

Simulación del proceso de extracción líquida para la producción directa de gasohol

MARTHA LUCIA PINZON BEDOYA

RESUMEN

En este artículo se describe un proceso para la producción directa de gasohol a partir de mezclas con concentraciones altas de etanol por extracción líquida, usando gasolina como solvente. Considerando la gasolina como una mezcla de muchos hidrocarburos; usando el Método UNIFAC de Contribución por Grupos tanto para la caracterización de mezclas complejas en términos de compuestos modelo como para la predicción de los equilibrios químicos. El proceso se simuló en un programa en FORTRAN 77 y se muestran algunos resultados.

INTRODUCCION

El uso adecuado de los combustibles derivados del petróleo es indudable una necesidad apremiante a nivel mundial por ser el crudo un recurso natural no renovable. Consciente de este hecho, el hombre desde mediados de 1970, período en el que aparecieron las dificultades de abastecimiento de hidrocarburos derivados del petróleo, ha tratado de utilizar los carburantes provenientes de recursos naturales renovables, que hagan posible la sustitución parcial o total de la gasolina.

Por sus especiales características de rendimiento, y en particular por la forma directa y relativamente sencilla como se puede sustituir la energía proveniente de los hidrocarburos líquidos derivados del petróleo, la biomasa merece la atención de muchos países del mundo, principalmente de aquellos que reúnen las condiciones para producirla, como el nuestro. El auge que a nivel mundial ha traído consigo el uso de este tipo de mezclas, ha dado origen al gasohol (una mezcla de gasolina y etanol anhidro obtenido a partir de la biomasa); combustible de uso directo sin implicaciones adversas sobre el medio ambiente. El conocimiento de estas mezclas es aún vago y la necesidad de ampliar éste y eliminar parte de las restricciones supuestas en la mayoría de los trabajos llevados a cabo hasta ahora sobre el tema, ha dado origen a esta investigación. En ella se plantea la producción directa de gasohol con un 10% en peso de etanol, por extracción con gasolina; tratando ésta como una mezcla compleja. El conocimiento sobre la caracterización de mezclas complejas y la determinación adecuada de los equilibrios líquido-líquido y vapor-líquido y además la separación del etanol del agua por extracción con gasolina, son los justificativos que enmarcan esta investigación. El producto de este trabajo lo constituye por tanto, un paquete de programas los cuales representan un aporte significativo a los procesos de separación que involucren mezclas complejas.

MODELO MATEMATICO

El tratamiento matemático involucra varias etapas, desarrolladas en dos grandes grupos los cuales se describen secuencialmente. En el primer grupo se realiza la caracterización de la gasolina a partir de los datos experimentales dados en la Tabla 1, los cuales fueron suministrados por la Empresa Colombiana de Petróleos, con el fin de identificar los compuestos modelo representativos de esta. En el segundo grupo se realiza el cálculo de la columna de extracción líquida a partir de la caracterización hecha.

IDENTIFICACION DE LOS COMPUESTOS MODELO

El método de contribución por grupos UNIFAC para predecir el equilibrio vapor-líquido

do (2), (5), (12) ha sido usado como una base para describir fracciones complejas del petróleo en términos de compuestos modelo (10) y presiones de vapor de compuestos puros (6) requiriendo para su ejecución un análisis TBP y PNA del corte de crudo a estudiar, restringido a fracciones del petróleo de bajos a moderados pesos moleculares a temperaturas hasta 600 K.

TABLA 1.- Propiedades de la gasolina natural

Curva de destilación ASTM D-86	
% Destilado	Temperatura, K
I.B.P.	308.60
10	367.57
20	381.20
30	388.13
40	396.33
50	407.44
60	417.44
70	426.32
80	439.67
E.P.	480.64

Información adicional:

- $\theta_{API}^{273\text{ K}}$: 56.2
- $\eta_{273\text{ K}}$: 1.4226
- S.G. 273 K : 0.7538
- % S : 0.01
- MABP : 251.3
- MW : 110
- PNA : 74.02% , 19.35% , 6.63%

PROCEDIMIENTO DE CALCULO PARA LA IDENTIFICACION DE LOS COMPUESTOS

MODELO

- Dividir la curva ASTM en subfracciones.
- A partir del análisis PNA, asignar valores a x_i .
- Definir la estructura de los compuestos modelo de las subfracciones en términos de la matriz UNIFAC $v_k^{(i)}$.
- Determinar el peso molecular de los compuestos modelo de acuerdo con el número de grupos, el cual se ajusta de tal forma que el punto de ebullición de la mezcla de los compuestos modelo coincida con el punto de ebullición del volumen medio de la subfracción real.
- Si la presión de vapor de los compuestos modelo difiere mucho, la estructura de estos se cambia de tal forma que al mismo tiempo produzca un acercamiento en la presión de vapor.

El punto de ebullición se calcula suponiendo:

$$P = \sum_{i=1}^{N_c} x_i \gamma_i P_i^s \quad (1)$$

donde:

- x_i : fracción molecular tomada del PNA.
- γ_i : coeficiente de actividad del componente i , el cual se calcula a partir del método UNIFAC de contribución por grupos. (2), (5), (12).
- P_i^s : Presión de vapor de los componentes puros, la cual se calcula también a partir del método de contribución por grupos UNIFAC, en parte basado sobre el método UNIFAC para predecir coeficientes de actividad en fase líquida. (6)
- $v_k^{(i)}$: Matriz que representa el número de grupos k en la molécula i , la cual es una función de n , donde n se establece de tal forma que el punto de burbuja de la mezcla de los compuestos modelo iguale el punto de ebullición del volumen medio observado.

PROCEDIMIENTO DE CALCULO PARA EL EQUILIBRIO VAPOR-LIQUIDO SEGUN UNIFAC

El método de contribución por grupos UNIFAC, para predecir los coeficientes de actividad en fase líquida se usa ampliamente para cálculos de equilibrios de fase. El cálculo del equilibrio vapor-líquido utilizando esta técnica (1), (2), (5), (6), (8), está implícitamente involucrado en la identificación de los compuestos modelo representativos de la gasolina. (10), (3)

La exactitud y el rango de aplicabilidad del método dependen del número disponible de parámetros de grupo confiables. Estos parámetros fueron obtenidos por Skjold Jorgensen Steen et al., (12), minimizando una función objetivo donde se incluyen tanto los coeficientes de actividad calculados según UNIFAC como los coeficientes de actividad calculados experimentalmente.

La ecuación fundamental para el cálculo del equilibrio vapor-líquido es:

$$\gamma_i = \left(\frac{P y_i \bar{\phi}_i}{x_i f_i^0} \right) \quad (i = 1, 2, \dots, N_c) \quad (2)$$

donde:

- $\bar{\phi}_i$: coeficiente de fugacidad
- f_i^0 : fugacidad en el estado estandar
- γ_i : coeficiente de actividad del componente i el cual se calcula según UNIFAC

El coeficiente de fugacidad $\bar{\phi}_i$ caracteriza la desviación con respecto a la idealidad de la fase de vapor y éste se calcula empleando una ecuación de estado la cual generalmente incluye el segundo coeficiente Virial de la mezcla, coeficiente que puede predecirse de acuerdo con el reciente aporte del método de contribución por grupos (8), el cual evita el uso de parámetros empíricos y abarca un amplio rango de compuestos.

El segundo coeficiente Virial cruzado, B_{ij} , puede calcularse por medio de la correlación de Tsonopoulos (14) y el coeficiente de fugacidad en el estado estandar f_i^0

puede hacerse de acuerdo con la siguiente ecuación:

$$f_i^o = P_i^s \phi_i^s \exp \left(\frac{V_i^L (P - P_i^s)}{RT} \right) \quad (3)$$

donde:

$$\phi_i^s = \exp \left(\frac{B_{ii} P_i^s}{RT} \right) \quad (4)$$

El cálculo del volumen parcial molar del líquido puede hacerse mediante la siguiente relación:

$$V_i^L = a'' + b'' T + c'' T^2 \quad (5)$$

cuyas constantes las reporta Reid, R.C., Pausnitz, J.M. y Sherwood T.K (9) y el cálculo de la presión de vapor como se describió con anterioridad.

PROCEDIMIENTO DE CALCULO PARA EL EQUILIBRIO LIQUIDO-LIQUIDO SEGUN UNIFAC

Debido al creciente costo de la energía, nuevos procesos de separación basados en la extracción líquida empiezan a ser más atractivos que antes, razón por la cual la predicción adecuada del equilibrio líquido-líquido ha tenido en los últimos años un interesante incremento en tecnología química. Con la aplicación de estos procesos, es posible operar procesos conocidos a nuevas condiciones, necesitándose por lo tanto verificar la estabilidad de la fase líquida con el fin de corroborar la no existencia de tres fases en el proceso, es decir, un vapor en equilibrio con dos líquidos (4). De este modo el cálculo y predicción de las composiciones del equilibrio líquido-líquido tienen mucha importancia.

La siguiente relación termodinámica indica el criterio aplicado al equilibrio líquido-líquido en sistemas parcialmente miscibles:

$$(Y_i x_i)^I = (Y_i x_i)^{II} \quad (6)$$

El cálculo de las composiciones del equilibrio de fases líquido-líquido implica la solución de la ecuación (6), la cual a su vez trae consigo la minimización de la siguiente función objetivo:

$$\phi' = \frac{\sum_{m=1}^{N_c} (x_m^I \gamma_m^I - x_m^{II} \gamma_m^{II})^2}{\left(\sum_{k=1}^{N_c} (x_k^I - x_k^{II})^2 \right)^2} \quad (7)$$

la cual se escogió porque corresponde a los mínimos cuadrados aplicados sobre la relación termodinámica representativa de este tipo de equilibrio, divididos por el término:

$$\left(\sum_{i=1}^{N_c} x_i^I - x_i^{II} \right)^2$$

de manera que la solución trivial $(x_i^I = x_i^{II})$ se elimine automáticamente. Dado que:

$$\lim_{x_i^{II} \rightarrow x_i^I} \left(\sum_{i=1}^{N_c} (x_i^I - x_i^{II})^2 \right)^2$$

es un infinitésimo de orden superior respecto a:

$$\lim_{x_i^{II} \rightarrow x_i^I} (x_i^I \gamma_i^I - x_i^{II} \gamma_i^{II})^2, \quad \phi' (x_i^{II} = x_i^I)$$

igual a infinito y no es un mínimo de la función ϕ' .

La minimización de dicha función se hizo en este trabajo en base al método de Quasi-Newton BFGS (BROYDEN-FLETCHER-GILL-SHANNO) (11), para funciones multivariantes con restricciones, el cual a su vez implica el cálculo de las derivadas de la función objetivo con respecto a la composición.

PROCEDIMIENTO DE CALCULO PARA LA COLUMNA DE EXTRACCION LIQUIDA

Debido a la escasez de memoria disponible del microcomputador usado, la convergencia se logró de manera interactiva según el esquema indicado en la Figura 1 y describiendo el sistema de la siguiente forma, de acuerdo al método de contribución por grupos UNIFAC, (3): (1) etanol, (2) hidrocarburo parafínico, (3) hidrocarburo nafténico, (4) hidrocarburo aromático, (5) agua.

Los parámetros de contribución por grupos UNIFAC líquido-líquido serán por consiguiente aquellos que correspondan a la descripción del sistema.

La solución se planteó suponiendo conocida la rata de flujo del extracto y resolviendo el sistema por el procedimiento plato a plato considerando dos fases, la fase rica en agua y la fase rica en hidrocarburo; donde L'_k y K_{k-1} se conocen. Posteriormente, se calcula la composición de L'_k mediante el equilibrio líquido-líquido, el cual se ejecuta de acuerdo con lo establecido en el numeral anterior, y los sistemas lineales de ecuaciones producidos al realizar los correspondientes balances de material.

Con un balance de material sobre el plato k es posible calcular la rata de flujo de L'_k y rata de flujo y composición de L'_{k+1} . Si $k = 1$, entonces L'_{k+1} es la alimentación de gasolina. Si la rata de flujo L'_2 no es igual a la especificada se debe repetir el procedimiento cambiando la rata de flujo del extracto hasta que L'_2 calculado sea igual al valor especificado.

SOLUCION AL MODELO

Con base en los posibles constituyentes de la gasolina (13), se plantea una prueba y error para obtener un grupo de compuestos modelo bien definidos, los cuales representan esta mezcla compleja del petróleo, la cual está basada en los datos experimentales dados en la Tabla 1. Para llevar a cabo esta predicción se supone la matriz $v_k^{(i)}$, la cual representa el número de grupos k UNIFAC en la molécula i . La escogencia de estos compuestos modelo lógicamente está limitada a los rangos de ebullición del corte. De acuerdo con estas restricciones y con los resultados obtenidos, los compuestos modelo representativos escogidos fueron: (1) hidrocarburo parafínico:

2,5-dimetilbenceno; (2) hidrocarburo nafténico; ciclohexano; (3) hidrocarburo aromático.
 Los datos experimentales se muestran en la Tabla 2, donde se comparan los resultados
 obtenidos con los datos experimentales. Los resultados se muestran en la Tabla 2.
 Los resultados se muestran en la Tabla 2.

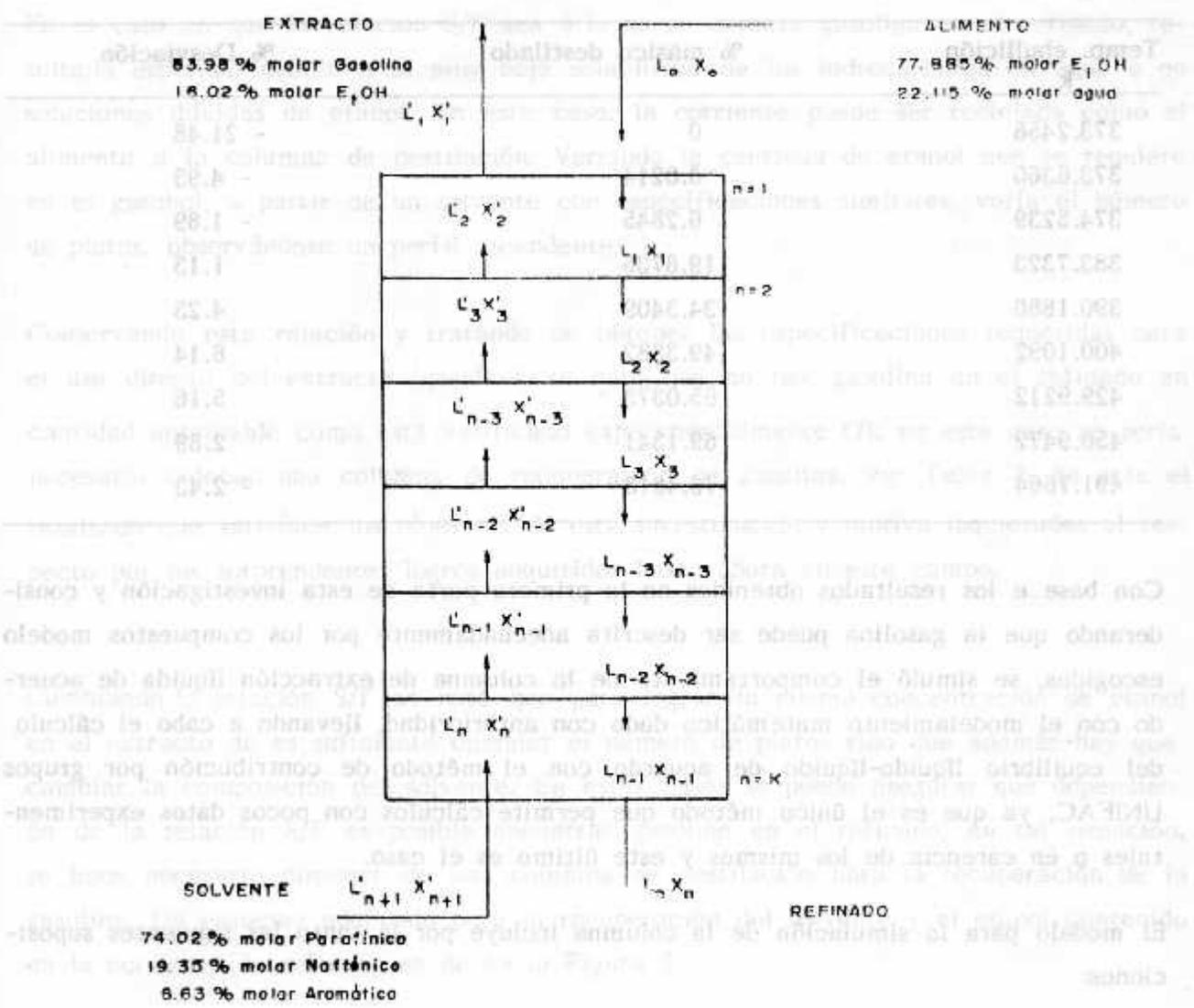


FIGURA 1 Esquema de cálculo para la columna de extracción líquida.

2,2-dimetilbutano; (2) hidrocarburo nafténico: ciclopentano; (3) hidrocarburo aromático: benceno; ya que como se observa en la Tabla 2, fueron los compuestos modelo que reflejaron un menor porcentaje de desviación con respecto a los datos experimentales.

TABLA 2.- Resultados de la prueba y error para $v_k(i)$

Temp. ebullición k	% másico destilado	% Desviación
373.2458	0	- 21.48
373.6360	3.0214	- 4.93
374.5239	6.2845	- 1.89
383.7323	19.8736	1.13
390.1886	34.3409	4.23
400.1092	49.3882	6.14
429.9212	65.0373	5.16
450.9472	69.1341	2.89
491.7664	73.4818	- 2.43

Con base e los resultados obtenidos en la primera parte de esta investigación y considerando que la gasolina puede ser descrita adecuadamente por los compuestos modelo escogidos, se simuló el comportamiento de la columna de extracción líquida de acuerdo con el modelamiento matemático dado con anterioridad; llevando a cabo el cálculo del equilibrio líquido-líquido de acuerdo con el método de contribución por grupos UNIFAC, ya que es el único método que permite cálculos con pocos datos experimentales o en carencia de los mismos y este último es el caso.

El modelo para la simulación de la columna incluye por lo tanto las siguientes suposiciones:

- Solvente adecuadamente representado por tres hidrocarburos.
- Equilibrio líquido-líquido debidamente representado por el método de contribución por grupos, al carecer de datos experimentales.
- Platos teóricos
- Minimización de la función objetivo con criterio de convergencia 1.0×10^{-5} .

Los cálculos se llevaron a cabo con diferentes relaciones S/F, para la obtención de un gasohol con las especificaciones requeridas para su uso directo, hasta lograr obtener la mejor; verificándose su exactitud con los trabajos de Leeper Stephen A. y Phillip C. Wankat (7) y Furzer Ian A. (3).

En el caso en que la relación S/F sea 3:1, no se detecta gasolina en el refinado, resultado esperado debido a la muy baja solubilidad de los hidrocarburos en agua o en soluciones diluidas de etanol. En este caso, la corriente puede ser reciclada como el alimento a la columna de destilación. Variando la cantidad de etanol que se requiere en el gasohol, a partir de un solvente con especificaciones similares, varía el número de platos, observándose un perfil ascendente.

Conservando esta relación y tratando de obtener las especificaciones requeridas para el uso directo del extracto (gasohol), se notó que no hay gasolina en el refinado en cantidad apreciable como está verificado experimentalmente (7); en este caso no sería necesario colocar una columna de recuperación de gasolina, ver Tabla 3. Es este el resultado que satisface los objetivos de esta investigación y motiva inquietudes al respecto por los sorprendentes logros adquiridos hasta ahora en este campo.

Cambiando la relación S/F se notó que para lograr la misma concentración de etanol en el extracto no es suficiente cambiar el número de platos sino que además hay que cambiar la composición del solvente. En estos casos se puede asegurar que dependiendo de la relación S/F es posible encontrar gasolina en el refinado; en tal situación, se hace necesario disponer de una columna de destilación para la recuperación de la gasolina. Un esquema adecuado para la recuperación del solvente y el etanol contenido en la corriente de refinado se da en la Figura 2.

Finalmente, la condensación del modelo matemático descrito la constituye un paquete de programas de computador los cuales el autor está en capacidad de suministrar a solicitud del interesado.

La Figura 3 muestra el diagrama de bloques correspondiente a la solución planteada en la ejecución de este trabajo.

TABLA 3. FLUJOS MOLARES Y COMPOSICIONES OBTENIDAS

Relación S/F = 3:1. Especificaciones del Extracto: 16.02% molar de EtOH					
		FASE RICA EN AGUA		FASE RICA EN HIDROCARBURO	
PLATO 1					
FLUJO	100.000			355.800	
COMPOSICION	.77885	.00000		.16020	.62160
	.00000	.00000		.16250	.05570
	.22115			.00000	
PLATO 2					
FLUJO	130.724			386.524	
COMPOSICION	.61389	.14568		.15359	.62146
	.04685	.02441		.16543	.05953
	.16917			.00000	
PLATO 3					
FLUJO	129.210			385.010	
COMPOSICION	.60485	.14837		.14874	.62423
	.04869	.02693		.16651	.06051
	.17116			.00000	
PLATO 4					
FLUJO	100.452			356.252	
COMPOSICION	.61295	.10886		.11421	.65151
	.03689	.02115		.17269	.06159
	.22015			.00000	
PLATO 5					
FLUJO	58.099			313.899	
COMPOSICION	.54560	.04482		.03445	.71287
	.01780	.01114		.18749	.06520
	.38065			.00000	
PLATO 6					
FLUJO	29.099			303.086	
COMPOSICION	.24000	.00000		.00000	.73830
	.00000	.00000		.19417	.06752
	.76000			.00000	

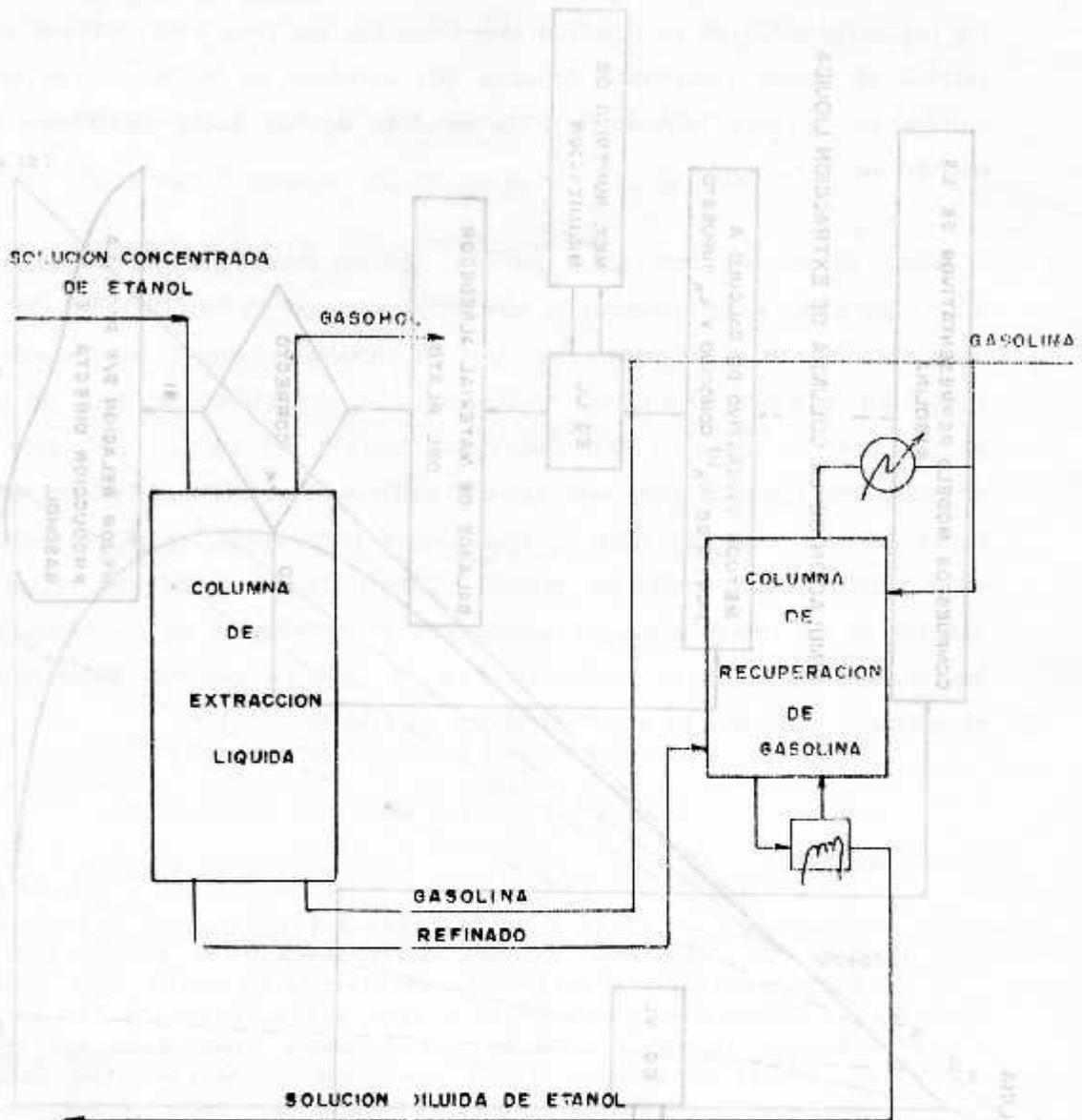
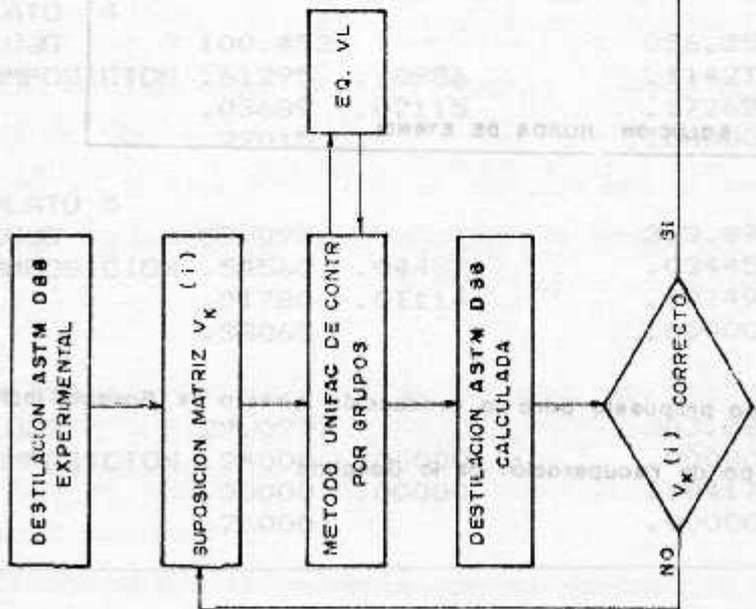


FIGURA 2 Esquema propuesto para la producción directa de Gasolina incluyendo la etapa de recuperación de la Gasolina.

CARACTERIZACION DE LA GASOLINA



SIMULACION DE LA COLUMNA DE EXTRACCION LIQUIDA

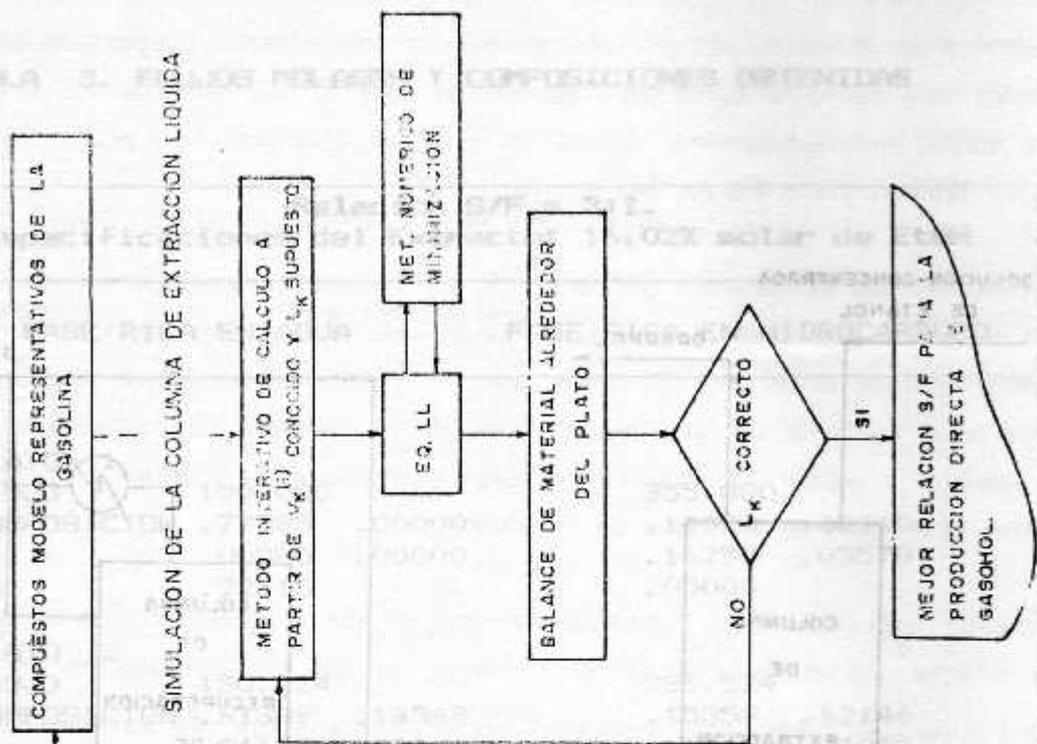


FIGURA 3 Diagrama de bloques del modelo matemático planteado

La regresión de la gasolina obtenida por los tres hidrocarburos representativos de estas fracciones livianas del petróleo es buena, si se tienen en cuenta los errores inherentes a las lecturas de los datos experimentales que

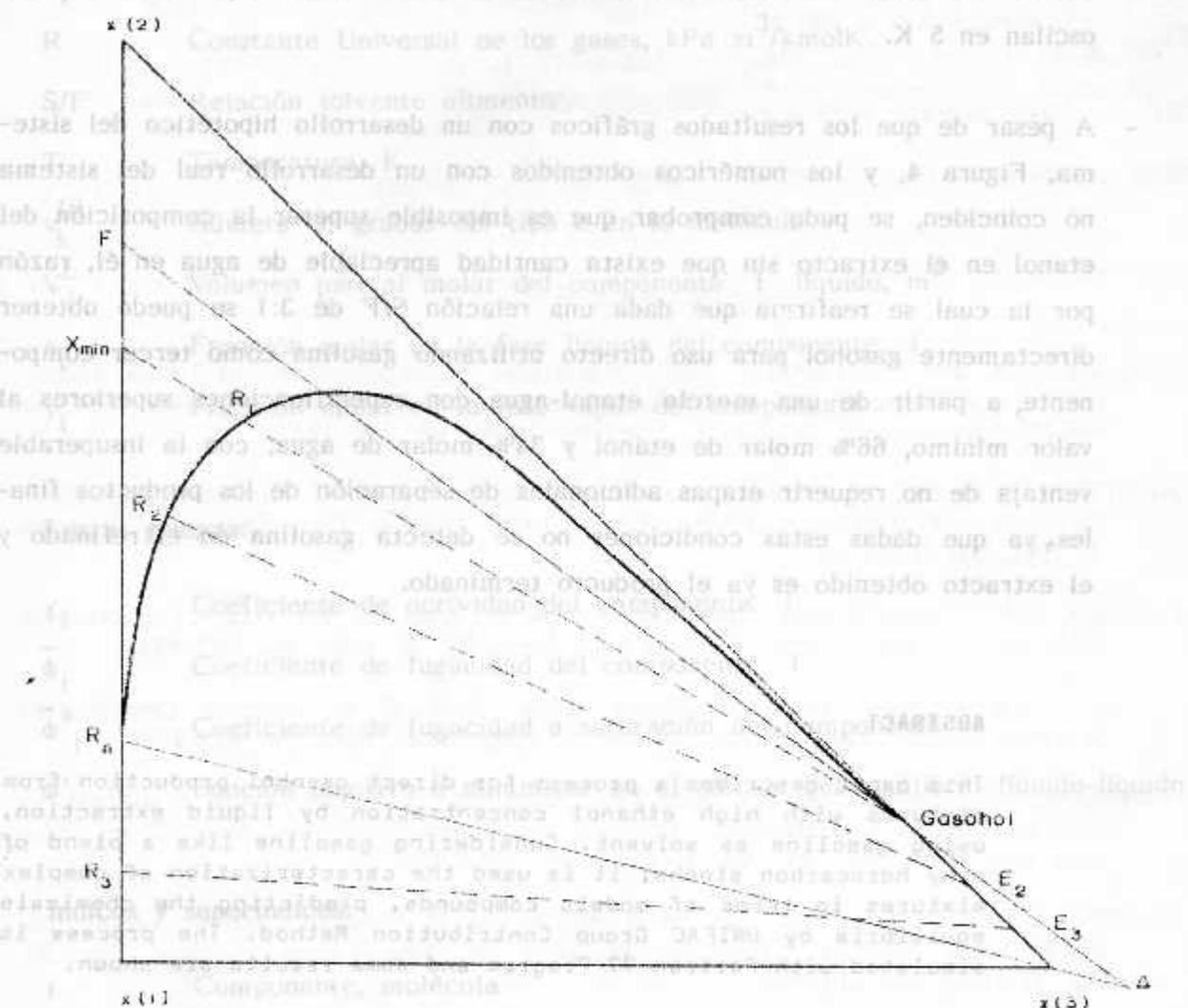


FIGURA 4: Diagrama de equilibrio hipotético UNIFAC líquido-líquido para el sistema: Agua (1) - Etanol (2) - Coque sintético de Nafta (3).

CONCLUSIONES

- La representación de la gasolina obtenida, por los tres hidrocarburos representativos de estas fracciones livianas del petróleo es buena, si se tienen en cuenta los errores inherentes a las lecturas de los datos experimentales que oscilan en 5 K.
- A pesar de que los resultados gráficos con un desarrollo hipotético del sistema, Figura 4, y los numéricos obtenidos con un desarrollo real del sistema no coinciden, se pudo comprobar que es imposible superar la composición del etanol en el extracto sin que exista cantidad apreciable de agua en él, razón por la cual se reafirma que dada una relación S/F de 3:1 se puede obtener directamente gasohol para uso directo utilizando gasolina como tercer componente, a partir de una mezcla etanol-agua con especificaciones superiores al valor mínimo, 66% molar de etanol y 34% molar de agua; con la insuperable ventaja de no requerir etapas adicionales de separación de los productos finales, ya que dadas estas condiciones no se detecta gasolina en el refinado y el extracto obtenido es ya el producto terminado.

ABSTRACT

This paper describes a process for direct gasohol production from mixtures with high ethanol concentration by liquid extraction, using gasoline as solvent. Considering gasoline like a blend of many hydrocarbon stocks; it is used the characterization of complex mixtures in terms of model compounds, predicting the chemical equilibria by UNIFAC Group Contribution Method. The process is simulated with Fortran 77 Program and some results are shown.

NOMENCLATURA

B_{ii}	Segundo coeficiente virial, $m^3/kmol$
f_i^o	Fugacidad en el estado estandar, Pa.
N_C	Número de componentes
N_g	Número de grupos

N_p	Número de puntos
P	Presión, Pa.
P_i^s	Presión de saturación del componente i , Pa.
R	Constante Universal de los gases, $kPa\ m^3/kmolK$.
S/F	Relación solvente alimento
T	Temperatura, K
$v_k^{(i)}$	Número de grados del tipo k en la molécula i
V_i^L	Volumen parcial molar del componente i líquido, m^3
x_i	Fracción molar en la fase líquida del componente i
y_i	Fracción molar en la fase vapor del componente i

Letras griegas:

γ_i	Coefficiente de actividad del componente i
$\bar{\phi}_i$	Coefficiente de fugacidad del componente i
$\bar{\phi}_i^s$	Coefficiente de fugacidad a saturación del componente i
ϕ'	Función objetivo a minimizar en el cálculo del equilibrio líquido-líquido

Indices y superíndices:

i	Componente, molécula
k, m, n	Grupo
s	Saturación
I	Fase liviana. Equilibrio líquido-líquido
II	Fase pesada. Equilibrio líquido-líquido

Abreviaturas:

TBP	True Boiling Point
-----	--------------------

PNA Parafinic Naftenic Aromatic.

$\eta_{293\text{ K}}$ Índice de refracción a 293 K

S.G._{293 K} Gravedad específica a 293 K

$^{\circ}\text{API}_{293\text{ K}}$ Gravedad API a 293 K

MABP Mean average boiling point.

UNIFAC Universal Function Activity Coefficients

BIBLIOGRAFIA

1. ABRAMS, S.D. and PRAUSNITZ, J.M. Statistical Thermodynamics of Liquid Mixtures: A new Expressions for the Excess Energy of Completely miscible Systems. *AIChE Journal*, vol. 21, No. 1, (January 1975); pp. 116-128.
2. ALMEIDA, M.E., et al. Vapor-Liquid Equilibria by UNIFAC Group Contribution. Revision and Extension 3. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* Vol. 22, No. 4, 1983; pp. 676-678.
3. FURZER, I.A. Liquid-Liquid Equilibria by use of UNIFAC for Gasohol Extraction systems. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 23, 2, 1984, pp. 387-391.
4. ----- Vapor-Liquid-Liquid Equilibria using UNIFAC in Gasohol Dehydration Systems. *AIChE Journal*, vol. 30, No. 5, (September 1984); p. 826-829.
5. GMEHLING, J.; RASMUSSEN, P. and FREDENSLUND, A. Vapor-Liquid Equilibria by UNIFAC Group Contribution. Revision and Extension 2. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, Vol. 21, No. 1, 1982; pp. 118-127.
6. JENSEN, T.; FREDENSLUND, A. and RASMUSSEN, P. Pure-Component Vapor Pressures using UNIFAC Group Contribution. *Ind. Eng. Chem. Fundam.* Vol. 20, No. 3, 1981; pp. 239-246.
7. LEEPER, A.S. and WANKAT, Ph. C. Gasohol Production by Extraction of Ethanol from water using gasoline as solvent. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* Vol. 21, No. 2, 1982; pp. 331-334.
8. McCAAN, D.W. and DANNER, R.P. Prediction of Second Virial Coefficients of Organic Compounds by a Group Contribution Method. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* Vol. 23, No. 3, 1984; pp. 529-533.
9. REID, R.C.; PRAUSNITZ, J.M. and SHERWOOD, T.K. *The Properties of Gases and Liquids*, New York, McGraw-Hill, 1977.
10. RUZICKA, Jr. VI.; FREDENSLUND, A. and RASMUSSEN, P. Representation of

11. SARGENT R.W.H. and SEBASTIAN D.J. Numerical experience with algorithm "Optimization". Lootsma. Academic Press (1972). London.
12. SKJOLD-JORGENSEN, S. et al. Vapor-Liquid Equilibria by UNIFAC Group Contribution. Revision and extension. Ind., Eng. Chem. Process Des. Dev., Vol. 18, No. 4, 1979; pp. 714-722.
13. THERMODYNAMIC DATA SPECIAL DATA PACKAGES. SIMULATION SIMSCI, 1986, Ecopetrol-Refinería.
14. TSONOPOULOS, C. An Empirical Correlation of Second Virial Coefficients. AIChE Journal, Vol. 20, No. 2, 1974; pp. 263-272.

JUAN FERNANDO MARTINEZ C. Ing. Químico
EDDAR M. SARMENTO C. Ing. Químico
ARISTOBULO CENIZO H. Ing. Químico M.Sc.

RESUMEN

Se presenta un análisis técnico del equipo y la técnica de las reacciones durante el proceso de absorción de ácido nítrico para la producción de ácido nítrico. Incluye un algoritmo y diagrama de flujo de un programa de computadora que simuló la operación de una torre. Se comparan los resultados del modelo computacional con los datos de operación de una planta real.

INTRODUCCION

La producción de ácido nítrico se lleva a cabo por absorción de los óxidos nítricos en agua, reacción que está asociada con un proceso de reacción química. Este mecanismo de reacción es complejo y del cual se hay mucha información, aunque el proceso de producción en sí es bastante complicado por la presencia de varias reacciones en las gases reaccionantes. Esta situación ha conducido a que se presente mucho interés en el estudio del proceso de fabricación por parte de varias investigaciones.