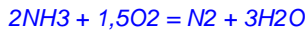
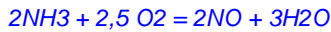


Balance de materia y energía de un convertidor (combustión de NH₃ sobre telas de platino-rodio) y caldera de una planta de ácido nítrico.

El programa sigue aproximadamente el Case Study 109, pág. 115, del libro Howard F. Rase, Chemical Reactor Design for Process Plants; Vol. 2: Case Studies and Design Data; 1977 John Wiley & Sons

Copyright J.I. Zubizarreta

Reacciones:



Rendimiento de la primera reacción eta y el complemento a 1 de la segunda, despreciamos la formación de N₂O

Call **JANAF** ['NH3'; 343,15 : CP₀; H₀; S₀] *Consideramos que el amoníaco gas de entrada se encuentra a 70°C*

$H_{in} = \text{Aire}_0 \cdot [0,21 \cdot h('O_2'; T=T_2) + 0,79 \cdot h('N_2'; T=T_2)] + \text{NH}_3_0 \cdot H_0$ *Determinamos la temperatura media T₀ de la mezcla aire + amoníaco*

$H_{in} = \text{NH}_3_0 \cdot H_{\text{NH}_3} + \text{Aire}_0 \cdot 0,21 \cdot h['O_2'; T=T_0] + \text{Aire}_0 \cdot 0,79 \cdot h['N_2'; T=T_0]$

A partir de la T de compresión del aire y de la temperatura de 70 °C del NH₃ vaporizado

$$P = 4,5 \text{ [atm]} \cdot \left| 1,01325 \cdot \frac{\text{bar}}{\text{atm}} \right|$$

$\text{NH}_3_0 = 1 \text{ [kmol]}$

$$\text{Ratio} = \frac{\text{NH}_3_0}{\text{Aire}_0}$$

$\text{Ratio} = 0,12$

$$y_{\text{NH}_3} = \frac{\text{NH}_3_0}{\text{NH}_3_0 + \text{Aire}_0}$$

Cinética del convertidor de amoníaco -r = k·a_w·(y-0)dZ = -Gdy en flujo pistón muy rápida gobernada por difusión solamente k es la constante de difusión turbulenta a la superficie en kmol/s·m² a_w, es la superficie de Pt-Rh por unidad de volumen en m⁻¹, y G es el flujo molar de gases en kmol/s·m²

Integrando resulta G·ln(yNH₃/yNH₃(1-y))=(G·ln(1-y)) = -k₁·n_s·f_w donde y es la fracción molar de amoníaco convertida, por lo que el rendimiento de la combustión: eta =y, f_w es la superficie por tela y n_s es el número de telas de platino utilizadas.

Para la obtención de k₁ se utiliza la expresión para lechos de relleno epsilon·j_d = 0,865NRe^{-0,648}·NSc^{-2/3} donde epsilon es la fracción de huecos y NRe, NSc los números de Reynolds y Schmidt respectivamente. j_d es igual a k/G.

También hay que tener en cuenta la descomposición catalítica del NO: 2NO = N₂ + O₂ que sigue la ecuación cinética -GdNO = k₂PNO^{2a}·dZ, que integrada -G(1/NO₀ - 1/NO) = k₂·N_s·f_w·P² produce 1-eta₂ = k₂·n_s·f_w·P²·G⁻¹·yNH₃

Tela de platino de 1024 mallas por cm² con un diámetro de hilo de 0,06 mm y peso de 400 g/m²

$d_w = 0,00006 \text{ [m]}$ *Diámetro del hilo*

$n_w = 100 \cdot \sqrt{1024}$ *Mallas por metro*

$l_w = \sqrt{\left[\frac{1}{n_w}\right]^2 + d_w^2}$ *Longitud del hilo de una malla elemental*

$a_w = \pi \cdot d_w \cdot 4 \cdot \frac{l_w}{\left[\frac{1}{n_w}\right]^2 \cdot 2 \cdot d_w}$ *Superficie por unidad de volumen*

$f_w = a_w \cdot 2 \cdot d_w$ *Superficie total de hilos de una tela por superficie (sección) de tela*

$$\varepsilon = 1 - \pi \cdot l_w \cdot n_w^2 \cdot \frac{d_w}{4} \quad \text{Porosidad o fracción de huecos sección hueca/sección total}$$

$$G = 0,085 \quad [\text{kmol/s-m}^2] \quad \text{Flujo molar a las telas}$$

$$\text{velotelas} = G \cdot 22,41 \quad [\text{m}^3/\text{kmol}] \cdot \frac{1 \quad [\text{atm}]}{P \cdot \left| 0,9869 \cdot \frac{\text{atm}}{\text{bar}} \right|} \cdot \frac{T}{273,15 \quad [\text{K}]} \quad \text{Velocidad típica entre 1,5-2 m/s}$$

$$t_{\text{residencia}} = 2 \cdot d_w \cdot \frac{n_s}{\text{velotelas}} \quad \text{tiempo en segundos}$$

$$n_s = 6 \quad \text{Número de telas}$$

$$\mu = [1 - y_{\text{NH}_3}] \cdot \text{Visc} [\text{'Air'}_{\text{ha}}; T=T_0; P=P] + y_{\text{NH}_3} \cdot \text{Visc} [\text{'Ammonia'}; T=T_0; P=P]$$

$$r_0 = P \cdot \left| 0,9869 \cdot \frac{\text{atm}}{\text{bar}} \right| \cdot \left[\frac{(1 - y_{\text{NH}_3}) \cdot \text{MolarMass} (\text{'Air'}) + y_{\text{NH}_3} \cdot \text{MolarMass} (\text{'Ammonia'})}{0,08205 \quad [\text{atm-m}^3/\text{kmol-K}] \cdot T_0} \right]$$

$$N_{\text{Re}} = G \cdot [(1 - y_{\text{NH}_3}) \cdot \text{MolarMass} (\text{'Air'}) + y_{\text{NH}_3} \cdot \text{MolarMass} (\text{'Ammonia'})] \cdot \frac{d_w}{\mu}$$

$$N_{\text{Sc}} = \frac{\frac{\mu}{r_0}}{0,0000227 \quad [\text{m}^2/\text{s}] \cdot \frac{T_0}{298,15 \quad [\text{K}]}}$$

$$k_1 = \frac{0,865}{\varepsilon} \cdot N_{\text{Re}}^{-0,648} \cdot N_{\text{Sc}}^{\left[\frac{-2}{3} \right]}$$

$$\eta_1 = 1 - \exp [-k_1 \cdot n_s \cdot f_w \cdot 0,66]$$

Se multiplica k por 2/3=0,66 que es el valor que ajusta los datos reales para tener en cuenta las reacciones a N2 y N2O

$$k_2 = 0,0002$$

$$1 - \eta_2 = k_2 \cdot n_s \cdot f_w \cdot \frac{P^2}{G} \cdot y_{\text{NO}}$$

$$\eta = \eta_1 \cdot \eta_2$$

Balance de materia

$$\text{NO} = \eta \cdot \text{NH}_3_0$$

$$\text{O}_2 = \text{Aire}_0 \cdot 0,21 - \frac{2,5}{2} \cdot \eta \cdot \text{NH}_3_0 - \frac{1,5}{2} \cdot [1 - \eta] \cdot \text{NH}_3_0$$

$$\text{H}_2\text{O} = 3 / 2 \cdot \eta \cdot \text{NH}_3_0 + 3 / 2 \cdot [1 - \eta] \cdot \text{NH}_3_0$$

$$\text{N}_2 = 0,79 \cdot \text{Aire}_0 + 0,5 \cdot [1 - \eta] \cdot \text{NH}_3_0$$

Composición base seca

$$y_{\text{NO}} = \frac{\text{NO}}{\text{NO} + \text{O}_2 + \text{N}_2}$$

$$y_{O_2} = \frac{O_2}{NO + O_2 + N_2}$$

$$y_{N_2} = \frac{N_2}{NO + O_2 + N_2}$$

Call **JANAF** ['NH3'; T₀ : CP_{NH3} ; H_{NH3} ; S_{NH3}]

Balance de energía para determinar la T de salida

$$H_{out} = NO \cdot h ['NO' ; T=T] + O_2 \cdot h ['O_2' ; T=T] + H_2O \cdot h ['H_2O' ; T=T] + N_2 \cdot h ['N_2' ; T=T]$$

$$H_{in} = H_{out}$$

$$T_{salida,convertidor} = T - 273,15 \text{ [K]}$$

Generación de vapor y balance de energía caldera

$$T_{caldera} = 500 \text{ [K]}$$

$$T_{vapor} = T ['Steam' ; x=0 ; P=40]$$

$$\text{Vapor} \cdot [h ('Steam' ; x=1 ; P=10) - h ('Water' ; x=0 ; P=1)] = H_{out} - [NO \cdot h ('NO' ; T=T_{caldera}) + O_2 \cdot h ('O_2' ; T=T_{caldera}) + H_2O \cdot h ('H_2O' ; T=T_{caldera}) + N_2 \cdot h ('N_2' ; T=T_{caldera})]$$

Energía de compresión de aire y autoconsumo de vapor en turbina

Compresión del aire

$$\text{Eff1} = 0,8 \text{ Eficiencia isoentrópica}$$

$$T_1 = 298,15$$

$$P_1 = 1 \text{ [bar]}$$

$$h_1 = h ['Air_{ha}' ; T=T_1 ; P=P_1]$$

$$s_1 = s ['Air_{ha}' ; T=T_1 ; P=P_1]$$

$$P_2 = P \text{ Presión en la etapa de compresión}$$

$$h_{2,ID} = h ['Air_{ha}' ; P=P_2 ; s=s_1] \text{ Entalpía obtenida en la isoentropica}$$

$$W_{c1} = \frac{h_{2,ID} - h_1}{\text{Eff1}}$$

El trabajo efectivo es mayor por la pérdida de eficiencia y añade entalpía extra

$$h_2 = h_1 + W_{c1}$$

Balance de entalpía total en el compresor real, que se asume adiabático y además aumenta la temperatura de descarga

$$s_2 = s ['Air_{ha}' ; h=h_2 ; P=P_2] \text{ propiedades para el estado 2}$$

$$T_2 = T ['Air_{ha}' ; h=h_2 ; P=P_2]$$

Expansión de vapor en turbina

$$\text{Eff2} = 0,7 \text{ Eficiencia isentrópica de la turbina de vapor}$$

$$s_{\text{vapor}} = s \left[\text{'Steam'} ; T = T_{\text{vapor}} ; x = 1 \right]$$

$$h_{t,\text{ID}} = h \left[\text{'Steam'} ; T = 323,15 ; s = s_{\text{vapor}} \right] \quad \textit{Entalpía obtenida en la isentropica hasta condensar a 50 °C}$$

$$W_{t1} = \text{Vapor}_{\text{turbina}} \cdot \left[h \left(\text{'Steam'} ; x = 1 ; P = 10 \right) - h_{t,\text{ID}} \right] \cdot \text{Eff2} \quad \textit{El trabajo efectivo es menor por la pérdida de eficiencia}$$

$$W_{t1} = [h_2 - h_1] \cdot \text{Aire}_0$$

Vapor sobrante neto

$$\text{Vapor}_{\text{exportación}} = \text{Vapor} - \text{Vapor}_{\text{turbina}}$$

SOLUTION

Unit Settings: [kJ]/[K]/[bar]/[kmol]/[degrees]

$$\text{Aire}_0 = 8,333 \text{ [kmol]}$$

$$\text{CP}_0 = 36,93$$

$$d_w = 0,00006 \text{ [m]}$$

$$\text{Eff2} = 0,7$$

$$\eta_1 = 0,947$$

$$\eta_2 = 0,9578$$

$$G = 0,085 \text{ [kmol/s-m}^2\text{]}$$

$$H_0 = -44267 \text{ [kJ/kmol]}$$

$$H_{\text{in}} = 4857 \text{ [kJ]}$$

$$H_{\text{out}} = 4857 \text{ [kJ]}$$

$$k_1 = 0,9236$$

$$l_w = 0,0003182 \text{ [m]}$$

$$N_2 = 6,61 \text{ [kmol]}$$

$$\text{NO} = 0,947 \text{ [kmol]}$$

$$n_s = 6$$

$$n_w = 3200 \text{ [m}^{-1}\text{]}$$

$$P = 4,56 \text{ [bar]}$$

$$r_o = 3,182 \text{ [kg/m}^3\text{]}$$

$$S_{\text{NH}_3} = 210,5 \text{ [kJ/kmol-K]}$$

$$T = 1202 \text{ [K]}$$

$$T_{\text{caldera}} = 500 \text{ [K]}$$

$$T_{\text{salida,convertidor}} = 928,9 \text{ [C]}$$

$$\text{Vapor} = 5,255 \text{ [kmol]}$$

$$\text{Vapor}_{\text{turbina}} = 4,658 \text{ [kmol]}$$

$$W_{c1} = 5883 \text{ [kJ/kmol]}$$

$$y_{N_2} = 0,8177$$

$$y_{\text{NO}} = 0,1172$$

$$a_w = 10237 \text{ [m}^{-1}\text{]}$$

$$\text{CP}_{\text{NH}_3} = 41,22 \text{ [kJ/kmol-K]}$$

$$\text{Eff1} = 0,8$$

$$\varepsilon = 0,8464$$

$$\eta_1 = 0,9888$$

$$f_w = 1,228$$

$$\text{H}_2\text{O} = 1,5 \text{ [kmol]}$$

$$h_{2,\text{ID}} = 13349 \text{ [kJ/kmol]}$$

$$H_{\text{NH}_3} = -39027 \text{ [kJ/kmol]}$$

$$h_{t,\text{ID}} = 35005 \text{ [kJ/kmol]}$$

$$k_2 = 0,0002$$

$$\mu = 0,00002522 \text{ [kg/m-s]}$$

$$\text{NH}_3_0 = 1 \text{ [kmol]}$$

$$N_{\text{Re}} = 5,598$$

$$N_{\text{Sc}} = 0,2182$$

$$\text{O}_2 = 0,5265 \text{ [kmol]}$$

$$\text{Ratio} = 0,12$$

$$S_0 = 197,7 \text{ [kJ/kmol-K]}$$

$$s_{\text{vapor}} = 109,3 \text{ [kJ/kmol-K]}$$

$$T_0 = 477,3 \text{ [K]}$$

$$t_{\text{residencia}} = 0,0003865 \text{ [s]}$$

$$T_{\text{vapor}} = 523,5 \text{ [K]}$$

$$\text{Vapor}_{\text{exportación}} = 0,5964 \text{ [kmol]}$$

$$\text{velotelas} = 1,863 \text{ [m/s]}$$

$$W_{t1} = 49029 \text{ [kJ]}$$

$$y_{\text{NH}_3} = 0,1071$$

$$y_{\text{O}_2} = 0,06513$$

1 potential unit problem was detected.

Arrays Table

	h_i	P_i	s_i	T_i
	[kJ/kmol]	[bar]	[kJ/kmol-K]	[K]
1	8643	1	198,8	298,1
2	14526	4,56	201,2	498,4