



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO**

**FACULTAD DE QUIMICA**

**"SIMULACION DEL COMPORTAMIENTO  
IDEAL DE PLANTAS CLAUS"**

**T E S I S  
M A N C O M U N A D A  
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE  
I N G E N I E R O Q U I M I C O  
P R E S E N T A N:  
J O R G E B A R R E D A V A Z Q U E Z  
E R N E S T O D E J . G O N Z A L E Z A L A T O R R E**

MEXICO, D. F.

1983



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.

# TESIS CON FALLA DE ORIGEN

## I N D I C E

### RESUMEN

I.- INTRODUCCION Y OBJETIVOS . . . . .	1
I.A INTRODUCCION . . . . .	1
I.B OBJETIVOS . . . . .	3
II.- ORIGEN Y DESARROLLO DEL PROCESO CLAUS . . . . .	5
II.A EL PROCESO CLAUS ORIGINAL . . . . .	5
II.B EL PROCESO CLAUS MODIFICADO . . . . .	9
II.C CONFIGURACIONES MODERNAS . . . . .	12
II.C.1 CONFIGURACION FLUJO DIVIDIDO . . . . .	12
II.C.2 CONFIGURACION FLUJO DIRECTO . . . . .	14
II.C.3 CONFIGURACION RECIRCULACION DE AZUFRE . . . . .	16
II.D ASPECTOS GENERALES DE LAS CONFIGURACIONES . . . . .	17
III.- SIMULACION DEL PROCESO CLAUS . . . . .	21
III.A ALCANCE DE LA SIMULACION DEL COMPORTAMIENTO IDEAL . . . . .	23
III.B ALCANCE DEL PREDIMENSIONAMIENTO DE LOS EQUIPOS. . . . .	25
III.C ESTRUCTURA DEL PROGRAMA DE SIMULACION SIMCLA . . . . .	26
III.D EJEMPLOS DE APLICACION DEL PROGRAMA SIMCLA . . . . .	28
III.D.1 EJEMPLO # 1: CONVERSION DE EQUILIBRIO DEL ACIDO SULFHDRIICO A AZUFRE . . . . .	28
III.D.2 EJEMPLO # 2: SIMULACION DE UN TREN DE RECUPERACION DE AZUFRE CON UNA ALIMENTACION POBRE . . . . .	45
III.D.3 EJEMPLO # 3: SIMULACION DE UN TREN DE RECUPERACION DE AZUFRE CON UNA ALIMENTACION RICA . . . . .	63
III.D.4 EJEMPLO # 4: SIMULACION DE LA PLANTA CLAUS DE LA REFINERIA DE TULA, HGO . . . . .	80
IV.- CALCULO DE LA COMPOSICION DE EQUILIBRIO POR EL METODO DE MINIMIZACION DE ENERGIA DE GIBBS. . . . .	92
IV.A MINIMIZACION DE ENERGIA DE GIBBS; SUBROUTINA MINER . . . . .	92

IV.A.1	DESARROLLO MATEMATICO . . . . .	92
IV.A.2	METODO DEL MAXIMO DESCENSO . . . . .	94
IV.B	SOLUCION DEL SISTEMA DE ECUACIONES SIMULTANEAS POR EL METODO DE ELIMINACION GAUSSIANA; SUBROUTINA MATRIX . . . . .	102
V.-	HORNO-CALDERA DE REACCION . . . . .	106
V.A	HORNO DE REACCION . . . . .	106
V.A.1	QUIMICA DEL HORNO DE REACCION . . . . .	107
V.A.2	MEDICIONES DE CAMPO . . . . .	107
V.A.3	CONDICIONES DE OPERACION . . . . .	118
V.A.4	CONVERSION EN EL HORNO . . . . .	122
V.A.5	CONTAMINANTES DE LOS GASES ACIDOS . . . . .	125
V.A.6	CRITERIOS DE DISEÑO DEL HORNO DE REACCION . . . . .	128
V.A.7	COMPORTAMIENTO IDEAL DEL HORNO DE REACCION . . . . .	130
V.B	CALDERA RECUPERADORA DE CALOR . . . . .	132
V.B.1	CRITERIOS DE DISEÑO DE LA CALDERA RECUPERADORA DE CALOR . . . . .	133
VI.-	CONVERTIDORES CATALITICOS . . . . .	137
VI.A	QUIMICA DEL CONVERTIDOR CATALITICO . . . . .	137
VI.A.1	CATALISIS DE LA REACCION CLAUS MODIFICADO . . . . .	139
VI.A.2	DEACTIVACION DEL CATALIZADOR . . . . .	143
VI.A.2.1	POR ENVEJECIMIENTO TERMICO . . . . .	147
VI.A.2.2	POR SULFATACION . . . . .	149
VI.A.2.3	POR AZUFRE LIQUIDO . . . . .	159
VI.A.2.4	POR DEPOSITOS DE CARBON . . . . .	160
VI.A.3	ELIMINACION DE CS <sub>2</sub> Y COS . . . . .	161
VI.A.3.1	DEPENDENCIA DE LA HIDROLISIS CON LA TEMPERATURA . . . . .	169
VI.B	CRITERIOS DE DISEÑO DE LOS CONVERTIDORES . . . . .	174
VI.C	COMPORTAMIENTO IDEAL DE LOS CONVERTIDORES . . . . .	178
VII.-	CONDENSADORES DE AZUFRE . . . . .	180
VII.A	COMPORTAMIENTO DEL AZUFRE RESPECTO A LA TEMPERATURA . . . . .	181
VII.B	FORMACION Y ELIMINACION DE NIEBLA . . . . .	186
VII.C	CONSECUENCIAS DE LA OPERACION DEL CONDENSADOR . . . . .	188

VII.D	CRITERIOS DE DISEÑO DE LOS CONDENSADORES . . . . .	189
APENDICE A:	MODULOS DE SIMULACION . . . . .	192
	A.1 MODULO DE DATOS DE ENTRADA (DATENT) . . . . .	192
	A.1.1 INSTRUCTIVO PARA EL USO DEL PROGRAMA SIMCLA . . . . .	195
	A.2 MODULO DE SIMULACION HORNO . . . . .	196
	A.2.2 SUBROUTINA HORNO; SIMULACION DEL COMPORTAMIENTO IDEAL . . . . .	197
	A.2.2 SUBROUTINA CAMCOM; PREDIMENSIONAMIENTO DE LA CAMARA DE REACCION . . . . .	202
	A.2.3 DATOS REQUERIDOS POR EL MODULO . . . . .	206
	A.3 MODULO DE SIMULACION CALDER; SUBROUTINAS CALDER Y DIMCAL . . . . .	209
	A.3.1 DATOS REQUERIDOS POR EL MODULO . . . . .	217
	A.4 MODULO DE SIMULACION CONCAT . . . . .	219
	A.4.1 DATOS REQUERIDOS POR EL MODULO . . . . .	227
	A.5 MODULO DE SIMULACION CONDEN . . . . .	234
	A.5.1 DATOS REQUERIDOS POR EL MODULO . . . . .	243
APENDICE B:	SUBROUTINAS AUXILIARES . . . . .	246
	B.1 SUBROUTINA ADIAB . . . . .	246
	B.2 SUBROUTINA EQUIMO . . . . .	250
	B.3 SUBROUTINA EQUIAZ . . . . .	253
	B.4 SUBROUTINA FACTOR . . . . .	256
	B.5 SUBROUTINA ROCIO . . . . .	259
	B.6 SUBROUTINA VAPOR . . . . .	264
APENDICE C:	BANCO DE DATOS . . . . .	268
	C.1 SUBROUTINA SFEL . . . . .	268
	C.2 SUBROUTINA ENTAL . . . . .	271
	C.3 SUBROUTINA PCP . . . . .	274
	C.4 SUBROUTINA PCTC . . . . .	278
	C.5 SUBROUTINA PVIS . . . . .	280
	C.6 SUBROUTINA PDENS . . . . .	283
	C.7 SUBROUTINA NOMBRE . . . . .	285

<b>CONCLUSIONES</b>	. . . . .	<b>288</b>
<b>BIBLIOGRAFIA</b>	. . . . .	<b>290</b>

## I      I N T R O D U C C I O N   Y   O B J E T I V O S

Virtualmente en todas las industrias el uso de Azufre, en una forma o en otra, es parte esencial de los procesos de producción de bienes de consumo finales o intermedios.

Actualmente, y desde hace muchos años, la fuente principal de Azufre elemental es la recuperación de éste a partir del Acido Sulfhídrico contenido en los gases residuales del proceso de endulzamiento del gas natural. Aunado a esto, la creciente demanda de materias primas de buena calidad y bajo costo, así como el estricto control de la contaminación ambiental, ha traído como resultado el mejoramiento y optimización de los métodos de recuperación de Azufre elemental.

Por otra parte, la presencia de Acido Sulfhídrico y mercaptanos en los hidrocarburos, líquidos o gaseosos, hace incapaces a éstos de muchas aplicaciones debido a la naturaleza tóxica de dichos contaminantes, así como a las condiciones corrosivas que se generan durante su oxidación.



En cuanto a la conveniencia de obtener directamente Azufre elemental a partir del  $H_2S$  contenido en el gas natural o en gases de refinera, en lugar de producir algún otro compuesto azufrado a partir de él, se basa en las siguientes ventajas<sup>6 56 59</sup>:

- Se obtiene un Azufre de alta pureza,
- Se facilita su manejo, transportación y almacenamiento,
- Se evita el manejo de grandes volúmenes de gas al tratar de obtener otro producto de Azufre.

Durante mucho tiempo se han desarrollado varios métodos para la separación del  $H_2S$  de los hidrocarburos; todos estos métodos se basan en la absorción del  $H_2S$  en una solución debilmente alcalina, seguida de la regeneración de la solución absorbente y la consiguiente liberación del gas absorbido, el cual es relativamente rico en  $H_2S$ . Dentro de estos procesos, llamados de endulzamiento, se utiliza con más frecuencia el proceso *Girbotel*, utilizandose con menor frecuencia los procesos *Shell*, *Koppers* y *Koppers-Thylox*<sup>56</sup>.

El gas efluente de estos procesos de endulzamiento, conteniendo el Acido Sulfhídrico se alimenta a otro proceso en donde se recupera el Azufre elemental. Actualmente los procesos de recuperación de Azufre pueden ser clasificados en cuatro categorías<sup>33</sup>:

- 1.- Conversión en lecho catalítico (como el Claus Modificado y el de Oxidación directa).
- 2.- Adsorción en lecho seco / conversión catalítica (como el Haines y Shell, los cuales utilizan mallas moleculares).
- 3.- Absorción en medio líquido / oxidación con aire (como el Giammarco-Vetrocke, Stretford, Lacy-Keller Thylox. Perox y Ferox).
- 4.- Absorción en medio líquido / conversión directa (como el Townsend y Shell).

De estos procesos, el más usado por considerarse el mejor de todos es el proceso Claus o alguna de sus variantes.

Durante el actual desarrollo petrolero en México, muchos de los ya

cimientos de gas natural y crudo localizados, son de alto contenido de Azufre, lo que hace necesario un incremento en el diseño e instalación de plantas de recuperación de Azufre.

El balance de materia y energía para estas plantas, lo mismo que su dimensionamiento, se efectuaría en varias semanas si se utiliza un método manual con cálculos de equilibrio aproximados o simplificados. Por el contrario, utilizando la computadora como herramienta de cálculo, es posible hacer lo mismo en unos cuantos minutos empleando métodos más rigurosos para el cálculo de los equilibrios.

### 1.3 OBJETIVOS:

En el presente trabajo se pretende implementar un programa de computadora para la simulación y dimensionamiento preliminar de los equipos principales de una planta Claus a fin de poder evaluar en forma rápida el efecto de las diferentes variables de proceso y, una vez analizados los resultados, establecer las condiciones de operación que satisfagan los requerimientos deseados, así como el esquema de flujo de proceso que mejor se adapte al sistema en cuestión.

Para lograr lo anterior, es esencial conocer las características principales y las reacciones químicas involucradas en las diferentes etapas del proceso, con el fin de generar los algoritmos para el cálculo de las composiciones de equilibrio termodinámico de las reacciones, los balances de materia y energía y por último el pre dimensionamiento de los equipos considerados.

El cálculo del equilibrio de reacción en el Horno-Caldera de reacción y en los Convertidores Catalíticos se basa en el método de Minimización de Energía Libre de Gibbs. Por lo que respecta al Condensador de Azufre se considerará el equilibrio existente entre las diferentes especies alotrópicas de Azufre generadas durante el enfriamiento de la corriente gaseosa, lo que hará más confiable el balance de materia de este equipo.

El programa estará estructurado en forma de módulos, cada uno de los cuales representará uno de los equipos que conforman las plantas Claus. De tal forma que para efectuar el balance de materia y energía y el predimensionamiento de los equipos bastará con llamar cada una de estas subrutinas o módulos mediante un número clave dentro de un programa principal ejecutor. Aunado a lo anterior cada módulo aceptará y transferirá en forma independiente todos los datos que caracterizan a cada corriente de proceso, con lo que la simulación de las plantas de recuperación de Azufre, ya que bastará acomodar cada uno de los módulos de acuerdo al diagrama de flujo de proceso seleccionado, ya sea flujo directo o dividido.

Por otra parte, a fin de hacer más flexible el programa, se contará también con diferentes opciones de simulación para los reactores catalíticos y térmico.

Así, en el Horno se podrá contar con las siguientes opciones:

- Cálculo del equilibrio a la temperatura de flama adiabática del sistema.
- Cálculo del equilibrio a la temperatura deseada.

En cuanto al Convertidor Catalítico se contará con las siguientes opciones:

- Temperatura de salida igual a temperatura de rocío del sistema.
- Temperatura de salida igual a temperatura de rocío del sistema más un gradiente de temperatura deseado.
- Temperatura de salida igual a temperatura deseada.
- Temperatura de salida igual a temperatura fijada por el balance de energía del sistema.

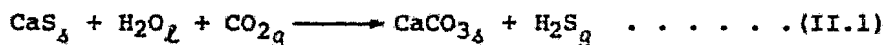
Para probar la confiabilidad del programa desarrollado se harán corridas con datos obtenidos de la literatura y se compararán los resultados obtenidos. De ser posible, se probará también con datos de plantas existentes.

## II ORIGEN Y DESARROLLO DEL PROCESO CLAUS

### II.A EL PROCESO CLAUS ORIGINAL:

El proceso Claus original es un proceso en dos partes desarrollado expresamente para la recuperación de Azufre consumido en la producción de Soda ( $\text{Na}_2\text{CO}_3$ ) por el método de *Leblanc*. El proceso fue desarrollado por Carl Friedrich Claus, un químico Londinense que registró una patente Británica en 1883.

El primer paso del proceso se representa en la figura II.1 y consiste en burbujear Bióxido de Carbono ( $\text{CO}_2$ ) en una suspensión de Sulfuro de Calcio ( $\text{CaS}$ ) y Agua ( $\text{H}_2\text{O}$ ) para obtener Carbonato de Calcio ( $\text{CaCO}_3$ ) y Acido Sulfhídrico ( $\text{H}_2\text{S}$ ), de acuerdo a la siguiente reacción:



Esta operación se lleva a cabo en un solo recipiente para proceso intermitente o en una serie de recipientes para una operación continua. En el último caso, las tuberías y válvulas que interconec-

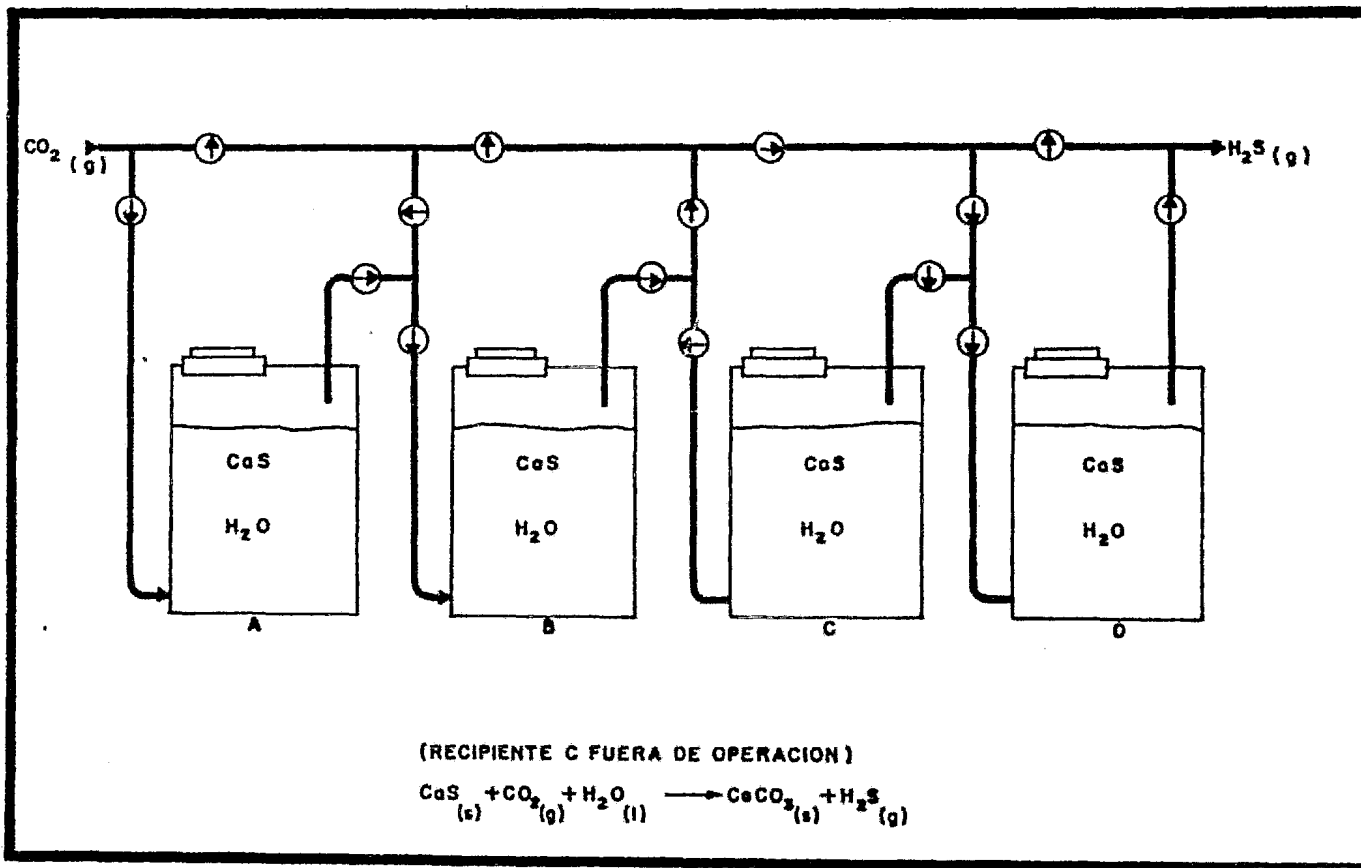
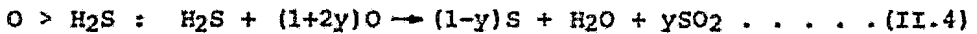
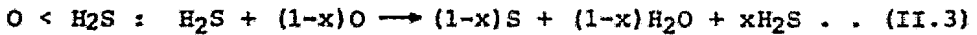
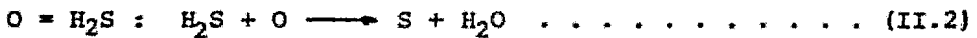


FIGURA II.1—PROCESO CLAUS ORIGINAL (1a. ETAPA)

tan los recipientes son arregladas de tal manera que cualquiera de los recipientes pueda ser sacado de operación para ser recargado con la suspensión de CaS en H<sub>2</sub>O, mientras se mantiene un suministro continuo de H<sub>2</sub>S a la segunda etapa del proceso.

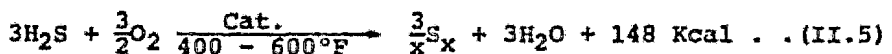
En la segunda etapa del proceso (fig. II.2) el Acido Sulfhídrico es mezclado con Oxígeno y la mezcla es introducida en un recipiente que contiene una cama de catalizador la cual ha sido precalentada hasta la temperatura de operación deseada. Después de iniciada la reacción se mantiene una temperatura constante controlando los flujos de los reactivos.

La relación de Oxígeno a Acido Sulfhídrico se varía de acuerdo a la mezcla de productos deseada, es decir:



Si se tiene disponible CO<sub>2</sub> puro para efectuar la reacción II.1, la corriente de H<sub>2</sub>S para la segunda etapa del proceso puede ser esencialmente pura, conteniendo sólo vapor de agua, trazas de CO<sub>2</sub> y posiblemente pequeñas cantidades de otros gases de la suspensión de CaS/H<sub>2</sub>O. Sin embargo, más frecuentemente, se utiliza como fuente de CO<sub>2</sub> una corriente de gases producto de la combustión de hidrocarburos y consecuentemente el CO<sub>2</sub> y por tanto el H<sub>2</sub>S es tan usualmente diluidos con Nitrógeno. En forma similar, una corriente de aire es la fuente más conveniente de O<sub>2</sub> por lo que más N<sub>2</sub> es introducido en la corriente de productos.

La aplicación del segundo paso de este proceso al Acido Sulfhídrico obtenido de otras fuentes se la conoce con el nombre de *Proceso Claus* para la recuperación de Azufre elemental a partir de la oxidación parcial del H<sub>2</sub>S sobre un catalizador.



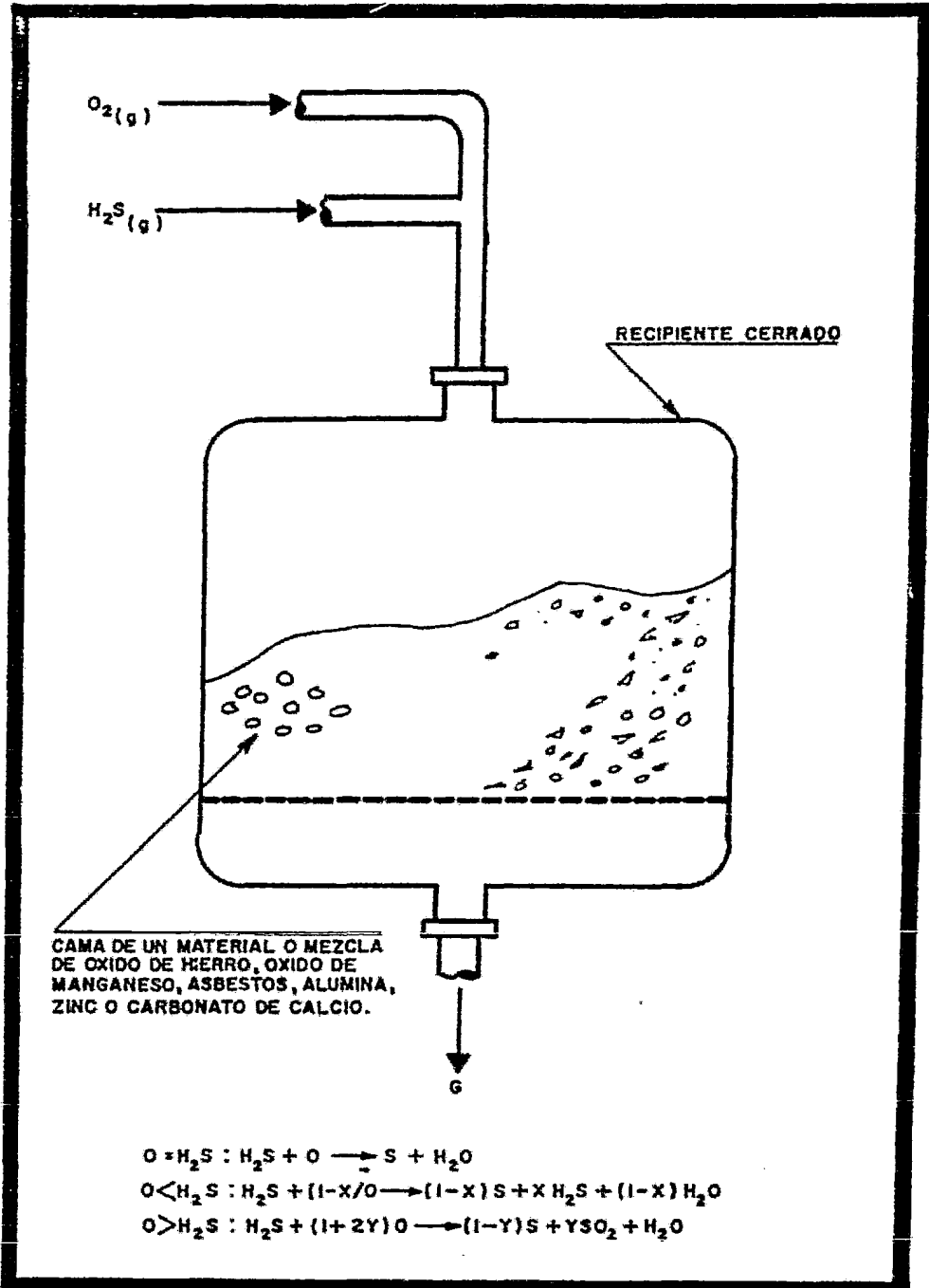


FIGURA II. 2-PROCESO CLAUS ORIGINAL (2o. ETAPA REACTOR CATALITICO)

El recipiente de reacción para el segundo paso se le conoce con el nombre de *Horno Claus*, el cual debe ser operado a una temperatura razonablemente baja, en un rango de 205 a 316°C (400 a 600°F) para maximizar el rendimiento de Azufre, ya que la reacción es exotérmica.

El Azufre formado de acuerdo a la reacción II.5 se recupera como líquido en un condensador a la salida del Horno Claus. Cualquier cantidad de Azufre no colectada aquí es atrapada en una cámara de polvos. Para remover el SO<sub>2</sub> residual de los gases de desecho normalmente se utiliza un lavado con agua, mientras que el exceso de H<sub>2</sub>S es removido pasando los gases por un purificador de Oxido de Hierro o bien es quemado hasta SO<sub>2</sub>.

Debido a que la reacción entre el Oxígeno y el Acido Sulfhídrico es bastante exotérmica y el calor desprendido debe ser disipado por radiación, el Horno Claus está limitado a procesar pequeñas cantidades de H<sub>2</sub>S. A fin de alcanzar un rendimiento de 80 a 90% pueden ser procesados de dos a tres volúmenes de H<sub>2</sub>S por cada volumen de catalizador por hora. Esfuerzos por incrementar la disipación de calor del proceso llevaron a instalar serpentines de enfriamiento en el Horno y a recircular gases gastados a través de éste, sin embargo no se obtuvo ningún éxito.

## II.B EL PROCESO CLAUS MODIFICADO:

En 1938 la I.G. Farbenindustrie A.G. de Alemania hizo una gran modificación al proceso Claus, por medio de la cual, no sólo se incrementó significativamente la capacidad del proceso, sino que además se provió un mecanismo para recuperar la energía consumida previamente. El proceso Claus-Modificado se muestra esquemáticamente en la figura II.3, en donde se puede ver que la oxidación parcial del H<sub>2</sub>S se lleva a cabo en dos pasos en lugar de uno.

El primer paso del proceso Claus-Modificado consiste en la oxidación completa a flama directa de una tercera parte del H<sub>2</sub>S contenido en la corriente de proceso hasta SO<sub>2</sub> de acuerdo a la siguiente reacción:



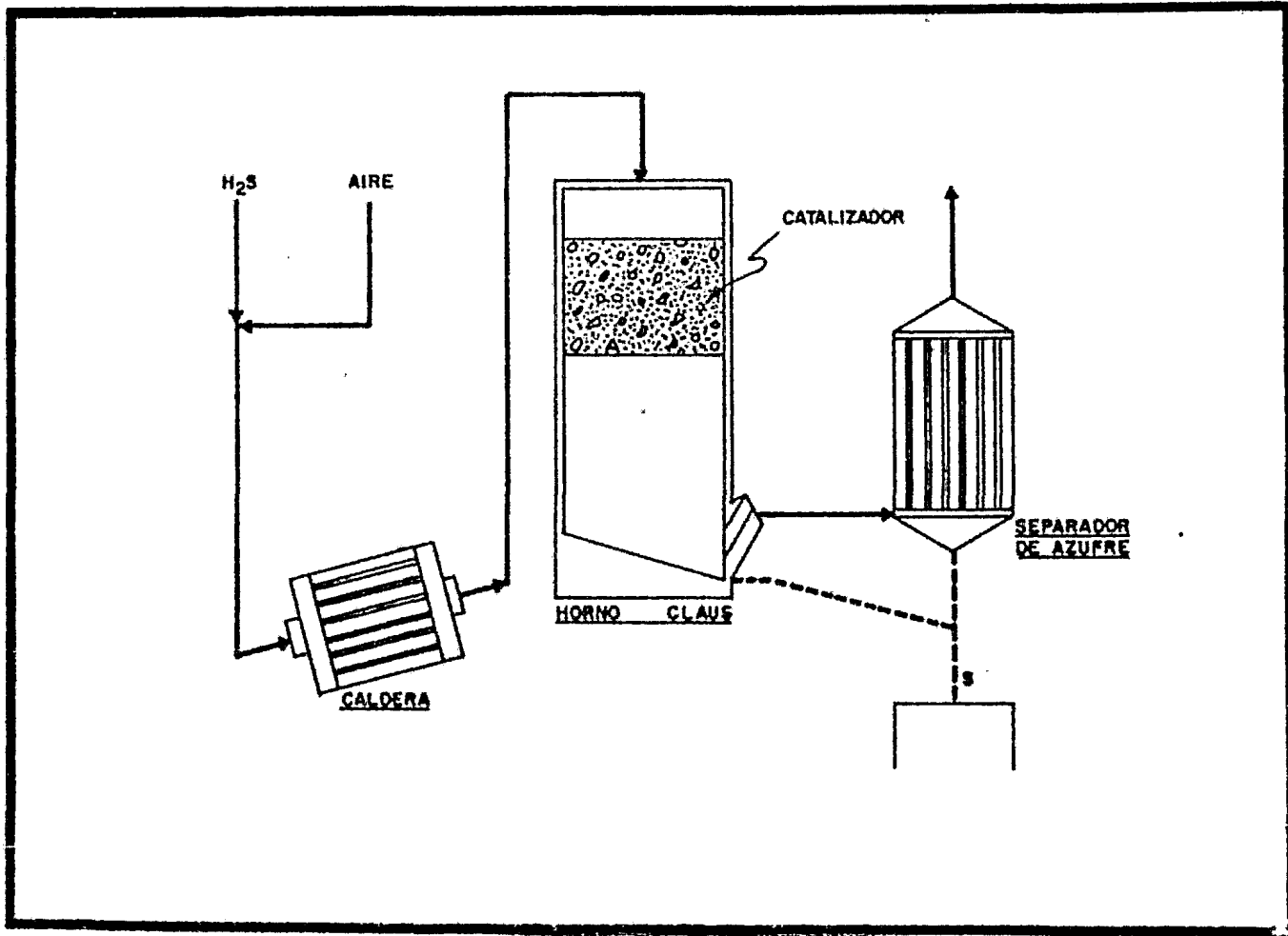
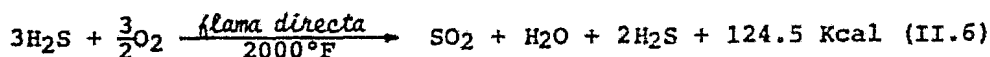
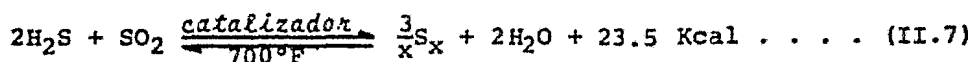


FIGURA II. 3 - PROCESO CLAU MODIFICADO (ALTERNATIVA FLUJO DIRECTO)



Este paso se lleva a cabo en una caldera y la energía disipada es usada para generar vapor.

En el segundo paso las dos terceras partes remanentes de  $\text{H}_2\text{S}$  se hacen reaccionar, en presencia de un catalizador, con el  $\text{SO}_2$  producido en el horno, de acuerdo a la siguiente reacción:



Los beneficios de esta simple modificación son:

- Es posible recuperar aproximadamente 4/5 partes de la energía liberada por la reacción general II.6.
- El problema de mantener bajas temperaturas de reacción es casi eliminado.
- La capacidad para procesar Acido Sulhídrico se incrementa más de cinco veces.
- Se puede recuperar Azufre de corrientes de gases ácidos que contienen de 15 a prácticamente 100% mol de  $\text{H}_2\text{S}$ .

En una de las primeras plantas basadas en el proceso Claus-Modificado, en donde toda la corriente de gas ácido pasaba a través de la Caldera, la temperatura de los gases de salida de ésta fué de 249 a 305°C (480 a 580°F) y el Horno Claus operó entre 371 y 399°C (700 y 750°F). El Azufre producido se colectó como líquido, una parte a la salida del Horno Claus y otra en un separador centrífugo, teniéndose una recuperación global del proceso de 92 a 94% del Azufre total de entrada.

Las más grandes mejoras desde 1938 fueron obtenidas por una adición secuencial de más reactores catalíticos, con remoción de Azufre y calor entre éstos para inducir el equilibrio de la reacción

hacia una mayor recuperación de Azufre.

## II.C PROCESO CLAUS MODIFICADO; CONFIGURACIONES MODERNAS:

A partir de los procesos Claus y Claus-Modificado han surgido diferentes configuraciones modernas las cuales pueden ser divididas en:

- Flujo Dividido (Split-Flow),
- Flujo Directo (Straight-Flow), y
- Recirculación de Azufre (Sulphur Recycle).

Cualquiera que sea la configuración de la planta, la secuencia de recipientes que comprende: Horno-Caldera de Reacción, Condensadores, Recalentadores y Convertidores Catalíticos se le conoce como Tren de Recuperación de Azufre.

### II.C.1 CONFIGURACION FLUJO DIVIDIDO:

En la configuración Flujo Dividido (fig. II.4) una tercera parte de la corriente de gases ácidos pasa a través del Horno de Reacción en donde el  $H_2S$  es oxidado para formar  $SO_2$ , después de lo cual los gases de reacción pasan por la Caldera de recuperación de calor en donde se produce vapor de alta presión aprovechando el calor disipado por la reacción de oxidación. Generalmente en esta configuración no se producen cantidades significativas de Azufre elemental en el Horno. Normalmente en todas las plantas Claus el Horno de Reacción y la Caldera de recuperación de calor se encuentran en un solo equipo que recibe el nombre de Horno - Caldera de Reacción.

Los gases efluentes del recuperador de calor son mezclados con la corriente de gas que no pasó por el Horno-Caldera de Reacción.

La mezcla resultante se alimenta al Convertidor Catalítico en donde se forma Azufre elemental mediante la reacción del  $SO_2$  producido en el Horno y el  $H_2S$  de la corriente de gases ácidos que no pasó por él (reacción II.7).

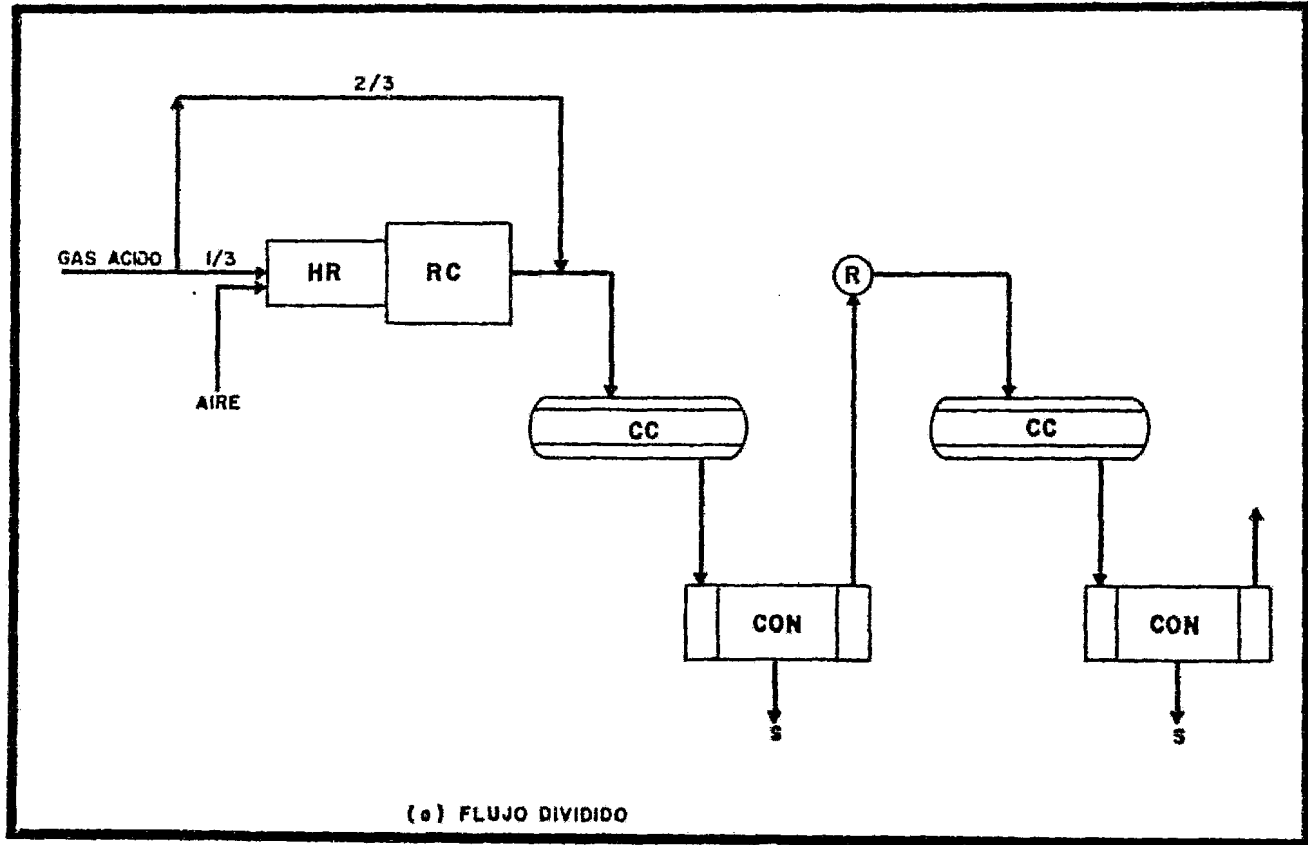


FIGURA II.4 - CONFIGURACIONES PROCESO CLAUS MODIFICADO.

La corriente efluente del Convertidor Catalítico pasa a un Condensador en donde se recupera el Azufre en forma líquida. La temperatura mínima de operación del Condensador es el punto de congelación del Azufre,  $115.6^{\circ}\text{C}$  ( $239.4^{\circ}\text{F}$ ) y la temperatura máxima es la de su punto de ebullición,  $445^{\circ}\text{C}$  ( $832.3^{\circ}\text{F}$ ), sin embargo, normalmente se operan en un rango de  $160$  a  $246^{\circ}\text{C}$  ( $320$  a  $475^{\circ}\text{F}$ ) con el objeto de evitar altas caídas de presión y problemas de taponamiento.

Una vez separado el Azufre, los gases residuales son enviados a un recalentador para alcanzar la temperatura de operación necesaria en el segundo Convertidor Catalítico en donde se continúa la reacción entre el  $\text{H}_2\text{S}$  y el  $\text{SO}_2$  que no reaccionaron en el primer Convertidor. Los gases de reacción de este segundo Convertidor pasan a un segundo Condensador en donde se separa el Azufre formado. Este par, Convertidor/Condensador, se repite hasta alcanzar la conversión deseada, después de lo cual, los gases residuales son enviados a un quemador, pasando antes por mallas separadoras con el objeto de separar el Azufre no condensado.

Esta configuración es recomendable cuando la cantidad de  $\text{H}_2\text{S}$  en el gas ácido es relativamente baja (20 a 25% mol) con el fin de mantener una flama constante en el Horno Caldera de Reacción. También se prefiere cuando el contenido de hidrocarburos en el gas es relativamente grande (2 a 5% mol) ya que de este modo decrece la formación tanto de Carbón, que ocasiona ensuciamiento del catalizador, como de Sulfuro de Carbonilo, el cual es difícil de convertir a Azufre elemental.

#### II.C.2 CONFIGURACION FLUJO DIRECTO:

En esta configuración toda la corriente de gas ácido se pasa por el Horno Caldera de Reacción, al cual también se alimenta la cantidad estequiométrica de Oxígeno para que reaccione sólo una tercera parte del  $\text{H}_2\text{S}$  de acuerdo a la reacción II.6. Así mismo, dentro del Horno se lleva a cabo la reacción entre el  $\text{SO}_2$  formado y el  $\text{H}_2\text{S}$  remanente para formar Azufre elemental. El diagrama de flujo de esta configuración se presenta en la figura II.5.

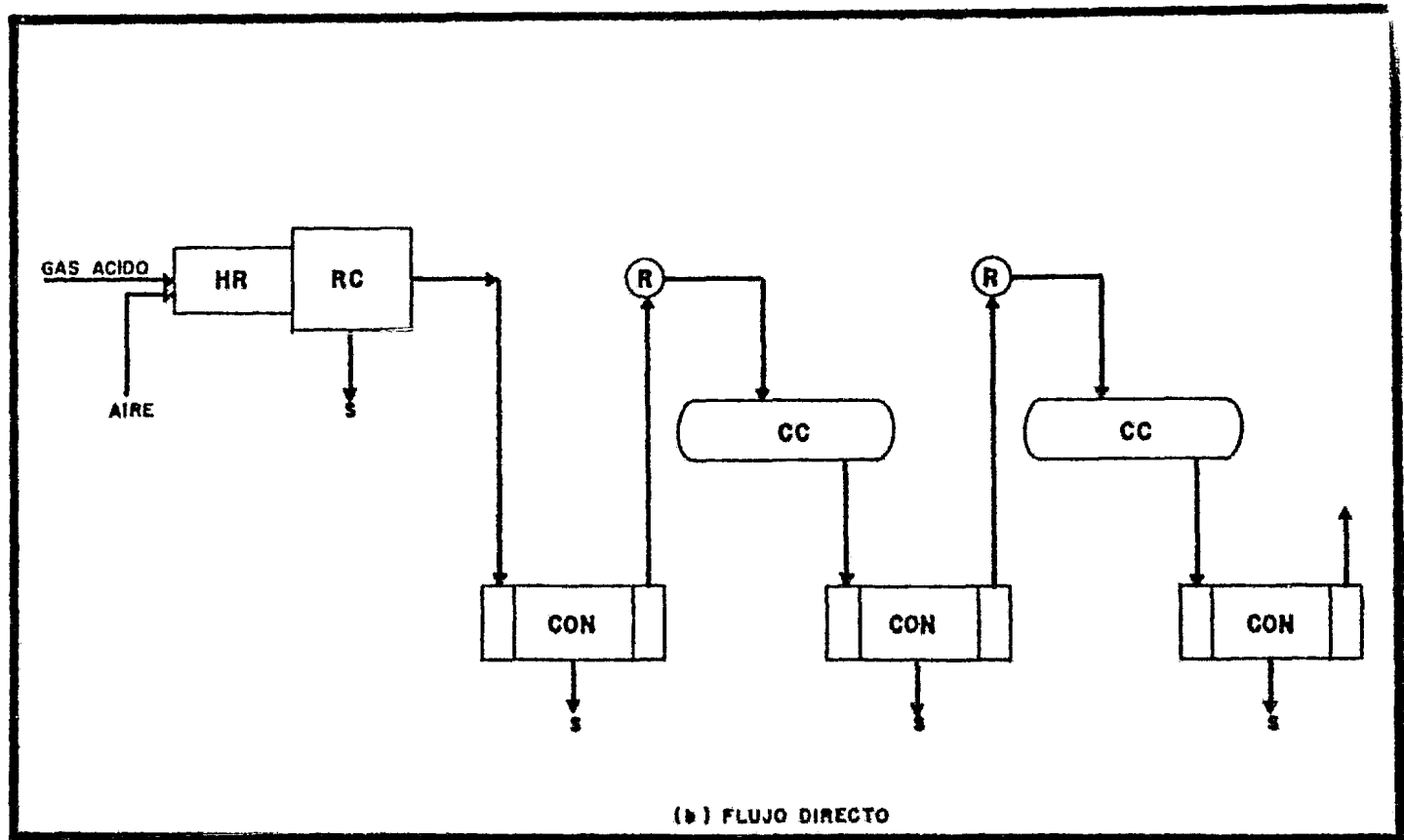


FIGURA 11.5 — CONFIGURACIONES PROCESO CLÄUS MODIFICADO.

En este tipo de plantas es usual que se presente una producción de Azufre dentro del Horno del orden de 60 a 70% por lo que en la Caldera, a la vez que se realiza una alta recuperación de calor, se condensa parte del Azufre formado, trayendo como consecuencia una eficiencia mayor del proceso.

Los gases efluentes del Horno Caldera de Reacción se envían a un Condensador en donde se termina de condensar y recuperar el Azufre formado.

Una vez hecho lo anterior, los gases libres de Azufre son enviados a un Recalentador en donde se eleva su temperatura hasta la temperatura de operación del primer Convertidor Catalítico donde se continúa la reacción entre el  $H_2S$  y el  $SO_2$  para formar Azufre elemental. Los gases de reacción se este Convertidor se envían a un segundo Condensador para recuperar el Azufre.

Las operaciones de recalentamiento, reacción catalítica y condensación se repiten hasta alcanzar la conversión deseada para después enviar los gases residuales a un sistema de mallas separadoras y luego a un quemador.

Como puede verse, este sistema incluye dos pasos de formación de Azufre; El primero lo constituye el Horno Caldera de Reacción, es decir, un paso térmico, mientras que el segundo paso está constituido por los Convertidores Catalíticos.

Esta configuración es recomendable cuando la concentración de  $H_2S$  es mayor de 20% mol y el contenido de hidrocarburos es menor de 2% mol. Esto se debe, primeramente, a que con este nivel de concentración de  $H_2S$  se mantiene una buena combustión y segundo, que si la concentración de hidrocarburos fuera mayor, la cantidad de Carbón producida por la combustión incompleta de los mismos sería mayor, lo que propiciaría una rápida contaminación del catalizador.

### II.C.3 CONFIGURACION RECIRCULACION DE AZUFRE:

En la configuración de recirculación de Azufre, nada de los gases

ácidos pasan a través del Horno de Reacción. En lugar de esto, Azufre es quemado para producir  $\text{SO}_2$ , el cual antes del primer Convertidor Catalítico se mezcla con la pequeña cantidad de  $\text{H}_2\text{S}$  contenida en la corriente de gas ácido de alimentación, la cual previamente pasó por un precalentador. Una vez hecha la mezcla, la corriente pasa al primer Convertidor y después al segundo Condensador donde se recupera el Azufre formado, parte del cual se envía al quemador para producir el  $\text{SO}_2$  requerido. Después del segundo Condensador, los gases pasan a un Recalentador y continúan al segundo Convertidor y tercer Condensador, en donde se condensa el Azufre, mientras que el gas agotado se manda a un separador de mallas para después pasar a un quemador (fig. II.6).

#### II.D ASPECTOS GENERALES DE LAS CONFIGURACIONES:

Como se vió en las secciones anteriores las diferencias entre las configuraciones existentes radica en los métodos utilizados en la producción de  $\text{SO}_2$  antes del primer Convertidor. Cualquiera que sea la configuración, en el Horno de Reacción el principal requisito es tener una flama estable a una temperatura suficientemente alta para completar la reacción entre el  $\text{O}_2$  y el  $\text{H}_2\text{S}$ . La temperatura de flama depende del contenido de Acido Sulhídrico en el gas ácido y de la fracción del mismo que se desvía del Horno. En aquellos casos en donde el contenido de  $\text{H}_2\text{S}$  es muy pequeño para alcanzar una temperatura suficientemente alta y estable, además de desviar 2/3 partes del gas ácido, se precalienta el gas que se alimenta al Horno de Reacción o bien se recircula Azufre para ayudar a la combustión.

Como se vió antes, cuando un Condensador es seguido por un Convertidor Catalítico es necesario tener un Recalentador entre estos equipos para alcanzar la temperatura necesaria para que se lleve a cabo la reacción catalítica; Existen cuatro métodos básicos de recalentamiento, los cuales son:

- Desviación de los gases calientes del Horno,
- Quemador de gas ácido en línea,
- Cambiadores de Calor gas/gas, y



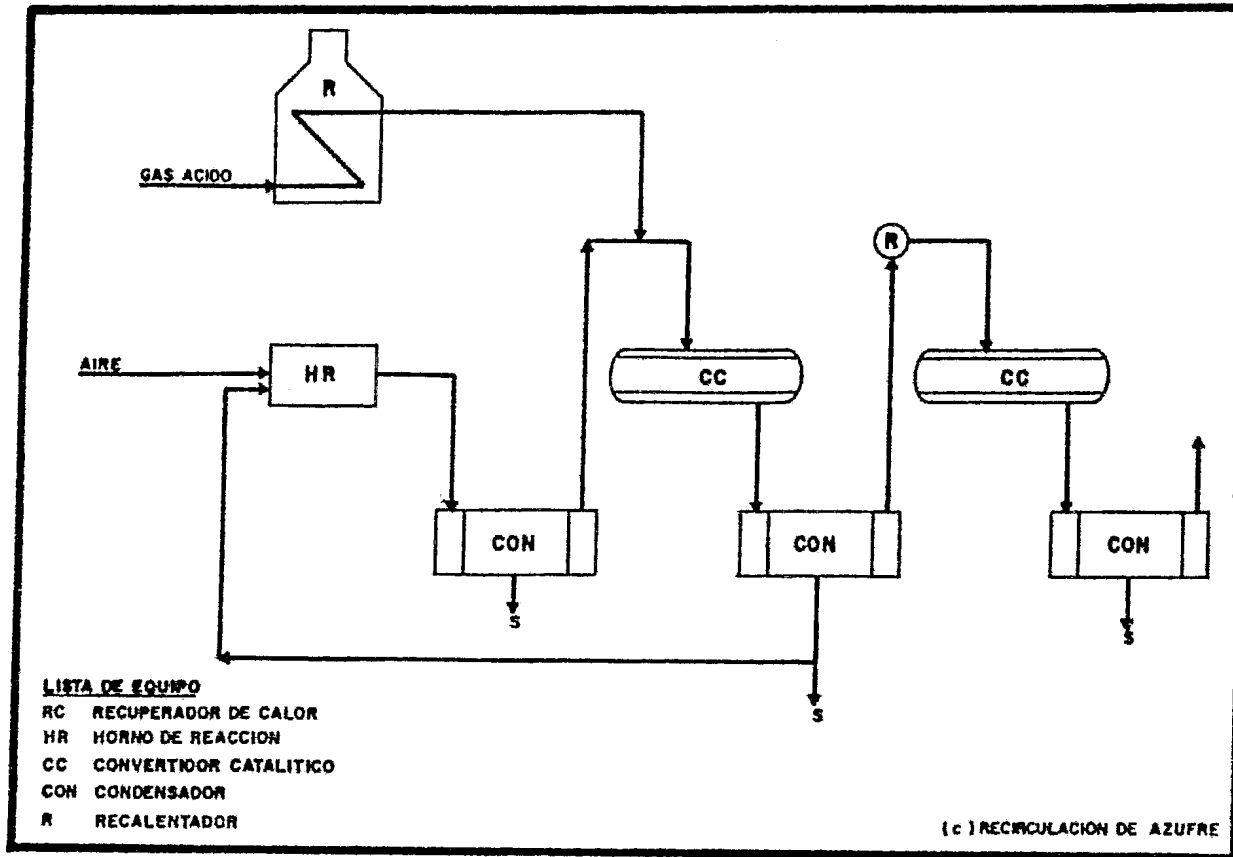


FIGURA II-6—CONFIGURACIONES PROCESO CLAUS MODIFICADO.

- Calentador de fuego directo.

Estos métodos (fig. II.7) pueden usarse en cualquiera de las configuraciones propuestas para el proceso Claus y su selección depende principalmente de: (a) Concentraciones de  $H_2S$  y contaminantes, (b) Recuperación de Azufre deseada, y (c) Aspectos económicos.

La tabla II.1 nos muestra una guía general del posible rango de aplicación de las diferentes configuraciones del proceso Claus.

TABLA II.1

RANGOS DE APLICACION DE LAS  
CONFIGURACIONES DEL PROCESO CLAUS

H <sub>2</sub> S en el gas ácido (% mol)	Configuración
50 a 100	Flujo Directo
20 a 50	Flujo Dividido
10 a 20	Flujo Dividido*
menor a 10	Recirculacion de Azufre .

\*Requiere de precalentamiento de las corrientes de alimentación.

Los rangos de la tabla anterior no están perfectamente definidos, algunos factores como la presencia de otras especies diferentes a  $H_2S$  y  $CO_2$  en la corriente de alimentación, el flujo, la composición del gas ácido, la experiencia de los diseñadores y la economía tienen una gran influencia en la selección de la configuración de la planta Claus más adecuada.

Por último, cabe hacer notar que todos los condensadores de las plantas Claus utilizan como medio de enfriamiento agua, con el fin de generar vapor de baja presión.

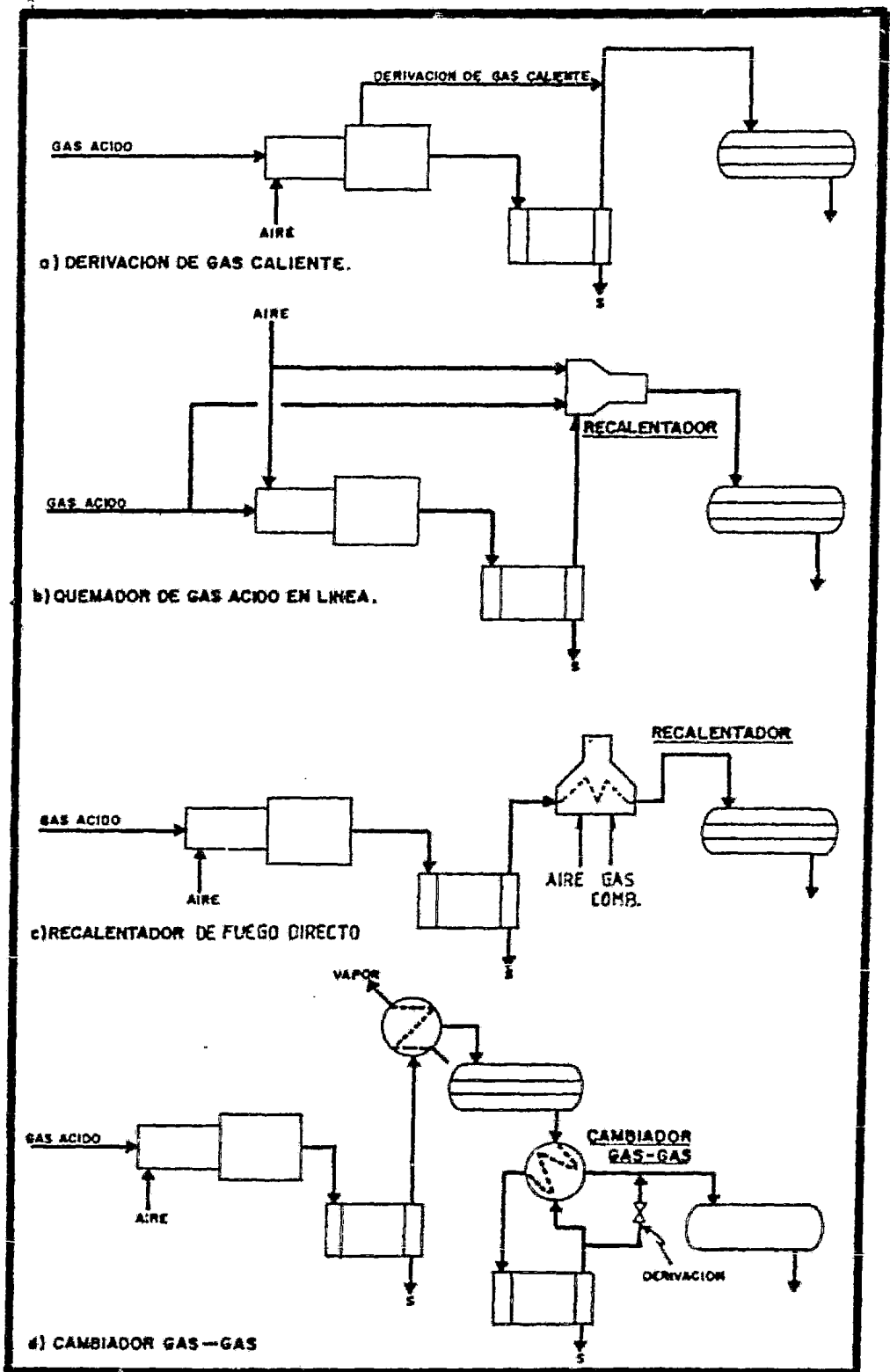


FIGURA 11-7 METODOS DE RECALENTAMIENTO.

### III        S I M U L A C I O N   D E L           P R O C E S O   C L A U S .

El desarrollo de los sistemas de computación ha permitido el desarrollo de modelos matemáticos y de métodos de cálculo que efectúan una solución rápida y eficaz de problemas que tradicionalmente requerían mucho tiempo. Así mismo, se facilitó la implementación de metodologías de simulación matemática de procesos químicos, ya sea total o parcialmente, y del dimensionamiento final o preliminar de los equipos involucrados en dichos procesos.

La necesidad de encontrar resultados más cercanos a la realidad y por lo tanto más confiables, así como la de resolver problemas más complejos propició el mejoramiento de los métodos ya existentes y la creación de otros nuevos.

Así, por ejemplo, en el cálculo del equilibrio de reacciones químicas se puede utilizar el método tradicional del cálculo de constantes de equilibrio o el método de Minimización de Energía de Gibbs. En el primero, se desarrolla una serie de ecuaciones alge-

braicas no lineales derivadas de la estequiometría y de las presiones parciales y total del sistema, por lo que para sistemas complejos que involucran un gran número de reacciones químicas se dificulta su solución, siendo lenta la convergencia y en algunas ocasiones no se logra. Por lo que respecta al segundo método mencionado, no requiere del conocimiento de las reacciones efectuadas y por lo tanto tampoco de su estequiometría para establecer el equilibrio de un sistema a una presión y temperatura dadas ya que éste se consigue mediante la minimización de la Energía de Gibbs total del sistema; para ello sólo se requiere de las Energías de Gibbs de los componentes involucrados.

Por otra parte, se puede contar con programas de simulación de procesos generales o específicos. Con los primeros es posible simular casi cualquier tipo de proceso -dependiendo de su alcance- mientras que con los segundos sólo se puede simular un proceso o sus alternativas como es el caso del programa SIMCLA desarrollado en el presente trabajo.

Para poder simular cualquier tipo de proceso es necesario contar con lo siguiente<sup>87, 88</sup>:

- Topografía del proceso
- Información sobre las corrientes de alimentación
- Propiedades físicas y químicas de las especies involucradas en el proceso
- Balance de materia y energía

Si la simulación se efectúa mediante una computadora, deberán considerarse además los siguientes aspectos<sup>87, 88</sup>:

- Lenguaje computacional
- Modelos matemáticos

- Criterios de convergencia
- Secuencias de cálculo

Con estas consideraciones es posible generar un programa de computadora que permita reproducir en forma confiable los efectos de todas las variables en el comportamiento del proceso.

### III.A ALCANCE DE LA SIMULACION DEL COMPORTAMIENTO IDEAL:

Desde el punto de vista conceptual, el comportamiento ideal de una planta o equipo se alcanza cuando se satisfacen todos los requisitos estequiométricos de las reacciones básicas del proceso bajo las condiciones termodinámicas más favorables y cuando se alcanza el equilibrio en todos los puntos del proceso.

Las condiciones termodinámicas más favorables se determinan sólo por las diferencias de energía entre los estados final e inicial del sistema sin importar el tiempo, los mecanismos de reacción y las limitaciones cinéticas, los cuales determinan la capacidad real del sistema. De aquí que la selección de las condiciones de operación y dimensiones del equipo se haga mediante la combinación de las condiciones termodinámicas más favorables y los requisitos cinéticos.

El conocimiento del comportamiento ideal de las plantas Claus es importante porque nos dará una base para:

- Evaluar el comportamiento y eficiencia de operación de una planta o equipo existente y así poder determinar si se debe hacer o no mejoras técnicas al proceso
- Crear nuevos criterios que permitan hacer diseños más eficientes de plantas futuras

El programa de simulación del comportamiento ideal de las plantas

Claus se basa en el método de Minimización de Energía de Gibbs en la cual, como su nombre lo indica, se minimiza la función de energía de Gibbs para encontrar la composición de equilibrio de las reacciones que se llevan a cabo en el Horno de Reacción y en los Convertidores Catalíticos, sin importar las limitaciones cinéticas y mecanismos de reacción que puedan existir.

Con el algoritmo del programa SIMCLA es posible obtener los parámetros de evaluación necesarios para seleccionar la configuración y condiciones de operación del tren de recuperación de Azufre más adecuada a una alimentación dada. Para ello se cuenta con las siguientes facilidades:

- 1.- Se pueden simular los esquemas de flujo de proceso Claus conocidos como Flujo Dividido y Flujo Directo, dependiendo su selección de los criterios enunciados en el capítulo anterior.
- 2.- Se pueden simular el número de etapas Conversión/Condensación necesarias para alcanzar la conversión deseada.
- 3.- Se pueden fijar las temperaturas de operación de los Convertidores térmico y catalítico o bien dejar que el programa las fije de acuerdo a los balances de energía.
- 4.- Se puede fijar la temperatura de operación de los condensadores de manera que se obtengan los mejores resultados

Adicional a esto, se puede analizar el efecto de la composición y carga de alimentación, lo mismo que los cambios de presión y temperatura de operación en las diferentes etapas del proceso.

Por otro lado, el programa proporciona las características principales de la corriente de proceso que pasa por cualquiera de los equipos considerados (Horno-Caldera de Reacción, Condensadores y Convertidores Catalíticos). Dentro de la información que se obtiene para las corrientes de proceso se tiene:

- Flujos molar y másico totales

- Composición y flujo para cada especie
- Peso molecular promedio de la corriente
- Temperatura
- Presión
- Entalpía a las condiciones actuales de la corriente

Además de estas características, se proporciona el valor medio de las siguientes propiedades:

- Densidad
- Viscosidad
- Capacidad Calorífica

Las cuales se obtienen a las condiciones de presión y temperatura de la corriente.

Todas las características anteriores se imprimen en una hoja de resultados individual para cada equipo, en la cual se enlistan todas las propiedades de las corrientes de entrada y salida del mismo, de tal forma que la lectura de los resultados obtenidos se puede hacer en forma rápida y sencilla.

### III.B ALCANCE DEL PREDIMENSIONAMIENTO DE LOS EQUIPOS:

Una vez realizado el balance de materia y energía para un equipo de terminado y con la información de las corrientes de entrada y salida es posible efectuar un predimensionamiento del equipo en turno (los criterios para esto se expondrán posteriormente en la sección correspondiente a cada equipo); este dimensionamiento preliminar tiene por objeto dar una idea de la capacidad y tamaño de los equipos, sin entrar en detalle sobre su diseño y características.

Los resultados obtenidos por el programa SIMCLA incluyen:

- Longitud, diámetro y tiempo de residencia de la cámara de combustión
- Área de transferencia, número, longitud y diámetro de tube-



ría para la Caldera Recuperadora de Calor y para los Condensadores.

- Area transversal, altura de la cama y volumen mínimo de catalizador para el Convertidor Catalítico.
- Caída de presión en la Caldera y Condensadores.
- Vapor de agua generado en la Caldera y Condensadores.

En los siguientes capítulos se describen con más detalle las características de cada uno de los equipos, mientras que en el Apéndice A se describe todo lo referente a los módulos de simulación.

### III.C ESTRUCTURA DEL PROGRAMA DE SIMULACION SIMCLA:

Para el desarrollo de este programa de simulación se consideraron las doce especies químicas más importantes que se encuentran en la mayoría de las plantas Claus, a los cuales se les asignó un número identificador como sigue:

IDENTIFICADOR	COMPUESTO
1	H <sub>2</sub> S
2	SO <sub>2</sub>
3	O <sub>2</sub>
4	CH <sub>4</sub>
5	N <sub>2</sub>
6	S <sub>2</sub>
7	S <sub>6</sub>
8	S <sub>8</sub>
9	H <sub>2</sub> O
10	CS <sub>2</sub>
11	COS
12	CO <sub>2</sub>

De esta forma, se pueden seleccionar aquellos compuestos que se desea intervengan en la simulación. A partir de estos indica-

dores, el control del programa se transfiere hacia el cálculo de las propiedades de los compuestos correspondientes dentro de las subrutinas del banco de datos (para mayor información referirse a los apéndices A.1 y C)

El programa SIMCLA está formado por 23 subrutinas y un programa principal ejecutor. A su vez estas subrutinas forman parte de cuatro módulos -controlados por el programa ejecutivo- los cuales simulan cada uno de los equipos que conforman las plantas Claus y de un módulo adicional que tiene por finalidad recibir los datos de la corriente de alimentación a la planta y calcular las propiedades termodinámicas de la misma. Aunque este tipo de organización requiere mayor uso de memoria de computadora, tiene flexibilidad mucho mayor en cuanto a la simulación de las diferentes alternativas del proceso Claus.

De las 23 subrutinas de que consta el programa, seis de ellas corresponden al cálculo de propiedades termodinámicas y termodinámicas, como son:

- Capacidad Calorífica,
- Conductividad Térmica,
- Energía Libre de Gibbs,
- Entalpía, y
- Viscosidad.

Mientras que el resto se utiliza en el cálculo del balance de materia y energía, predimensionamiento de los equipos e impresión de resultados.

En el apéndice A se describen más detalladamente los módulos de simulación, mientras que en los apéndices B y C se encuentra todo lo referente a las subrutinas auxiliares y banco de datos de propiedades, respectivamente.

Para poder llamar a cada módulo de simulación dentro del programa principal, se les asignó a cada uno de ellos un número identificador de la forma siguiente:

IDENTIFICADOR	MODULO	EQUIPO SIMULADO
1	DATENT	DATos de ENTRada
2	HORNO	HORNO de reacción
3	CALDER	CALDERA rec. de calor
4	CONCAT	CONVERTIDOR CATALítico
5	CONDEN	CONDENSADOR de azufre

De tal forma que para simular una planta Claus lo único que se tiene que hacer es ir acomodando cada uno de estos módulos, con sus datos respectivos. de acuerdo al diagrama de flujo de proceso de la planta Claus seleccionado.

Con el objeto de tener una continuidad en los cálculos efectuados por cada módulo, los datos y variables que afectan la simulación de cada equipo son transferidos de un módulo a otro por medio del programa principal, tal como se puede apreciar en la representación esquemática de la figura III.1

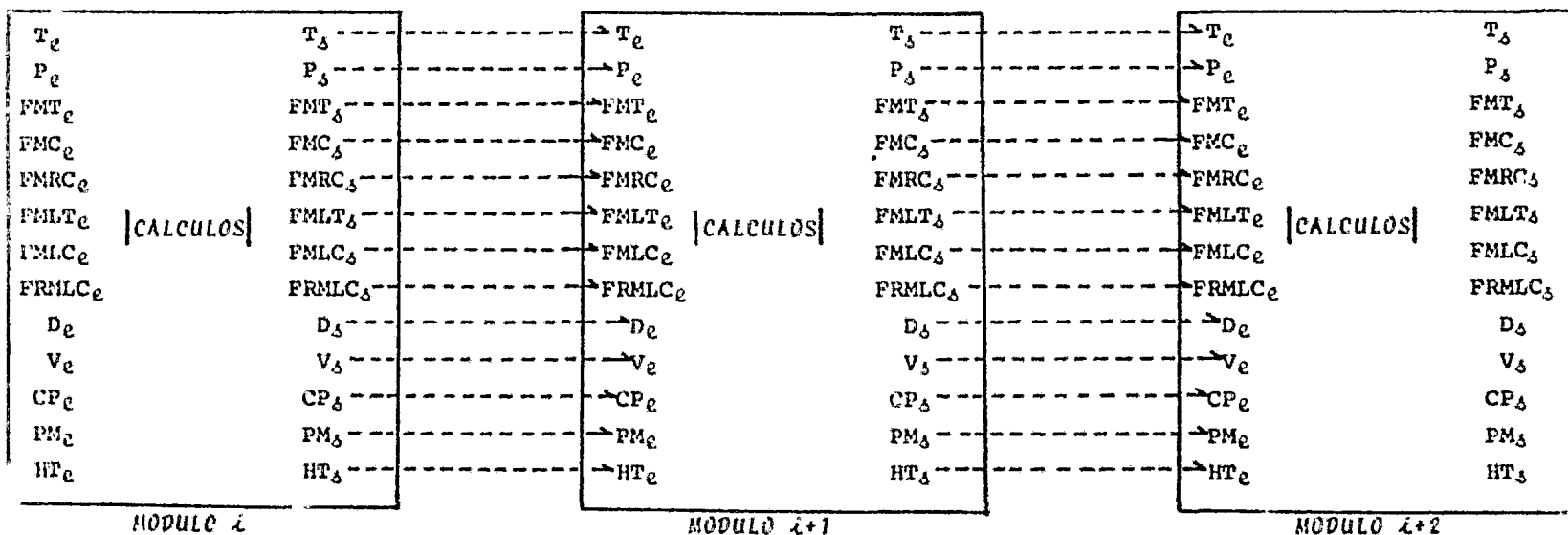
Aunado a todo lo anterior, el programa de simulación SIMCLA cuenta con la facilidad de que en caso de llamar el modulo DATENT nuevamente dentro del programa ejecutor, es posible simular otro esquema de flujo de proceso, es decir, se pueden simular en una sola corrida de computadora varias plantas o equipos, ya sea que se cambie el esquema de flujo de proceso o bien que la corriente de alimentación sea diferente en composición.

### III.D EJEMPLOS DE APLICACION DEL PROGRAMA SIMCLA:

Con el objeto de ejemplificar y comprobar la aplicabilidad del programa SIMCLA se realizaron diferentes ejemplos, los cuales se presentan a continuación.

#### III.D.1 EJEMPLO # 1: Conversión de equilibrio del Acido Sulfidrico a Azufre elemental.

Este ejemplo consiste en generar una gráfica de porcentaje de con-



**NOMENCLATURA:**

T : TEMPERATURA

P : PRESION

FMT : FLUJO MASA TOTAL

FMC : FLUJO MASA POR COMPONENTE

FMRC : FRACCION MASA POR COMPONENTE

FMLT : FRACCION MOLAR TOTAL

FMLC : FRACCION MOLAR POR COMPONENTE

FRMLC : FRACCION MOL POR COMPONENTE

D : DENSIDAD

V : VISCOSIDAD

CP : CAPACIDAD CALORIFICA

PM : PESO MOLECULAR

HT : ENTALPIA TOTAL

**SUBINDICES:**

e = entrada

s = salida

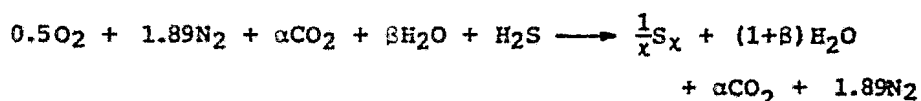
FIGURA III.1 REPRESENTACION ISQUEMATICA DE LA TRANSFERENCIA DE VARIABLES

versión de Acido Sulfhídrico a Azufre contra la temperatura para después compararla con la gráfica calculada por la *Western Research & Development*<sup>80</sup> y poder cuantificar la confiabilidad de los resultados obtenidos por el programa SIMCLA en el rango de temperaturas de operación de las plantas Claus.

Para generar esta gráfica se alimentó al programa la misma composición del gas ácido pobre utilizada por la *W.R. & D.*, la cual es:

H <sub>2</sub> S	17.190 moles
CO <sub>2</sub>	78.310 moles
H <sub>2</sub> O	4.500 moles

A partir de esta composición se calculó la cantidad estequiométrica de aire para oxidar el Acido Sulfhídrico de acuerdo a la siguiente reacción:



De donde se tiene que:

0.5 O <sub>2</sub>	————	1.89 N <sub>2</sub>	————	H <sub>2</sub> S
8.595	————	32.4891	————	17.190
AIRE (21% O <sub>2</sub>		79% N <sub>2</sub> )		

$\alpha, \beta$  : moles iniciales correspondientes

Así mismo, se consideró la formación de otras especies además de las de Azufre con el objeto de poder observar su comportamiento dentro del rango de temperaturas de operación de las plantas Claus. De aquí que la composición del gas pobre alimentado es:

H <sub>2</sub> S	17.1900
SO <sub>2</sub>	0.0000
O <sub>2</sub>	8.5950
CH <sub>4</sub>	0.0000
N <sub>2</sub>	32.4891
S <sub>2</sub>	0.0000

S <sub>6</sub>	0.0000
S <sub>8</sub>	0.0000
H <sub>2</sub> O	4.5000
COS	0.0000
CO <sub>2</sub>	7 8 3100
CS <sub>2</sub>	0.0000

Como se puede observar, en esta simulación se incluyen las doce especies con que cuenta el programa. Inclusive, se tomó en cuenta al Metano (CH<sub>4</sub>), el cual obviamente deberá tener una composición del 0% mol durante toda la simulación, sin embargo, esto se hizo con el fin de comprobar que el método de Minimización de Energía es capaz de converger en forma correcta aún cuando se incluyan especies que químicamente no pueden existir en el sistema propuesto.

Basandose en el hecho de que para generar esta gráfica de conversión lo único que se requiere son los cálculos de Minimización de Energía a diferentes temperaturas, se decidió utilizar el módulo HORNO con la opción de simulación número 2, es decir, temperatura de salida igual a temperatura deseada (ver Apéndice A.2), con lo cual se pudo obtener las conversiones de equilibrio alcanzada a diferentes temperaturas.

A continuación se presenta el listado de computadora en el cual se muestra la forma de alimentación de datos y algunas de las hojas de resultados para las diferentes temperaturas. Para mayor información sobre el procedimiento de alimentar los datos y el uso del programa, referirse al Apéndice A.1.

La computadora utilizada en la realización del programa así como en la obtención de resultados fué una UNIVAC 1100.



```

60 SDATOS IYSUP=0,IOP=2,IDAL=1,TAS=644.44,TOLTA=1000.,TOLER=J001,NTI=300,SEND
61 ICONVER FCON=.74,SEND
62 1
63 SDATOS TENT=328.,PENT=1.,M=5,N=12,IRAST=0,SEND
64 $SYSTEM IDENT=1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,SEND
65 17.19 2 1 0 0 0 2 2 0 0 0
66 0.0000 0 1 0 0 0 2 2 0 0 0
67 8.5950 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0
68 0.000 4 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
69 32.4891 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
70 0.00000 0 0 2 2 0 0 0 0 0 0 0
71 0.00000 0 0 6 6 0 0 0 0 0 0 0
72 0.00000 0 0 8 8 0 0 0 0 0 0 0
73 4.500 2 2 0 0 0 0 1 0 0 0 0
74 0.0000 0 0 2 2 1 1 0 0 0 0 0
75 0.00000 0 0 1 1 1 1 0 0 0 0 0
76 78.31 0 0 0 0 1 1 2 0 0 0 0
77 2
78 SDATOS IYSUP=0,IOP=2,IDAL=1,TAS=755.56,TOLTA=1000.,TOLER=.0001,NTI=300,SEND
79 ICONVER FCON=.54,SEND
80 1
81 SDATOS TENT=328.,PENT=1.,M=5,N=12,IRAST=0,SEND
82 $SYSTEM IDENT=1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,SEND
83 17.19 2 1 0 0 0 0 0 0 0 0
84 0.0000 0 1 0 0 0 2 2 0 0 0 0
85 8.5950 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0
86 0.000 4 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
87 32.4891 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
88 0.00000 0 0 2 2 0 0 0 0 0 0 0
89 0.00000 0 0 6 6 0 0 0 0 0 0 0
90 0.00000 0 0 8 8 0 0 0 0 0 0 0
91 4.500 2 2 0 0 0 0 1 0 0 0 0
92 0.0000 0 0 2 2 1 1 0 0 0 0 0
93 0.00000 0 0 1 1 1 1 0 0 0 0 0
94 78.31 0 0 0 0 1 1 2 0 0 0 0
95 2
96 SDATOS IYSUP=0,IOP=2,IDAL=1,TAS=838.89,TOLTA=1000.,TOLER=.0001,NTI=300,SEND
97 ICONVER FCON=.53,SEND
98 1
99 SDATOS TENT=328.,PENT=1.,M=5,N=12,IRAST=0,SEND
100 $SYSTEM IDENT=1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,SEND
101 17.19 2 1 7 0 0 0 0 0 0
102 0.0000 0 1 0 0 0 2 2 0 0 0 0
103 8.5950 0 0 0 0 1 0 0 0 0 0 0
104 0.000 4 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
105 32.4891 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0
106 0.00000 0 0 2 2 0 0 0 0 0 0 0
107 0.00000 0 0 6 6 0 0 0 0 0 0 0
108 0.00000 0 0 8 8 0 0 0 0 0 0 0
109 4.500 2 2 0 0 0 0 1 0 0 0 0
110 0.0000 0 0 2 2 1 1 0 0 0 0 0
111 0.00000 0 0 1 1 1 1 0 0 0 0 0
112 78.31 0 0 0 0 1 1 2 0 0 0 0
113 2
114 SDATOS IYSUP=0,IOP=2,IDAL=1,TAS=922.22,TOLTA=1000.,TOLER=.0001,NTI=300,SEND
115 ICONVER FCON=.54,SEND
116 1
117 SDATOS TENT=328.,PENT=1.,M=5,N=12,IRAST=0,SEND
118 $SYSTEM IDENT=1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,SEND
119 17.19 2 1 0 0 0 0 0 0 0

```



120	0.0000	0	1	0	2	0	
121	8.5950	0	0	1	2	0	
122	0.0000	0	0	0	2	0	
123	32.4891	0	0	0	0	0	
124	0.00000	0	2	0	0	0	
125	0.00000	0	6	0	0	0	
126	0.00000	0	8	0	0	0	
127	4.5000	2	7	0	1	0	
128	0.0000	0	2	1	1	0	
129	0.0000	0	1	1	1	0	
130	78.31	0	0	1	2	0	
131	2						
132	SDATGS IYSUP=0, IOP=2, IDAL=1, TAS=1088.89, TOLTA=1000., TOLC=0.0001, NTI=300, SEND						
133	SCONVER FCON=64, SEND						
134	1						
135	SDATGS TENT=320., PCNT=1., M=5, N=12, TRAST=0, SEND						
136	%ISISEM IDENT=1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, SEND						
137	17.19	2	1	0	0	0	
138	0.0000	0	1	0	2	0	
139	8.5950	0	0	0	2	0	
140	0.0000	0	0	1	2	0	
141	32.4891	0	0	0	0	0	
142	0.00000	0	2	0	0	0	
143	0.00000	0	6	0	0	0	
144	0.00000	0	8	0	0	0	
145	4.5000	2	7	0	1	0	
146	0.0000	0	2	1	1	0	
147	0.00000	0	1	1	1	0	
148	78.31	0	0	1	2	0	
149	2						
150	SDATGS IYSUP=0, IOP=2, IDAL=1, TAS=1277.78, TOLTA=1000., TOLC=0.0001, NTI=300, SEND						
151	SCONVER FCON=65, SEND						
152	1						
153	SDATGS TENT=320., PCNT=1., M=5, N=12, TRAST=0, SEND						
154	%ISISEM IDENT=1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, SEND						
155	17.19	2	1	0	0	0	
156	0.0000	0	1	0	2	0	
157	8.5950	0	0	0	2	0	
158	0.0000	0	0	1	2	0	
159	32.4891	0	0	0	0	0	
160	0.00000	0	2	0	0	0	
161	0.00000	0	6	0	0	0	
162	0.00000	0	8	0	0	0	
163	4.5000	2	7	0	1	0	
164	0.0000	0	2	1	1	0	
165	0.00000	0	1	1	1	0	
166	78.31	0	0	1	2	0	
167	2						
168	SDATGS IYSUP=0, IOP=2, IDAL=1, TAS=1866.87, TOLTA=1000., TOLC=0.0001, NTI=300, SEND						
169	SCONVER FCON=72, SEND						
170	1						
171	SDATGS TENT=320., PCNT=1., M=5, N=12, TRAST=0, SEND						
172	%ISISEM IDENT=1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 11, 12, SEND						
173	17.19	2	1	0	0	0	
174	0.0000	0	1	0	2	0	
175	8.5950	0	0	0	2	0	
176	0.0000	0	0	1	2	0	
177	32.4891	0	0	0	0	0	
178	0.00000	0	2	0	0	0	
179	0.00000	0	6	0	0	0	

160	0.00000	0	0	0	0
161	0.50000	0	0	0	0
162	0.00000	0	0	0	0
163	0.00000	0	0	0	0
164	78.31	0	0	0	0
165	2				
166	SDATOS XYSUP=0,IP=2,IDL=1,TAS=164,NA,TOLTA=1000,TOLEOF=0.0001,NTI=300,SENO				
167	SCONVER FCON=0.77,SENO				
168	F				
169	FIN				

BASE 0A E000\*EGAABS.

BASE 10 E000\*EGAABS.

BASE 20 E000\*EGAABS.SIMZ

RESULTADOS DEL MODULO NUMERO 1

«DATOS CORRIENTE DE ENTRADA A LA SIMULACION»

SIMULACION DEL COMPORTAMIENTO IDEAL DE PLANTAS CLAS  
POR EL METODO DE MINIMIZACION DE ENERGIA LIBRE

DATOS DE LA CORRIENTE DE ENTRADA

TEMPERATURA = 328.200 K  
PRESION = 1.300 ATM  
NUM. DE ESPECIES = 12  
NUM. DE ELEMENTOS = 5

COMUESTO	PESC MOL.	FLUJO MOLAR ALIMENTADO	TABLA DE ELEMENTOS POR COMUESTO (AVI, JIP)				
			H	S	C	O	N
H2S	34.080	17.1980	2	1	0	3	0
SO2	64.066	.0000	0	1	0	2	0
O2	31.907	8.5953	0	0	0	2	0
CH4	16.043	.0000	1	0	1	0	0
N2	28.013	32.4891	0	0	0	0	2
S2	64.128	.0000	0	2	0	3	0
S4	192.384	.0000	0	4	0	0	0
S8	256.528	.0000	0	8	0	0	0
H2O	18.016	4.5000	2	0	0	1	0
CS2	76.143	.0000	0	2	1	0	0
CO2	60.077	.0000	0	1	1	1	0
CO	44.010	78.3100	0	0	1	2	0

RESULTADOS DEL MODULO NUMERO 2

«HORNO DE REACCION»

LA CONFIGURACION SELECCIONADA PARA LA PLANTA ES "FLUJO DIRECTO"

OPCION DE CALCULO = 21  
TEMPERATURA DE SALIDA IGUAL A TEMPERATURA DESEADA

CARACTERISTICAS DE LA CAMARA DE COMBUSTION

TEMPERATURA DE ENTRADA =	326.0 K	131.0 F
TEMPERATURA DE FLAMA =	693.3 K	1180.0 F
TEMPERATURA DE OPERACION =	644.4 K	700.6 F
PRECISION DE OPERACION =	1.000 ATM	14.7 PSIA
FLUJO ALIMENTADO =	5298.52 KG/H	11670.74 LB/H
FLUJO VOLUMETRICO A P Y T =	7188.176 M3/H	70.515 FT3/SEG
VOLUMEN DE CAMARA REQ. =	1.20 M3	42.31 FT3
LONG. DE CAMARA ESTIMADA =	2.90 M	9.52 FT
DIAM. DE CAMARA ESTIMADO =	.73 M	2.38 FT
TIEMPO DE RESISTENCIA =	.60 SFS	

% DE CONVERSION = 73.97

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

E N T R A D A				S A L I D A				
FLUJO MOLAR	EMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	EMASA	COMPUESTO	FLUJO MOLAR	EMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	EMASA
17.1000	12.1842	585.6342	11.0566	H2S	1.2934	2.4226	117.2377	2.1183
.0000	.0000	.0000	.0000	SO2	1.6642	1.2243	106.6169	2.0122
4.5950	4.0921	277.0297	5.1807	O2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CH4	.0000	.0000	.0000	.0000
32.4891	23.2262	910.1301	17.1772	H2	32.4892	23.9011	910.1317	17.1771
.0000	.0000	.0000	.0000	S2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	S6	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	S8	1.7895	.9484	330.7868	6.2430
4.5000	3.2896	41.0720	1.5301	H2O	18.3967	11.5338	331.4150	6.2552
.0000	.0000	.0000	.0000	CS2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CO5	.0000	.0000	.0000	.0000
76.3100	55.4059	3446.4192	65.0454	CO2	76.2756	57.5845	3446.4151	65.0314
141.0841	100.0000	5298.4852	100.0000	TOTAL	135.9316	100.0000	5298.5151	100.0000
37.5554	KG/MOL			PESO MOLECULAR	80.9793	KG/MOL		
55.0	C	131.0	F	TEMPERATURA	371.0	C	700.6	F
1.000	ATM.	14.700	LB/PLG2	PRECISION	1.000	ATM	14.700	LB/PLG2
16.8147	KCAL/HR	66.7252	BTU/HR	ENTALPIA	445.8038	KCAL/HR	1807.9514	BTU/HR
.001395	G/GM3	.087112	LB/PIE3	DENSIDAD	.000737	G/GM3	.046018	LB/PIE3
.010	CP			VELOCIDAD	.0046	CP		
.2109	CAL/G.	.4156	BTU/LB	CAP. CALORIFICA	.2917	CAL/G	.5242	BTU/LB

RESULTADOS DEL MODULO NUMERO 2

\*HORNO DE REACCION\*

LA CONFIGURACION SELECCIONADA PARA LA PLANTA ES "FLUJO DIRECTO"

FUNCION DE CALCULO = 23  
TEMPERATURA DE SALIDA IGUAL A TEMPERATURA DESEROGA

CARACTERISTICAS DE LA CAMARA DE COMBUSTION

TEMPERATURA DE ENTRADA =	320.0 K	131.0 F
TEMPERATURA DE FLAMA =	811.2 K	1000.8 F
TEMPERATURA DE OPERACION =	838.9 K	1050.6 F
PRESION DE OPERACION =	1.000 ATM	14.7 PSIA
FLUJO ALIMENTADO =	5298.49 KG/H	11670.69 LB/H
FLUJO VOLUMETRICO A P Y T =	9605.880 M <sup>3</sup> /H	94.233 FT <sup>3</sup> /SEC
VOLUMEN DE CAMARA REQ. =	1.46 M <sup>3</sup>	57.01 FT <sup>3</sup>
LONG. DE CAMARA ESTIMADA =	3.20 M	10.51 FT
DIAM. DE CAMARA ESTIMADO =	.80 M	2.63 FT
TIEMPO DE RESIDENCIA =	.61 SEG	

X DE CONVERSION = 47.33

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

ENTRADA					SALIDA				
FLUJO MOLAR	ENCL	FLUJO MASA (KG/HRI)	MASA	COMPLETO	FLUJO MOLAR	ENCL	FLUJO MASA (KG/HRI)	MASA	
17.1900	12.1842	584.8342	11.4566	H2S	5.7415	4.1144	195.4782	3.6929	
.0000	.0000	.0000	.0000	SO2	3.0186	2.1632	193.1911	3.6699	
8.5950	6.0921	274.0287	5.4907	O2	.0000	.0000	.0000	.0000	
.0000	.0000	.0000	.0000	CH4	.0000	.0000	.0000	.0000	
32.4491	23.0297	917.1331	17.1772	N2	32.4492	23.2421	913.1321	17.1772	
.0000	.0000	.0170	.0000	S2	4.0252	2.8845	259.1251	4.1717	
.0000	.0000	.0000	.0000	S6	.0000	.0000	.0000	.0000	
.0000	.0000	.0000	.0000	S8	.0000	.0000	.0000	.0000	
4.5000	3.1896	81.0720	1.5201	H2O	15.0486	11.0249	287.3292	5.4224	
.0000	.0000	.0000	.0000	CS2	.0002	.0002	.0184	.0001	
.0000	.0000	.0000	.0000	COS	.2942	.2109	17.6747	.3336	
78.3100	55.5059	3446.4492	45.0454	CO2	78.0147	55.9042	3433.4239	44.8000	
141.0441	100.0000	5298.4852	100.0000	TOTAL	139.5457	100.0000	5298.4912	100.0000	
37.5576	KG/POZ			PESO MOLECULAR	37.5696	KG/MOL			
55.0	C	100.0 F		TEMPERATURA	545.9	C	1050.6 F		
1.000	ATM.	14.700 LB/PLG2		PRESION	1.000	ATM	14.700 LB/PLG2		
16.6147	KCAL/HR	66.7252 BTU/HR		ENTALPIA	735.4073	KCAL/HR	2918.2824	BTU/HR	
.001395	G/CH3	.087112 LB/PIEZ		CONSIDAD	.000552	G/CH3	.034436	LB/PIEZ	
.0152	CP			VISCOSIDAD	.0307	CP			
.2309	CAL/G	.4156 BTU/LB		CAP. CALCRIFICA	.3022	CAL/G	.5440	BTU/LB	

RESULTADOS DEL MODULO NUMERO 2

\*HORNO DE REACCION\*

LA CONFIGURACION SELECCIONADA PARA LA PLANTA ES "FLUJO DIRECTO"

OPCION DE CALCULO = 2)  
(TEMPERATURA DE SALIDA IGUAL A TEMPERATURA DESEADA)

CARACTERISTICAS DE LA CAMARA DE COMBUSTION

TEMPERATURA DE ENTRADA =	328.0 K	151.0 F
TEMPERATURA DE FLAMA =	834.8 K	989.3 F
TEMPERATURA DE OPERACION =	1088.9 K	1500.6 F
PRESION DE OPERACION =	1.000 ATM	14.7 PSIA
FLUJO ALIMENTARIO =	5295.51 KG/H	11670.72 LB/H
FLUJO VOLUMETRICO A P Y T =	12513.707 M <sup>3</sup> /H	172.759 FT <sup>3</sup> /SEG
VOLUMEN DE CAMARA REQ. =	2.47 M <sup>3</sup>	87.35 FT <sup>3</sup>
LONG. DE CAMARA ESTIMADA =	3.69 M	12.12 FT
DIAM. DE CAMARA ESTIMADO =	.92 M	3.03 FT
TIEMPO DE RESIDENCIA =	.71 SEC	

% DE CONVERSION = 63.9%

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

FLUJO MOLAR	E N T R A D A				S A L I D A			
	EMOL	FLUJO MASA (KG/H)	EMASA	COMPUESTO	FLUJO MOLAR	EMOL	FLUJO MASA (KG/H)	EMASA
17.1970	12.1842	585.8342	11.0566	H2S	0.1325	2.9507	140.8151	2.6580
.0000	.0000	.0000	.0000	SO2	2.0663	1.4754	132.3768	2.4984
6.5950	6.0921	274.0297	5.1907	O2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CH4	.0000	.0000	.0000	.0000
32.4891	23.0282	710.1201	17.1772	N2	32.4891	23.1980	912.1321	17.1772
.0000	.0000	.0000	.0000	S2	5.4956	3.9240	352.4241	6.6514
.0000	.0000	.0000	.0000	S8	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	S8	.0000	.0000	.0000	.0000
4.5000	3.1894	83.0720	1.5201	H2O	17.5575	12.5365	316.3163	5.9699
.0000	.0000	.0000	.0000	CS2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CO5	.0000	.0000	.0000	.0000
78.3100	55.9059	3446.4192	65.0000	CO2	78.3100	55.7153	3446.4188	65.0000
100.0000	100.0000	5295.5267	100.0000	TOTAL	140.0510	100.0000	5295.5267	100.0000
37.5575	KG/MOL			PESO MOLECULAR	37.5575	KG/MOL		
55.0	C	171.0	F	TEMPERATURA	55.0	C	1500.6	F
1.0000	ATM.	14.700	LB/PLG2	PRESION	1.0000	ATM	14.700	LB/PLG2
16.8147	KCAL/MH	66.7202	BTU/MH	ENTALPIA	1117.3877	KCAL/MH	4434.0762	BTU/MH
.003355	G/CM3	.007112	LB/PIE3	DENSIDAD	.000423	G/CM3	.026434	LB/PIE3
.0100	CP			VISCOSIDAD	.0162	CP		
.2329	CAL/G	.4156	BTU/LB	CAP. CALORIFICA	.3228	CAL/G	.5010	BTU/LB

RESULTADOS DEL MODULO NUMERO 2

\*HORNO DE REACCION\*

LA CONFIGURACION SELECCIONADA PARA LA PLANTA ES "FLUJO DIRECTO"

(OPCION DE CALCULO = 2)

(TEMPERATURA DE SALIDA IGUAL A TEMPERATURA DESEADA)

CARACTERISTICAS DE LA CAMARA DE COMBUSTION

TEMPERATURA DE ENTRADA =	328.0 K	131.0 F
TEMPERATURA DE FLAMA =	801.3 K	983.0 F
TEMPERATURA DE OPERACION =	1356.7 K	2000.4 F
PRESION DE OPERACION =	1.000 ATM	14.7 PSIA
FLUJO ALIMENTADO =	5298.51 KG/H	11670.72 LB/H
FLUJO VOLUMETRICO @ P Y T =	15731.878 M <sup>3</sup> /H	154.379 FT <sup>3</sup> /SEC
VOLUMEN DE CAMARA REQ. =	3.48 M <sup>3</sup>	122.88 FT <sup>3</sup>
LONG. DE CAMARA ESTIMADA =	4.14 M	13.58 FT
DIAM. DE CAMARA ESTIMADO =	3.03 M	9.95 FT
TIEMPO DE RESIDENCIA =	.83 SEC	

% DE CONVERSION = 72.00

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

ENTRADA				SALIDA			
FLUJO MOLAR	EMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	EMASA	FLUJO MOLAR	EMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	EMASA
17.1900	12.1842	585.8342	11.0566	H2S	3.2008	2.2874	109.3557
.0000	.0000	.0000	.0000	SO2	1.6048	1.1437	102.7875
8.5950	6.0921	275.0297	5.1907	O2	.0000	.0000	.0333
.0000	.0000	.0000	.0000	CH4	.0000	.0000	.0000
32.4891	23.2282	910.1301	17.1772	N2	32.4891	23.1599	910.1301
.0000	.0000	.0000	.0000	S2	6.1884	4.4114	398.8497
.0000	.0000	.0000	.0000	S6	.0000	.0000	.0219
.0000	.0000	.0000	.0000	S8	.0000	.0000	.0026
4.5000	3.1896	81.0720	1.5301	H2O	18.4812	13.1743	332.4573
.0000	.0000	.0000	.0000	CS2	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CS	.0000	.0000	.0000
78.3100	55.5059	3446.4192	65.0454	CO2	78.3100	55.8233	3446.4191
141.0041	100.0000	5298.4852	100.0000	TOTAL	140.2820	100.0000	5298.5257

37.5595	KG/MOL		PESO MOLECULAR	37.7704	KG/MOL	
52.00	C	131.0 F	TEMPERATURA	1093.7	C	2000.4 F
1.000	ATM.	14.700 LB/PLG2	PRESION	1.000	ATM	14.700 LB/PLG2
16.8147	KCAL/HR	66.3252 BTU/HR	ENTALPIA	1565.0457	KCAL/HR	6210.4987 BTU/HR
.001395	G/CM3	.087112 LB/PIE3	DENSIDAD	.000337	G/CM3	.021326 LB/PIE3
.0150	CP		VISCOSIDAD	.0424	CP	
.2309	CAL/G	.4156 BTU/LB	CAP. CALORIFICA	.3399	CAL/G	.6118 BTU/LB

A partir de los resultados obtenidos se generó la tabla III.1, en la cual se encuentran tabuladas las composiciones de equilibrio obtenidas por el programa SIMCLA para cada una de las temperaturas. Así mismo, se muestran los porcentajes de conversión a Azufre elemental y los porcentajes de error al comparar estas conversiones con las reportadas por la *Western Research & Development*. Por otra parte, para tener una mejor idea de la desviación existente, en la figura III.2 se muestran graficadas ambas curvas de conversión.

Como se puede observar, tanto en la tabla III.1 como en la figura III.2, la conversión obtenida por el programa SIMCLA es inferior en todos los casos a la reportada por la institución de referencia esto se debe a las tres razones siguientes en orden de importancia:

- a) El programa SIMCLA considera la formación de sólo tres especies de Azufre ( $S_2$ ,  $S_6$  y  $S_8$ ), mientras que el programa de referencia toma en cuenta todas las especies alotrópicas del Azufre ( $S_1$ ,  $S_2$ ,  $S_3$ , . . . .  $S_8$ ), lo cual definitivamente es mucho más estricto. De hecho, se reporta que las mayores formaciones de  $S_3$ ,  $S_4$ ,  $S_5$  y  $S_7$  se encuentran dentro del rango de temperaturas de 700 a 1100°F, que es precisamente en donde se tienen los porcentajes de error más grandes.
- b) En los cálculos efectuados en el presente trabajo se consideró la formación de especies de Azufre-Carbón ( $\text{COS}$  y  $\text{CS}_2$ ) que aún cuando no se forman grandes cantidades de estos compuestos, la conversión a Azufre elemental se vé disminuida, de hecho, en la tabla III.1 se observa que a las temperaturas en donde hay formación de  $\text{COS}$  y  $\text{CS}_2$  se tienen las mayores discrepancias en los resultados.
- c) Los datos termodinámicos necesarios para efectuar los cálculos de la composición de equilibrio podrían venir de diferentes fuentes de información lo cual causaría una pe-



queña diferencia en los resultados obtenidos.

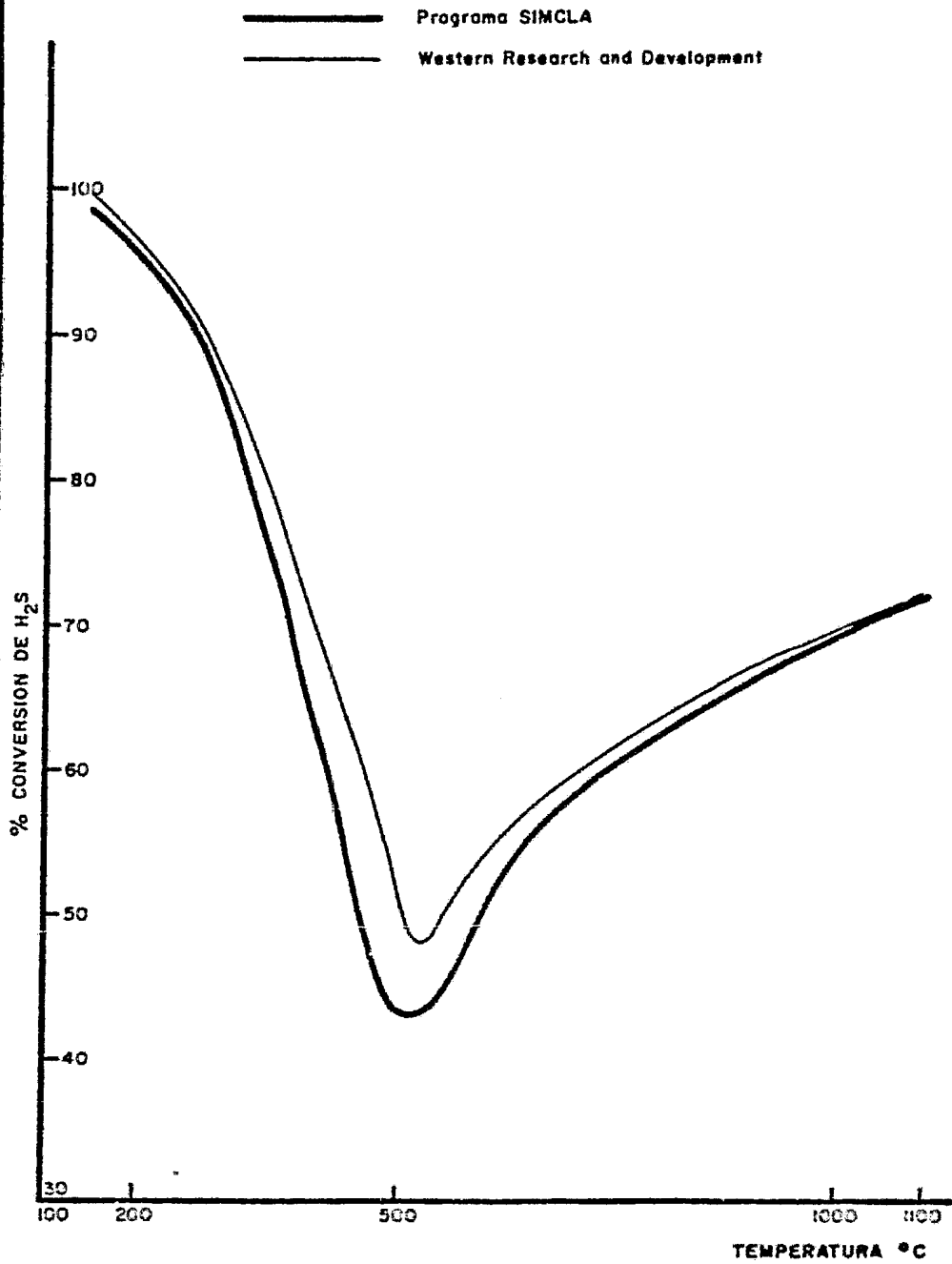
Aún con las diferencias en las bases de cálculo antes mencionadas se tiene que el porcentaje de error máximo es de 18.12 %, el cual puede ser aceptado considerando que a la temperatura a la cual se presenta este error no corresponde a las temperaturas de operación de ninguno de los equipos de las plantas Claus además de que el programa desarrollado en la presente tesis no es un programa para el diseño final de las plantas Claus.

En las hojas de resultados del programa SIMCLA se puede observar que la composición del Metano permanece igual a cero, lo cual era de esperarse ya que no era posible la formación de este compuesto a partir de las especies reaccionantes en el sistema. De aquí se puede concluir que aún cuando se incluyan especies que no existen en el punto de equilibrio el método de Minimización de Energía libre es capaz de convergir sin ningún problema.

TABLA III.1  
CONVERSION DE ACIDO SULFHDRIICO A AZUFRE

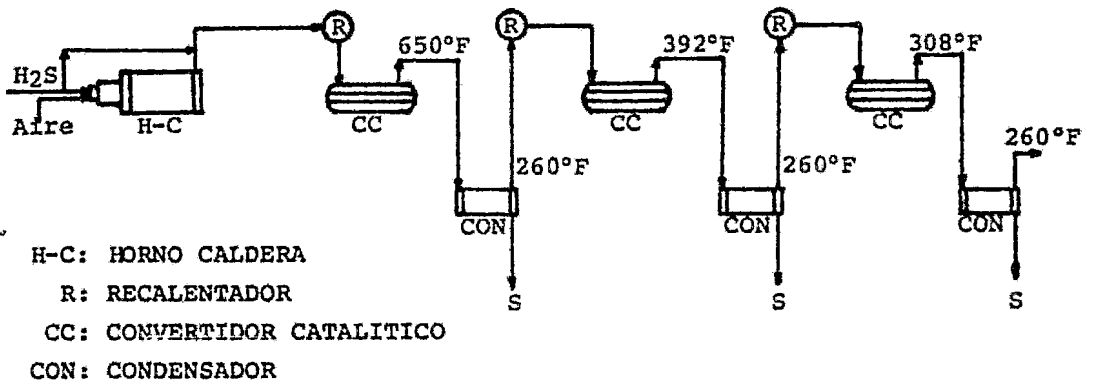
°C	149.2	260.0	371.0	483.0	566.0	649.0	816.0	1005.0	1094.0
°F	300.6	501.0	701.0	901.0	1051.0	1201.0	1501.0	1841.0	2001.0
COMPOSICION % MOL									
H <sub>2</sub> S	0.1231	0.7194	2.4228	4.3184	4.1144	3.6178	2.9507	2.5340	2.2874
SO <sub>2</sub>	0.6180	0.3610	1.2243	2.2253	2.1632	1.8089	1.4754	1.2670	1.1437
O <sub>2</sub>	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
CH <sub>4</sub>	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
N <sub>2</sub>	24.1211	24.0730	23.9011	23.4417	23.2821	23.2365	23.1980	23.1741	23.1599
S <sub>2</sub>	0.0001	0.0041	0.1940	1.9095	2.8845	3.4338	3.9240	4.2302	4.4114
S <sub>6</sub>	0.0065	0.0446	0.1663	0.1326	0.0084	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
S <sub>8</sub>	1.5673	1.4224	0.9486	0.1392	0.0013	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
H <sub>2</sub> O	15.9804	15.3519	13.5338	11.3315	11.4289	11.8951	12.5365	12.9372	13.1743
CS <sub>2</sub>	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0002	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
COS	0.0000	0.0017	0.0246	0.1310	0.2109	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
CO <sub>2</sub>	58.1398	58.0219	57.5845	56.3707	55.9062	56.0079	55.9153	55.8575	55.8233
TOTAL	100.0000	100.0000	100.0000	100.0000	100.0000	100.0000	100.0000	100.0000	100.0000

PORCIENTO DE RECUPERACION DE AZUFRE									
SINCLA	98.55	91.55	70.97	46.18	47.33	55.86	63.94	69.00	72.00
REF. 80	99.75	91.65	73.60	56.40	52.50	56.50	64.30	70.00	72.30
% ERROR	1.20	0.11	3.57	18.12	9.85	1.13	0.56	1.43	0.43

FIGURA III.2— CONVERSION DE  $H_2S$  a S

### III.D.2 EJEMPLO # 2: Simulación de un tren de recuperación de Azufre con una alimentación pobre.

Este ejemplo consiste en simular una planta Claus con una alimentación pobre y una configuración de flujo dividido cuyo diagrama se muestra en la siguiente figura:



La composición del gas alimentado es:

H <sub>2</sub> S	17.190 mol/hr
CO <sub>2</sub>	77.355 mol/hr
H <sub>2</sub> O	4.500 mol/hr

Este tren de recuperación fue inicialmente simulado para obtener la máxima recuperación de Azufre, para lo cual se siguieron los siguientes criterios:

- El Horno de Reacción deberá ser operado en forma adiabática, de tal forma que la temperatura de salida es igual a la temperatura de flama adiabática.
- Cada Convertidor Catalítico deberá ser operado de tal forma que la temperatura de salida sea igual a la temperatura de rocío del Azufre. Las temperaturas de rocío reportadas por la literatura se muestran en el diagrama de flujo de proceso. En el caso del primer convertidor, la temperatura de salida se mantiene a 650°F, muy arriba del punto de rocío; Esto se hace para mantener la temperatura nece-

saria para la hidrólisis de cualquier cantidad de COS y/o CS<sub>2</sub> que se pudiera haber formado en el Horno.

- c) Cada Convertidor deberá operar en forma adiabática por lo que la temperatura de entrada deberá ser ajustada de tal forma que se cumpla el punto anterior.
- d) La caída de presión dentro de los Convertidores Catalíticos se considera despreciable.
- e) Cada condensador deberá ser operado a 260°F, lo cual dará un margen de 20°F arriba del punto de congelación del Azufre.
- f) Se deberá utilizar un eliminador de niebla a la salida de cada Condensador.
- g) Se evitarán procedimientos de recalentamiento en los cuales se desvien compuestos de Azufre-Carbón de los Convertidores Catalíticos.

El propósito principal de este ejemplo es comparar los porcentajes acumulados de conversión y recuperación de Azufre con los reportados por la literatura<sup>30</sup>. Para lograr ésto, se eligieron las opciones de los módulos de simulación de la siguiente forma:

<u>EQUIPO</u>	<u>OPCION</u>	<u>DESCRIPCION</u>
HORNO-CALDERA	1	Temperatura de salida igual a temperatura de flama adiabática.
CONVERTIDOR CATALITICO	3	Temperatura de salida igual temperatura deseada.

Las temperaturas de salida de los Convertidores Catalíticos y de los Condensadores se fijaron igual a las temperaturas mostradas en el diagrama de flujo de proceso. Por otro lado, los demás datos requeridos por los módulos se fijaron de acuerdo a los valo-

res recomendados mencionados en los capítulos correspondientes.

A partir de la composición del gas ácido pobre y tomando en cuenta que la configuración del tren de recuperación es flujo dividido es posible calcular la cantidad de aire necesaria para oxidar hasta SO<sub>2</sub> un tercio del Acido Sulfhídrico contenido en el gas de alimentación de acuerdo a la siguiente reacción:



$$\begin{array}{r} \text{H}_2\text{S} \text{ ----- } 1.5\text{O}_2 \\ \frac{17.19}{3} \text{ ----- } 8.595 \text{ mol/hr de O}_2 \end{array}$$

De donde la cantidad total de aire requerida es:

$$\begin{array}{r} 8.5950 \text{ mol/hr O}_2 \text{ (21\%)} \\ \underline{32.4891 \text{ mol/hr N}_2 \text{ (79\%)}} \\ 41.0841 \text{ mol/hr Aire} \end{array}$$

En esta simulación también se tomaron en cuenta todas las especies químicas disponibles en el programa SIMCLA. A continuación se presentan las hojas de resultados obtenidas.

```

ERRBOSPUA TOS 11, SIMCLA=P151
1 2000 LOP 3P C8166 ACUEGA,CEOC 2,150
2 0000 N 5,FAVOR DE INHIBIR EN CARA BLANCA GRACIAS
3 CLOC 21 PPI A J PERFORADOS
4 2PRT,2 ELDC=CCPLATOS-SIMCLA-P
5 CASE,4 EUL=LGAARD,
6 CASE 11 ALGUB*EGAAFS,
7 2XOT 11 E1=LGAARD,51ND
8 1PLANTA N1N=11,51ND
9
10 5DATOS ICNT=320, ICNT=1, NMS=12, IRAST=0, SEND
11 55ISTLP ICNT=1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,SEND
12 17,17 2 1 1 0 0 3
13 0,0000 0 1 0 0 2 0
14 8,0000 0 0 0 0 2 0
15 0,0000 4 0 0 0 0 0
16 32,4091 0 0 0 0 0 2
17 0,0000 0 2 0 0 0 0
18 0,0000 0 0 0 0 0 0
19 0,0000 0 0 0 0 0 0
20 4,0000 0 0 0 0 1 0
21 0,0000 0 0 0 0 1 0
22 0,0000 0 1 1 1 1 0
23 78,21 0 0 1 2 0 0
24
25 5DATOS IYSUP=0, ICPE=1, ICAL=2, IAS=1300, TOLV=0,5, TOLEQ=0,001, VTI=300, VFM0
26 5CONVE FCON=0,5,SEND
27
28 5DATOS ISAL=050, ICAC=001, PVCON=19, PURGA=5, TCORTE=0, ITUB=0, SEND
29
30 5DATOS IYSUP=0, ICPE=1, ICAL=0,000, TOLV=0,5, TOLEQ=0,001, VTI=300, ESPVEL=1000,
31 VELL=1000, SEND
32 STEPP N1TS=0,11, TCALS=0,10,7, SEND
33 5CONVE FCON=0,5, SEND
34
35 5DATOS ISAL=000, ICAC=030, PVCON=5, PURGA=5, ITUB=0, SEND
36
37 5DATOS IYSUP=0, ICPE=1, ICAL=0,000, TOLV=0,5, TOLEQ=0,001, VTI=300, ESPVEL=1000,
38 VELL=1000, SEND
39 STEPP N1TS=0,11, TCALS=0,10,7, SEND
40 5CONVE FCON=0,5, SEND
41
42 5DATOS ISAL=000, ICAC=030, PVCON=5, PURGA=5, ITUB=0, SEND
43
44 5DATOS IYSUP=0, ICPE=1, ICAL=0,000, TOLV=0,5, TOLEQ=0,001, VTI=300, ESPVEL=1000,
45 VELL=1000, SEND
46 STEPP N1TS=0,11, TCALS=0,10,7, SEND
47 5CONVE FCON=0,5, SEND
48
49 5DATOS ISAL=000, ICAC=030, PVCON=5, PURGA=5, ITUB=0, SEND
50
51 5DATOS IYSUP=0, ICPE=1, ICAL=0,000, TOLV=0,5, TOLEQ=0,001, VTI=300, ESPVEL=1000,
52 VELL=1000, SEND
53 STEPP N1TS=0,11, TCALS=0,10,7, SEND
54 5CONVE FCON=0,5, SEND
55
56 5DATOS ISAL=000, ICAC=030, PVCON=5, PURGA=5, ITUB=0, SEND
57
58 -FIN

```

RESULTADOS DEL MÓDULO NÚMERO 1

• DATOS CORRIENTE DE ENTRADA A LA SIMULACION •

SIMULACION DEL COMPORTAMIENTO IDEAL DE PLANTAS CLAS  
POR EL METODO DE MINIMIZACION DE ENERGIA LIBRE

DATOS DE LA CORRIENTE DE ENTRADA

TEMPERATURA = 370.300 K  
 PRESION = 1.300 ATM  
 NUM. DE ESPECIES = 12  
 NUM. DE ELEMENTOS = 5

COMPUESTO	PESO MOL.	FLUJO MOLAR ALIMENTADO	TABLA DE ELEMENTOS POR COMPUESTO (K1, J1)				
			H	S	C	O	N
H2	34.080	17.1000	2	1	0	3	0
CO2	64.000	1.0000	0	1	0	2	0
O2	31.999	8.5000	0	0	0	2	0
CH4	16.040	1.0000	4	0	1	3	0
NO	30.013	32.8891	0	0	0	0	2
SO	64.130	1.0000	0	2	0	3	0
Se	192.364	1.0000	0	6	0	0	0
SB	233.526	1.0000	0	8	0	0	0
H2O	18.016	4.0000	2	0	0	1	0
CS2	76.130	1.0000	0	2	1	0	0
CO	28.010	1.0000	0	1	1	1	0
CO2	44.010	78.3100	0	0	1	2	0



RESULTADOS DEL MODELO NUMERO 2

\*HORNO DE REACCION\*

LA CONFIGURACION SELECCIONADA PARA LA PLANTA ES "FLUJO DIVIDIDO"  
 POR LO QUE SE DESVIAN POR TERCERAS PARTES DE LA CORRIENTE DE  
 ENTRADA A LA PLANTA

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

FLUJO MOLAR	ENTRADA AL HORNO	FLUJO MASA (KG/HR)	ENTRADA	COMPUESTO	FLUJO MOLAR	CORR. DESVIADA	FLUJO MASA (KG/HR)	ENTRADA
5.73	7.6595	191.2741	7.3292	H2S	11.4810	17.1630	392.5561	14.2425
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	SO2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	11.5457	277.1137	13.7503	O2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	CH4	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
32.0000	43.0274	719.1311	35.5139	N2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	S2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	SC	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	S8	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
1.0000	2.00157	27.0000	1.0000	H2O	3.0000	4.5000	54.0000	1.7714
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	CS2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	CO2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	35.0769	1149.0000	44.7403	CO2	52.2167	78.3133	2297.6128	83.7267
74.4174	100.0000	2564.2072	100.0000	TOTAL	64.6167	100.0000	2742.2159	100.0000
34.3549	KG/MOL	55.0	F	PESO MOLECULAR	41.1333	KG/MOL	55.0	F
1.111	ATM.	14.711	LB/PLG2	TEMPERATURA	1.0000	ATM	14.700	LB/PLG2
10.000	KCAL/HR	41.000	BTU/HR	ENTALPIA	4.224	KCAL/HR	34.319	KCAL/HR
10.000	CP	0.7677	BTU/PLG	DENSIDAD	0.01526	G/CM3	0.01521	LB/PIES3
0.000	CP	0.232	BTU/PLG	VISCOSIDAD	0.0161	CP	0.0161	CP
0.000	CAL/CM	0.232	BTU/PLG	CAP. CALORIFICA	0.2261	CAL/G*CM	0.4370	BTU/PLG*F

CONTINUA . . .

(OPCION DE CALCULO = 1)  
 TEMPERATURA DE SALIDA IGUAL A TEMPERATURA DE FLAMA ADIABATICA)

CARACTERISTICAS DE LA CAMARA DE COMBUSTION

TEMPERATURA DE ENTRADA =	323.0 K	131.0 F
TEMPERATURA DE FLAMA =	1336.6 K	1566.4 F
TEMPERATURA DE OPERACION =	1336.6 K	1946.4 F
PRECION DE OPERACION =	1.033 ATM	14.7 PSIA
FLUJO ALIMENTADO =	2556.30 KG/H	5639.61 LB/H
FLUJO VOLUMETRICO A P Y T =	7647.472 M <sup>3</sup> /H	76.983 FT <sup>3</sup> /SEC
VOLUMEN DE CAMARA REQ. =	1.60 M <sup>3</sup>	56.34 FT <sup>3</sup>
LONG. DE CAMARA ESTIMADA =	3.19 M	10.47 FT
DIAM. DE CAMARA ESTIMADA =	.83 M	2.62 FT
TIEMPO DE RESIDENCIA =	.73 SEC	
% DE CONVERSION =	.00	

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

ENTRADA				SALIDA			
FLUJO MOLAR	W/M	FLUJO MASA (KG/H)	W/M	FLUJO MOLAR	W/M	FLUJO MASA (KG/H)	W/M
5.7300	7.6998	195.2771	7.5392	H2O	.0000	.7333	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	SO2	5.7300	8.0681	147.0982
8.5950	11.5497	271.0277	13.7593	O2	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CH4	.0000	.0000	.0000
32.4691	43.6579	911.1231	35.5639	H2	32.4691	45.4650	913.1331
.0000	.0000	.0000	.0000	N2	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	SO	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	SE	.0000	.0000	.0000
1.5000	2.0127	27.0000	1.3572	H2O	7.2300	10.1245	132.2557
.0000	.0000	.0000	.0000	SO2	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CO	.0000	.0000	.0000
26.1133	35.0769	1144.8164	99.7968	CO2	26.1133	36.4614	1243.8264
74.4174	100.0000	2557.2642	100.0000	TOTAL	71.5225	100.0000	2556.7976
34.3504	KG/MOL			PESO MOLECULAR	35.7262	KG/MOL	
55.1	C	131.40	F	TEMPERATURA	1363.6	C	1946.4
1.000	ATM	14.710	LB/PLG	PRECION	1.033	ATM	14.733
10.561	KCAL/HR	41.904	BTU/HR	ENTALPIA	720.486	KCAL/HR	2850.227
101.276	G/GMS	.075077	LB/PIES	LENSIDAD	.000326	G/GMS	.023336
.0000	CP			VISCOSIDAD	.0439	CP	
.0000	CAL/G+C	.0000	BTU/LB+F	LAP. CALORIFICA	.3200	CAL/G+C	.5850

RESULTADOS DEL MODELO NUMERO 3

\*CALDERA DE RECUPERACION DE CALOR\*

CARACTERISTICAS DE LA CALDERA (WASTE HEAT BOILER)

TEMPERATURA DE ENTRADA =	1376.6 °C	1946.4 F
TEMPERATURA DE SALIDA ESTIMADA =	850.0 °C	710.6 F
PRESION DE ENTRADA =	1.303 ATM	14.7 PSIA
FLUJO ALIMENTADO =	2556.33 KG/H	5631.61 LB/H
UT =	47.316 KCAL/(HOM <sup>2</sup> °C)	4.492 BTU/(HOF <sup>2</sup> °F)
AREA DE TRANSFERENCIA REQ. =	21.51 M <sup>2</sup>	231.52 FT <sup>2</sup>
LONG. DE TUBO ESTIMADA =	3.7 M	12.0 FT
DIAMETRO ESTIMADO DE TUBO =	4.09 CM	1.61 PULG.
AREA DE TRANSFERENCIA DISPONIBLE =	22.21 M <sup>2</sup>	239.04 FT <sup>2</sup>
CALIFA DE PRESION =	1.0359 ATM	10.866 PSI
NUMERO DE TUBOS =	40.	
VAPOR DE AGUA GENERADO (19.0 ATM)	922.46/M	2031.16/M
AGUA ALIMENTADA	971.46/M	2136.16/M
TEMP. DE ENTRADA DEL AGUA	400.0 °C	260.0 F

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

ENTRADA				SALIDA			
FLUJO MOLAR	EMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA	FLUJO MOLAR	EMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA
40000	40000	40000	3000	40000	40000	40000	3000
5.7300	5.7300	367.0982	14.3605	5.7300	5.7300	367.0982	14.3605
40000	40000	40000	3000	40000	40000	40000	3000
32.4491	32.4491	911.1301	35.5034	32.4491	32.4491	911.1301	35.5034
40000	40000	40000	3000	40000	40000	40000	3000
40000	40000	40000	3000	40000	40000	40000	3000
7.2211	7.2211	101.2557	5.2955	7.2211	7.2211	101.2557	5.2955
40000	40000	40000	3000	40000	40000	40000	3000
26.1033	26.1033	1147.8064	44.2402	26.1033	26.1033	1147.8064	44.2402
71.5525	71.5525	2556.2976	100.0000	71.5525	71.5525	2556.2976	100.0000
35.7262	KG/MOL			35.7262	KG/MOL		
1263.6	C	1946.4 F	PEQ. MOLECULAR	1263.6	C	710.6 F	
1.250	ATM	14.700 LB/PLG <sup>2</sup>	TEMPERATURA	1.250	ATM	14.700 LB/PLG <sup>2</sup>	
720.460	KCAL/HR	2059.074 BTU/HR	PRESION	720.460	KCAL/HR	2059.074 BTU/HR	
100000	G/CM <sup>3</sup>	15.7080 LB/PIES <sup>3</sup>	ENTALPIA	100000	G/CM <sup>3</sup>	15.7080 LB/PIES <sup>3</sup>	
10.000	BTU/LEF	1.000 BTU/LEF	ENTALPIA	10.000	BTU/LEF	1.000 BTU/LEF	
			VISCOSIDAD				
			CP. CALORIFICA				

CONTINUA . . .

CARACTERÍSTICAS DE LAS CORRIENTES

FLUJO MOLAR	CORRIENTE	COMPOSICIÓN	FLUJO MASICO (KG/HRI)	ENTALPIA	FLUJO MOLAR	MEZCLA RESULTANTE	FLUJO MASICO (KG/HRI)	ENTALPIA
11.4600	17.1910	H2S	391.5561	14.2423	11.4600	8.2912	391.5565	7.3711
.0000	.0000	SO2	.0000	.0000	5.7300	4.1456	367.0982	6.9263
.0000	.0000	O2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	CH4	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	N2	.0000	.0000	32.4891	23.0355	913.1131	17.1771
.0000	.0000	S2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	SE	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	S8	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
3.0111	4.5213	H2O	54.1470	1.07713	10.2300	7.4613	184.3337	3.4784
.0000	.0000	CO2	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	CO	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000	.0000
52.2167	70.3100	CO2	2297.6128	83.7867	76.3100	56.6564	3446.4192	65.2450
64.6267	100.0000	TOTAL	2742.2159	100.0000	138.2192	100.0000	5298.5145	100.0000
41.1333	KG/MOL	PESO MOLECULAR	131.46	TEMPERATURA	18.3341	KG/MOL	412.5	F
55.4	C				211.4	C		
.594	ATM.	14.613	LB/PLG2	FRECUENCIA	.994	ATM	14.513	LB/PLG2
6.254	MKCAL/HR	24.019	1000/HR	ENTALPIA	227.481	MKCAL/HR	902.941	1000/HR
.00126	G/G-C	.091411	LB/PIG3	DENSIDAD	.000959	G/G-C	.359851	LB/PIG3
.0161	CP			VISCOSIDAD	.0267	CP		
.2261	CAL/G-C	.4470	BTU/LB-F	CAP. CALORIFICA	.2587	CAL/G-C	.4659	BTU/LB-F

RESULTADOS DEL MODELO NUMERO 1

\*CONVERTIDOR CATALITICO\*

(OPCION DE CALCULO = J)  
(TEMPERATURA DE SALIDA IGUAL A TEMPERATURA DESEADA)

CARACTERISTICAS DEL CONVERTIDOR CATALITICO

VOLUMEN FISICO DE CATALIZADOR = 6.123 M3 218.3523 FT3  
 AREA TRANSVERSAL DE LA CAPA = 5.7243 M2 61.6226 FT2  
 ALTURA DE LA CAYA = 1.0830 M 3.5535 FT  
 CARGA DE FOSFORO = .000 ATM .003 PSIG  
 TEM. EL RCC. DEL GAS ENFUENTE = 242.5 C 468.5 F  
 COMPRESION = 77.33

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

E N T R A D A					S A L I D A			
FLUJO MOLAR	EMCL	FLUJO MASA (KG/HR)	EMASA	COMPUESTO	FLUJO MOLAR	EMCL	FLUJO MASA (KG/HR)	EMASA
11.4100	0.2912	301.4545	7.3711	H2	7.2790	1.0021	87.8926	1.8598
5.7310	4.1450	367.1925	5.2103	SO2	1.2097	.9586	83.2885	1.5715
.0000	.0000	.0000	.0000	O2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CH4	.0000	.0000	.0000	.0000
23.4050	23.4050	910.1371	17.1778	N2	32.4891	23.9676	912.1327	17.1778
.0000	.0000	.0000	.0000	S2	.1172	.8864	7.5157	.1418
.0000	.0000	.0000	.0000	SO	.1773	.1328	31.1157	.5439
.0000	.0000	.0000	.0000	SS	1.4993	1.1058	384.6318	7.2586
11.2211	7.4013	184.2137	3.4704	CO	19.1111	14.8956	344.3354	6.4981
.0000	.0000	.0000	.0000	CS2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CS	.0190	.0140	1.7400	.0215
76.3111	56.0574	344.2412	65.2450	CO2	76.2097	67.7440	344.5596	65.3226
128.2192	128.0000	5291.5145	128.0000	TOTAL	135.5824	128.0000	5293.5410	128.0000
36.3341	KG/MOL			PECS MOLECULAR	39.0799	KG/MOL		
261.99	C	510.00 F		TEMPERATURA	343.47	C	653.7 F	
.904	ATM	14.813 LB/PLG2		PRESION	.994	ATM	14.413 LB/PLG2	
307.000	MOLAL/HR	1210.517 MGTU/HR		ENTALPIA	415.536	MOLAL/HR	1652.122 MGTU/HR	
1000007	G/GMS	1000000 LB/PLG2		ENTALPIA	1000000	G/GMS	1000000 LB/PLG2	
1000007	CP			VISCOSIDAD	.0232	CP		
1000007	CAL/C4C	.4707 BTU/LB4F		CAP. CALORIFICA	.2896	CAL/G4C	.5213 BTU/LB4F	

EL RECALENTADOR REQUIERE DE UNA CARGA TERMICA DE 139.473 MOCAL/HR  
 PARA LLEVAR LA TEMPERATURA DE LA CORRIENTE DE ENTRADA DE 468.5 F  
 HASTA 541.9 F

RESULTADOS DEL MODELO NUMERO 5

\*CONDENSADOR DE AZUFRE\*

CARACTERISTICAS DEL CONDENSADOR

TEMPERATURA DE ENTRADA =	616.7 K	650.7 F
PRESION DE ENTRADA =	0.904 ATM	13.61 PSIA
TEMPERATURA DE SALIDA =	400.3 K	260.5 F
DESESTIMADA =	88.5 (CALAH)2°C	10.7 BTU/(H*FT2*F)
AREA RECCIBIDA =	35.060 M2	377.335 FT2
NUM. DE TUBOS REQUERIDOS =	59	
NUM. DE TUBOS DISPONIBLES =	62	
DIAMETRO DE CORAZA =	5.413 M	21.25 PULG.
DIAM. DE TUBO (12 INCH) =	3.01 CM	1.5 PULG.
LONG. DE TUBO =	4.88 M	16.0 FT
MASA VELOCIDAD =	102605.57 KG/H*H2	5.81 LB/KG*FT2
CAIDA DE PRESION =	0.212 ATM	3.09 PSI
AZUFRE CONDENSADO =	425.1 KG/H	930.1 LB/H
TEMPERATURA DE AGUA =	315.5 K	400.5 F
VAPOR DE AGUA GENERADO (5.0 ATM)	108. KG/H	1339. LB/H
AGUA ALIMENTADA	680. KG/H	1410. LB/H
TEMP. DE ENTRADA DEL AGUA	350. K	170. F

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

ENTRADA				SALIDA				
FLUJO MOLAR	PCOL	FLUJO MASA (KG/H)	ENTASA	COMPUESTO	FLUJO MOLAR	PCOL	FLUJO MASA (KG/H)	ENTASA
2.5790	1.0001	87.8976	1.5588	H2S	2.5790	1.9275	87.8936	1.8031
1.2997	.9580	83.2645	1.5715	S02	1.2997	.9724	83.2685	1.7083
.0000	.0000	.0000	.0000	O2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CH4	.0000	.0000	.0000	.0000
32.4891	23.9616	911.2337	17.1770	H2	32.4891	24.2423	913.1177	18.5716
.1110	.1110	7.5157	.1418	S2	.0000	.0000	.0000	.0000
.1773	.1773	24.2197	.4439	56	.0013	.0010	.7591	.0053
1.4443	1.4443	38.8618	7.2584	H2O	.0074	.0055	1.4951	.0189
14.1111	14.1111	344.2154	5.1901	K2O	14.1111	14.2816	344.7254	7.8635
.0000	.0000	.0000	.0000	CS2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0110	.0110	1.2400	.0215	CO5	.0190	.0142	1.1430	.0234
78.2907	57.7490	3445.5076	85.3201	CO2	78.2907	58.5184	3443.8596	73.8862
135.5424	100.0000	5298.6410	103.0000	TOTAL	135.7973	100.0000	4874.4590	100.0000
39.0700	KG/PCOL			PESO MOLECULAR	36.4317	KG/MOL		
3.57	C	1.117 F		TEMPERATURA	127.5	C	267.6 F	
.994	ATM.	14.012 LB/PLG2		PRESION	1.973	ATM	14.305 LB/PLG2	
412.276	KCAL/HR	1652.022 BTU/H2		ENTALPIA	108.752	KCAL/H2R	431.556 BTU/H2R	
.000718	G/CM3	.047926 LB/PIG3		DENSIDAD	.001088	G/CM3	.067433 LB/PIG3	
.0230	CP			VISCOSIDAD	.0177	CP		
.2850	CAL/G*°C	.2213 BTU/LB*F		CAP. CALORIFICA	.2643	CAL/G*°C	.4757 BTU/LB*F	

CU  
CU

RESULTADOS DEL MODELO NUMERO 1

CONVERTIDOR CATALITICO

FORMA DE CALCULO = J1  
 (TEMPERATURA DE SALIDA IGUAL A TEMPERATURA DESEADA)

ATENCION LA TEMPERATURA DE SALIDA ES MENOR QUE LA TEMPERATURA DE POCES  
 SE PUEDE PRESENTAR CONDENSACION DE AZUFRE SOBRE EL CATALIZADOR

CARACTERISTICAS DEL CONVERTIDOR CATALITICO

VOLUMEN NITROSO DEL CATALIZADOR = 5.0962 M3 178.9920 FT3  
 ANCHO TRANSVERSAL DE LA CAMA = 4.7187 M2 53.7967 FT2  
 ALTURA DE LA CAMA = 1.0833 M 3.5535 FT  
 CAIDA DE PRESION = 0.000 ATM 0.000 PSIG  
 TEM. PL. REC. DEL GAS EFLENTE = 225.6 C 402.1 F  
 % CONVERSION = 85.69

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

FLUJO MOLAR	ENTRADA			COMPUESDO	SALIDA			
	MMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA		MMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA	
2.5740	1.0275	87.0936	1.9031	H2	0.3554	0.2670	12.1118	0.2485
1.2097	0.9714	83.2675	1.7163	S02	0.1790	0.1345	11.4696	0.2353
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	O2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	CH4	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
32.4491	24.2823	910.1307	19.5714	N2	32.4491	24.4394	913.1337	18.5714
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	S2	0.0014	0.0011	0.0099	0.0018
0.0013	0.0010	0.2501	0.0053	S6	0.0045	0.0034	1.6311	0.0035
0.0174	0.0155	1.8201	0.009	S8	0.0220	0.0171	1.312570	2.2209
15.1111	14.2436	344.2154	7.3635	H2O	21.3347	18.0291	344.3651	7.3653
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	CS2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	COS	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
78.2907	58.5144	3440.5690	73.1862	CO2	78.3067	58.8347	3446.3630	70.7025
133.7993	100.0000	4874.4000	100.0000	TOTAL	133.0595	100.0000	4874.4592	100.0000
36.4317	KG/MOL			PLSU MOLECULAR	36.6227	KG/MOL		
17.017	C	343.6	F	TEMPERATURA	201.3	C	392.5	F
0.573	ATM.	14.380	LB/PLG2	FORMACION	0.973	ATM	14.305	LB/PLG2
175.0000	MKCAL/HR	697.710	MBTU/HR	ENTALPIA	204.918	MKCAL/HR	813.171	MBTU/HR
0.000000	L/CM3	0.000714	LB/PIE3	DENSIDAD	0.000918	G/CM3	0.057285	LB/PIE3
0.0000	CP			VISCOSIDAD	0.0172	CP		
0.2713	CAL/G°C	0.4800	BTU/LB°F	CAP. CALORIFICA	0.2760	CAL/G°C	0.5304	BTU/LB°F

EL PRECALENTADOR REQUIERE DE UNA CARGA TERMICA DE 29.396 MKCAL/HR  
 PARA ELEVAR LA TEMPERATURA DE LA CORRIENTE DE ENTRADA DE 60.03 C  
 HASTA 89.43 K

RESULTADOS DEL MODELO NUMERO 5

\*CONDENSADOR DE AZUFRE\*

CARACTERISTICAS DEL CONDENSADOR

TEMPERATURA DE ENTRADA =	475.3 K	392.5 F
PRESION DE ENTRADA =	.973 ATM	14.30 PSIA
TEMPERATURA DE SALIDA =	400.0 K	240.6 F
U ESTIMADA =	48.8 KCAL/M <sup>2</sup> °C	10.0 BTU/(H <sup>2</sup> FT <sup>2</sup> °F)
AREA REQUERIDA =	35.040 M <sup>2</sup>	377.395 FT <sup>2</sup>
NUM. DE TUBOS REQUERIDOS =	53.	
NUM. DE TUBOS DISPONIBLES =	67.	
DIAMETRO DE CORONA =	540 mm	21.25 PULG.
DIAM. DE TUBO (1/2 BUC) =	3.81 CM	1.5 PULG.
LONG. DE TUBO =	4.76 M	16.0 FT
MASA VELOCIDAD =	48393.78 KG/H <sup>2</sup>	5.37 LB/SEC*FT <sup>2</sup>
CAIDA DE PRESION =	40157 ATM	230 PSI
AZUFRE CONDENSADO =	107.8 KG/H	237.4 LB/H
TEMPERATURA DEL ROCIO =	478.3 K	406.9 F
VAPOR DE AGUA CATERADO (5.0 ATM)	184. KG/H	406. LB/H
AGUA ALIMENTADA	194. KG/H	428. LB/H
TEMP. DE ENTRADA DEL AGUA	350. K	170. F

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

ENTRADA		FLUJO MASA		COMPUUESTO	SALIDA		FLUJO MASA	
FLUJO MOLAR	EMOL	(KG/HR)	MASA		FLUJO MOLAR	EMOL	(KG/HR)	MASA
.3554	.2670	12.1118	.2485	H2S	.3554	.2679	12.1118	.2541
.1750	.1345	11.4696	.2353	S02	.1790	.1349	11.4596	.2406
.0170	.0100	.0000	.0000	C2	.0100	.0000	.0000	.0000
.3000	.0100	.0000	.0000	CH4	.0000	.0000	.0000	.0000
32.4491	24.4090	910.2107	18.5718	N2	32.4291	24.4675	912.1307	19.0937
.0114	.1011	.0879	.2018	O2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0015	.0004	1.4311	.0335	S6	.0014	.0010	.2127	.3555
.4221	.3171	12.02570	2.2019	S8	.0075	.0054	1.9213	.3401
21.3347	16.0091	384.3021	7.3053	H2O	21.3347	16.0012	381.3551	9.3636
.0110	.0000	.0000	.0000	CS2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0007	.0000	.0011	.0008	CO5	.0007	.0005	.0011	.0009
72.3107	56.8247	3440.3670	73.7025	CO2	72.3107	59.0223	3440.3630	72.3013
133.0995	100.0000	4874.4592	100.0000	TOTAL	132.6765	100.0000	4765.6653	100.0000
36.6107	KG/MOL	36.6	F	PESO MOLECULAR	36.6270	KG/MOL	36.6	F
201.3	C	14.315	LD/PLG2	TEMPERATURA	127.6	C	14.374	LD/PLG2
.473	ATM.	613.171	4810/HR	PRESION	.977	ATM.	627.539	4810/HR
24.519	KCAL/HR	.05700	LB/PIE3	ENTALPIA	107.740	KCAL/HR	.05524	LB/PIE3
.000016	G/CM3	.0171	CP	ENTALPIA	.0171	G/CM3	.0171	CP
.0172	CP	.4014	BTU/LOG	VISCOSIDAD	.2667	CP	.4436	BTU/LOG
.2740	CAL/G°C			CAP. CALORIFICA				



RESULTADOS DEL MODELO NUMERO 4

\*CONVERTIDOR CATALITICO\*

OPCION DE CALCULO = 3)  
TEMPERATURA DE SALIDA IGUAL A TEMPERATURA DESEADA

ATENCION LA TEMPERATURA DE SALIDA ES MENOR QUE LA TEMPERATURA DE REACCION, EL PUEDO PRESENTAR CONDENSACION DE AZUFRE SOBRE EL CATALIZADOR

CARACTERISTICAS DEL CONVERTIDOR CATALITICO

VOLUMEN MINIMO DE CATALIZADOR = 4.8221 M3 170.3123 FT3  
 AREA TRANSVERSAL DE LA CANA = 4.9249 M2 51.0649 FT2  
 ALTURA DE LA CANA = 1.0800 M 3.5435 FT  
 CAIDA DE PRESION = 0.030 ATM 0.00 PSIG  
 TEM. DE REACC. DEL GAS EFLENTE = 150.8 C 319.5 F  
 % CONVERSION = 71.64

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

C Y R A D A					S A L I D A			
FLUJO MOLAR	WCL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA	COMPUESTO	FLUJO MOLAR	WCL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA
.3554	.2679	12.1118	.2541	H2S	.1004	.0759	3.4265	.0719
.1791	.1349	11.4056	.2404	S02	.0515	.0388	3.7331	.0692
.0000	.0000	.0000	.0000	O2	.0100	.0080	.2123	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CH4	.0000	.0000	.0000	.0000
32.4481	24.4875	911.1307	19.3937	N2	32.4691	24.5321	913.1326	19.3937
.0000	.0000	.0000	.0000	S2	.0010	.0008	.0070	.0014
.0114	.0010	.0027	.0105	SO	.0016	.0012	.0017	.0003
.0175	.0056	1.0211	.0407	SO	.0049	.0044	11.0916	.0256
01.3347	11.0065	384.3641	9.3635	H2O	21.5844	16.2820	389.9555	9.1599
.0000	.0000	.0000	.0000	CS2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0007	.0005	.0011	.0009	CO2	.0002	.0001	.0003	.0002
78.3187	59.0023	3446.3630	72.3013	CO2	78.3090	59.0577	3445.3772	72.3017
132.6745	100.0000	4761.6653	100.0000	TOTAL	132.5974	100.0000	4761.6512	100.0000
35.9271	KG/MCL			PESO MOLECULAR	35.9424	KG/MCL		
151.1 C		313.29 F		TEMPERATURA	153.47 C		308.7 F	
.957 ATM		14.074 LB/PLG2		PRESION	.957 ATM		14.174 LB/PLG2	
136.510 MKCAL/HR		549.456 BTU/HR		ENTALPIA	141.468 MKCAL/HR		563.364 BTU/HR	
000180 G/CM3		.061710 LB/PIE3		DENSIDAD	.000983 G/CM3		.061367 LB/PIE3	
.0110 CP		.4895 BTU/LB*F		VISCOSIDAD	.0175 CP			
.2719 CAL/G*OC				CAP. CALORIFICA	.2728 CAL/G*OC		.4910 BTU/LB*OF	

EL RECALENTADOR REQUIERE DE UNA CARGA TERMICA DE 3.459 MKCAL/HR PARA ELEVAR LA TEMPERATURA DE LA CORRIENTE DE ENTRADA DE 100.0 C HASTA 153.5 C

RESULTADOS DEL MODELO NUMERO 5

«CONDENSADOR DE AZUFRE»

CARACTERISTICAS DEL CONDENSADOR

TEMPERATURA DE ENTRADA =	426.7 °C	308.7 °F
PRESION DE ENTRADA =	4.957 ATM	14.07 PSIA
TEMPERATURA DE SALIDA =	400.0 °C	240.0 °F
U ESTIMADA =	98.8 CAL/M <sup>2</sup> ·K	10.0 BTU/(H·FT <sup>2</sup> ·°F)
AREA RECORRIDA =	32.725 M <sup>2</sup>	352.252 FT <sup>2</sup>
LUN. DE TUBOS REQUERIDOS =	65	
NUM. DE TUBOS DISPONIBLES =	76	
DIAMETRO DE CORAZA =	.591 M	23.25 PULG.
DIAM. DE TUBO (IN BNG) =	3.61 CM	1.5 PULG.
LCRG. DE TUBO =	3.66 M	12.0 FT
MASA VELOCIDAD =	73371.26 KG/M <sup>2</sup> ·S	4.17 LB/SEC·FT <sup>2</sup>
CARGA DE PRESION =	.0071 ATM	.105 PSI
AZUFRE CALIFICADO =	13.2 KG/H	27.0 LB/H
TEMPERATURA DE AGUA =	432.3 °C	319.5 °F
VAPOR DE AGUA GENERADO @ 5.0 ATM	61.45/M	134. LB/H
AGUA ALIMENTADA	84.45/M	181. LB/H
TEMP. DE ENTRADA DEL AGUA	350. K	170. °F

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

E N T R A D A		S A L I D A		COMUESTO	E N T R A D A		S A L I D A	
FLUJO MCLAR	3MOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA		FLUJO MCLAR	3MOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA
.1004	.0759	3.4205	.3719	H2S	.1004	.0759	3.4205	.0721
.0515	.0388	3.1001	.3692	SO2	.0515	.0389	3.3001	.3694
.0100	.0075	.0000	.0000	O2	.0100	.0075	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CO	.0000	.0000	.0000	.0000
32.4891	24.4021	911.1314	19.3937	N2	32.4891	24.4110	912.1334	19.1426
.0010	.0008	.0000	.0000	SE	.0000	.0000	.0000	.0000
.0016	.0012	.0017	.0013	SG	.0016	.0016	.0016	.0016
.0049	.0044	14.0916	.0256	SR	.0049	.0057	1.4521	.0411
21.5874	16.2820	387.9555	8.1599	H2O	21.5874	16.2879	385.9555	8.1809
.0010	.0000	.0000	.0000	CS2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0012	.0001	.0000	.0000	CCl4	.0000	.0000	.0000	.0000
76.3050	59.0577	3440.3772	72.1017	CO2	76.3190	59.0794	3445.3772	72.4879
122.5974	100.0000	4766.0612	100.0000	TOTAL	122.5604	100.0000	4754.4199	100.0000
35.8692	KG/MOL			PESO MOLECULAR	35.8692	KG/MOL		
127.0	°C	310.7	°F	TEMPERATURA	127.0	°C	262.0	°F
.450	ATM	14.074	LB/PLG <sup>2</sup>	PRESION	.450	ATM	13.969	LB/PLG <sup>2</sup>
107.625	MKCAL/HR	563.304	1810/HR	ENTALPIA	107.625	MKCAL/HR	427.083	1810/HR
.001038	G/CM <sup>3</sup>	.061367	LB/PIE <sup>3</sup>	DENSIDAD	.001038	G/CM <sup>3</sup>	.064533	LB/PIE <sup>3</sup>
.0171	°C			VISCOSIDAD	.0171	°C		
.2492	CAL/G·°C	.4912	BTU/LB·°F	CAP. CALORIFICA	.2492	CAL/G·°C	.4345	BTU/LB·°F

Como se puede observar, a partir de las hojas de resultados es posible obtener todos los datos necesarios para generar el diagrama de flujo de proceso ya que se tienen flujos, composición, presión, temperatura, entalpía, y propiedades termofísicas de la corriente de proceso en cada una de las etapas del tren de recuperación.

En la tabla III.2 se muestra la comparación de los resultados obtenidos por el programa de simulación SIMCLA con los reportados en la literatura.

TABLA III.2  
TABLA COMPARATIVA DE RESULTADOS  
EJEMPLO # 2

<u>% CONVERSION ACUMULADA</u>			
EQUIPO	REF. 80	SIMCLA	% ERROR
HORNO	0.00	0.00	0.00
1er. CONVERTIDOR	81.22	77.33	-4.79
2° CONVERTIDOR	97.70	97.30	-0.41
3er. CONVERTIDOR	99.31	99.90	0.59
<u>% RECUPERACION ACUMULADA</u>			
1er. CONDENSADOR	80.05	76.94	-3.89
2° CONDENSADOR	97.31	96.50	-0.83
3er. CONDENSADOR	98.91	98.70	-0.21

Como se observa el porcentaje de error máximo en la conversión acumulada es de 4.79%, mientras que para la recuperación acumulada en los condensadores es de 3.89%.

Una vez más, encontramos que la mayor discrepancia entre los resultados se tiene a una temperatura (650°F) a la cual la curva de conversión (fig. III.2) se encuentra cerca de su punto mínimo que, de acuerdo a los resultados del ejemplo anterior, es la región en don

de se tiene la mayor diferencia entre resultados debido a la gran influencia de las especies  $S_3$ ,  $S_4$ ,  $S_5$  y  $S_7$ , las cuales no son tomadas en cuenta por el programa SIMCLA.

En la figura III.2 se muestra esquemáticamente la comparación de los resultados obtenidos por el programa SIMCLA y los reportados por la literatura.

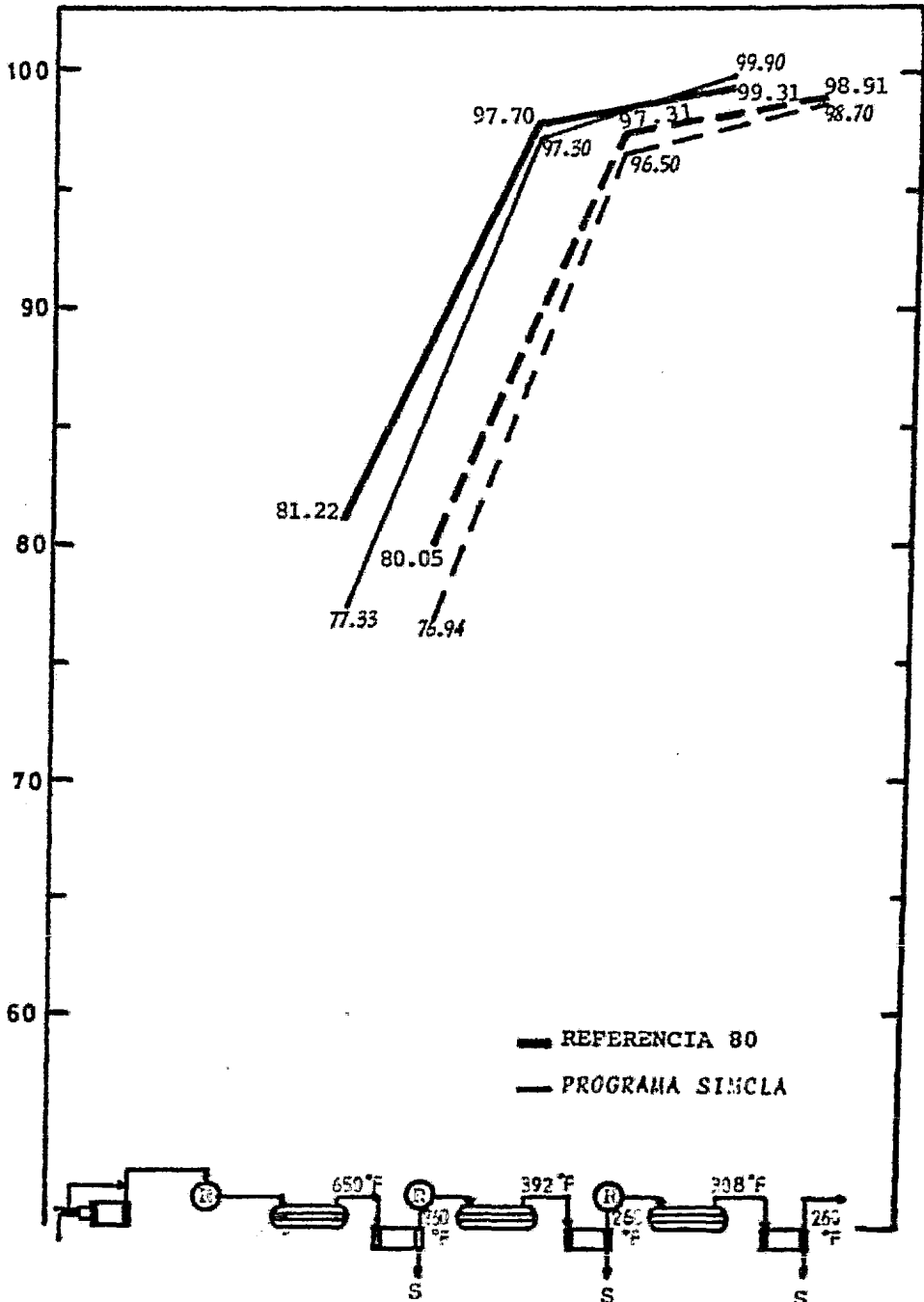
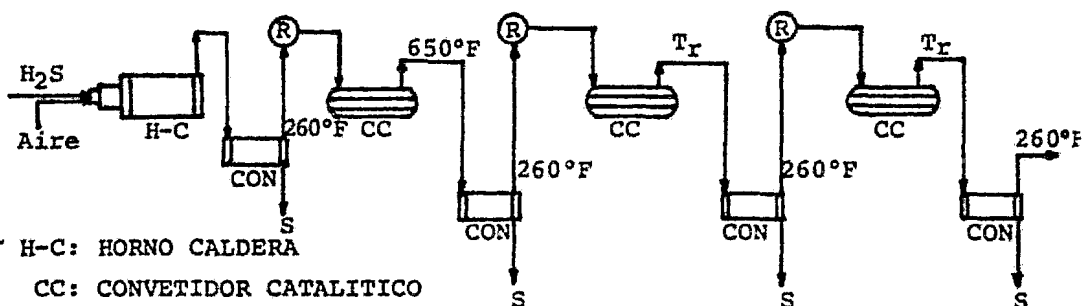


FIG. III.2 COMPARACION ESQUEMATICA, SIMULACION DEL TREN DE RECUPERACION FLUJO DIVIDIDO (EJEM. No. 2)

### III.D.3 EJEMPLO # 3: Simulación de un tren de recuperación de Azufre con una alimentación rica.

Este ejemplo consiste en simular una planta Claus con una alimentación rica y una configuración de flujo directo cuyo diagrama se muestra en la siguiente figura:



H-C: HORNO CALDERA

CC: CONVETIDOR CATALITICO

CON: CONDENSADOR

$T_r$ : TEMPERATURA DE ROCIO

R: RECALENTADOR

La composición del gas ácido alimentado es:

H <sub>2</sub> S	81.056 mol/hr
H <sub>2</sub> O	4.640 mol/hr
CO <sub>2</sub>	14.304 mol/hr

En este caso, el tren de recuperación también fue simulado para obtener la máxima recuperación de Azufre, por lo que se siguieron los mismos criterios mencionados en el ejemplo anterior.

En el presente ejemplo además de comparar los porcentajes acumulados de conversión y recuperación de Azufre en los Convertidores y en los Condensadores respectivamente, se efectúa la simulación de tal forma que el programa calcule las temperaturas de salida de los Convertidores para obtener las máximas conversiones de Azufre y poder comparar estas temperaturas con las reportadas en la literatura, con lo cual es posible evaluar en forma más global los resultados obtenidos por el programa SIMCLA.

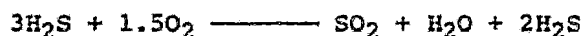
Para lograr lo anterior se eligieron las opciones de los módulos

de simulación de la siguiente manera:

<u>EQUIPO</u>	<u>OPCION</u>	<u>DESCRIPCION</u>
HORNO-CALDERA	1	Temperatura de salida igual a temperatura de flama adiabática.
1er CONVERTIDOR CATALITICO	3	Temperatura de salida igual a temperatura deseada.
CONVERTIDORES CATALITICOS	1	Temperatura de salida igual a temperatura de rocío.

En el caso del primer Convertidor Catalítico, al igual que en el ejemplo anterior, se eligió una temperatura de salida de 650°F con el objeto de tener las condiciones necesarias para la hidrólisis de CS<sub>2</sub> y COS formados en el Horno. Las temperaturas de salida de los Condensadores se fijaron igual a las mostradas en el diagrama de flujo de proceso. Por lo que respecta a los demás datos requeridos por los diferentes módulos se fijaron de acuerdo a los valores recomendados en los capítulos correspondientes.

A partir de la composición del gas ácido rico de alimentación y tomando en cuenta que la configuración del tren de recuperación es flujo directo, es posible calcular la cantidad de aire requerido para la oxidación total de un tercio del Acido Sulfhídrico contenido en la corriente de alimentación de acuerdo a la siguiente reacción:



$$81.056 \text{ ---- } 40.528 \text{ mol/hr de O}_2$$

De donde la cantidad total de aire requerida es:

$$\begin{array}{r} 40.5280 \text{ mol/hr O}_2 \text{ (21\%)} \\ \hline 153.1958 \text{ mol/hr N}_2 \text{ (79\%)} \\ \hline 193.7238 \text{ mol/hr Aire} \end{array}$$

A continuación se presentan los resultados obtenidos:

```

EMP#GSSPDATOS(1).DATOS/SIFCCAT31
1  MKU: EMP3R*E#166/ECHEGA,ERR#2,150
2  #ROG#N .S,FAVOR DE IMPRIMIR EN CARA BLANCA GRACIAS
3  #LOG SIMPI AJ PEFORADOS
4  #MRT#S FL#R#G#PTATOS.DATOS/SINCLA
5  #MUS#A FL#B#E#GAABS.
6  #MUS# 10#EB#R#E#GAABS.
7  #MOT#M .TCC#R#E#S#2
8  #PLANTA NTH#12,SEND
9  1
10  #DATOS TEND=22H, #PENT=1, #M=5, #N=12, #RAST#0, #END
11  #SISTE IDLE#1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,SEND
12  #1.05# 2 1 0 0 0
13  #0.0000 0 1 0 0 2
14  #0.52#0 0 0 0 0 0
15  #0.00# 4 0 1 0 0 0
16  #153.19#0 0 0 2 0 2
17  #0.00000 0 2 0 0 0
18  #0.00000 0 6 0 0 0
19  #0.00000 0 8 0 0 0
20  #4.64#0 2 0 0 1 0
21  #0.0000 0 2 1 1 0
22  #0.00000 0 1 1 1 0
23  #14.30# 0 0 1 2 0
24  2
25  #DATOS #YSUP#0, #ICP#1, #DAL#1, #TAS#1600, #TCLTA#5, #TCLE#0.0001, #NTI#300, #END
26  #CCNVER# FCCN#75, #END
27  3
28  #DATOS #TSAL#50, #TEACAL#400, #PYCAL#19, #PURGA#5, #TCORTE#110S, #ITUR#0,
29  #END
30  5
31  #DATOS #TSAL#400, #TEACON#350, #PYCCN#5, #PURGA#5, #ITUR#0, #END
32  4
33  #DATOS #YSUP#0, #ICP#3, #DT#0, #DP#0, #TCLTEM#5, #TCLE#0.0001, #NTI#300, #ESP#FL#1000,
34  #VELL#1000, #END
35  #STEMP#T#NTS#400, #TCALS#616, #3, #END
36  #CCNVER# FCCN#6, #END
37  5
38  #DATOS #TSAL#400, #TEACON#350, #PYCCN#5, #PURGA#5, #ITUR#0, #END
39  4
40  #DATOS #YSUP#0, #ICP#1, #DT#0, #DP#0, #TCLTEM#5, #TCLE#0.0001, #NTI#300, #ESP#EL#1000,
41  #VELL#1000, #END
42  #STEMP#T#NTS#400, #TCALS#488, #0, #END
43  #CCNVER# FCCN#05, #END
44  5
45  #DATOS #TSAL#400, #TEACON#350, #PYCCN#5, #PURGA#5, #ITUR#0, #END
46  4
47  #DATOS #YSUP#0, #ICP#1, #DT#0, #DP#0, #TCLTEM#5, #TCLE#0.0001, #NTI#300, #ESP#EL#1000,
48  #VELL#1000, #END
49  #STEMP#T#NTS#400, #TCALS#488, #5, #END
50  #CCNVER# FCCN#75, #END
51  5
52  #DATOS #TSAL#400, #TEACO#350, #PYCCN#5, #PURGA#5, #ITUR#0, #END
53  4
54  #DATOS #YSUP#0, #ICP#1, #DT#0, #DP#0, #TCLTEM#5, #TCLE#0.0001, #NTI#300, #ESP#EL#1000,
55  #VELL#1000, #END
56  #STEMP#T#NTS#400, #TCALS#488, #3, #END
57  #CCNVER# FCCN#7, #END
58  5
59  #DATOS #TSAL#100, #TEACON#350, #PYCCN#5, #PURGA#5, #ITUR#0, #END

```



RESULTADOS DEL MÓDULO "NÚMERO 1"

\*DATOS CORRIENTE DE ENTRADA A LA SIMULACION\*

SIMULACION DEL COMPORTAMIENTO IDEAL DE PLANTAS CLAS  
POR EL METODO DE MINIMIZACION DE ENERGIA LIBRE

DATOS DE LA CORRIENTE DE ENTRADA

TEMPERATURA = 328.000 K  
 PRESSION = 1.000 ATM  
 NUM. DE ESPECIES = 12  
 NUM. DE ELEMENTOS = 5

COMPLETO	PESO MOL.	FLUJO MOLAR ALIMENTADO	TABLA DE ELEMENTOS POR COMPLETO (A111J1)				
			H	S	C	O	N
H2S	34.000	81.0560	2	1	0	0	0
SO2	64.066	.0000	0	1	0	2	0
CO	31.970	40.5280	0	0	0	2	0
CH4	16.043	.0000	4	0	1	0	0
H2	20.013	153.1958	0	0	0	0	2
S2	64.128	.0000	0	2	0	0	0
S6	192.384	.0000	0	6	0	0	0
S8	256.512	.0000	0	8	0	0	0
H2O	18.016	4.6400	2	0	0	1	0
CS2	76.133	.0000	0	2	1	0	0
CS	60.077	.0000	0	1	1	1	0
CO2	44.010	14.3840	0	0	1	2	0

RESULTADOS DEL MODELO NUMERO 2

HORNO DE REACCION

LA CONFIGURACION SELECCIONADA PARA LA PLANTA ES <FLUJO DIRECTO>

(OPCION DE CALCULO = 1)

(TEMPERATURA DE SALIDA IGUAL A TEMPERATURA DE FLAMA ADIABATICA)

CARACTERISTICAS DE LA CAMARA DE COMBUSTION :

TEMPERATURA DE ENTRADA =	324.0 K	111.0 F
TEMPERATURA DE FLAMA =	1599.7 K	2310.0 F
TEMPERATURA DE OPERACION =	1599.7 K	2310.0 F
PRESION DE OPERACION =	1.000 ATM	14.7 PSIA
FLUJO ALIMENTADO =	9063.96 KG/H	19964.67 LB/H
FLUJO VOLUMETICO Q P Y T =	36907.271 M3/H	302.057 FT3/SEG
VOLUMEN DE CAMARA REQ. =	7.00 M3	247.37 FT3
LONG. DE CAMARA ESTIMADA =	5.23 M	17.14 FT
DIAM. DE CAMARA ESTIMADA =	1.11 M	4.29 FT
TIEMPO DE RESIDENCIA =	.28 SEG	
% DE CONVERSION =	74.19	

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

E N T R A D A				S A L I D A				
FLUJO MOLAR	MMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MMASA	COMPUESTO	FLUJO MOLAR	MMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MMASA
81.0560	27.5960	2762.3816	30.4766	H2S	13.6864	4.7156	466.4324	5.1460
.0000	.0000	.0000	.0000	SO2	6.9735	2.4027	446.7611	4.9297
40.5260	13.7980	1296.7474	14.3479	CO	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CH4	.0000	.0000	.0000	.0000
153.1953	52.1564	4291.352	47.3477	H2O	153.1960	52.7030	4291.5401	47.3477
.0000	.0000	.0000	.0000	SO	30.0679	10.3594	1926.1959	21.2737
.0000	.0000	.0000	.0000	SH	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	SR	.0000	.0000	.0000	.0000
4.0400	1.5707	63.5942	.9223	H2O	72.0098	24.8166	3297.3281	34.3130
.0000	.0000	.0000	.0000	CO2	.0010	.0004	.0792	.0009
.0000	.0000	.0000	.0000	CO	.2585	.0791	15.4277	.1713
14.3040	4.7693	629.5143	6.9424	CO2	14.3045	4.7300	618.0974	6.8103
243.7233	100.0000	9063.9747	100.0000	TOTAL	243.7237	100.0000	9063.0615	100.0000
30.2535	KU/MOL			PESO MOLECULAR	31.2295	KU/MOL		
55.0	C	131.0	F	TEMPERATURA	1276.7	C	2330.0	F
1.000	ATM	14.700	LB/PLG2	PRESION	1.000	ATM	14.700	LB/PLG2
50.043	MKCAL/HR	201.906	BTU/HR	ENTALPIA	3167.692	MKCAL/HR	1270.000	BTU/HR
.001174	G/GMS	.571579	LB/PIE3	REN-3140	.000246	G/GMS	.015330	LB/PIE3
.1174	CP			VISCOSIDAD	.0004	CP		
.2443	CAL/G°C	.437	BTU/LB°F	CAP. CALORIFICA	.2460	CAL/G°C	.0584	BTU/LB°F

RESULTADOS DEL MÓDULO NÚMERO 3  
 CALDERA DE RECUPERACIÓN DE CALOR

CARACTERÍSTICAS DE LA CALDERA (WASTE HEAT BOILER):

TEMPERATURA DE ENTRADA = 1569.7 K 2330.0 F  
 TEMPERATURA DE SALIDA DESEADA = 650.0 K 710.6 F  
 PRESIÓN DE ENTRADA = 1.000 ATM 14.7 PSIA  
 FLUJO ALIMENTICO = 9061.96 KG/H 19964.67 LB/H

UT = 02.746 KCAL/(H\*MT2\*F) 16.949 BTU/(H\*FT2\*F)  
 AREA DE TRANSFERENCIA REQ. = 51.32 M2 552.37 FT2  
 LOG. DE TUBO ESTIMADA = 4.9 M 16.0 FT  
 DIAMETRO ESTIMADO DE TUBO = 4.89 CM 1.61 IN.  
 AREA DE TRANSFERENCIA DISPONIBLE = 51.02 M2 557.76 FT2  
 CAIDA DE PRESION = 0.355 ATM 5.225 PSI  
 NUMERO DE TUBOS = 70.

VAPOR DE AGUA GENERADO (19.0 ATM) 4600. KG/H 9710. LB/H  
 AGUA ALIMENTICA 4640. KG/H 10221. LB/H  
 TEMP. DE ENTRADA DEL AGUA 400. K 260. F

CARACTERÍSTICAS DE LAS CORRIENTES

E N T R A D A				S A L I D A				
FLUJO MULAR	INCL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA	COMPUESTO	FLUJO MULAR	INCL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA
13.1809	4.7156	466.4324	5.1460	H2O	17.9628	6.2114	612.1711	6.7519
0.9735	2.4027	446.7611	4.9290	SO2	9.0639	3.1342	580.6843	6.4046
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	O2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	CO2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
153.1900	52.7833	4291.6401	47.3473	H2	152.1960	52.9737	4291.6304	47.1473
30.1073	10.1594	120.1959	21.2732	S2	26.9322	9.3129	1727.1076	10.0547
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	SO	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	SO2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
72.0000	24.8106	1297.3281	14.3130	H2O	67.7334	23.4216	1220.2658	13.4630
0.0010	0.0004	0.1792	0.0019	CO2	0.0004	0.0001	0.3319	0.0004
0.2545	0.0891	15.5277	0.1713	CO2	0.1642	0.0768	0.0653	0.0004
14.1445	4.6390	610.1974	6.8193	CO2	10.1393	4.0492	622.2706	6.8653
240.2375	100.0000	9363.6615	100.0000	TOTAL	289.1922	100.0000	9063.9669	100.0000
31.2205	KG/MOL			PEO MOLECULAR	31.3424	KG/MOL		
1276.7	C	2330.0 F		TEMPERATURA	377.0	C	710.6 F	
1.000	ATM.	14.700 LB/PLG2		PRESION	0.984	ATM.	14.174 LB/PLG2	
3107.042	KCAL/HR	12570.24 BTU/HR		ENTALPIA	802.924	KCAL/HR	3190.173	BTU/HR
0.00240	G/CM3	0.15142 LB/PIES3		DENSIDAD	0.00264	G/CM3	0.15254	LB/PIES3
0.001	CM			VISCOSIDAD	0.0210	CP		
0.001	CM/HR	0.500	BTU/LB*F	CAP. CALORIFICA	0.3016	CAL/GR*F	0.5424	BTU/LB*F

RESULTADOS DEL MÓDULO NÚMERO 5

\*CONDENSADOR DE AZUFRE\*

CARACTERISTICAS DEL CONDENSADOR

TEMPERATURA DE ENTRADA =	658.0 K	710.6 F
PRESION DE ENTRADA =	.964 ATM	14.18 PSIA
TEMPERATURA DE SALIDA =	480.0 K	260.6 F
U ESTIMADA =	88.0 KCAL/H*M <sup>2</sup> *C	10.0 BTU/(H*FT <sup>2</sup> *F)
AREA REQUERIDA =	74.079 M <sup>2</sup>	797.377 FT <sup>2</sup>
NUM. DE TUBOS REQUERIDOS =	116.	
NUM. DE TUBOS DISPONIBLES =	131.	
DIAMETRO DE CARAZA =	.757 M	29.80 PULG.
DIAM. DE TURO (12 ANG) =	3.01 CM	1.5 PULG.
LONG. DE TURO =	4.88 M	16.0 FT
MASA VELOCIDAD =	83071.75 KG/H*M <sup>2</sup>	4.72 LB/SEG*FT <sup>2</sup>
CAIDA DE PRESION =	.0200 ATM	.294 PSI
AZUFRE CONDENSADO =	1722.0 KG/H	3794.6 LB/H
TEMPERATURA DE MOCIO =	517.2 K	507.5 F
VADOR DE AGUA GENERADO ( 5.0 ATM)	1375. KG/H	3024. LB/H
AGUA ALIMENTADA	1495. KG/H	3183. LB/H
TEMP. DE ENTRADA DEL AGUA	350. K	170. F

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

ETAPA A		FLUJO MASA		COMPUESTO	SALIDA		FLUJO MASA	
FLUJO MOLAR	ANGUL	(KG/HR)	MASA		FLUJO MOLAR	ANGUL	(KG/HR)	MASA
17.9620	6.2114	612.1711	6.7539	H <sub>2</sub> S	17.9620	6.2114	612.1711	6.7539
9.1639	3.1342	580.6803	6.4066	S <sub>2</sub>	9.1639	3.1342	580.6803	6.4066
.0000	.0000	.0000	.0000	UP	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CH <sub>4</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000
153.1900	52.9737	4291.6398	47.3473	H <sub>2</sub>	153.1900	52.9737	4291.6398	47.3473
20.9322	9.3129	1727.1876	19.0547	S <sub>2</sub>	20.9322	9.3129	1727.1876	19.0547
.0000	.0000	.0000	.0000	SR	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	H <sub>2</sub> O	.0000	.0000	.0000	.0000
67.7334	23.4216	1220.0000	13.4630	CS <sub>2</sub>	67.7334	23.4216	1220.0000	13.4630
.0004	.0001	.0319	.0004	CO <sub>2</sub>	.0004	.0001	.0319	.0004
.1042	.0509	9.0693	.1042	CO <sub>2</sub>	.1042	.0509	9.0693	.1042
14.1393	4.8092	622.2706	6.8653	CO <sub>2</sub>	14.1393	4.8092	622.2706	6.8653
284.1922	100.0000	9363.6669	100.0000	TOTAL	284.1922	100.0000	9363.6669	100.0000
31.3424	KG/MOL			PESO MOLECULAR	27.7002	KG/MOL		
37.5	C	710.6	F	TEMPERATURA	127.0	C	260.6	F
.906	ATM.	14.178	LB/PLG <sup>2</sup>	PRESION	.684	ATM	13.884	LB/PLG <sup>2</sup>
803.924	MKCAL/HR	3170.173	BTU/LB*H	ENTALPIA	19.0005	MKCAL/HR	781.759	BTU/LB*H
.000005	G/CM <sup>3</sup>	.035244	LB/PIF <sup>3</sup>	DENSIDAD	.000005	G/CM <sup>3</sup>	.035203	LB/PIF <sup>3</sup>
.6216	CP			VISCOSIDAD	.0179	CP		
.3916	CAL/G*C	.5804	BTU/LB*F	CAP. CALORIFICA	.3003	CAL/G*C	.5806	BTU/LB*F

RESULTADOS DEL MODELO NÚMERO 4  
 \*CONVERTIDOR CATALITICO\*  
 (OPCION DE CALCULO = 3)  
 (TEMPERATURA DE SALIDA IGUAL A TEMPERATURA DESEADA)

CARACTERISTICAS DEL CONVERTIDOR CATALITICO

VOLUMEN MINIMO DE CATALIZADOR = 12.7722 M3      451.0909 FT3  
 AREA TRANSVERSAL DE LA CAMA = 11.4241 M2      127.3077 FT2  
 ALTURA DE LA CAMA = 1.0880 M      3.5703 FT  
 CAIDA DE PRESION = 0.000 ATM      0.000 PSIG  
 TEM. DE HOG. DEL GAS EFLUYENTE = 227.2 C      441.0 F  
 % CONVERSION = 26.6%

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

ENTRADA					SALIDA				
FLUJO MOLAR	MMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MMASA	COMPUESTO	FLUJO MOLAR	MMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MMASA	
17.0620	6.8400	612.1711	6.3300	H2S	7.9168	3.0528	269.4024	3.6752	
9.0639	3.4558	580.6043	7.9100	SO2	1.9599	1.5270	253.6959	3.4558	
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	OP	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	CH4	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
153.1967	52.4094	4291.5398	58.4682	N2	153.1960	52.0736	4291.5420	58.4651	
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	SO	0.2513	0.0049	16.1176	0.2195	
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	SO	0.2220	0.0056	42.7152	0.2119	
0.0144	0.0057	3.1334	0.0522	SO	1.7016	0.0542	438.4144	0.2061	
67.7334	25.4251	1220.2050	16.6224	H2O	77.7723	29.9423	1401.2726	19.0477	
0.0000	0.0002	0.0004	0.0004	CO2	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
0.1642	0.0626	9.3653	0.1314	CO2	0.0011	0.0012	0.1842	0.0026	
14.1393	5.3910	622.2706	6.4764	CO2	14.1307	5.5145	629.1740	6.4732	
264.2777	100.0000	7341.2004	100.0000	TOTAL	252.3309	100.0000	7341.2225	100.0000	
27.9932	KG/MOL			PESO MOLECULAR	28.9883	KG/MOL			
217.5	C	549.5	F	TEMPERATURA	443.3	C	649.0	F	
944	ATM	13.813	LB/PLG2	PRESION	1944	ATM	13.813	LB/PLG2	
552.707	MKCAL/HR	2115.917	BTU/HR	ENTALPIA	697.260	MKCAL/HR	2608.176	BTU/HR	
606575	G/CM3	0350.4	LB/PIE3	VELOCIDAD	000529	G/CM3	0330.4	LB/PIE3	
0.230	CP			VICIOSIDAD	0236	CP			
0.316	CAL/G°C	0.5678	BTU/LB°F	CAP. CALORIFICA	0.2553	CAL/G°C	0.5656	BTU/LB°F	

EL RECALENTADOR REQUIERE DE UNA SALIDA TERMICA DE 124.553 MKCAL/HR  
 PARA ELEVAR LA TEMPERATURA DE LA CORRIENTE DE ENTRADA DE 603.0 K  
 HASTA 660.15 K

RESULTADOS DEL MODULO NUMERO 5

\*CONDENSADOR DE AZUFRE\*

CARACTERISTICAS DEL CONDENSADOR

TEMPERATURA DE ENTRADA =	516.3 K	649.9 F
PRESION DE ENTRADA =	944 ATM	13.00 PSIA
TEMPERATURA DE SALIDA =	400.0 K	260.6 F
U ESTIMADA =	48.6 KCAL/H*CM <sup>2</sup> *C	10.8 BTU/(H*FT <sup>2</sup> *F)
AREA EFECTIVA =	53.150 M <sup>2</sup>	572.169 FT <sup>2</sup>
NUM. DE TUBOS REFRIGERADOS =	87.	
NUM. DE TUBOS DISPONIBLES =	94.	
DIAMETRO DE CARAZA =	0.35 M	25.00 PULG.
DIAM. DE TUBO (12 ANG) =	3.01 CM	1.5 PULG.
LONG. DE TUBO =	4.88 M	16.0 FT
MASA VELOCIDAD =	93766.31 KG/H*CM <sup>2</sup>	5.33 LB/SEG*FT <sup>2</sup>
CAIDA DE PRESION =	0.257 ATM	0.370 PSI
AZUFRE CONDENSADO =	401.0 KG/H	1001.5 LB/H
TEMPERATURA DE ROCIO =	499.0 K	430.7 F
VAPOR DE AGUA GENERADO (5.0 ATM)	092.0 KG/H	1965.0 LB/H
AGUA ALIMENTADA	939.0 KG/H	2069.0 LB/H
TEMP. DE ENTRADA DEL AGUA	350.0 K	170.0 F

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

ENTRADA		COMPUESTO			SALIDA			
FLUJO MULAR	ANCL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASSA		FLUJO MULAR	ANCL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASSA
7.9160	3.0520	269.4024	3.6752	H2S	7.9160	3.0784	269.4024	3.7386
3.9599	1.5270	253.2959	3.4558	S02	3.9599	1.5398	253.2959	3.7035
.0000	.0000	.0000	.0000	O2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CM4	.0000	.0000	.0000	.0000
153.1760	59.2736	4291.5420	58.4541	N2	153.1760	59.5691	4291.5420	60.6480
.2513	.0909	16.1176	.2145	SP	.0000	.0000	.0001	.0000
.2220	.0856	42.7162	.5019	SH	.0027	.0011	.0252	.0277
1.7016	.6567	436.149	5.4661	SA	.0160	.0048	1.0918	.0561
77.7793	29.6923	1401.3766	19.0077	H2O	77.7793	30.2419	1401.3726	20.4558
.0000	.0000	.0000	.0000	CS2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0012	.1802	.0026	CO2	.0031	.0012	.1882	.0027
14.3067	5.5145	629.3740	8.5732	CO2	14.3067	5.5607	629.3740	9.1876
257.3309	100.0000	7341.2225	100.0000	TOTAL	257.1715	100.0000	8050.2416	100.0000
26.3085	KG/MOL			PESO MOLECULAR	26.3266	KG/MOL		
263.5	C	100.0	F	TEMPERATURA	127.0	C	260.6	F
.944	ATM	13.00	PSIA	PRESION	.919	ATM	13.504	PSIA
607.260	MKCAL/HR	2608.176	BTU/HR	ENTALPIA	190.386	MKCAL/HR	763.437	BTU/HR
.00020	G/CM3	.0330	LB/PIE3	DENSIDAD	.000746	G/CM3	.046547	LB/PIE3
.0230	CP			VISCOSIDAD	.0167	CP		
.3253	CAL/G*°C	.5846	BTU/LB*°F	CAP. CALORIFICA	.3113	CAL/G*°C	.5603	BTU/LB*°F

RESULTADOS DEL PODULO NÚMERO 4  
 \*CONVERTIDOR CATALITICO\*  
 (OPCION DE CALCULO = 1)  
 (TEMPERATURA DE SALIDA IGUAL A TEMPERATURA DE ROCIO)

CARACTERISTICAS DEL CONVERTIDOR CATALITICO

VOLUMEN MINIMO DE CATALIZADOR = 10.2723 M3 362.8049 FT3  
 AREA TRANSVERSAL DE LA CAMA = 9.5114 M2 102.3905 FT2  
 ALTURA DE LA CAMA = 1.0000 M 3.2835 FT  
 CAMA DE PRESION = .000 ATM .000 PSIG  
 TEM. DE ROCIO DEL GAS EFLUENTE = 214.5 C 418.1 F  
 % CONVERSION = 82.20

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

FLUJO MOLAR	ENTRADA			COMUESTO	SALIDA			
	MMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	VMASA		FLUJO MOLAR	MMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	VMASA
7.9168	3.0784	269.824	3.9386	H2S	1.4042	.5504	47.8961	.6986
3.9599	1.5328	253.7959	3.7015	SO2	.7022	.2752	44.2855	.6567
.0000	.0000	.0000	.0000	O2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CH4	.0000	.0000	.0000	.0000
153.1700	59.1691	4291.5420	62.6480	N2	153.1760	60.0425	4291.5419	62.6479
.0000	.0000	.0001	.0000	SO	.0000	.0000	.0000	.0000
.0027	.0011	.0032	.0077	SA	.0025	.0004	5.0002	.0783
.0150	.0058	3.0414	.0561	SO	1.2170	.4774	312.4369	4.5610
77.7793	30.2432	1401.2780	20.4550	H2O	80.2418	13.0767	1518.6012	22.1695
.0000	.0000	.0000	.0000	CS	.0000	.0000	.0000	.0000
.0031	.0012	.0032	.0077	CO2	.0001	.0000	.0076	.0001
14.3007	5.5667	629.3740	7.1076	CO2	14.3037	5.6061	629.5055	7.1075
257.1726	100.0000	6950.2416	100.0000	TOTAL	256.1461	100.0000	6950.2535	100.0000
20.6366	KG/MOL			PESO MOLECULAR	26.8484	KG/MOL		
174.2	C	345.6	F	TEMPERATURA	14.5	C	414.1	F
.919	ATM.	13.515	LB/PLG2	PRESION	.919	ATM	13.505	LB/PLG2
206.727	MKCAL/HR	1137.845	BTU/HR	ENTALPIA	370.497	MKCAL/HR	1470.227	BTU/HR
.006657	G/CM3	.041632	LB/PIE3	DENSIDAD	.006617	G/CM3	.038495	LB/PIE3
.0186	CP			VISCOSIDAD	.0169	CP		
.3142	CAL/G°C	.5656	BTU/LB°F	CAP. CALORIFICA	.3233	CAL/G°C	.5420	BTU/LB°F

EL RECALENTADOR REQUIERE DE UNA CARGA TERMICA DE 13.770 MKCAL/HR  
 PARA ELEVAR LA TEMPERATURA DE LA CORRIENTE DE ENTRADA DE 407.0 K  
 HASTA 447.2 K

PROPIEDADES DEL MEDIO FLUIDO

CONDENSADOR DE AIRE

CARACTERÍSTICAS DEL CONDENSADOR

TEMPERATURA DE ENTRADA =	407.0 K	410.1 F
PRESIÓN DE ENTRADA =	1.019 ATM	15.91 PSIA
TEMPERATURA DE SALIDA =	400.0 K	260.6 F
U ESTIMADA =	40.8 KCAL/HM <sup>2</sup> °C	10.0 BTU/HM <sup>2</sup> °F
AREA REQUERIDA =	53.176 M <sup>2</sup>	572.169 FT <sup>2</sup>
NÚM. DE TUBOS REQUERIDOS =	80	
NÚM. DE TUBOS DISPONIBLES =	94	
DIÁMETRO DE CARRA =	.635 M	25.00 PULG.
DIAM. DE TUBO (1/2 PULG) =	3.81 CM	1.5 PULG.
LONG. DE TUBO =	6.00 M	19.68 FT
MASA VELOCIDAD =	57495.30 KG/HM <sup>2</sup>	4.97 LB/SEC-FT <sup>2</sup>
CAIDA DE PRESIÓN =	.0205 ATM	.302 PSI
AZUFRE CONDENSADO =	313.3 KG/H	690.1 LB/H
TEMPERATURA DE BOCIO =	407.5 K	410.1 F
VAPOR DE AGUA GENERADO (5.0 ATM)	363.0 KG/H	799.0 LB/H
AGUA ALIMENTADA	382.0 KG/H	842.0 LB/H
TEMP. DE ENTRADA DEL AGUA	350.0 K	170.0 F

CARACTERÍSTICAS DE LAS CORRIENTES

ENTRADA				SALIDA				
FLUJO MOLAR	EMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA	COMPUESTO	FLUJO MOLAR	EMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA
1.4042	.5564	47.4061	.6936	H <sub>2</sub> S	1.4042	.5530	47.0561	.7721
.7022	.2782	49.1055	.0567	SO <sub>2</sub>	.7022	.2769	48.3055	.6882
.0000	.0000	.0000	.0000	O <sub>2</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CO <sub>2</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000
153.1920	60.4925	4201.4419	62.6479	N <sub>2</sub>	153.1960	60.3313	4291.4910	60.4507
.0015	.0014	.0238	.0074	SO	.0000	.0000	.0000	.0000
.0205	.0104	4.0912	.0743	SO <sub>2</sub>	.0205	.0111	4.336	.0207
1.0177	.4774	312.4310	4.4610	SO <sub>3</sub>	.0152	.0160	3.4029	.0107
04.2911	33.0367	1510.0012	22.1005	H <sub>2</sub> O	04.2910	32.1907	1510.0012	22.2311
.0000	.0000	.0000	.0000	CO <sub>2</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0070	.0311	CO <sub>2</sub>	.0001	.0000	.0076	.0001
14.2037	5.1001	629.1055	9.1875	CO <sub>2</sub>	14.2037	5.6332	629.4055	9.4700
253.1451	100.0000	6050.2935	100.0000	TOTAL	253.9161	100.0000	6536.9343	100.0000

26.0404	KG/MOL			26.7445	KG/MOL		
219.5	C	410.1 F		127.0	C	260.6 F	
.910	ATM	13.919 LB/PLG <sup>2</sup>		.698	ATM	10.1779 LB/PLG <sup>2</sup>	
376.007	KCAL/HR	1470.207 BTU/HR		180.000	KCAL/HR	751.779 BTU/HR	
.000017	G/CM <sup>3</sup>	.038405 LB/PIE <sup>3</sup>		.000700	G/CM <sup>3</sup>	.043980 LB/PIE <sup>3</sup>	
.0164	CP			.0166	CP		
.3233	CAL/G°C	.5820 BTU/LB°F		.3185	CAL/G°C	.5734 BTU/LB°F	

PESO MOLECULAR  
TEMPERATURA  
PRESIÓN  
ENTRADA  
SALIDA  
VELOCIDAD  
VISCOSIDAD  
CAP. CALORÍFICA



RESULTADOS DEL ACCION NÚMERO  
 \*CONVERTIDOR CATALITICO\*  
 OPCION DE CALCULO = 11  
 (TEMPERATURA DE SALIDA IGUAL A TEMPERATURA DE ROCI)

CARACTERISTICAS DEL CONVERTIDOR CATALITICO

VOLUMEN MINIMO DE CATALIZADOR =	10.1379 M3	358.0598 FT3
AREA TRANSVERSAL DE LA CAMA =	9.5869 M2	101.0503 FT2
ALTEZA DE LA CAMA =	1.0800 M	3.5435 FT
CAIDA DE PRESION =	0.000 ATM	0.000 PSIG
TEMP. LE. DEG. DEL GAS EFLENTE =	160.9 C	337.9 F
% CONVERSION =	66.19	

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

ENTRADA				SALIDA				
FLUJO MOLAR	MOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA	COMPUESTO	FLUJO MOLAR	MOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA
1.4042	.6530	47.0561	.721	H2S	.4748	.1872	14.1825	.2976
.7022	.2745	44.0355	.6892	SO2	.2374	.0936	15.2120	.2327
.0000	.0000	.0000	.0000	O2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CO	.0000	.0000	.0000	.0000
153.1960	60.3333	4291.5419	65.6507	H2	153.1960	60.4023	4291.5419	65.6507
.0000	.0000	.0000	.0000	SP	.0000	.0000	.0000	.0000
.0020	.0011	.0336	.0042	SO	.0016	.0014	.0008	.0107
.0152	.0060	3.0229	.0537	SA	.1887	.0794	44.0078	.7406
84.2910	33.1967	1518.012	23.2311	H2O	84.2213	33.6011	1538.4067	23.4872
.0000	.0000	.0000	.0000	CS2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0001	.0000	.0076	.0001	CO2	.0000	.0000	.0013	.0000
14.3037	5.6332	629.4355	9.6300	CO2	14.3038	5.6397	629.5088	9.6300
253.9101	100.0000	6536.9343	100.0000	TOTAL	253.6263	100.0000	6536.9370	100.0000
25.7445	KG/MOL			PESO MOLECULAR	25.7739	KG/MOL		
164.3	C	327.3	F	TEMPERATURA	169.9	C	337.9	F
.078	ATM.	13.203	LM/PLG2	PRESION	.0794	ATM	13.203	LM/PLG2
261.779	MKCAL/HR	1038.815	KBTU/HR	ENTALPIA	273.671	MKCAL/HR	1085.997	KBTU/HR
.000605	G/CM3	.000245	LB/PIES	DENSIDAD	.000437	G/CM3	.0003764	LB/PIES
.0181	CP			VISCOSIDAD	.0172	CP		
.3208	CAL/G.C	.5774	BTU/LB.F	CAP. CALORIFICA	.3221	CAL/G.C	.5797	BTU/LB.F

EL RECALENTADOR REQUIERE LE UNA CARGA TERMICA DE 11.892 MKCAL/HR  
 PARA ELEVAR LA TEMPERATURA DE LA CORRIENTE DE ENTRADA DE 400.0 K  
 HASTA 437.0 K

RESULTADOS DEL MUESTRO NÚMERO 5

\*CONDENSADOR DE AZUFRE\*

CARACTERÍSTICAS DEL CONDENSADOR

TEMPERATURA DE ENTRADA =	442.9 K	337.9 F
PRESION DE ENTRADA =	4.98 ATM	13.20 PSIA
TEMPERATURA DE SALIDA =	400.0 K	260.6 F
U ESTIMADA =	48.8 KCAL/H·M <sup>2</sup> ·°C	10.0 BTU/(H·FT <sup>2</sup> ·°F)
AREA REQUERIDA =	44.100 M <sup>2</sup>	474.774 FT <sup>2</sup>
NUM. DE TUBOS REQUERIDOS =	75.	
NUM. DE TUBOS DISPONIBLES =	70.	
DIAMETRO DE CAJAZA =	5.91 M	23.25 PULG.
DIAM. DE TUBO (12 ING) =	3.81 CM	1.5 ING.
LOG. EF TUBO =	0.80 M	16.0 FT
DATA VELOCIDAD =	100620.39 KG/H·M <sup>2</sup>	5.72 LB/SEC·FT <sup>2</sup>
CAIDA DE PRESION =	0.026 ATM	0.376 PSI
AZUFRE CONDENSADO =	49.6 KG/H	90.3 LB/H
TEMPERATURA DEL AGUA =	442.9 K	337.9 F
VAJOR DE AGUA OPERANDO A 5.0 ATM =	152. KG/H	336. LB/H
AGUA ALIMENTADA =	160. KG/H	354. LB/H
TEMP. DE ENTRADA DEL AGUA =	390. K	170. F

CARACTERÍSTICAS DE LAS CORRIENTES

ENTRADA				SALIDA			
FLUJO MOLAR	MOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA	FLUJO MOLAR	MOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA
0.748	0.1872	16.1825	0.2476	H <sub>2</sub> S	0.4748	0.1873	16.1825
0.2374	0.0926	15.0120	0.2327	S <sub>2</sub>	0.2374	0.0937	15.0120
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	O <sub>2</sub>	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	Cl <sub>4</sub>	0.0000	0.0000	0.0000
153.1960	60.4023	4291.5419	65.6507	N <sub>2</sub>	153.1960	60.4439	4291.5419
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	S <sub>2</sub>	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	SO	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	SO <sub>2</sub>	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	CS <sub>2</sub>	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	CO <sub>2</sub>	0.0000	0.0000	0.0000
0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	CS <sub>2</sub>	0.0000	0.0000	0.0000
14.3033	5.6397	629.5088	9.6300	CO <sub>2</sub>	14.3033	5.6436	629.5088
253.4263	100.0000	6536.0370	100.0000	TOTAL	253.4518	100.0000	6492.1268
25.7739	KG/MOL			PESO MOLECULAR	25.8156	KG/MOL	
10.90	C	337.9	F	TEMPERATURA	127.0	C	260.6
0.890	ATM.	13.203	LB/PLG <sup>2</sup>	PRESION	0.73	ATM	12.827
213.671	MKCAL/HR	1075.997	MOTU/HR	ENTALPIA	180.031	MKCAL/HR	750.121
0.00057	G/G·°C	0.00764	LB/PIE <sup>3</sup>	CONDENSACION	0.00051	G/G·°C	0.042519
0.172	CP			VISCOSIDAD	0.166	CP	
0.221	CAL/G·°C	0.5767	BTU/LB·°F	CAP. CALORIFICA	0.196	CAL/G·°C	0.5753

En la tabla III.3 se muestra la comparación de los resultados obtenidos por el programa SIMCLA con los reportados por la literatura para este tren de recuperación de Azufre:

TABLA III.3  
TABLA COMPARATIVA DE RESULTADOS  
EJEMPLO # 3

<u>% DE CONVERSION</u>			
EQUIPO	REF. 80	SIMCLA	% ERROR
HORNO-CALDERA	66.60	66.45	-0.22
1er CONVERTIDOR	88.35	85.51	-3.21
2° CONVERTIDOR	98.07	97.74	-0.33
3er CONVERTIDOR	99.37	99.63	0.26

<u>% DE RECUPERACION</u>			
1er CONDENSADOR	66.47	66.28	-0.29
2° CONDENSADOR	88.22	85.15	-3.48
3er CONDENSADOR	97.93	97.23	-0.71
4° CONDENSADOR	99.22	98.95	-0.27

<u>TEM. SALIDA CONVERTIDORES</u>			
1er CONVERTIDOR	649.9°F	650.0°F	0.00
2° CONVERTIDOR	418.1°F	414.0°F	0.97
3er CONVERTIDOR	337.9°F	331.0°F	2.01

En este caso el porcentaje de error máximo en la conversión acumulada es de 3.21% mientras que para la recuperación acumulada es de 3.48%. Una vez más encontramos que la mayor diferencia en resultados se tiene a la temperatura en la que las especies alotrópicas  $S_3$ ,  $S_4$ ,  $S_5$  y  $S_7$  tienen la mayor influencia dentro del cálculo del equilibrio termodinámico.

Por lo que se refiere al cálculo de la temperatura de salida de los Convertidores Catalíticos se tiene que el porcentaje máximo de e-

error es de 2.01% en el tercer Convertidor. Las diferencias existentes entre las temperaturas calculadas y las reportadas se podría deber a los diferentes criterios, datos termodinámicos y métodos de cálculo utilizados para evaluar el equilibrio entre las diferentes especies alotrópicas de Azufre durante el cálculo de la temperatura de rocío de la mezcla efluente de los convertidores (ver Subrutina ROCIO, apéndice B.5).

Considerando que el programa SIMCLA desarrollado en el presente trabajo no pretende ser un programa de diseño final de plantas recuperadoras de Azufre se puede concluir que los resultados obtenidos por el mismo son bastante aceptables, ya que al compararlos con los obtenidos con un programa en el que se toma en cuenta todas las especies de Azufre y se utilizan métodos de cálculo mucho más rigurosos, los porcentos de error no rebasan el 5%.

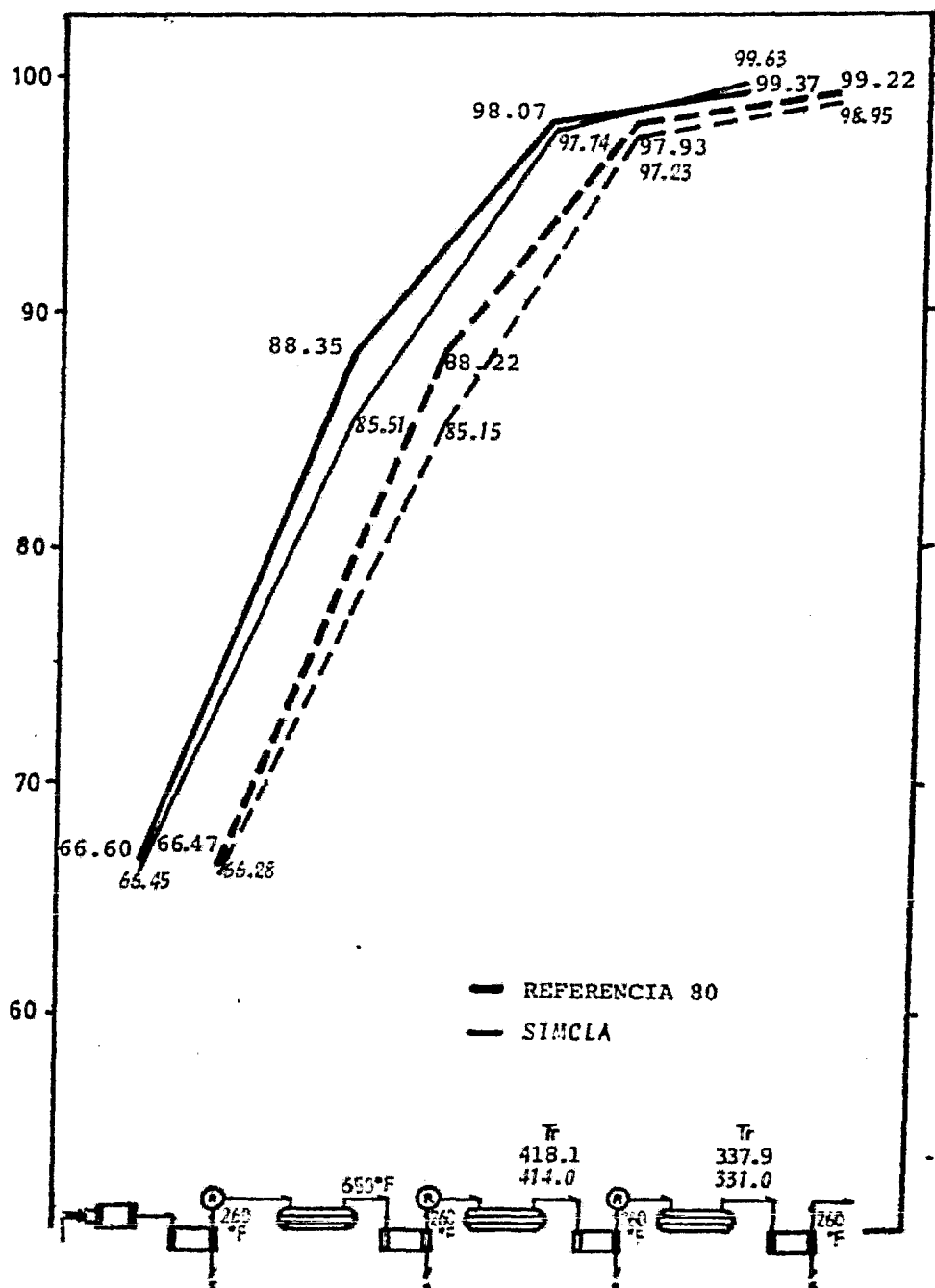


FIG. III.3 COMPARACION ESQUEMATICA, SIMULACION DEL TREN DE RECUPERACION FLUJO DIRECTO (EJEM. No. 3)

### III.D.4 EJEMPLO # 4: Simulación de la planta Claus de la Refinería de Tula, Hidalgo.

El propósito de este ejemplo es el de cotejar los resultados obtenidos con el programa SIMCLA contra los datos reportados en el libro de proceso de la planta Claus localizada en la Refinería de Tula, Hidalgo la cual fue diseñada en el año de 1973.

Esta planta Claus opera con una configuración de flujo directo, similar al presentado en la figura II.5, en donde el tren de recuperación esta constituido por el Horno-Caldera de Reacción, dos Convertidores Catalíticos y tres Condensadores.

Las características de la corriente de alimentación a la planta son las siguientes:

H <sub>2</sub> S	110.3427 Kg-mol/h
CH <sub>4</sub>	1.2539 Kg-mol/h
H <sub>2</sub> O	4.6394 Kg-mol/h
CO <sub>2</sub>	9,1534 Kg-mol/h
TEMPERATURA:	324.0 °K
PRESION	; 1.109 atm.

Mientras que la cantidad de aire requerida estequiométricamente para oxidar un tercio del H<sub>2</sub>S alimentado es de 276.3 Kg-mol/h.

Por otro lado el libro de proceso de esta planta Clausa reporta para los diferentes equipos del tren de recuperación los siguientes datos:

- CALDERA RECUPERADORA DE CALOR:

Temperatura de salida de la corriente de proceso:	466.0 °K
Temperatura del agua de alimentación:	412.0 °K
Presión del vapor generado:	3.54 atm

- CONDENSADORES:

Temperatura de salida de la corriente de proceso: 466.0 °K  
 Temperatura del agua de alimentación: 400.0 °K  
 Presión del vapor generado: 3.54 atm

- 1er. CONVERTIDOR CATALITICO:

Temperatura de entrada de la corriente de proceso: 494.0 °K  
 Temperatura de salida de la corriente de proceso: 583.0 °K

- 2° CONVERTIDOR CATALITICO:

Temperatura de entrada de la corriente de proceso: 489.0 °K  
 Temperatura de salida de la corriente de proceso: 512.0 °K

Estos valores se usaron como datos para los módulos de simulación para los cuales se eligieron las siguientes opciones de cálculo:

EQUIPO	OPCION	DESCRIPCION
Horno-Caldera	1	temperatura de salida igual a temperatura de flama adiabática.
1er. Convertidor	3	Temperatura de salida igual a temperatura deseada.
2° Convertidor	1	Temperatura de salida igual a temperatura de rocío.

Por lo que respecta a los demás datos requeridos por el programa SIMCLA fueron seleccionados a partir de los valores recomendados ya que el libro de proceso de la Refinería de Tula no proporciona información de los mismos.

A continuación se presentan las hojas de resultados obtenidas por el programa SIMCLA





RESULTADOS DEL MODULO NUMERO 1

\*DATOS CORRIENTE DE ENTRADA A LA SIMULACION\*

SIMULACION DEL COMPORTAMIENTO IDEAL DE PLANTAS CLAS  
 POR EL METODO DE MINIMIZACION DE ENERGIA LIMAC

DATOS DE LA CORRIENTE DE ENTRADA

TEMPERATURA = 329.000 K  
 PRESTION = 1.109' ATM  
 NUN. DE ESPECIES = 12  
 NUN. DE ELEMENTOS = 5

COMUESTO	PESE MCL.	FLUJO MOLAR ALIMENTADO	TABLA DE ELEMENTOS POR COMUESTO (ATI, JII)				
			H	S	C	O	N
H2S	34.080	110.3427	2	1	0	0	0
SO2	64.056	.0000	0	1	0	2	0
O2	31.998	54.0230	0	0	0	2	0
CO	16.013	1.2539	1	0	1	0	0
H2	28.013	214.2770	0	0	0	0	2
S2	64.124	.0030	0	2	0	0	0
S4	192.384	.0000	0	6	0	0	0
S8	256.578	.0000	0	8	0	0	0
H2O	18.016	4.6394	2	0	0	1	0
CS2	76.133	.0000	0	2	1	0	0
CO2	44.010	.0000	0	1	1	1	0
CO	28.010	4.1534	0	0	1	2	0

RESULTADOS DEL MODULO NUMERO 7

«HORNO DE REACCION»

LA CONFIGURACION SELECCIONADA PARA LA PLANTA ES "FLUJO DIRECTO"

OPCION DE CALCULO = 11  
TEMPERATURA DE SALIDA IGUAL A TEMPERATURA DE FLAMA ADIABATICA

CARACTERISTICAS DE LA CAMARA DE COMBUSTION

TEMPERATURA DE ENTRADA =	323.3 K	173.8 F
TEMPERATURA DE FLAMA =	1624.8 K	2445.3 F
TEMPERATURA DE OPERACION =	1624.8 K	2445.3 F
PRESION DE OPERACION =	1.109 ATM	16.3 PSIA
FLUJO ALIMENTADO =	12218.97 KG/M	26956.98 LB/M
FLUJO VOLUMETRICO A P Y T =	67715.000 M <sup>3</sup> /M	668.080 FT <sup>3</sup> /SEG
VOLUMEN DE CAMARA REC. =	10.14 M <sup>3</sup>	358.07 FT <sup>3</sup>
LONG. DE CAMARA ESTIPADA =	5.91 M	19.39 FT
DIAM. DE CAMARA ESTIPADA =	1.48 M	4.85 FT
TIEMPO DE RESIDENCIA =	.76 SEG	

% DE CONVERSION = 74.84

CARACTERISTICAS DE LAS CARRIENTES

ENTRADA				SALIDA				
FLUJO MOLAR	MMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MPASA	COMPUUESTO	FLUJO MOLAR	MMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	BMASA
110.2427	27.4697	3765.2726	30.7269	H2S	18.0422	6.5502	615.5572	5.3227
.0000	.0000	.0000	.0000	SO2	9.4763	2.3873	607.1055	4.9406
57.0230	14.4447	1854.8664	15.1709	O2	.0000	.0000	.0000	.0000
1.7519	.3172	20.1143	.1644	CH4	.0000	.0000	.0000	.0000
217.2100	54.3392	6114.6809	49.5632	H2	218.2774	54.9884	6114.6932	49.9429
.0000	.0000	.0000	.0000	SP	41.3008	10.4045	2648.5369	21.6411
.0000	.0000	.0000	.0000	SA	.0000	.0000	.0031	.0002
.0000	.0000	.0000	.0000	SB	.0000	.0000	.0020	.0002
4.0354	1.1550	83.5634	.6818	H2O	59.4276	25.0478	1791.2883	14.6365
.0000	.0000	.0000	.0000	CS2	.0000	.0002	.0659	.0005
.0000	.0000	.0000	.0000	CO3	.7012	.0507	12.0877	.0988
5.3536	2.2787	402.7407	3.2914	CO2	10.2653	2.5709	449.1330	3.6498
401.6804	100.0000	12218.3600	100.0000	TOTAL	396.9516	100.0000	12218.4675	100.0000
30.4672	KG/MOL			PESO MOLECULAR	30.4311	KG/MOL-		
51.0	C	123.8 F		TEMPERATURA	173.8	C	2445.3 F	
1.109	ATM.	16.305	LB/PLG2	PRESION	1.109	ATM	16.305	LB/PLG2
57.0230	MMOL/HR	230.725	MMTU/HR	ENTALPIA	4569.722	MMOL/HR	18133.618	MMTU/HR
.000000	CM <sup>3</sup>	.079355	LB/PIG3	DENSIDAD	.000256	G/CM3	.014013	LB/PIG3
.0074	FM			VELOCIDAD	.1479	FM		
.2449	CAL/G°C	.4409	BTU/LB°F	CAP. CALORIFICA	.3681	CAL/G°C	.6426	BTU/LB°F

RESULTADOS DEL MODULO NUMERO 3  
CALDERA DE RECUPERACION DE CALOR

CARACTERISTICAS DE LA CALDERA (WASTE HEAT BOILERS)

TEMPERATURA DE ENTRADA =	1624.8 K	2945.3 F
TEMPERATURA DE SALIDA DESEADA =	658.0 K	725.0 F
PRESION DE ENTRADA =	1.109 ATM	16.3 PSIA
FLUJO ALIMENTADO =	2238.47 KG/H	26956.98 LB/H
UT =	73.700 KCAL/(M <sup>2</sup> ·H·°C)	15.396 BTU/(M <sup>2</sup> ·H·°F)
AREA DE TRANSFERENCIA AFO. =	81.25 M <sup>2</sup>	874.51 FT <sup>2</sup>
LONG. DE TUBO ESTIMADA =	9.9 M	32.6 FT
DIAMETRO ESTIMADO DE TUBO =	9.09 CM	3.61 PULG.
AREA DE TRANSFERENCIA DISPONIBLE =	81.43 M <sup>2</sup>	876.98 FT <sup>2</sup>
CAIDA DE PRESION =	.0243 ATM	.3720 PSI
NUMERO DE TUBOS =	110	
VAPOR DE AGUA GENERADO (10.8 ATM)	6631. KG/H	14540. LB/H
AGUA ALIMENTADA	6999. KG/H	15526. LB/H
TEMP. DE ENTRADA DEL AGUA	412. K	282. F

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

ENTRADA				SALIDA				
FLUJO MOLAR	MMOL	FLUJO MASA (KG/H)	EMASA	COMPUESTO	FLUJO MOLAR	MMOL	FLUJO MASA (KG/H)	EMASA
17.0422	4.5502	615.5532	5.6297	H2S	24.6669	6.2400	841.3270	6.8799
5.4763	2.3873	407.1055	4.9604	S02	12.7474	3.7246	816.4763	6.6730
.0000	.0000	.0000	.0000	O2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CH4	.0000	.0000	.0000	.0000
217.2374	54.9889	6114.6932	49.9629	H2	218.2777	55.2160	6114.7001	49.9629
41.3008	10.4045	2442.5349	21.6911	S2	34.3939	9.2063	2331.8693	19.0699
.0000	.0000	.0000	.0000	S6	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	S8	.0000	.0000	.0000	.0000
94.9276	25.0478	1791.2693	14.6365	H2O	97.8028	23.4756	1671.9355	13.6613
.0000	.0000	.0000	.0000	CS2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CO	.0000	.0000	.0000	.0000
10.0000	2.5709	445.1330	3.6698	CO2	10.2872	2.6023	452.7375	3.6993
394.5536	100.0000	12237.4675	100.0000	TOTAL	394.3161	100.0000	12236.4810	100.0000
30.7311	KG/MOL	2945.3 F		PESO MOLECULAR	30.7311	KG/MOL	725.0 F	
1373.8	C	16.305		TEMPERATURA	1373.8	C	15.933	
1.109	ATM	16.305		PRESION	1.109	ATM	16.305	
2238.47	KGAL/H	26956.98		CALORIF. (KCAL/H)	2238.47	KGAL/H	26956.98	
1.109	ATM	16.305		DENSIDAD (KG/M <sup>3</sup> )	1.109	ATM	16.305	
1.109	ATM	16.305		VISCOSIDAD (CP)	1.109	ATM	16.305	
1.109	ATM	16.305		CAP. CALORIF. (KCAL/KG·°C)	1.109	ATM	16.305	

RESULTADOS DEL MODULO NUMERO 5

CONDENSADOR DE AZUFRE

CARACTERISTICAS DEL CONDENSADOR

TEMPERATURA DE ENTRADA =	658.0 K	725.0 F
PRESION DE ENTRADA =	1.084 ATM	15.93 PSIA
TEMPERATURA DE SALIDA =	466.0 K	379.4 F
W ESTIMADA =	48.8 KCAL/MON24C	10.0 BTU/(H*FT**2)*F
AREA REQUERIDA =	99.526 M2	1071.284 FT2
NUM. DE TUBOS REQUERIDOS =	172.	
NUM. DE TUBOS DISPONIBLES =	174.	
DIAMETRO DE CORAZA =	.838 M	33.00 PULG.
DIAM. DE TUBO (1/2 BUC) =	3.81 CM	1.5 PULG.
LONG. DE TUBO =	4.28 M	14.0 FT
MASA VELOCIDAD =	3187.44 KG/H*H2C	4.75 LB/SEC*FT
CAIDA DE PRESION =	.3193 ATM	.284 PSI
AZUFRE CONDENSADO =	2166.6 KG/H	4772.2 LB/H
TEMPERATURA DE ROCIC =	543.0 K	514.4 F
VAPOR DE AGUA GENERADO (3.5 ATM)	1724. KG/H	3794. LB/H
AGUA ALIMENTADA	1815. KG/H	3994. LB/H
TEMP. DE ENTRADA DEL AGUA	400. K	260. F

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

FLUJO MOLAR	ENTRADA				COMPUUESTO	SALIDA			
	MMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA	TEMPERATURA		FLUJO MOLAR	MMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA
24.8869	6.7988	441.3270	6.8784	H2S	24.8869	6.8648	841.3270	8.3332	
12.7474	3.2244	816.6743	6.6730	S02	12.7474	3.5448	816.6743	8.1045	
.0000	.0000	.0000	.0000	O2	.0000	.0000	.0000	.0000	
.0000	.0000	.0000	.0000	CH4	.0000	.0000	.0000	.0000	
218.2777	55.2160	6114.7001	49.9629	H2	218.2777	63.6960	6114.7001	60.7104	
34.2939	9.2043	2333.8493	19.6499	S2	.0002	.0001	.0132	.0001	
.0000	.0000	.0125	.0001	S6	.1534	.0426	29.5039	.2929	
.0000	.0000	.0000	.0000	S8	.5372	.1494	117.7994	1.3682	
97.4028	23.4756	1671.9345	13.6613	108	92.8028	29.8063	1671.9355	16.6000	
.0003	.0001	.0233	.0022	CS2	.0003	.0001	.0213	.0002	
.0196	.0302	7.7997	.0586	CO5	.1896	.0533	7.1997	.8725	
10.2872	2.6073	457.7375	3.6993	CO2	10.2872	2.8604	452.7375	4.4950	
394.3161	100.0000	12238.4810	100.0000	TOTAL	359.6128	100.0000	10371.9158	103.3033	
30.4587	KG/MOL			PESO MOLECULAR	28.1077	MG/MOL			
155.0	C	755.0 F		TEMPERATURA	153.0	C			
1.684	ATM.	15.933 LB/PLG2		PRESION	1.065	ATM			
1114.260	KCAL/MR	4421.664 MR/L*HR		ENTALPIA	456.706	KCAL/HR	1832.326	MRU/HR	
.00019	C/CM3	.058619 LB/PIE3		DENSIDAD	.000780	G/CM3	.048679	LB/PIE3	
.0226	CP			VISCOSIDAD	.0177	CP			
.0123	CAL/G*OC	.7441 BTU/LB*F		CAP. CALORIFICA	.3548	CAL/G*OC	.5486	BTU/LB*F	

RESULTADOS DEL MÓDULO NUMERO 1  
 «CONVERTIDOR CATALITICO»  
 OPCION DE CALCULO = 31  
 TEMPERATURA DE SALIDA IGUAL A TEMPERATURA DESEADA

CARACTERISTICAS DEL CONVERTIDOR CATALITICO

VOLUMEN NOMINAL DE CATALIZADOR = 10.3397 M3 499.4012 FT3  
 ANCHO TRANSVERSAL DE LA CAMA = 13.0923 M2 140.9391 FT2  
 ALTURA DE LA CAMA = 1.0000 M 3.2808 FT  
 CAIDA DE PRESION = .0000 ATM .0000 PSIG  
 TEM. DE BCC. DEL GAS FLUYENTE = 243.3 C 469.9 F  
 % CONVERSION = 69.10

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

ENTRADA				SALIDA				
FLUJO MOLAR	MOL	FLUJO MASA (KG/HR)	GRASA	COMPUESTO	FLUJO MOLAR	MOL	FLUJO MASA (KG/HR)	GRASA
24.8669	6.8648	841.3270	8.3532	H2S	7.5610	2.1338	257.6798	2.5584
17.7474	3.5440	816.6763	8.1085	S02	4.1248	1.3641	264.7603	2.6237
.0000	.0000	.0000	.0000	O2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CO	.0000	.0000	.0000	.0000
21.6277	60.6980	6114.7001	60.7104	H2	216.2777	61.6002	6114.7000	60.7102
.0002	.0001	.0132	.0001	S2	.1199	.0338	7.6914	.0764
.1574	.0426	24.2039	.2929	S4	.2827	.0794	54.3439	.5400
.7172	.1494	137.7994	1.3482	S8	3.6437	1.0283	934.7151	9.2404
97.0628	25.8043	1671.9315	16.6000	H2O	109.9284	31.0229	1940.4705	19.6632
.0003	.0001	.0233	.0002	CS2	.0000	.0000	.0000	.0000
.1178	.0333	7.1497	.0715	CO2	.0011	.0003	.0669	.0069
10.8782	2.8408	938.4239	9.4458	SO3	10.8782	2.9363	867.9750	8.5470
354.4374	100.0000	10071.9158	100.0000	TOTAL	354.3456	100.0000	10071.9426	100.0000
28.0077	MG/MOL			PESO MOLECULAR	28.0241	MG/MOL		
233.1	C	410.8	F	TEMPERATURA	330.0	C	590.0	F
1.065	TEM.	15.449	LB/PIE2	PRESION	1.045	ATM	15.449	LB/PIE2
572.375	MKCAL/HR	2312.456	M3/PIE3	ENTALPIA	817.021	MKCAL/HR	3182.624	M3U/HR
.000772	G/CM3	.004470	LB/PIE3	DENSIDAD	.000633	G/CM3	.039489	LB/PIE3
.0202	CP			VISCOSIDAD	.0212	CP		
.3177	CAL/G°C	.1539	BTU/LB°F	CAP. CALORIFICA	.3249	CAL/G°C	.5848	BTU/LB°F

EL RECALENTADOR REQUIERE DE UNA CARGA TERMICA DE 219.282 MKCAL/HR  
 PARA ELEVAR LA TEMPERATURA DE LA CORRIENTE DE ENTRADA DE 469.0 K  
 HASTA 510.0 K

RESULTADOS DEL MÓDULO NÚMERO 5

CONDENSADOR DE AZUFRE

CARACTERÍSTICAS DEL CONDENSADOR

TEMPERATURA DE ENTRADA =	583.0 K	590.0 F
PRECION DE ENTRADA =	1.065 ATM	15.65 PSIA
TEMPERATURA DE SALIDA =	450.0 K	350.6 F
U ESTIMADA =	48.8 KCAL/M <sup>2</sup> OC	10.0 BTU/IN <sup>2</sup> °F
AREA REQUERIDA =	85.388 M <sup>2</sup>	919.114 FT <sup>2</sup>
NUM. DE TUBOS REQUERIDOS =	138	
NUM. DE TUBOS DISPONIBLES =	151	
DIAMETRO DE CORAZA =	7.87 M	31.00 PULG.
DIAM. DE TUBO (1/2 BUC) =	3.81 CM	1.5 PULG.
LONG. DE TUBO =	4.88 M	16.0 FT
MASA VELOCIDAD =	8003.42 KG/HOM <sup>2</sup>	4.55 LB/SEC·FT <sup>2</sup>
CAIDA DE PRESTION =	.0177 ATM	.260 PSI
AZUFRE CONDENSADO =	915.7 KG/H	2074.1 LB/H
TEMPERATURA DE FOCIO =	514.3 K	466.2 F
VAPOR DE AGUA GENERADO (A 3.7 ATM)	872.4 KG/H	1921.0 LB/H
AGUA ALIMENTADA	914.4 KG/H	2022.0 LB/H
TEMP. DE ENTRADA DEL AGUA	350.0 K	170.0 F

CARACTERÍSTICAS DE LAS CORRIENTES

ENTRADA				SALIDA				
FLUJO MOLAR	EMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	EMASA	COMPUESTO	FLUJO MOLAR	EMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	EMASA
7.5610	7.1330	251.6750	2.5584	H <sub>2</sub> S	7.5610	7.1564	257.6798	2.6141
4.1248	1.1648	264.2403	2.6237	SO <sub>2</sub>	4.1248	1.1764	264.7403	2.6860
.0000	.0000	.0000	.0000	O <sub>2</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CO <sub>2</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000
218.7777	61.6027	6114.7000	60.7102	N <sub>2</sub>	218.7777	62.2523	6114.7000	66.2788
.1199	.0338	7.6514	.6764	SO	.0000	.0000	.0000	.0000
.0727	.0198	54.3879	.5400	SO <sub>2</sub>	.0480	.0194	13.0782	.1428
3.6437	1.0283	734.7151	9.2804	SO <sub>3</sub>	.2147	.0761	68.4193	.7472
105.4224	31.0224	1980.4705	19.6612	H <sub>2</sub> O	105.9244	31.3513	1980.4705	21.6288
.0000	.0000	.0000	.0000	CS <sub>2</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CO	.0000	.0000	.0000	.0000
10.4062	2.9347	457.9770	4.6470	CO <sub>2</sub>	10.4062	2.9678	457.9750	5.0016
354.7456	100.0000	10071.9476	100.0000	TOTAL	350.6390	100.0000	9156.6541	100.0000
28.4241	MG/MOL			PESO MOLECULAR	28.4241	MG/MOL		
1.015	C	550.0	F	TEMPERATURA	177.0	C	350.6	F
0.02071	ATM.	15.649	LB/PLG <sup>2</sup>	PRECION	1.047	ATM.	15.389	LB/PLG <sup>2</sup>
.000013	KCAL/HR	3182.624	MBTU/HR	ENTALPIA	396.016	KCAL/HR	1671.492	MBTU/HR
.012	G/GMS	.032409	LB/PLG <sup>3</sup>	DENSIDAD	.000740	G/GMS	.046222	LB/PLG <sup>3</sup>
.0249	CP			VELOCIDAD	.0176	CP		
	CAL/OC	.7498	BTU/LE·F	CAP. CALORIFICA	.3174	CAL/OC	.5713	BTU/LB·F

RESULTADOS DEL MODULO NUMERO 1  
 \*CONVERTIDOR CATALITICO\*  
 (OPCION DE CALCULO = 1)  
 TEMPERATURA DE SALIDA (IGUAL A TEMPERATURA DE ROTACION)

CARACTERISTICAS DEL CONVERTIDOR CATALITICO

VOLUMEN MINIMO DE CATALIZADOR =	12.6073 M3	445.2747 FT3
AREA TRANSVERSAL DE LA CAMA =	11.6735 M2	125.6648 FT2
ALTIMA DE LA CAMA =	1.3000 M	3.5435 FT
CAIDA DE PRESION =	.600 ATM	.000 PSIG
TEMP. DE REG. DEL GAS EFLENTE =	213.9 C	417.0 F
% CONVERSION =	78.08	

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

ENTRADA		COMUESTO				SALIDA		
FLUJO MOLAR	TRMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA		FLUJO MOLAR	TRMOL	FLUJO MASA (KG/HR)	MASA
7.5610	2.1564	257.6798	7.8191	H2S	1.4793	.4292	50.4129	-5506
4.1248	1.1764	264.2603	2.4860	SO2	1.0230	.3106	69.3824	-7577
.0000	.0000	.0000	.0000	O2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	.0000	CH4	.0000	.0000	.0000	.0000
217.7177	62.2523	6114.7000	16.7788	H2	217.7178	62.5934	6114.7000	46.7787
.0001	.0000	.0000	.0000	S2	.0011	.0003	.0729	.0008
.0000	.0194	13.0782	.1428	S6	.0254	.0073	4.8844	.0533
.0007	.0761	68.4193	.7472	S8	1.4390	.4124	369.1379	4.0314
104.4284	31.1513	1987.4795	21.7288	H2O	116.0108	33.2672	2090.0498	22.8234
.0000	.0000	.0000	.0000	CS2	.0000	.0000	.0000	.0000
.0011	.0003	.0000	.0000	CO5	.0000	.0000	.0000	.0000
10.4662	2.9178	451.0790	5.0016	CO2	10.4071	2.9844	458.0179	5.0020
350.0140	100.0000	9154.6541	100.0000	TOTAL	348.7237	103.8000	9154.6694	100.0000
27.1146	KG/MOL			PESO MOLECULAR	26.2577	KG/MOL		
175.7	C	176.1	C	TEMPERATURA	213.9	C	417.0	F
1.047	TRMOL	15.379	LB/PLEG	PRESION	1.047	ATM	15.380	LB/PLEG
415.647	KCAL/HR	1665.266	MBTU/HR	ENTALPIA	415.647	KCAL/HR	1778.447	MBTU/HR
.007206	CZ/HR	.049743	LB/FIC3	DENSIDAD	.006800	G/CM3	.02955	LB/PIE3
.0181	CP			VISCOSIDAD	.2159	CP		
.4179	KAL/POC	.4179	BTU/POC	CAP. CALORIFICA	.2241	KAL/GOC	.5034	BTU/POC

EL REACTADOR REQUIERE DE UNA CARGA TERMICA DE 16.922 KCAL/HR  
 PARA ELEVAR LA TEMPERATURA DE LA CORRIENTE DE ENTRADA DE 175.7  
 A 213.9 C

RESULTADOS DEL MODELO NUMERO 8

CONDENSADOR DE AZUFRE

CARACTERISTICAS DEL CONDENSADOR

TEMPERATURA DE ENTRADA =	488.0 K	917.0 F
PRESION DE ENTRADA =	1.047 ATM	15.39 PSIA
TEMPERATURA DE SALIDA =	416.0 K	289.4 F
W ESTIMADA =	48.8 KCAL/MONZOC	10.8 BTU/INCH <sup>2</sup> HR
AREA REQUERIDA =	74.379 M <sup>2</sup>	797.377 FT <sup>2</sup>
NUM. DE TUBOS REQUERIDOS =	120.	
NUM. DE TUBOS DISPONIBLES =	131.	
DIAMETRO DE CORAZA =	.737 M	29.00 PULG.
DIAM. DE TUBO 112 BUCI =	5.01 CM	1.5 PULG.
LONG. DE TUBO =	4.88 M	16.0 FT
MASA VELOCIDAD =	33921.37 KG/MONZ	4.77 LB/SEG <sup>WT</sup>
CAIDA DE PRESION =	.0173 ATM	.254 PSI
AZUFRE CONDENSADO =	360.8 KG/M	793.1 LB/M
TEMPERATURA DE POCIO =	486.2 K	915.8 F
VAPOR DE AGUA GENERADO A 3.7 ATM	437. KG/M	888. LB/M
AGUA ALIMENTADA	424. KG/M	935. LB/M
TEMP. DE ENTRADA DEL AGUA	350. K	170. F

CARACTERISTICAS DE LAS CORRIENTES

ENTRADA				SALIDA			
FLUJO MOLAR	FLUJO MASA (KG/HR)	ENTRADA	COMPUESTO	FLUJO MOLAR	FLUJO MASA (KG/HR)	SALIDA	ENTRADA
1.4793	.4242	50.4129	SO <sub>2</sub>	1.4793	.4259	50.4129	.5731
1.0830	.3186	65.3824	SO <sub>2</sub>	1.0830	.3118	69.3824	.7487
.0000	.0000	.0000	O <sub>2</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	CH <sub>4</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000
214.2770	67.5934	6114.7089	H <sub>2</sub>	214.2780	67.8472	6114.7149	67.5120
.0000	.0000	.0000	H <sub>2</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000
.0254	.0075	4.8846	SO <sub>2</sub>	.0296	.0028	1.8455	.0718
1.4346	.4126	365.1379	SO <sub>2</sub>	.0476	.0137	12.7013	.1387
114.0106	33.2672	2094.0498	H <sub>2</sub>	114.0108	33.4621	2090.0498	21.7597
.0000	.0000	.0000	SO <sub>2</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000
.0000	.0000	.0000	CO <sub>2</sub>	.0000	.0000	.0000	.0000
10.4071	2.9846	454.0179	CO <sub>2</sub>	10.4071	2.9846	450.0179	5.2067
347.1237	100.0000	9158.6694	100.0000	TOTAL	347.1153	100.0000	8796.6211
24.2577	KG/MOL			75.2275	KG/MOL		
213.9	C	417.0 F		343.0	C		
1.047	ATM	15.389 LB/PLG <sup>2</sup>		1.030	ATM	15.135 LB/PLG <sup>2</sup>	
492.569	KCAL/HR	1978.447 MBTU/HR		299.863	KCAL/HR	1289.936 MBTU/HR	
.000698	C/CH <sub>3</sub>	.000769 LB/PIE <sup>3</sup>		.000769	G/CH <sub>3</sub>	.007493 LB/PIE <sup>3</sup>	
.0169	CP			.0171	CP		
.4241	CAL/INCH	.0834 BTU/INCH <sup>2</sup>		.2205	CAL/INCH	.5764 BTU/INCH <sup>2</sup>	

AREA IGNORED - IN CONTROL MODE



Debido a que en el libro de proceso no se cuenta con información detallada sobre la composición de la corriente de proceso a la salida de la Caldera y de los Convertidores Catalíticos, no es posible determinar la conversión alcanzada en cada etapa, y por lo tanto, no se puede comparar con la calculada por el programa de simulación SIMCLA. Sin embargo, se cuenta con datos de la recuperación de Azufre lograda a la salida de cada condensador, la cual en cierta forma es un reflejo de la conversión. En la tabla III.4 se muestra la comparación de las recuperaciones alcanzadas en cada Condensador.

TABLA III.4  
COMPARACION DE LA RECUPERACION DE AZUFRE (Kg/h)  
(EJEMPLO # 4)

CONDENSADOR	LIBRO	TESIS	% ERROR
1°	1967	2167	10.0
2°	1162	915	-21.0
3°	330	360	9.0
TOTAL	3459	3442	-0.5

Como se puede apreciar, la recuperación global en ambos casos es muy similar (0.5% de diferencia), mientras que las recuperaciones intermedias presentan mayor discrepancia, lo cual podría deberse a una o varias de las siguientes razones:

- El Horno de Reacción no opera en forma adiabática por lo que la temperatura alcanzada es menor, trayendo como consecuencia que la conversión también lo sea.
- En la Caldera Recuperadora de Calor la temperatura de corte seleccionada para el cálculo del equilibrio de las reacciones reversibles podría ser menor.
- En el primer Convertidor (simulado a una temperatura igual que la del libro de proceso) se tiene una conversión menor que la reportada debido a que la temperatura de operación es mayor que la temperatura de rocío de la mezcla efluente.
- En el segundo Convertidor (simulado a la temperatura de rocío) la conversión alcanzada es mayor que la reportada de-

bido a que el diseño original considera una temperatura de operación mayor que la de rocío, lo que se traduce en una conversión menor.

- El método de cálculo utilizado en el diseño original de este tren de recuperación no está basado en la minimización de energía libre de Gibbs.

Por lo que respecta a las dimensiones y características de los equipos obtenidas por el programa SIMCLA, en la tabla III.5 se presenta la comparación de las mismas con las reportadas en el libro de proceso de la planta de Tula.

TABLA III.5  
COMPARACION CARACTERISTICAS DE LOS EQUIPOS  
(EJEMPLO # 4)

EQUIPO	CARACTERISTICA	LIBRO	TESIS
Cámara de Comb.	Diámetro (m)	1.21	1.48
	Longitud (m)	4.88	5.91
	Volumen (m <sup>3</sup> )	5.61	10.14
Caldera	Carga Térmica (MKcal/h)	4080.00	3460.00
1° Condensador	Carga Térmica (MKcal/h)	810.00	658.00
2° Condensador	Carga Térmica (MKcal/h)	494.00	406.00
3° Condensador	Carga Térmica (MKcal/h)	296.00	199.00

Las divergencias observadas en los valores de las variables comparadas aquí para los diferentes equipos pueden estribar en la aplicación de los criterios de diseño (no mencionados en el libro de proceso) y en los métodos de cálculo utilizados.

Cabe mencionar que las características y dimensiones de los equipos que se calculan con el programa SIMCLA son preliminares, útiles para dar una idea y capacidad de los mismos y cuyas dimensiones finales serán establecidas por el fabricante o diseñador aplicando los factores de seguridad pertinentes.

IV      CALCULO DE LA COMPOSICION DE EQUILIBRIO  
         POR EL METODO DE ENERGIA DE GIBBS

IV.A    MINIMIZACION DE ENERGIA LIBRE; SUBROUTINA MINER:

Esta subrutina tiene la función de calcular la composición de equilibrio a una temperatura y presión dadas, utilizando el método de Minimización de Energía de Gibbs<sup>9</sup>.

IV.A.1    DESARROLLO MATEMATICO:

Antes de describir el modelo matemático en el cual se basa este método, es importante hacer notar que se considera que los gases siguen un comportamiento ideal, lo cual aplicado a la simulación de plantas Claus es válido ya que éstas operan a presiones bajas.

La energía libre total de una mezcla gaseosa de  $n$  especies químicas que contiene  $x_i$  moles de la  $i$ -ésima especie puede ser expresada como<sup>9 57</sup>:

$$G(X) = \sum_{i=1}^n g_i \quad \dots \dots \dots \quad (IV.1)$$

en donde:

$X = (x_1, x_2, x_3, \dots, x_n)$ , Vector de número de moles.  
 $g_i$  = contribución de la  $i$ -ésima especie gaseosa a la Energía de Gibbs total del sistema, la cual está dada por:

$$g_i = x_i \left( c_i + \ln \frac{x_i}{\bar{x}} \right) \quad \dots \dots \dots \quad (IV.2)$$

con

$$c_i = \left[ \frac{G}{RT} \right]_i + \ln \left[ \frac{P}{1 \text{ atm}} \right] \quad \dots \dots \dots \quad (IV.3)$$

en donde:

$\left[ \frac{G}{RT} \right]_i$  = Función de Energía de Gibbs molar estándar para la  $i$ -ésima especie gaseosa a 298.15°K y 1 atm.

$x_i$  = Número de moles de la  $i$ -ésima especie gaseosa.

$\bar{x} = \sum_{i=1}^n x_i$ , Número total de moles de las especies gaseosas.

$R$  = Constante de los gases.

$P$  = Presión total del sistema, atm.

Como se puede ver, el término de función de Energía de Gibbs molar estándar es en realidad la Energía de Gibbs de la  $i$ -ésima especie dividida entre  $RT$ , siguiendo la práctica de White, Johnson y Dantzing<sup>9</sup>, para obtener un término adimensional.

La función de Energía de Gibbs molar estándar de la  $i$ -ésima especie gaseosa se calcula por medio de cualquiera de las dos siguientes ecuaciones, en el presente trabajo se utilizó la ecuación IV.5.

$$\left( \frac{G}{RT} \right)_i = \left[ \frac{\Delta H_{f, 298.15}^\circ + H_{298.15}^T}{RT} \right]_i - \left[ \frac{S^T}{R} \right]_i \quad \dots \quad (IV.4)$$

o bien:

$$\left( \frac{G}{RT} \right)_i = \frac{1}{R} \left[ \frac{G^T - H_{298.15}^T}{T} \right]_i + \left[ \frac{\Delta H_{f, 298.15}^\circ}{RT} \right]_i \quad \dots \quad (IV.5)$$

en donde:

$\Delta H_{f, 298.15}^\circ$  = Entalpía de formación estándar a 298.15°K

$$\begin{aligned}
 H_{298.15}^T &= \text{Diferencia de entalpías entre } 298.15^\circ\text{K y la} \\
 &\quad \text{temperatura } T. \\
 S^T &= \text{Entropía a la temperatura } T \text{ y } 1 \text{ atm} \\
 \frac{G_T - H_{298.15}^T}{T} &= \text{Función de Energía de Gibbs a la temperatura } T \\
 &\quad \text{y } 1 \text{ atm (tablas termodinámicas}^{65}\text{)}.
 \end{aligned}$$

La determinación de la composición de equilibrio de un sistema de reacción consiste en encontrar un conjunto de moles ( $X$ ), no negativo, que minimice la energía libre total del sistema (ec. IV.1) y que además satisfaga las restricciones del balance de masa que es está representado por:

$$\sum_{i=1}^n a_{ij} x_i = b_j \quad (j=1, 2, \dots, m) \dots \dots \dots \text{(IV.6)}$$

en donde:

$a_{ij}$  = Número de átomos del  $j$ -ésimo elemento de la  $i$ -ésima especie gaseosa.

$x_i$  = Número de moles de la  $i$ -ésima especie gaseosa.

$b_j$  = Número total de pesos atómicos del  $j$ -ésimo elemento químico de la mezcla gaseosa original.

$m$  = Número total de átomos diferentes dentro del sistema.

$n$  = Número total de especies diferentes dentro del sistema.

Para resolver este sistema de ecuaciones se recurre al método iterativo del máximo descenso, el cual se describe a continuación:

#### IV.A.2 METODO DEL MAXIMO DESCENSO:

Este método consiste en expresar la energía libre total de la mezcla en equilibrio, de composición desconocida, en términos de una mezcla de composición conocida y de incrementos desconocidos los cuales representan los cambios necesarios para llevar la composición inicial supuesta a la composición final de equilibrio<sup>9</sup>.

La ecuación de aproximación usada es una expresión cuadrática que involucra los dos primeros términos de una expansión de Taylor y que además está sujeta a las restricciones del balance de masa.

Supongase cualquier vector positivo  $V = (y_1, y_2, y_3, \dots, y_n)$  que satisfaga las restricciones del balance de masa (ec. IV.6) entonces, la energía libre total del sistema será:

$$G(V) = \sum_{i=1}^n y_i [c_i + \ln \frac{y_i}{\bar{y}}] \dots \dots \dots (IV.7)$$

en donde:

$$\bar{y} = \sum_{i=1}^n y_i \dots \dots \dots (IV.8)$$

Por otra parte, sea:

$$\Delta_i = x_i - y_i \quad \text{Y} \quad \bar{\Delta} = \bar{x} - \bar{y} \dots \dots \dots (IV.9)$$

Entonces, asumiendo que todas las  $y_i$ 's son positivas, es posible obtener una expresión de Taylor para  $V$  que nos dará una aproximación cuadrática,  $Q(X)$ , de la energía libre total del sistema en el equilibrio  $G(X)$  (ec. IV.1), de la siguiente manera:

$$Q(X) = G(V) + \sum_i \frac{\partial G}{\partial y_i} \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_i \sum_k \frac{\partial^2 G}{\partial y_i \partial y_k} \Delta_i \Delta_k \dots \dots \dots (IV.10)$$

Observese que:

$$\frac{\partial G}{\partial y_i} = c_i + \ln \frac{y_i}{\bar{y}} \dots \dots \dots (IV.11)$$

$$\frac{\partial^2 G}{\partial y_i^2} = \frac{1}{y_i} - \frac{1}{\bar{y}} \dots \dots \dots (IV.12)$$

$$\frac{\partial^2 G}{\partial y_i \partial y_k} = -\frac{1}{\bar{y}} \text{, para } i \neq k \dots \dots \dots (IV.13)$$

Sustituyendo IV.11, IV.12 y IV.13 en IV.10 se obtiene:

$$Q(X) = G(V) + \sum_i [c_i + \ln \frac{y_i}{\bar{y}}] \Delta_i + \frac{1}{2} \sum_i y_i \left( \frac{\Delta_i}{y_i} - \frac{\bar{\Delta}}{\bar{y}} \right)^2 \dots \dots \dots (IV.14)$$

De donde se observa que los términos de segundo grado de  $G(x)$  y  $Q(X)$  son positivas, lo que significa que ambas funciones son convexas.

Para encontrar la siguiente aproximación a la solución buscada se debe minimizar la función  $Q(X)$ , sujeta al balance de masa y restringiendo las  $x_i$ 's a valores positivos.

Utilizando la técnica de multiplicadores de Lagrange para tomar en cuenta las restricciones se llega finalmente a:<sup>57</sup>

$$B(X) = Q(X) + \sum_j \pi_j [b_j - \sum_i a_{ij} x_i] \dots \dots \dots (IV.15)$$

en donde:

$\pi_j$  = Multiplicadores de Lagrange.

Para minimizar la función  $B(X)$  se establece que su derivada parcial al respecto a  $x$  es igual a cero, por lo tanto, a partir de las ecuaciones IV.14 y IV.15 se tiene:

$$\frac{\partial B(X)}{\partial x_i} = [c_i + \ln \frac{y_i}{y}] + [\frac{x_i}{y_i} - \frac{\bar{x}}{y}] - \sum_{j=1}^m \pi_j a_{ij} = 0 \dots (IV.16)$$

Las ecuaciones IV.6 y IV.16, junto con la suma de las  $x_i$ 's para conocer  $\bar{x}$ , constituyen un sistema de  $m+n+1$  ecuaciones simultáneas con  $n x_i$ 's desconocidas,  $m$  multiplicadores desconocidos  $\pi_j$  y el número total de moles  $\bar{x}$  desconocido.

Despejando  $x_i$  de la ecuación IV.16 se tiene:

$$x_i = -g_i(y) + (\frac{y_i}{y}) \bar{x} + y_i (\sum_{j=1}^m \pi_j a_{ij}) \dots \dots \dots (IV.17)$$

donde:

$$g_i(y) = y_i [c_i + \ln \frac{y_i}{y}] \dots \dots \dots (IV.18)$$

Sumando la ecuación IV.17 para todas las  $i$ 's, tenemos:

$$\sum_{i=1}^n x_i = \sum_{i=1}^n -g_i(y) + \sum_{i=1}^n (\frac{y_i}{y}) \bar{x} + (\sum_{j=1}^m \pi_j \sum_{i=1}^n a_{ij} y_i)$$

rearrreglando

$$\sum_{j=1}^m \pi_j \sum_{i=1}^n a_{ij} y_i = \sum_{i=1}^n g_i(y) \dots \dots \dots (IV.19)$$

o bien 
$$\sum_{j=1}^m \pi_j b_j = \sum_{i=1}^n g_i(y)$$

Ahora, definiendo las constantes:

$$r_{jk} = r_{kj} = \sum_{i=1}^n (a_{ij} a_{ik}) y_i, \quad j, k=1, 2, \dots, m \quad \text{(IV.20)}$$

Por último, sustituyendo la ecuación IV.17 en IV.6 se obtiene un conjunto de  $m$  ecuaciones, que junto con la ecuación IV.19 forman el siguiente sistema de  $m+1$  ecuaciones simultáneas simétricas:

$$\begin{aligned} r_{11}\pi_1 + r_{12}\pi_2 + \dots + r_{1m}\pi_m + b_1 \left(\frac{\bar{x}}{\bar{y}}\right) &= b_1 + \sum_{i=1}^n a_{i1} g_i(y) \\ r_{21}\pi_1 + r_{22}\pi_2 + \dots + r_{2m}\pi_m + b_2 \left(\frac{\bar{x}}{\bar{y}}\right) &= b_2 + \sum_{i=1}^n a_{i2} g_i(y) \\ \cdot & \\ \cdot & \\ r_{m1}\pi_1 + r_{m2}\pi_2 + \dots + r_{mm}\pi_m + b_m \left(\frac{\bar{x}}{\bar{y}}\right) &= b_m + \sum_{i=1}^n a_{im} g_i(y) \\ b_1\pi_1 + b_2\pi_2 + \dots + b_m\pi_m + 0 \cdot \left(\frac{\bar{x}}{\bar{y}}\right) &= \sum_{i=1}^n g_i(y) \end{aligned} \quad \text{(IV.21)}$$

en donde:

$$\sum_{i=1}^n a_{ij} y_i = b_j \quad \dots \quad \text{(IV.6)}$$

con  $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_m$  y  $\bar{x}/\bar{y}$  como variables.

La solución de este sistema de ecuaciones simultáneas nos dará los valores de las  $b_j$ 's,  $r_{jk}$ 's y  $\bar{x}/\bar{y}$  por lo que será necesario sustituir estos valores en la ecuación IV.17 para obtener los nuevos valores de las  $x_i$ 's. De esta forma se ha encontrado el nuevo conjunto  $X$  que representa la nueva aproximación a la composición de equilibrio. El procedimiento se repite utilizando los valores de las  $x_i$ 's calculadas como los nuevos valores de las  $y_i$ 's supuestas hasta que la diferencia entre iteraciones subsecuentes sea suficientemente pequeña para satisfacer un criterio de convergencia.

Es posible que el conjunto de número de moles computado incluya algún valor negativo, si esto sucede, este conjunto de valores no es usado directamente en el cálculo de la siguiente aproximación, ya



que si se permiten números negativos dentro de las iteraciones la solución final podría incluir algunos valores negativos que no tienen ningún significado para el balance de masa.

Para eliminar la posibilidad de tener  $x_i$ 's negativas y asegurar una buena convergencia se incluye el siguiente método para corregir las aproximaciones a la composición de equilibrio.

Este método consiste en considerar los resultados de las diferencias  $\Delta_i = x_i - y_i$  como indicadores de la dirección de descenso y limitar los incrementos a una cantidad fraccional  $\lambda \Delta_i$ , utilizando para ello el mayor valor de  $\lambda$  que satisfaga las siguientes condiciones<sup>57</sup>:

- Todos los números de moles son positivos, es decir  $\frac{\partial G(\lambda)}{\partial \lambda}$  está definida.
- La derivada direccional  $\frac{\partial G(\lambda)}{\partial \lambda}$  no se hace positiva, es decir el punto mínimo no ha sido rebasado.  $G(\lambda)$  es una función convexa, cuya derivada es:

$$\frac{\partial G(\lambda)}{\partial \lambda} = \sum_{i=1}^N \Delta_i \left[ c_i + \ln \frac{y_i'}{y_i} \right] \quad \dots \quad \text{(IV.22)}$$

en donde:

$$y_i' = y_i + \lambda(x_i - y_i) \quad \dots \quad \text{(IV.23)}$$

$$\bar{y} = \sum_{i=1}^N y_i' = \bar{y} + \lambda(\bar{x} - \bar{y}) \quad \dots \quad \text{(IV.24)}$$

$y_i'$  = Valores de aproximación corregidos.

El método para seleccionar  $\lambda$  es arbitrario dentro de ciertos límites y su valor deberá estar comprendido en el intervalo de cero a uno. Un método consiste en calcular a partir de las diferencias  $x_i - y_i$  que tengan un valor negativo un conjunto de  $\lambda'_i$  de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$\lambda = \frac{-0.99 * y_i}{x_i - y_i} \quad \dots \quad \text{(IV.25)}$$

De este conjunto de  $\lambda'_i$  se selecciona la mayor para ser usada como factor de corrección, con lo cual generalmente el término logarítmico de la ecuación IV.22 es mayor de cero. Sin embargo, en el

caso de que, por algún motivo, éste sea menor o igual a cero, el factor  $\lambda$  se va disminuyendo por un factor de 0.9 hasta lograr que todos los números de moles corregidos ( $y'_i$ ) sean mayores a cero.

Una vez logrado lo anterior, se procede a evaluar la derivada direccional de la función que está representada por la ecuación IV.22, en el caso de que el resultado de esta ecuación sea menor que cero, es decir, que el punto mínimo no ha sido revasado, se utilizan las aproximaciones corregidas (de acuerdo a la ec. IV.23) como nuevas suposiciones en el siguiente cálculo iterativo. Por otra parte, cuando la derivada direccional tiene un valor positivo, es decir que se ha revasado el punto mínimo, se procede a reducir el factor correctivo  $\lambda$  hasta lograr que esta derivada tenga un valor negativo o cero para después utilizar la  $\lambda$  que satisfaga esta restricción como factor correctivo de las composiciones de aproximación al equilibrio.

Durante las corridas de prueba se observó que en algunas ocasiones la derivada direccional alcanzaba valores positivos muy cercanos a cero (del orden de  $5 \times 10^{-5}$ ) y que por más pequeña que se hiciera la  $\lambda$  no era posible conseguir un valor negativo de esta función. Basandose en el hecho de que la derivada direccional representa la pendiente de la función en un punto dado y en que, cuando el valor de esta pendiente es cero se tiene el punto mínimo (notese que la única forma de que la ecuación IV.22 sea igual a cero, es cuando  $\Delta_i$  es igual a cero, es decir, cuando  $x_i = y_i$ ), se decidió que cuando la derivada direccional tuviera un valor absoluto menor o igual a  $1 \times 10^{-4}$  se había encontrado el punto mínimo de la función, reportandose como composición de equilibrio los últimos valores de las composiciones de aproximación corregidas, así como el valor de la derivada direccional, la cual nos dará la desviación que existe del punto mínimo de la función.

Es importante hacer notar que el tipo de problemas descrito antes se presenta principalmente cuando existen especies químicas cuyas composiciones en el equilibrio son, o están muy cercanas a cero, por lo que, cuando se tenga la sospecha de que alguna especie no

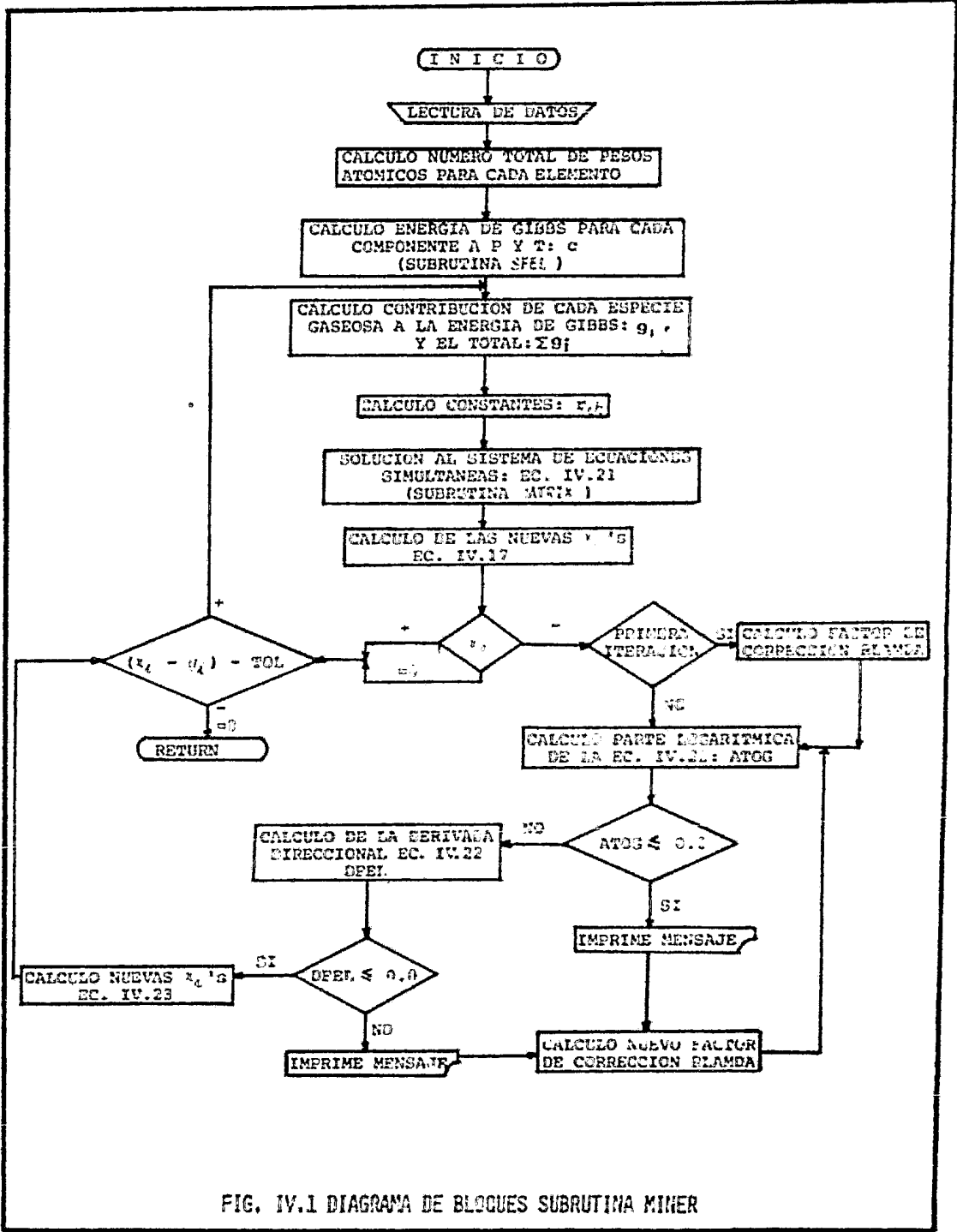


FIG. IV.1 DIAGRAMA DE BLOQUES SUBROUTINA MINER

existe en el equilibrio será mejor eliminarla del cálculo para evitar problemas de convergencia. Cuando el programa ha alcanzado el número máximo de iteraciones asignadas (NTI) y no se ha podido alcanzar la convergencia, se imprime un mensaje en donde se explica la razón por la cual no convergió y el número indicador de la especie que está causando problemas, los tipos de mensaje que pueden ser impresos son:

- CONVERGENCIA ERRONEA NIVEL ATOG = - .0001 8

Lo que significa que el término logarítmico de la ecuación IV.22 tiene un valor de  $-0.0001$  y que la especie gaseosa causante de esto es la número 8, es decir el  $S_8$ .

- CONVERGENCIA ERRONEA NIVEL DFEL = .00006

Lo que significa que la derivada direccional tiene un valor de  $0.00006$ , en este caso no se imprime el número identificador de la especie gaseosa ya que el valor de esta ecuación es el resultado de sumar las contribuciones de todas las especies. Para localizar la o las especies que causan el problema será necesario utilizar la opción  $IRAST=1$  con el objeto de tener una impresión de resultados parciales y poder detectar las especies que persisten en hacerse negativas y eliminarlas del cálculo (para mayor información sobre esta opción referirse al apéndice A.2).

En la figura IV.1 se presenta el diagrama de flujo simplificado del método de Minimización de Energía de Gibbs. Como se puede observar, el programa MINER consta de cinco partes principales que son: recepción de datos, establecimiento del sistema de  $m+n$  ecuaciones simultáneas, solución del sistema de ecuaciones por el método de eliminación Gaussiana (Subrutina Matrix), cálculo de la nueva composición y finalmente una prueba de convergencia para cada una de las  $x_i$ 's calculadas.

IV.B SOLUCION DEL SISTEMA DE ECUACIONES SIMULTANEAS POR EL METODO DE ELIMINACION GAUSSIANA; SUBROUTINA MATRIX

Esta subrutina tiene la finalidad de resolver el sistema de  $m + 1$  ecuaciones simultáneas que se forma en el procedimiento de minimización de Energía de Gibbs (ec. IV.21). El método que utiliza esta subrutina para resolver este sistema de ecuaciones se basa en el método de eliminación Gaussiana, que se describe a continuación <sup>87</sup> :

Considerese el siguiente sistema general de tres ecuaciones lineales simultáneas:

$$b_{11}x_1 + b_{12}x_2 + b_{13}x_3 = u_1 \dots \dots \dots \text{(IV.26)}$$

$$b_{21}x_1 + b_{22}x_2 + b_{23}x_3 = u_2 \dots \dots \dots \text{(IV.27)}$$

$$b_{31}x_1 + b_{32}x_2 + b_{33}x_3 = u_3 \dots \dots \dots \text{(IV.28)}$$

El primer paso de la eliminación Gaussiana consiste en reemplazar la ecuación IV.27 por el resultado de sumar ésta a la ecuación IV.26, previamente multiplicada por  $-b_{21}/b_{11}$ , siempre y cuando  $b_{11}$  sea diferente de cero, esto es:

$$\begin{array}{r}
 + \quad - \frac{b_{21}b_{11}}{b_{11}}x_1 - \frac{b_{21}b_{12}}{b_{11}}x_2 - \frac{b_{21}b_{13}}{b_{11}}x_3 = - \frac{b_{21}}{b_{11}}u_1 \\
 \hline
 \quad \quad \quad b_{21}x_1 + \quad b_{22}x_2 + \quad b_{23}x_3 = \quad u_2 \\
 \hline
 0 + x_2(b_{22} - \frac{b_{21}b_{12}}{b_{11}}) + x_3(b_{23} - \frac{b_{21}b_{13}}{b_{11}}) = u_2 - \frac{b_{21}}{b_{11}}u_1
 \end{array}$$

si, definimos:

$$b'_{22} = b_{22} - \frac{b_{21}b_{12}}{b_{11}}$$

$$b'_{23} = b_{23} - \frac{b_{21}b_{13}}{b_{11}}$$

$$u'_2 = u_2 - \frac{b_{21}}{b_{11}}u_1$$

El sistema de ecuaciones quedaría:

$$b_{11}x_1 + b_{12}x_2 + b_{13}x_3 = u_1 \dots \dots \dots \text{(IV.26)}$$

$$b'_{22}x_2 + b'_{23}x_3 = u'_2 \dots \dots \dots \text{(IV.29)}$$

$$b_{31}x_1 + b_{32}x_2 + b_{33}x_3 = u_3 \dots \dots \dots \text{(IV.28)}$$

El siguiente paso consiste en reemplazar la ecuación IV.28 por el resultado de sumar ésta a la ecuación IV.26, previamente multiplicada por el término  $-b_{31}/b_{11}$ , siempre y cuando  $b_{11}$  sea diferente de cero, de esta forma tenemos:

$$b_{11}x_1 + b_{12}x_2 + b_{13}x_3 = u_1 \dots \dots \dots \text{(IV.26)}$$

$$b'_{22}x_2 + b'_{23}x_3 = u'_2 \dots \dots \dots \text{(IV.29)}$$

$$b''_{32}x_2 + b''_{33}x_3 = u''_3 \dots \dots \dots \text{(IV.30)}$$

en donde:

$$b'_{32} = b_{32} - \frac{b_{31}b_{12}}{b_{11}}$$

$$b'_{33} = b_{33} - \frac{b_{31}b_{13}}{b_{11}}$$

$$u'_3 = u_3 - \frac{b_{31}u_1}{b_{11}}$$

Finalmente, se sustituye la ecuación IV.30 por el resultado de sumar ésta a la ecuación IV.29, la cual ha sido multiplicada previamente por  $-b_{32}/b'_{22}$ , dando como resultado el siguiente sistema triangular:

$$b_{11}x_1 + b_{12}x_2 + b_{13}x_3 = u_1 \dots \dots \dots \text{(IV.26)}$$

$$b'_{22}x_2 + b'_{23}x_3 = u'_2 \dots \dots \dots \text{(IV.29)}$$

$$b''_{33}x_3 = u''_3 \dots \dots \dots \text{(IV.31)}$$

en donde:

$$b''_{33} = b'_{33} - \frac{b'_{32}b'_{23}}{b'_{22}}$$

$$u''_3 = u'_3 - \frac{b'_{32}u'_2}{b'_{22}}$$

Una vez encontrado este sistema triangular se procede a resolverlo mediante un proceso de sustitución hacia atrás, esto es,  $x_3$  se obtiene a partir de la ecuación IV.31, para después calcular  $x_2$  de la ecuación IV.29 y por último, conociendo  $x_3$  y  $x_2$  calcular  $x_1$  a partir de la ecuación IV.26.

A partir del método original de eliminación de Gauss, se han desarrollado otros métodos, como lo es la eliminación de Gauss-Jordan, en el cual las operaciones aritméticas involucradas pueden ser divididas en dos tipos:<sup>87</sup> (a) Pasos de Normalización.- en los

cuales los elementos de la diagonal se convierten en la unidad, y (b) *Pasos de Reducción*.- en los cuales los elementos fuera de la diagonal son convertidos en cero.

Con el objeto de que haya un mejor entendimiento, a continuación se describe paso a paso la solución de un sistema de ecuaciones simultáneas utilizando el método de Gauss-Jordan, en el cual se ilustra el efecto de una substitución hacia atrás simultáneamente con la reducción de los elementos fuera de la diagonal.

Considerese el siguiente sistema de ecuaciones simultáneas:

$$\begin{aligned}x_2 + x_3 &= 5 \\2x_1 - x_2 + x_3 &= -1 \\x_1 + x_2 - 2x_3 &= -3\end{aligned}$$

Paso 1: Escriba la matriz aumentada del conjunto de vectores:

$$\begin{array}{cccc}0 & 1 & 1 & 5 \\-2 & -1 & 1 & -1 \\1 & 1 & -2 & -3\end{array}$$

Paso 2: Localice a lo largo de la primera columna el número mayor en valor absoluto, el cual se conoce con el nombre de pivote. Divida entre el pivote todos los elementos del renglón en donde fue encontrado éste:

$$\begin{array}{cccc}0 & 1 & 1 & 5 \\1 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\1 & 1 & -2 & -3\end{array}$$

Paso 3: Multiplique el renglón en donde fue encontrado el pivote por un número tal que al sumar este renglón a otro aparezca un cero en la columna 1. Esto se realiza repetidamente hasta que toda la columna 1 contenga ceros, excepto para el renglón del pivote. En este caso, como el renglón 1 ya contiene cero en la columna 1, multiplicamos el renglón 2 por -1 y lo sumamos al renglón 3:

$$\begin{array}{cccc} 0 & 1 & 1 & 5 \\ 1 & \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{2} & -\frac{3}{2} & -\frac{7}{2} \end{array}$$

Paso 4: Repita el mismo procedimiento para los valores de la columna 2. Sin embargo, los valores de los renglones seleccionados previamente (renglón 2) no son elegibles. Debido a que el renglón 1 tiene el valor mayor de la columna, este renglón es usado para eliminar los  $\frac{1}{2}$ 's de los renglones 2 y 3:

$$\begin{array}{cccc} 0 & 1 & 1 & 5 \\ 1 & 0 & -1 & -2 \\ 0 & 0 & -2 & -6 \end{array}$$

Paso 5: Repita el mismo procedimiento para todas las columnas menos para la última. En nuestro caso:

$$\begin{array}{cccc} 0 & 1 & 0 & 2 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 3 \end{array}$$

Paso 6: Rearregle los renglones de tal forma que se obtenga la matriz identidad del sistema. Entonces, los valores del lado derecho nos darán la solución:

$$\begin{array}{cccc} 1 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 2 \\ 0 & 0 & 1 & 3 \end{array}$$

de donde:

$$x_1 = 1, x_2 = 2 \text{ y } x_3 = 3$$

En base al método de eliminación Gaussiana y sus diferentes modalidades se han desarrollado muchos programas paquetes de computadora con los cuales se puede resolver cualquier sistema de ecuaciones lineales simultáneas. La subrutina MATRIX presentada en el presente trabajo fue tomada del libro "MATERIAL AND ENERGY BALANCE COMPUTATIONS"<sup>17</sup>



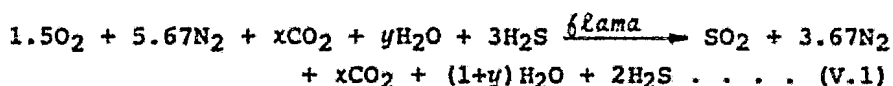
## V HORNO CALDERA DE REACCION

### V.A HORNO DE REACCION:

Cualquiera que sea la configuración seleccionada para el proceso Claus-Modificado, los dos primeros equipos que se encuentran en el tren de recuperación de Azufre son el Horno de reacción de flama directa y la Caldera Recuperadora de Calor, los cuales, frecuentemente están combinados en un solo recipiente llamado Horno-Caldera de Reacción.

Las funciones del Horno-Caldera de Reacción son<sup>3 5 24 30 51 70 74</sup>:

- Quemar, en presencia de aire, un tercio del H<sub>2</sub>S alimentado para producir SO<sub>2</sub> de acuerdo con la siguiente reacción:



- Destruir los contaminantes de la corriente de entrada.
- Producir Azufre elemental (en el caso de flujo directo) , por una oxidación parcial del H<sub>2</sub>S
- Recuperar el calor producido por las reacciones de oxidación, mediante la producción de vapor de alta presión.

### V.A.1 QUIMICA DEL HORNO DE REACCION:

Durante la combustión, la temperatura que se alcanza dentro de la cámara de reacción del Horno depende de la composición y tipo de los componentes del gas ácido, tales como  $\text{CO}_2$ , Agua, Hidrocarburos y residuos de agentes de endulzamiento. Obviamente, los hidrocarburos tienden a incrementar la temperatura, mientras que los inertes la decrecen por un simple efecto de dilución. El rango de temperaturas de operación reportado está entre  $760$  y  $1538^\circ\text{C}$  ( $1400$  y  $2800^\circ\text{F}$ ); las temperaturas menores se obtienen en plantas con alimentación pobre de  $\text{H}_2\text{S}$ . Sin embargo, la mayoría de las plantas operan entre  $927$  y  $1205^\circ\text{C}$  ( $1700$  y  $2200^\circ\text{F}$ )<sup>5 17 26 54 72</sup> ;

Las reacciones básicas que ocurren en el Horno de Reacción se presentan en la tabla V.1. Las tres primeras son conocidas como reacciones Claus y Claus-Modificado. Las siguientes cuatro muestran las reacciones adicionales que pueden ocurrir, mientras que las dos últimas muestran la combustión de algunos hidrocarburos contaminantes que se encuentran frecuentemente en el gas ácido<sup>5 32 43 50</sup> .

Se ha dicho que la complejidad de las reacciones en el Horno es mucho mayor de la que muestran las reacciones de la tabla V.1<sup>5</sup>. Realmente es muy probable que exista una gran cantidad de radicales libres como intermediarios. Sin embargo, para aplicaciones prácticas las reacciones mostradas en esta tabla son suficientes.

El mayor fracaso de las reacciones enlistadas es que no demuestran las cantidades de  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{COS}$  y  $\text{CS}_2$  observadas en las plantas de Azufre en operación. Las tablas V.2, V.3 y V.4 muestran varias de las posibles reacciones laterales sugeridas para explicar la aparición de estos compuestos<sup>5 43 50</sup> . El análisis de estas reacciones, muestra que el sistema de reacción para el gas ácido es demasiado complejo.

### V.A.2 MEDICIONES DE CAMPO:

Las figuras V.1 a V.4 muestran las cantidades de  $\text{H}_2$ ,  $\text{CO}$ ,  $\text{COS}$  y  $\text{CS}_2$  medidas en la corriente de salida de la Caldera de recupera-

TABLA V.1

QUIMICA DEL HORNO  
REACCIONES PRINCIPALES

	$\Delta F^*$ 2200°F	$\Delta H^{**}$ 2200°F
	(Kcal)	
$3H_2S + \frac{3}{2}O_2 \longrightarrow SO_2 + H_2O + 2H_2S$	-96.2	-124.5
$2H_2S + SO_2 \longrightarrow \frac{3}{2}S_2 + 2H_2O$	-10.1	9.9
$3H_2S + \frac{3}{2}O_2 \longrightarrow \frac{3}{2}S_2 + 3H_2O$	-106.3	-114.6
$H_2S + \frac{1}{2}O_2 \longrightarrow H_2O + S$	-4.8	13.8
$S + O_2 \longrightarrow SO_2$	-91.4	-138.5
$2S \longrightarrow S_2$	-61.3	-104.2
$S_2 + 2O_2 \longrightarrow 2SO_2$	-121.5	-172.8
$CH_4 + 2O_2 \longrightarrow CO_2 + 2H_2O$	-191.0	-192.2
$C_2H_6 + \frac{7}{2}O_2 \longrightarrow 2CO_2 + 3H_2O$	-359.0	-342.8

---

\* El signo negativo en el cambio de energía libre de Gibbs indica reacción espontánea

\*\* El signo negativo en el calor de reacción indica reacción exotérmica.

TABLA V.2

QUIMICA DEL HORNO  
REACCIONES COLATERALES (PARA CO Y H<sub>2</sub>)

	ΔF* 2200°F (Kcal)	ΔH** 2200°F
FORMACION:		
CH <sub>4</sub> + $\frac{3}{2}$ O <sub>2</sub> → CO + 2H <sub>2</sub> O	-154.2	-125.2
CH <sub>4</sub> + O <sub>2</sub> → CO + H <sub>2</sub> O + H <sub>2</sub>	-114.6	-65.4
CH <sub>4</sub> + 2H <sub>2</sub> O → CO <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub>	-32.7	47.0
H <sub>2</sub> + CO <sub>2</sub> → CO + H <sub>2</sub> O	-2.7	7.6
	3000°F	3000°F
CO <sub>2</sub> + H <sub>2</sub> S → CO + H <sub>2</sub> O + $\frac{1}{2}$ S <sub>2</sub>	-6.6	27.5
2CO <sub>2</sub> + H <sub>2</sub> S → 2CO + H <sub>2</sub> + SO <sub>2</sub>	1.8	68.3
H <sub>2</sub> S → $\frac{1}{2}$ S <sub>2</sub> + H <sub>2</sub>	-1.0	21.4
CONSUMO:		
2CO + O <sub>2</sub> → 2CO <sub>2</sub>	2200°F -73.8	2200°F -134.1
4CO + 2SO <sub>2</sub> → 4CO <sub>2</sub> + S <sub>2</sub>	-26.2	-95.4
H <sub>2</sub> + $\frac{1}{2}$ O <sub>2</sub> → H <sub>2</sub> O	-39.6	-59.8
H <sub>2</sub> + $\frac{1}{2}$ S <sub>2</sub> → H <sub>2</sub> S	-4.2	-21.4

\* El signo negativo en el cambio de energía libre de Gibbs indica reacción espontánea

\*\* El signo negativo en el calor de reacción indica reacción exotérmica.

TABLA V.3  
QUIMICA DEL HORNO  
REACCIONES COLATERALES (PARA COS)

	$\Delta F^*$ 2200°F (Kcal)	$\Delta H^{**}$ 2200°F (Kcal)
FORMACION:		
$2CH_4 + 3SO_2 \longrightarrow 2COS + \frac{1}{2}S_2 + 4H_2O$	-114.0	-32.6
$2CO_2 + 3S \longrightarrow 2COS + SO_2$	-66.7	-150.0
$CS_2 + CO_2 \longrightarrow 2COS$	-3.8	0.7
$2S + 2CO_2 \longrightarrow COS + CO + SO_2$	-42.1	-77.2
$CO + S \longrightarrow COS$	-24.6	-72.8
$CH_4 + SO_2 \longrightarrow COS + H_2O + H_2$	-47.8	0.3
$CS_2 + H_2O \longrightarrow COS + H_2S$	-11.4	-7.4
CONSUMO:		
$COS + H_2O \longrightarrow H_2S + CO_2$	-7.6	-8.1
$2COS + SO_2 \longrightarrow \frac{3}{2}S_2 + 2CO_2$	-25.2	-6.3
$COS + CO + SO_2 \longrightarrow S_2 + 2CO_2$	-19.2	-27.0
$COS + H_2 \longrightarrow CO + H_2S$	-10.3	-0.9
$COS + \frac{3}{2}O_2 \longrightarrow CO_2 + SO_2$	-103.7	-132.7
$COS \longrightarrow CO + \frac{1}{2}S_2$	-6.1	20.7

\* El signo negativo en el cambio de energía libre de Gibbs indica reacción espontánea.

\*\* El signo negativo en el calor de reacción indica reacción exotérmica.

TABLA V.4

QUIMICA DEL HORNO  
REACCIONES COLATERALES (PARA CS<sub>2</sub>)

	ΔF* 2200°F (Kcal)	ΔH** 2200°F (Kcal)
FORMACION		
C + 2S → CS <sub>2</sub>	-66.1	-106.7
CH <sub>4</sub> + 2H <sub>2</sub> S → CS <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub>	-13.7	62.5
CH <sub>4</sub> + 4S → CS <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> S	-153.0	-232.1
CH <sub>4</sub> + 2S <sub>2</sub> → CS <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> S	-30.5	-23.8
CO <sub>2</sub> + 3S <sub>2</sub> → CS <sub>2</sub> + SO <sub>2</sub>	-62.8	-150.6
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub> + $\frac{7}{2}$ S <sub>2</sub> → 2CS <sub>2</sub> + 3H <sub>2</sub> S	-73.3	-44.1
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub> + 5S <sub>2</sub> → 3CS <sub>2</sub> + 4H <sub>2</sub> S	-113.7	-62.9
CONSUMO:		
CS <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> O → CO <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> S	-19.0	-15.5
CS <sub>2</sub> + 2H <sub>2</sub> O → 2SO <sub>2</sub> + CH <sub>4</sub>	-101.6	-62.2
CS <sub>2</sub> + SO <sub>2</sub> → CO <sub>2</sub> + $\frac{3}{2}$ S <sub>2</sub>	-29.0	-5.6
CS <sub>2</sub> + CO <sub>2</sub> → 2CO + S	-15.9	42.1

\* El signo negativo en el cambio de energía libre de Gibbs indica reacción espontánea.

\*\* El signo negativo en el calor de reacción indica reacción exotérmica.

ción de calor para diferentes plantas. Los datos fueron acumulados durante los últimos nueve años de 53 trenes de recuperación de Azufre y representan el rango completo de operación del Horno de reacción<sup>44</sup>. Con el objeto de poner las escalas razonables y poner todas las plantas en una base común, todos los componentes son expresados como relaciones molares con los componentes del gas de entrada.

Estas curvas de equilibrio fueron hechas, por simplicidad, asumiendo temperaturas constantes y congelando todas las demás reacciones después de quemar un tercio del  $H_2S$  a  $SO_2$  y  $H_2O$  con aire. Se asumió un comportamiento ideal, por lo tanto, las curvas solo son aproximaciones ya que las demás reacciones podrían ocurrir y la temperatura podría no ser constante<sup>44</sup>.

Las grandes cantidades de  $H_2$  y  $CO$  graficadas en las figuras V.1 y V.2 muestran claramente que estos componentes se originan principalmente a partir del  $H_2S$  y  $CO_2$ <sup>44</sup>, lo que está de acuerdo con lo mostrado en la tabla V.2. Las curvas de equilibrio trazadas en estas figuras muestran que, mientras una simple disociación de  $H_2S$  es suficiente para explicar la producción de  $H_2$ , la producción de  $CO$  no puede ser atribuida completamente a la disociación del  $CO_2$ . Aún asumiendo una temperatura de hasta  $3000^\circ F$ , la mayoría de los niveles de  $CO$  medidos están arriba de la curva de disociación del  $CO_2$ . Por otro lado, la reacción sugerida entre el  $CO_2$  y  $H_2S$  podría explicar la producción de  $CO$  pero no completamente la de  $H_2$ <sup>44,45</sup>.

Estas curvas fueron incluidas solo para propósitos ilustrativos: Muestran que no solo se deberán anticipar niveles de concentración de  $H_2$  y  $CO$ , sino también que los niveles observados no son tan altos como podrían ser. Esto implica posibles limitaciones cinéticas o cualquier reacción reversible producida a través del recuperador de calor.

Puesto que el  $H_2$  y el  $CO$  no contienen Azufre son considerados de interés pero no de importancia. Su presencia, sin embargo, produ

FIG. V-1 PRODUCCION DE H<sub>2</sub> EN EL HORNO

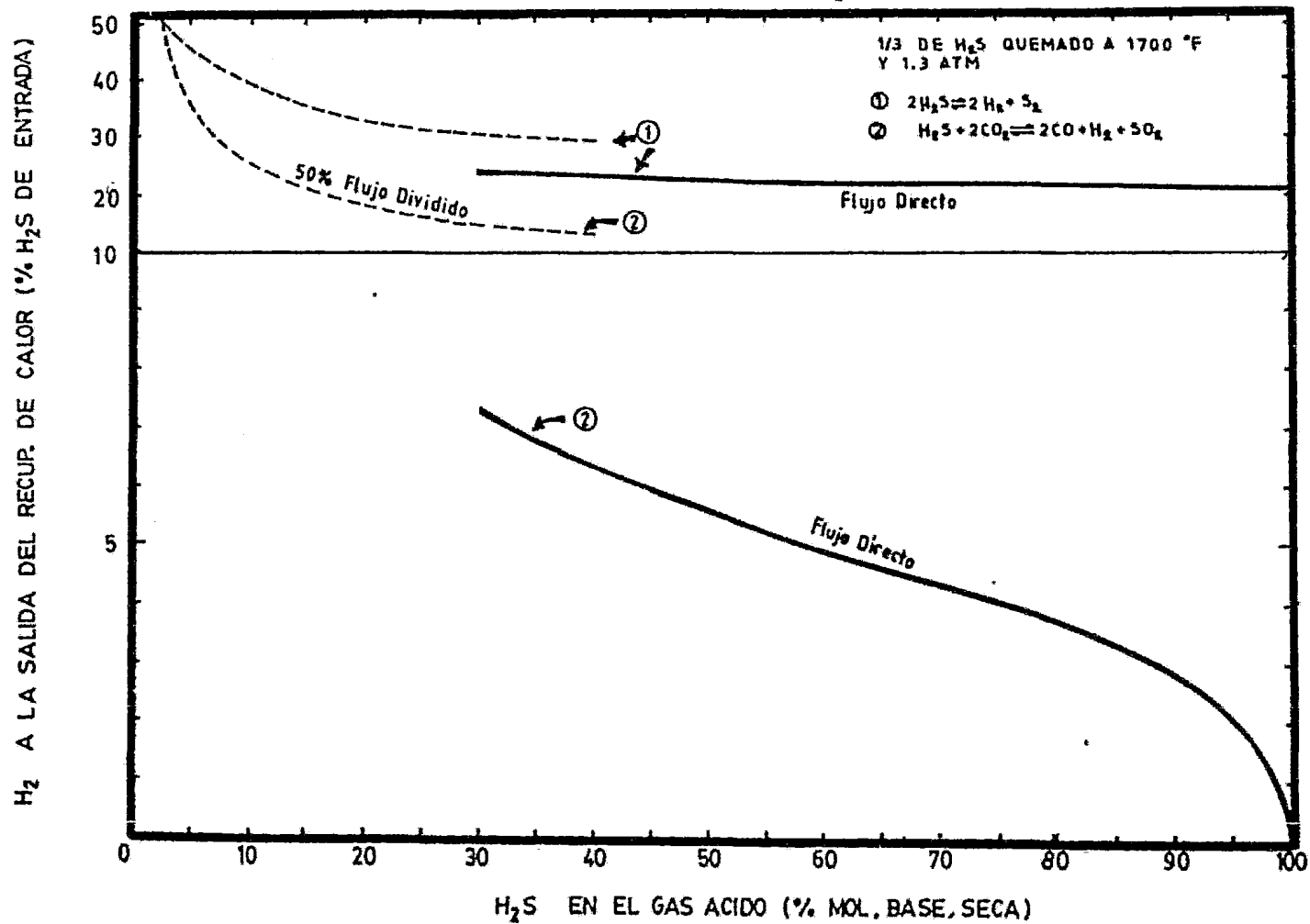




FIG. V-2 PRODUCCION DE CO EN EL HORNO

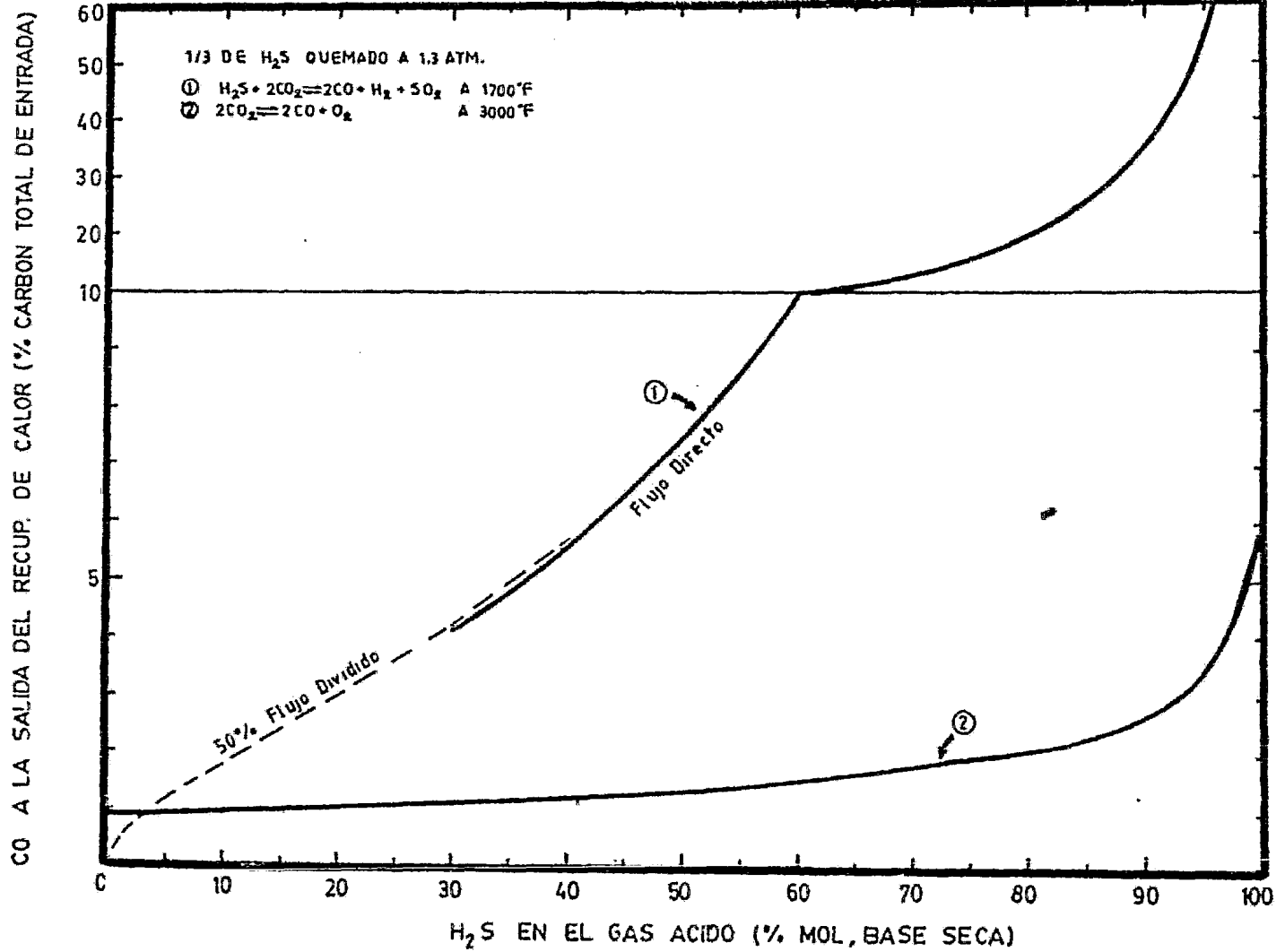


FIG. V-3 PRODUCCION DE COS EN EL HORNO

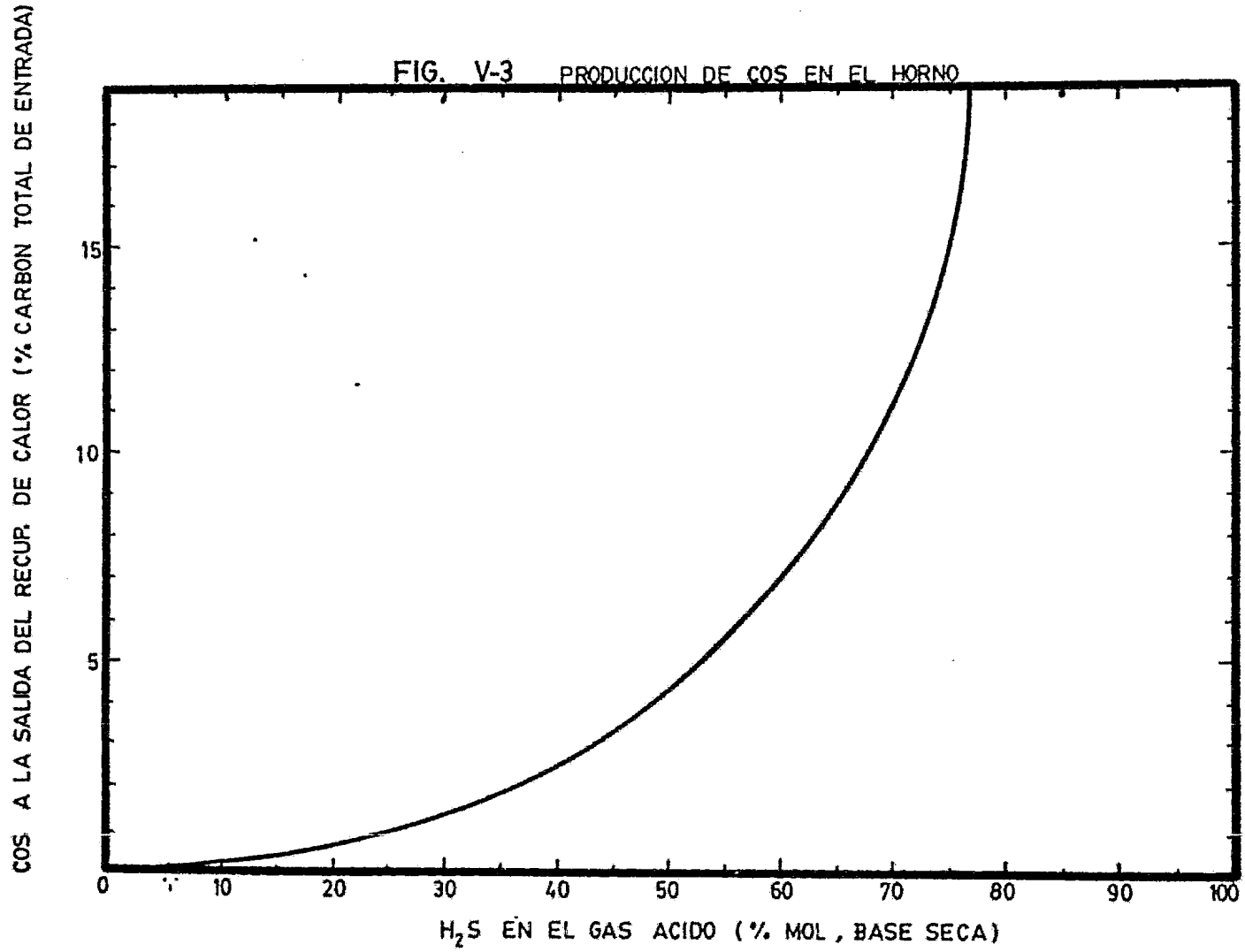
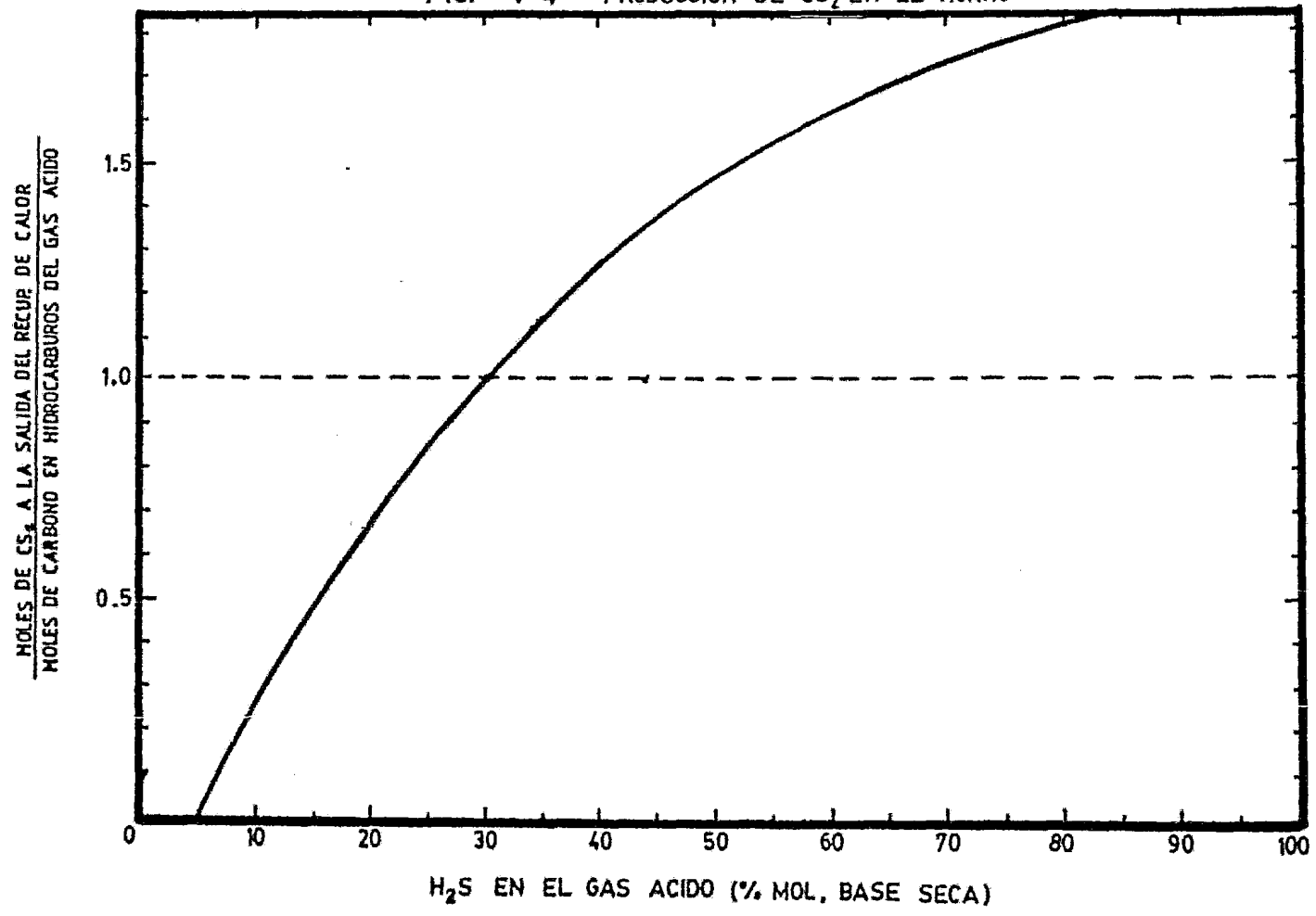


FIG. V-4 PRODUCCION DE CS<sub>2</sub> EN EL HORNO



ce efectos que deben ser considerados por el diseñador en los cálculos precisos de las temperaturas de flama, balances de materia y energía y en la cantidad correcta de aire de reacción. En los Convertidores Catalíticos y en los Condensadores, tanto el  $H_2$  como el  $CO$  se comportan como componentes químicamente inertes, como lo son el  $N_2$  y el  $Ar$ <sup>48</sup>. Sin embargo, hay evidencias de que en el Horno de Reacción el  $CO$  reacciona con el Azufre elemental para formar  $COS$ , tal como se muestra en la tabla V.3<sup>28 42 46 50 70</sup>; Altos niveles de  $COS$  se presentan al mismo tiempo que niveles altos de  $CO$ .

Puesto que el  $CS_2$  se produce comercialmente por la reacción del Azufre elemental con hidrocarburos saturados, la producción de este compuesto en el Horno de Reacción se atribuye a la presencia de hidrocarburos en el gas ácido<sup>5 28 42 70</sup>. Sin embargo, las condiciones termodinámicas existentes -como lo son la alta temperatura y la abundancia de agua- favorecen la hidrólisis del  $CS_2$ , de tal forma que si se tiene el suficiente tiempo para que se alcance el equilibrio, la hidrólisis se completará esencialmente y por lo tanto la cantidad de  $CS_2$  en la corriente de salida del recuperador de calor será despreciable.

Los datos de la figura V.4 son interpretados tomando en cuenta lo anterior. Las mediciones de los niveles de  $CS_2$  rara vez exceden los niveles esperados a partir del contenido de hidrocarburos en la corriente de gas ácido; la mayoría de las veces son menores, lo cual es consistente con el favorecimiento de la reacción de hidrólisis. De cualquier modo, los datos son igualmente consistentes con el retardo en la producción de  $CS_2$  a partir de otras interacciones posibles de compuestos de Carbono y Azufre. Por otro lado, el hecho de que el Disulfuro de Carbono esté presente en los efluentes del recuperador de calor indica que las reacciones están limitadas cinéticamente en la mayoría de los hornos<sup>24 42</sup>.

Los contenidos de Azufre en forma de  $COS$  y  $CS_2$  son de gran interés ya que estos compuestos constituyen una de las principales pérdidas de Azufre en los gases de salida de la planta. En los efluentes del recuperador de calor para la mayoría de los casos se han medido de

0.5 a 2% del Azufre total de entrada en forma de  $CS_2$ , teniéndose un intervalo similar para el caso del COS. Sin embargo, en algunas ocasiones, se han medido hasta 8% del azufre total de entrada en forma de  $CS_2$  y hasta 4.5% como COS, por lo tanto, es imperativo que estos compuestos sean hidrolizados en el primer Convertidor Catalítico para evitar grandes pérdidas de Azufre<sup>24 4243 46 74</sup>.

### V.A.3 CONDICIONES DE OPERACION:

La temperatura mínima para una operación efectiva del Horno de Reacción es de aproximadamente  $927^\circ C$  ( $1700^\circ F$ )<sup>5172428 63</sup>, abajo de esta temperatura la estabilidad de la flama es mala y frecuentemente aparece Oxígeno libre a la salida del recuperador de calor, lo que indica una velocidad de reacción baja. Para gases ácidos con concentraciones de Acido Sulfhídrico mayores de 50% se alcanzan temperaturas mayores de  $1700^\circ F$  utilizando flujo directo, mientras que para alimentaciones de menor concentración la energía requerida para calentar los diluyentes (principalmente  $CO_2$  y  $H_2O$ ) es muy grande y no es posible alcanzar temperaturas mayores utilizando esta configuración. Este problema se resuelve, para alimentaciones con concentraciones entre 20 y 50%, utilizando la configuración de flujo dividido que, como se vió en el Cap. II, consiste en desviar del Horno una parte de la corriente de gas ácido y volverla a unir antes del primer Convertidor Catalítico. Debido a que la reacción Claus-Modificada requiere una relación de  $H_2S/SO_2$  de 2:1, la máxima cantidad de gas ácido que se puede quemar es un tercio del total. El uso de una relación diferente afecta en forma desfavorable la eficiencia global de recuperación de Azufre.

La temperatura de flama máxima calculada en la combustión de mezclas de  $SO_2-H_2S$  con aire, tanto para flujo dividido como para flujo directo, se muestran en la figura V.5. Estas temperaturas son consideradas como las máximas porque los productos de reacción están limitados a  $SO_2$  y  $H_2O$  y además porque se usa una fracción máxima desviada de dos tercios de la corriente de alimentación<sup>66</sup>.

Las temperaturas de flama se ven afectadas por todas las reaccio

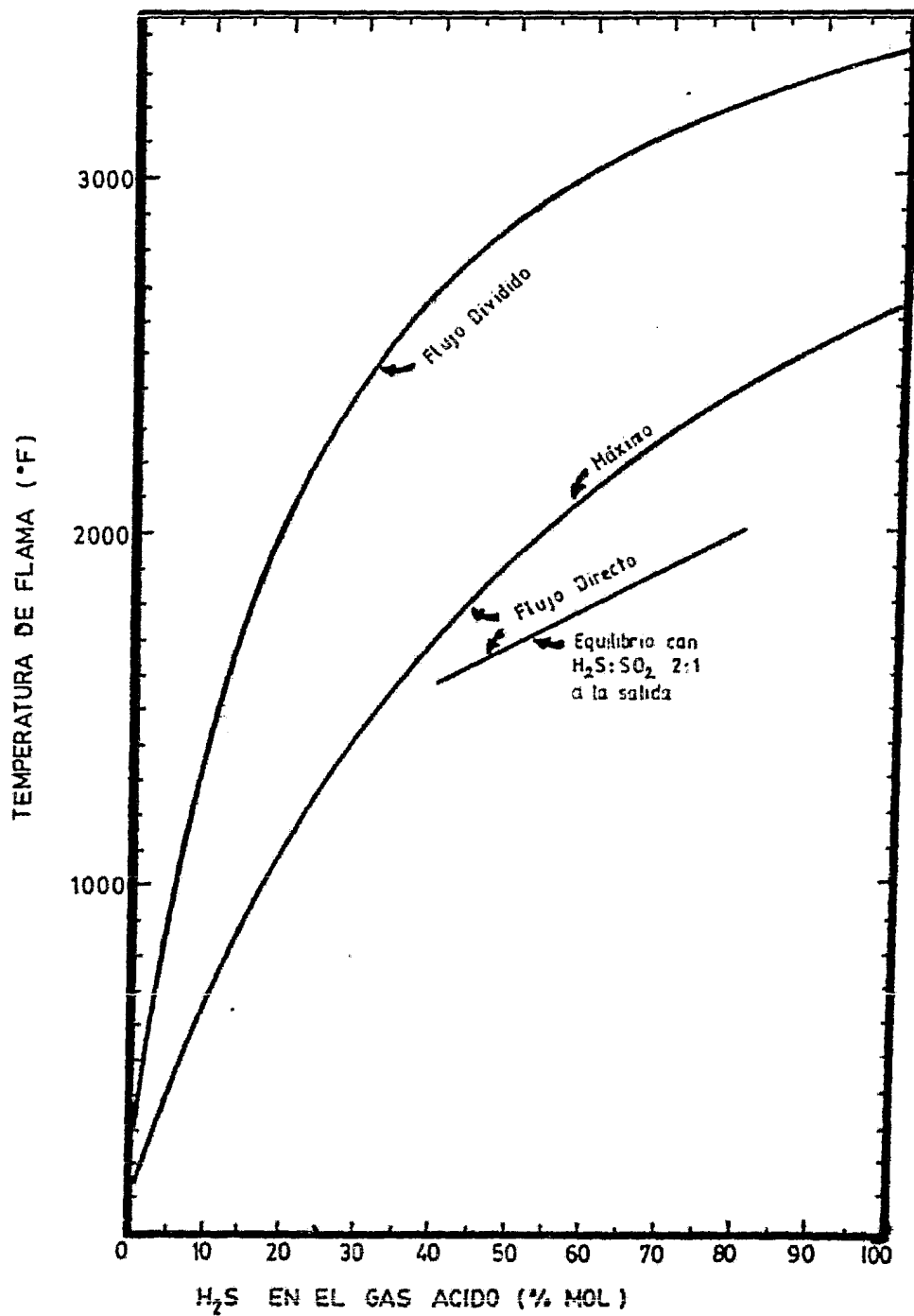


FIG. V-5 MAXIMA TEMPERATURA DE FLAMA

nes que ocurren dentro del Horno. La producción de  $H_2$  y  $CO$  son de particular interés en este aspecto puesto que ambos reducen la temperatura de flama de dos maneras: En primer lugar, la disociación del  $H_2S$  reduce la cantidad del mismo que deberá ser quemada para obtener la relación 2:1 de  $H_2S:SO_2$ , trayendo como consecuencia la reducción del calor liberado. En segundo lugar, las reacciones de producción de  $H_2$  y  $CO$  son reacciones endotérmicas.

A pesar del hecho de que la producción tanto de  $H_2$  como de  $CO$  reduce la demanda de aire para obtenerla relación 2:1, la temperatura alcanzada es menor. El efecto de éstas y otras reacciones endotérmicas se muestra en la figura V.5 para la curva de equilibrio de la corriente de salida del recuperador de calor para la configuración de flujo directo<sup>24</sup>. De aquí que si la cantidad de aire utilizada se basa estrictamente en la concentración de  $H_2S$  la temperatura de flama será mayor, la relación  $H_2S:SO_2$  será menor y la recuperación global de la planta será reducida.

En la figura V.6 se muestran las variaciones de las temperaturas de flama respecto a la cantidad de gas ácido desviado. Los cálculos para las curvas de equilibrio fueron obtenidas por la *Western Research & Development*<sup>25</sup> mediante la minimización de energía libre para un gas ácido de concentración dada y con flujos de aire basados en la concentración de Acido Sulhídrico, por lo que las temperaturas podrían ser un poco mayores que las que se obtendrían en la práctica. No obstante, las curvas ilustran los efectos del cambio de la fracción de gas ácido desviado, así mismo muestran los beneficios que se pueden obtener por un precalentamiento indirecto del gas ácido, el cual es un método que comúnmente se utiliza para corrientes con concentraciones entre el 10 y 20% mol de  $H_2S$  ya que con esto se logra un aumento de volumen, dentro de límites razonables, necesario para obtener una conversión Claus cercana a los límites termodinámicos<sup>48, 51, 52</sup>.

Para gases ácidos con concentraciones menores de 10% mol de  $H_2S$  el recurso usual es una oxidación parcial directa sobre catalizador<sup>53</sup> o quemar Azufre recirculado para producir el  $SO_2$  requerido. Se han

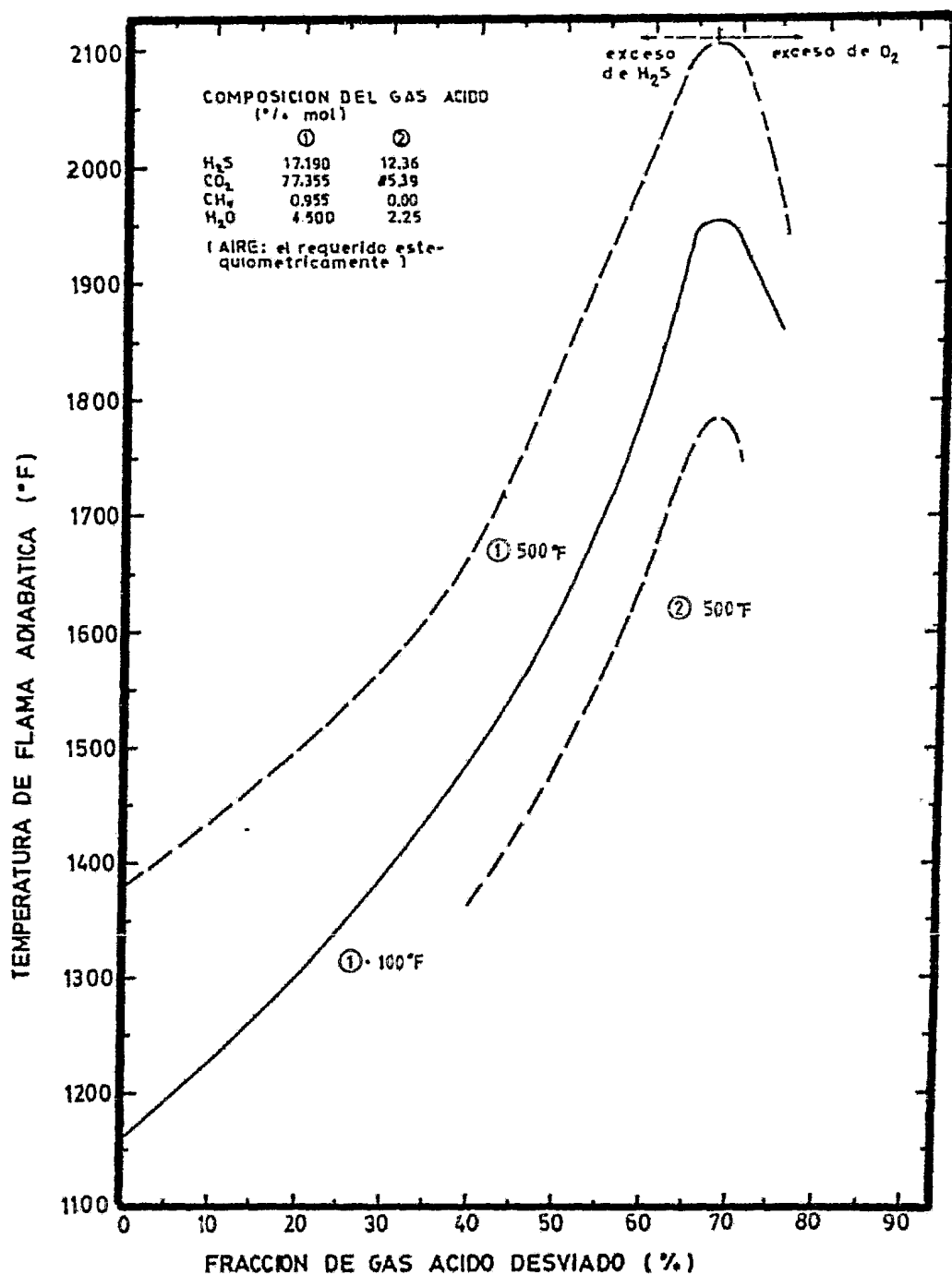


FIG. V-6 TEMPERATURA DE FLAMA



reportado recientes éxitos en el uso de una configuración de flujo dividido con alimentaciones de 3% mol de  $H_2S$ , donde previamente había fracasado el uso de una oxidación directa debido a una severa deactivación del catalizador<sup>52</sup>. Una temperatura de flama adecuada se puede alcanzar por un precalentamiento tanto del aire como del gas ácido y/o agregando gas combustible a la flama. Para evitar la formación de  $CS_2$  se usa un quemador de diseño especial, consistente en tubos concéntricos, por donde se hace circular el gas combustible, el gas de proceso y el aire requerido<sup>5 52 54 70</sup>.

En principio, para el caso de un gas ácido pobre, se puede pasar a una alimentación rica de más fácil manejo mediante dos formas:

- Separación selectiva de  $CO_2$  de la corriente de proceso, lo cual aumentaría la concentración relativa de  $H_2S$ .

- Reducir o eliminar el  $N_2$  de la corriente de aire al Horno, lo que evitaría su efecto de dilución y aumentaría la concentración relativa de  $O_2$ , logrando así una temperatura de flama más elevada y por lo tanto más estable<sup>41</sup>.

#### V.A.4 CONVERSION EN EL HORNO:

La principal función del Horno de Reacción y de la Caldera de recuperación de calor son la de generar  $SO_2$  para su posterior reacción con el  $H_2S$  en los Convertidores Catalíticos, así como la recuperación de energía, por lo tanto, cualquier conversión a Azufre elemental en el Horno es un beneficio adicional. Si, además, el Azufre formado es removido, la carga a los Convertidores es reducida en términos de materia, calor disipado y punto de rocío del Azufre; todos estos efectos conducen a acrecentar la conversión.

Para la configuración de flujo directo la conversión en el Horno es tá en función, principalmente, de la temperatura aunque, también se ve afectada por la presión total del sistema. Arriba de  $927^\circ C$  ( $1700^\circ F$ ) la diferencia entre las conversiones para alimentaciones ricas y pobres es despreciable. Para una presión de una atmósfera la conversión de equilibrio se incrementa desde cerca de 68% a  $927^\circ C$  hasta alrededor de 75% a  $1260^\circ C$ <sup>42 72</sup>. En este intervalo, un cambio en la

presión total de 0.5 a 2.0 atmósferas traería como resultado un decremento en la conversión de aproximadamente 5%.

La conversión en el Horno, para plantas de flujo dividido, depende de la cantidad de gas ácido desviado por dos razones; primero, al desviar cualquier cantidad de gas ácido sin desviar la fracción de aire de proceso, se fuerza al Horno a una condición de aire en exceso, lo cual trae como consecuencia una conversión de equilibrio menor. Segundo, cualquier cantidad de  $H_2S$  que se desvía de la unidad no está disponible para su conversión. En la figura IV.7 se muestra la variación de la conversión en el Horno en función de la fracción desviada<sup>88</sup>. Para una desviación de dos tercias partes, la conversión necesaria es cero, puesto que todo el  $H_2S$  que pasa a través de la flama es oxidado a  $SO_2$ . Para una desviación de cero, la conversión está limitada por una temperatura de flama muy baja. Para puntos intermedios, la conversión es el resultado de la interrelación de las condiciones de aire de exceso, incremento en la temperatura de flama y la fracción de gas ácido desviado.

La pregunta de qué tanto gas ácido debe ser desviado, no siempre es contestada fácilmente. Si se desvía una gran cantidad, parte del Oxígeno fluiría hacia los Convertidores y desactivará el catalizador. Si se desvía una cantidad pequeña, la temperatura de flama podría ser muy baja. Para alimentaciones pobres, las fracciones máximas y mínimas desviadas son a menudo las mismas, las cuales pueden resultar en problemas operacionales consistentes en establecer un balance entre lograr una flama razonablemente estable y evitar el paso de  $O_2$  a los Convertidores Catalíticos.

De la figura V.7, puede apreciarse que la eficiencia de conversión es maximizada con la fracción mínima desviada. Si el equilibrio se alcanza esto puede ser cierto, sin embargo, puesto que en la mayoría de los casos las reacciones están limitadas cinéticamente, la fracción ideal desviada es determinada empíricamente una vez que se ha puesto en operación la planta.

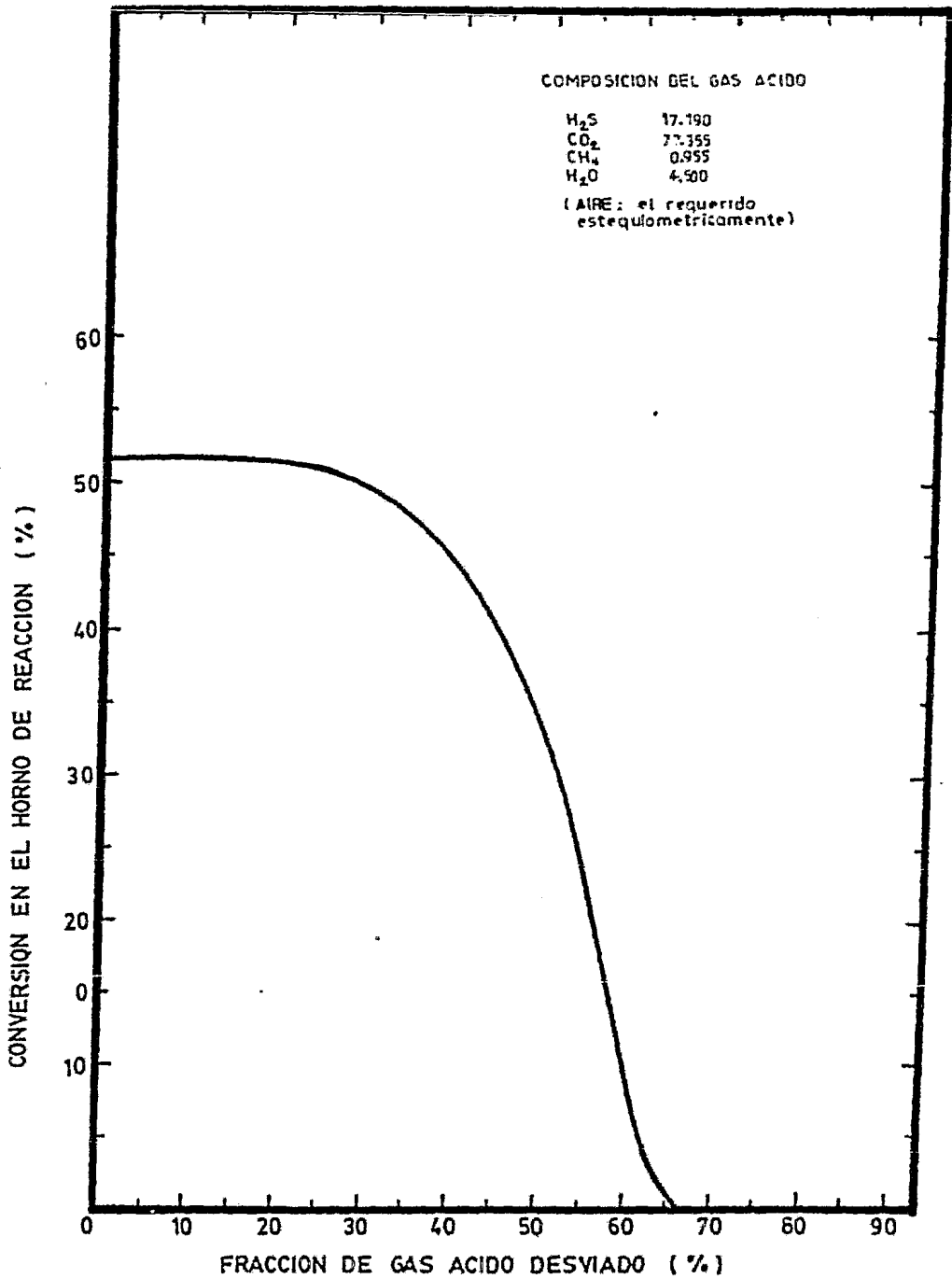


FIG. V-7 CONVERSION EN EL HORNO

Mediante el registro de una serie de conversiones logradas en el Horno para varias fracciones de gas ácido desviado en una planta con alimentación pobre, se observó que conforme la fracción desviada aumentaba, la conversión se mejoraba como consecuencia de obtener temperaturas y tiempos de residencia mayores. La calidad y estabilidad de la flama también se mejoró, comprobándose además que a temperaturas bajas y tiempos de residencia pequeños las reacciones en el Horno están limitadas cinéticamente.<sup>24 88</sup>

Por otra parte, se ha demostrado que aún con una conversión de cero en el Horno, las condiciones de presión y temperatura alcanzadas en el proceso permiten una recuperación ligeramente menor que para una planta de alimentación rica. Por esta razón, la maximización de la conversión en el Horno no debería ser el criterio para la selección de la fracción de gas ácido desviado. El criterio debe ser una operación estable y altas temperaturas con largos tiempos de residencia.<sup>5 24 42</sup>

La limitación cinética en la conversión del Horno de Reacción es una observación general para plantas con alimentación pobre. Mientras muchas plantas con alimentación rica alcanzan conversiones de equilibrio, las plantas con alimentación pobre generalmente no lo alcanzan.<sup>24</sup>

#### V.A.5 CONTAMINANTES DE LOS GASES ACIDOS:

Las impurezas que acompañan al gas ácido alimentado, afectan el diseño, mantenimiento y operación de una planta Claus, debido a que causan problemas de corrosión y disminuyen la eficiencia de conversión. Estos efectos pueden establecerse de la siguiente manera.<sup>41 48 82 75</sup>

- Reducen la conversión a Azufre debido al efecto de dilución de los inertes que causa una baja presión parcial de los reactivos principales en la reacción Claus.
- Requieren de equipos más grandes, mayor tubería y volumen de catalizador, debido al mayor volumen de gases, a la corrosión y envenenamiento del catalizador.

- Reducen la recuperación de Azufre y, por tanto, aumenta la emisión de  $\text{SO}_2$  en los gases de desecho.
- Hacen necesaria la instalación de plantas de desulfurización para los gases de desecho, debido al gran volumen de éstos y a su gran contenido de  $\text{SO}_2$ .

Además del  $\text{CO}_2$ , los contaminantes más comunes en las corrientes de gases ácidos en la industria de proceso de gas incluyen:  $\text{H}_2\text{O}$ , trazas de  $\text{N}_2$ , alifáticos, alicíclicos e hidrocarburos aromáticos, vapores de agentes de endulzamiento y productos de corrosión de las líneas de proceso.<sup>41 42 46 50 72</sup>

El  $\text{CO}_2$  se considera como un contaminante inerte, aunque la producción de  $\text{CO}$  a partir de éste reduce los requerimientos de aire de proceso. Igualmente el  $\text{H}_2\text{O}$  se considera a menudo como un contaminante inerte; el efecto de estos contaminantes se refleja en el incremento del volumen del gas y en la disminución de la temperatura de flama.

La principal causa de la corrosión en la planta, es la solución de gases corrosivos en los líquidos condensados en las partes frías de los diferentes equipos, principalmente durante el arranque de la planta<sup>62 75</sup>. Los productos de corrosión y erosión son usualmente sólidos, los cuales, si no son removidos, podrían promover la formación de niebla de Azufre o la depositación de éste sobre el catalizador, incrementando la caída de presión y, tal vez, contribuyendo a la desactivación del mismo.

Dentro de los hidrocarburos contaminantes el grupo de los alifáticos es el mayor, encontrándose usualmente Metano y pequeñas cantidades de Etano y Propano. Los grupos alicíclicos y aromáticos usualmente se presentan en pequeñas trazas; se han medido concentraciones de aromáticos de 160 a 700 ppm y de alicíclicos de 1 a 30 ppm.

Pueden existir tres grandes efectos de los contaminantes combustibles. El primer efecto proviene directamente de sus combustiones,

las cuales incrementan el flujo total a través de la planta y requieren una mayor capacidad de intercambio de calor en la Caldera de recuperación de calor para poder disipar sus calores de combustión. El segundo efecto lo constituyen las reacciones secundarias dentro del Horno, que producen compuestos gaseosos de Azufre tales como  $CS_2$  y  $COS$ , los cuales son difícil de convertir en Azufre elemental en las unidades siguientes. El tercer efecto es la posible formación de especies gaseosas o de otra especie las cuales pueden desactivar el catalizador de los Convertidores.

La mayoría de los problemas de desactivación de catalizadores se deben a la alimentación de contaminantes teniéndose que las plantas con alimentación pobre son más susceptibles debido al gas ácido desviado. Las plantas de oxidación directa o de recirculación de Azufre utilizadas para alimentaciones muy pobres son igualmente susceptibles a los problemas de desactivación.

Otro tipo de contaminantes, como lo es el  $NH_3$  pueden ser de gran importancia, ya que cantidades significativas de este compuesto requieren de un Horno y estrategia de quemado especiales, además de una planta significativamente mayor para manejar el incremento de aire y de productos de combustión<sup>42,46</sup>. Otros problemas que se tienen con grandes cantidades de  $NH_3$  incluyen: altas temperaturas en el Horno, incrementos en la caída de presión y taponamientos por depositación de sales de amonio, desactivación del catalizador, formación de óxidos de Nitrógeno e incrementos en el combustible del quemador de los gases de desecho. Parece ser que la mejor solución a estos problemas de contaminación es la remoción de de estos contaminantes antes de alimentar los gases a la planta Claus. En algunos casos puede ser que este procedimiento sea más barato que manejar estos contaminantes dentro de la planta.

Es importante hacer notar que el presente trabajo considera únicamente el manejo de gas ácido "limpio" y no el gas ácido de refinería el cual contiene  $NH_3$  como contaminante.

#### V.A.6 CRITERIOS DE DISEÑO DEL HORNO DE REACCION:

En las plantas Claus de recuperación de Azufre se pueden utilizar dos diferentes tipos de Hornos de Reacción, los cuales son<sup>342 70</sup> :

- Horno Mufla (*Muffle Furnace*) y
- Caldera de tunel de fuego (*Fire Tube Boiler*).

El primer tipo consiste en una cámara de reacción aislada en donde la combustión del gas se efectúa en forma adiabática, junto a esta cámara se encuentra una Caldera para recuperar el calor de combustión. El segundo tipo es un simple tubo de gran diámetro dentro del cual se lleva a cabo la combustión y además constituye el primer paso del recuperador de calor. Debido a que en este caso hay transferencia de calor durante la combustión las reacciones que se llevan a cabo son no-adiabáticas.

A pesar de que el Horno de Reacción, junto con el quemador de gas ácido, es la principal característica del proceso Claus-Modificado, sus criterios de diseño son probablemente los menos definidos, basandose para ello principalmente en reglas empíricas<sup>3540</sup>. Esto se debe, más que nada, a la complejidad de las reacciones que ocurren y a la falta de conocimiento de sus velocidades de reacción.

Sin embargo, se pueden considerar algunos criterios generales aplicables a ambos tipos de Hornos. La temperatura del Horno deberá estar arriba de 927°C (1700°F) y preferentemente en un intervalo de 1094 a 1205°C (2000 a 2200°F) ya que a altas temperaturas se favorece la conversión, tanto termodinámica como cinéticamente, sin embargo la temperatura de operación se deberá determinar en base a la composición del gas ácido de alimentación.

Estudios de laboratorio y campo indican que la colocación adecuada de una o dos paredes cuadradas dentro del Horno pueden incrementar y estabilizar la temperatura como consecuencia de un mejor mezclado<sup>5 28</sup>.

El quemador principal debe ser eficiente, de tal forma que se ten

ga una flama estable para la combustión completa tanto de los contaminantes como del Acido Sulfhídrico. Los gases deben ser mezclados completamente, esto es, la corriente de gas ácido y la corriente de aire deberán ser mezcladas eficientemente en el quemador. Para lograrlo se utilizan quemadores concéntricos los cuales pueden ser colocados sobre el eje del Horno o en forma tangencial a éste; la colocación tangencial facilita la formación de remolinos en la corriente gaseosa lo que aumenta su mezclado<sup>5 52 54</sup>. Cuando se utiliza este tipo de quemador, las dimensiones de la cámara se calculan a partir del volúmen requerido, recomendandose mantener una relación L/D de 4:1<sup>3 42</sup>.

Si se utiliza un sistema de quemadores múltiples, distribuidos en la sección transversal de la cámara, el diámetro de ésta dependerá del número de quemadores, mientras que la longitud del tiempo de residencia. Estos quemadores presentan la ventaja de manejar un amplio intervalo de cargas de gas<sup>42</sup>.

En el presente trabajo se consideró únicamente la utilización del primer tipo de quemadores y de la cámara de combustión tipo mufla por lo que sus dimensiones se determinarán de acuerdo a los criterios indicados.

En la mayoría de las plantas de Azufre, no se alcanzan las conversiones de equilibrio en los Hornos de Reacción. Se sospecha que esto es resultado de las limitaciones cinéticas, sin embargo, no se han llevado a cabo estudios definitivos para confirmar o desechar estas sospechas. Aparentemente, los factores cinéticos tales como: temperatura, tiempo de residencia, eficiencia de mezclado, mecanismos de reacción, intermediarios de reacción, etc. son de primordial importancia.

Para la simulación del comportamiento ideal de los Hornos de Reacción se consideró que los gases de combustión están bien mezclados y que se tiene el suficiente tiempo de residencia para que se alcance el equilibrio termodinámico. Esto se basa en que a las altas temperaturas alcanzadas durante la combustión se tiene una cinéti



ca de reacción muy rápida<sup>35</sup> .

Los tiempos de residencia reportados para Hornos de Reacción en operación se encuentran en el rango de 0.43 a 2.3 seg.<sup>32 42 52</sup> . Es interesante hacer notar que algunos de los niveles más bajos de Dióxido de Sulfuro de Carbono (CS<sub>2</sub>) y conversiones más altas fueron logrados en Hornos de Reacción con alimentación rica y menores tiempos de residencia a niveles normales de hidrocarburos en el gas ácido<sup>51</sup> . Los datos disponibles no son suficientes para establecer las razones exactas de esto, aunque se supone que el mezclado pueda ser el mayor factor de influencia.

Para el caso de alimentaciones pobres se recomiendan tiempos de residencia altos (entre 1 y 3 seg.), los cuales dependerán de la composición inicial<sup>26 52</sup> .

Otro criterio que debe tomarse en cuenta al diseñar la cámara de combustión es el máximo calor liberado por unidad de volúmen, el cual se ha considerado de 50000 BTU/hr-Ft<sup>3</sup> <sup>3</sup> .

El Horno de Reacción es el recipiente clave del proceso Claus-Modificado, un buen diseño de este equipo aunado a una buena operación contribuyen a un buen funcionamiento de la planta en general y a una larga vida del catalizador.

#### V.A.7 COMPORTAMIENTO IDEAL DEL HORNO DE REACCION:

Una vez descritas las reacciones principales y laterales que ocurren en el Horno de Reacción, así como las limitaciones cinéticas por las cuales estas reacciones no alcanzan el equilibrio, en esta sección se estudiará el comportamiento ideal del Horno de Reacción.

En el Horno, al igual que en otros sistemas reaccionantes, el comportamiento ideal se alcanza cuando se satisfacen todos los requisitos estequiométricos de todas las reacciones presentes. La segunda condición para alcanzar este comportamiento es que el sis

tema opere bajo las condiciones termodinámicas más favorables, las cuales, en el caso del Horno de Reacción Claus, se determinan por el balance energético entre los estados final e inicial del sistema adiabático que se tiene en el Horno, suponiendo que la temperatura de flama alcanzada es lo suficientemente alta y estable para que las reacciones no estén limitadas cinéticamente. De esta forma se tiene que para la simulación del comportamiento ideal de los Hornos sólo importan los estados final e inicial del sistema, sin importar los mecanismos de reacción ni el tiempo de residencia dentro de la cámara de combustión.

Aún cuando en ninguna de las plantas en operación se tenga un Horno de Reacción que se comporte idealmente, el conocimiento de este comportamiento es muy importante debido a que:

- Podemos evaluar la temperatura máxima que se puede alcanzar dentro de la cámara de combustión y así seleccionar los materiales de construcción más adecuados.
- Podemos evaluar la eficiencia de operación de los Hornos y determinar si se debe o no hacer mejoras al equipo.

En el Apéndice A.2 se describe todo lo relacionado con el módulo de simulación HORNO, el cual se divide en dos subrutinas principales, una para la simulación del comportamiento ideal (Subrutina HORNO), y otra para el predimensionamiento de la cámara de combustión (Subrutina CAMCOM).

## V.B CALDERA RECUPERADORA DE CALOR:

Estos equipos generalmente se utilizan en procesos en los cuales la reacción química requerida se efectúa a altas temperaturas, tal como ocurre en el Horno de Reacción del proceso Claus.

El calor que utilizan estos equipos para la producción de vapor de agua es absorbido de la corriente principal de proceso y/o de los gases de chimenea de los hornos y son llamados, según la fuente de calor, Calderas de gas de proceso y Calderas de gas de chimenea de hornos<sup>11 96</sup>. En el proceso Claus se utilizan Calderas de gas de proceso, algunas de las cuales manejan gases desde unas cuantas psi hasta 500 psi y con temperaturas entre 400 y 1200°C (750 y 2200°F) y pueden producir vapor con presiones arriba de 118.4 Kg/cm<sup>2</sup> (1740 psi)<sup>11</sup>. Debido a lo anterior, en el presente trabajo sólo se tratarán este tipo de calderas.

Las calderas de gas de proceso pueden ser de dos tipos; Calderas de tubos de humo y Calderas de tubos de agua. En las primeras, el fluido de calentamiento circula dentro de los tubos mientras que el vapor se produce fuera de ellos, en las segundas, por el contrario, el medio de calentamiento fluye a través de la coraza y el vapor se produce dentro de los tubos.

Las calderas de tubos de agua se utilizan generalmente en sistemas de producción de grandes cantidades de vapor de alta presión ya que las de tubos de humo presentan problemas de diseño mecánico cuando son de gran tamaño y operan a altas presiones pero, si su diseño mecánico y fabricación son de alta calidad, son más confiables que las de tubos de agua puesto que estas son muy propensas a fallas cuando existe acumulación de incrustaciones propias del sistema<sup>11 96</sup>.

Sin embargo, un mal tratamiento del agua para caldera puede incrementar las fallas en cualquier tipo de ellas. Para evitar esto, el agua que entra a la unidad debe haber pasado a través de una sección de tratamiento de donde continúa a un deaerador el cual frecuentemente está precedido por un precalentador. Una vez deaerea-da, el agua pasa por bombas que darán la presión necesaria para pa-sar a través de la caldera<sup>11 16</sup> .

La capacidad de estos equipos varía dentro de un amplio intervalo: las hay desde 5 ton/h de vapor de 15.5 Kg/cm<sup>2</sup> y 300°C (220 psia y 570°F) hasta de 300 ton/h de vapor de 155 Kg/cm<sup>2</sup> y 530°C (2200 psia y 986°F)<sup>16</sup> . Su uso reduce los costos de producción puesto que utizan la energía producida durante el proceso en la producción de va-por de agua que puede ser utilizado como medio de calentamiento o como fuerza motriz y, en caso de haber excedentes, exportarlo ha-cia otras plantas.

En el proceso Claus se utiliza una Caldera de gas de proceso de tu-bos de humo, cuyo esquema se presenta en la figura V.8, junto con la cámara de combustión<sup>38 70</sup>. Esta figura representa un Horno Mufla con Caldera de dos pasos y salida de gas caliente después del primer paso -normalmente entre 482 y 649°C (900 y 1200°F)- para ser utilizado como medio de recalentamiento en etapas posteriores (ver Cap. II)

#### V.R.1 CRITERIOS DE DISEÑO DE LA CALDERA RECUPERADORA DE CALOR:

Los gases que salen de la Cámara de Combustión a la temperatura de operación , alrededor de 1093°C (2000°F), pasan a la Caldera recuperadora de calor en donde se enfrían hasta temperaturas entre 288 y 399°C (550 y 750°F) produciendo vapor de alta presión<sup>6 38 56 59 66 70</sup> .

La selección de la temperatura de salida de la Caldera deberá ha-cerse tomando en cuenta que el balance de calor resultante de considerar el enfriamiento desde de la temperatura de operación de la Horno hasta la temperatura de salida de la Caldera corresponda, a proximadamente, al calor liberado por las reacciones en el Horno a

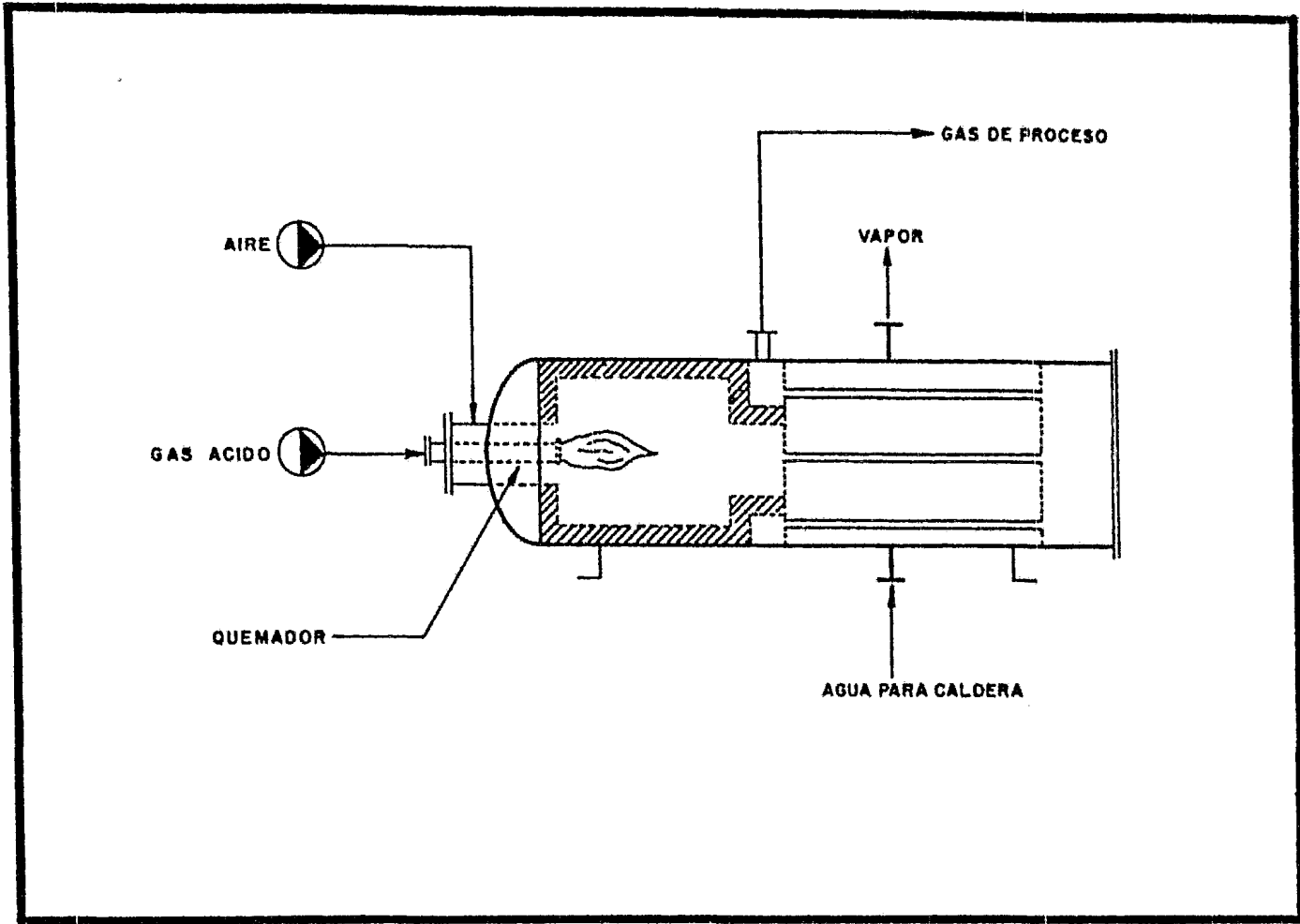


FIGURA V.8 -- HORNO DE REACCION -- CALDERA RECUPERADORA DE CALOR.

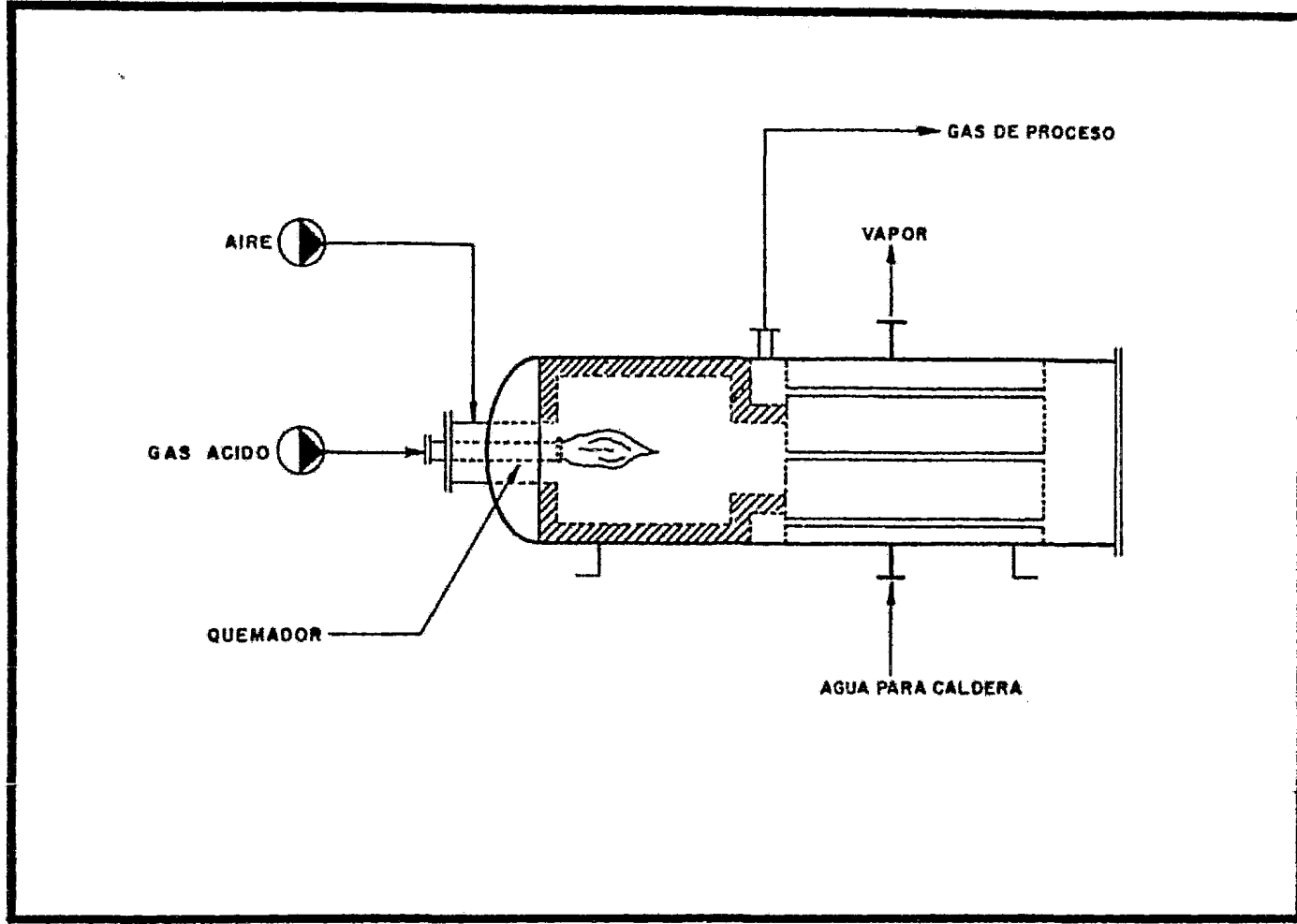
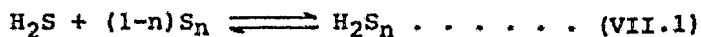


FIGURA V.8 - HORNO DE REACCION - CALDERA RECUPERADORA DE CALOR.

capacidad de variar el comportamiento de la viscosidad del Azufre puro arriba de 160°C (320°F), ver fig. VII.2. Dentro de estas sustancias se encuentra el H<sub>2</sub>S, el SO<sub>2</sub>, los halógenos, los sulfuros orgánicos y metálicos, todos los cuales, en concentraciones inferiores al 1% en peso, reducen notablemente la viscosidad del Azufre puro<sup>80</sup>. Así, una cantidad de 0.18% en peso de H<sub>2</sub>S es suficiente para reducir la viscosidad del Azufre a 188°C (370°F) desde 930 poise hasta 0.8 poise. En los condensadores de las plantas en operación se ha encontrado Azufre líquido con cantidades de Acido Sulfhídrico comprendidas entre 0.001 y 0.07%<sup>80</sup>.

Lo descrito anteriormente puede ser la razón de que en plantas con alimentación rica y cuyos condensadores operan a temperaturas entre 160 y 246°C (320 y 475°F) no presenten problemas de taponamiento o altas caídas de presión ya que sus corrientes gaseosas tienen altas concentraciones de H<sub>2</sub>S y SO<sub>2</sub> lo que a su vez aumenta la concentración de éstos en la corriente líquida disminuyendo su viscosidad. Por el contrario, en plantas con alimentación pobre se observan altas caídas de presión cuando operan dentro del mismo rango de temperaturas ya que las concentraciones de H<sub>2</sub>S y SO<sub>2</sub> son significativamente menores<sup>86</sup>.

Aunque la contaminación del Azufre líquido con H<sub>2</sub>S es benéfica en algunos casos, como en operaciones de bombeo, presenta problemas durante su manejo y embarque ya que el H<sub>2</sub>S liberado en los espacios vacíos de los tanques crea una atmósfera tóxica y explosiva<sup>88 89</sup>. Este problema se agrava por el hecho de que el H<sub>2</sub>S no se disuelve físicamente en el Azufre líquido, sino que reacciona para formar polisulfuro de hidrógeno (sulfano)<sup>87</sup>



Estudios realizados indican que a las condiciones de operación de las plantas Claus se favorece esta reacción y al pasar al condensador contamina el Azufre líquido, lo cual, aunado a que la velocidad de descomposición de los sulfanos es lenta puede resultar en una disminución de la eficiencia de la planta.<sup>97</sup>

a la conversión obtenida.<sup>92</sup>

La presión de vapor saturado que se genera en este equipo dependerá de la temperatura arriba mencionada, ya que ésta influye directamente en el balance de calor, y a requerimientos de vapor en la planta, tanto en cantidad como en aplicación<sup>16 53</sup>.

Por otra parte, durante el enfriamiento del gas de proceso y únicamente para el caso de flujo directo, dentro de la Caldera, ocurren reacciones químicas inversas a las efectuadas en el Horno, las cuales deben ser tomadas en cuenta ya que reducen la conversión a Azufre elemental. Para simular este efecto, se utiliza la temperatura que separa las zonas de conversión térmica y catalítica para el caso particular del gas en proceso, la cual es llamada temperatura de corte y corresponde al punto mínimo de la curva % Conversión vs. Temperatura (ver fig. VI.1), ya que desde el punto de vista termodinámico este punto representa la conversión de equilibrio que se alcanza a temperaturas relativamente bajas sin el uso de un catalizador, así, al disminuir la temperatura de los gases dentro de la Caldera y presentarse las reacciones inversas, la conversión a Azufre elemental disminuye hasta alcanzar esta conversión mínima. Se ha observado que al calcular un nuevo equilibrio con una temperatura de corte adecuada es posible simular en forma más realista la corriente de salida de la Caldera, así mismo, se ha observado que por debajo de esta temperatura de corte solamente ocurren reacciones de intercambio de Azufre a sus diferentes formas alotrópicas excepto en el caso de que existiera un catalizador puesto que esta región de temperaturas corresponde precisamente a la zona de conversión catalítica<sup>3 17 70</sup>.

En el caso de que no se cuente con el valor exacto de la temperatura de corte para determinado gas ácido, es posible utilizar una temperatura de 641°C (1185°F), debido a que la mayoría de los gases tratados en plantas Claus presentan temperaturas de corte más o menos cercanas a este valor<sup>2 3 17 87 70</sup>.

Otras variables de diseño asociadas a la Caldera recuperadora de



calor son: longitud, diámetro y número de tubos.

En el presente trabajo, debido a que se considera únicamente el diseño de un Horno Mufla, la longitud de los tubos se ajustará a las disponibles comercialmente para este tipo de equipos, siendo de : 32, 24, 16, 12, 10 y 8 pies<sup>81</sup>. Así mismo, el diámetro también se ajustará a los comerciales más usuales para estos equipos, los cuales son: 3, 2.5, 2 y 1.5 pulgadas para tubería de acero<sup>16</sup>.

Por lo que se refiere a la máxima caída de presión del gas de proceso a través de la Caldera recuperadora de calor, se consideró de 703 mm H<sub>2</sub>O (1 lb/in<sup>2</sup>).

En el predimensionamiento de las Calderas de tubos de humo, los cálculos del calor transferido se simplifican debido a que el calor transferido por radiación es despreciable por debajo de 432°C (900°F), que es aproximadamente la temperatura media de los tubos de la caldera, quedando sólo el calor transferido por convección. El calor transferido por radiación, además de ser difícil de evaluar debido al efecto de la geometría del equipo y a problemas para obtener la emisividad del sistema, no representa gran porcentaje del calor total transferido, por lo que tampoco se evalúa<sup>3</sup>.

En el Apéndice A.3 se presenta una descripción detallada del modulo CALDER para la simulación del comportamiento ideal de la Caldera recuperadora de calor. Este módulo está dividido en las subrutinas CALDER y DIMCAL, la primera para la evaluación del comportamiento ideal y la segunda para el predimensionamiento del equipo.

## VI CONVERTIDORES CATALITICOS

VI.A QUIMICA DEL CONVERTIDOR CATALITICO

Como se vió en el capítulo anterior, en el Horno de Reacción la conversión de  $H_2S$  a Azufre está limitada, desde el punto de vista termodinámico, a aproximadamente el 75% o menos para la caso de una configuración de flujo directo y mucho menos para la configuración de flujo dividido, por lo tanto, para obtener conversiones mayores se requiere que las reacciones se continúen a temperaturas más bajas donde son termodinámicamente más favorables tal como se puede apreciar en la figura VI.1<sup>39 40</sup>. Si se observa esta figura, se podría pensar que entre más baja sea la temperatura de operación, mayor será la conversión alcanzada, lo cual, visto desde un punto de vista estrictamente termodinámico es verdad sin embargo, la temperatura mínima de operación de un convertidor está limitada por la temperatura de rocío del Azufre contenido en la corriente de salida, ya que de lo contrario se presentará una condensación de Azufre sobre el catalizador, lo que como se verá más adelante, causaría una desactivación severa del catalizador debido a limitaciones cinéticas.

Este tipo de reactores que trabajan a temperaturas bajas, de 149 a 371°C (300 a 700°F), se les conoce generalmente con el nombre de *Convertidores Claus* y su propósito principal es el de hacer reaccionar Acido Sulfhídrico ( $H_2S$ ) con Dióxido de Azufre ( $SO_2$ ), normalmente en una relación de 2:1, para formar Azufre elemental y agua de acuerdo a la siguiente reacción:



en donde:  $S_x$  representa las diferentes especies moleculares del Azufre ( $S_1, S_2, \dots, S_8$ )

Así mismo, dentro de los Convertidores Claus es deseable convertir otros compuestos de Azufre (como lo son el Sulfuro de Carbono y el Disulfuro de Carbono) a Azufre elemental aunque, como se

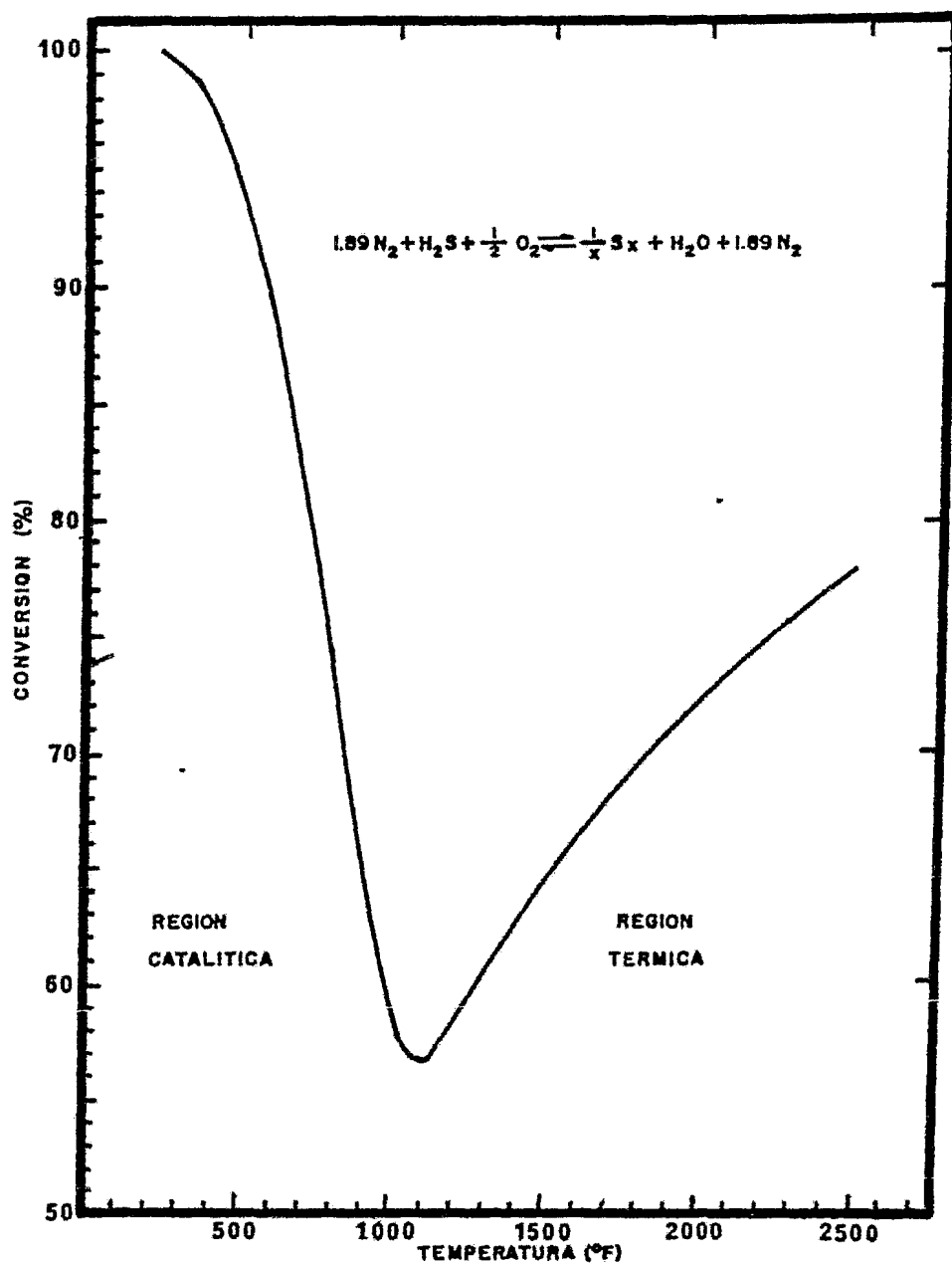


FIGURA VI.1— CONVERSION DE EQUILIBRIO DE H<sub>2</sub>S A AZUFRE (80)

verá más adelante, ésto no siempre se logra en las unidades comerciales debido a limitaciones cinéticas.

Para facilitar que éstas reacciones alcancen el equilibrio, normalmente se utiliza un catalizador dentro de los convertidores y ya que la energía de activación de una reacción catalizada es menor que para la misma reacción no catalizada y que la velocidad de reacción varía inversa y exponencialmente con respecto a la energía de activación, se puede concluir que la reacción catalizada es mucho más rápida a una temperatura dada o bien es posible tener una temperatura de reacción menor para una velocidad de reacción dada.

Utilizando más de un convertidor con remoción de azufre por condensación entre convertidores y operando los sucesivos a menor temperatura, la reacción entre el  $H_2S$  y el  $SO_2$  es forzada hacia el lado derecho, haciendo posible obtener una recuperación total arriba de 98%, tal como se puede ver en la tabla VI.1.

TABLA VI.1  
PORCIENTOS ACUMULATIVOS DE  
RECUPERACION EN PLANTAS CLAUS

EQUIPO	% RECUPERACION
HORNO	50 a 90*
CONVERTIDOR # 1	85 a 95
CONVERTIDOR # 2	94 a 97
CONVERTIDOR # 3	96 a 98
CONVERTIDOR # 4	98 a 99 <sup>+</sup>

\*En el caso de alimentaciones muy ricas.

Como puede verse en esta tabla, el uso de más de cuatro convertidores en plantas Claus convencionales no está justificado.

#### VI.A.1 CATALISIS DE LA REACCION CLAUS-MODIFICADO

Al igual que en otros sistemas catalíticos heterogéneos (gas/sólido), algunas de las propiedades deseables del catalizador son:

- a.- Gran actividad catalítica,
- b.- alta resistencia mecánica,

- c.- alta resistencia a los mecanismos de desactivación,
- d.- alta resistencia al desgaste por rozamiento,
- e.- baja resistencia al flujo de gas (baja caída de presión)
- f.- fácil manejo,
- g.- disponibilidad inmediata, y
- h.- bajo costo.

En general las Bauxitas y Alúminas Activadas satisfacen estos requisitos y son los catalizadores normalmente usados en el proceso Claus-Modificado.

La actividad de estos catalizadores depende tanto de sus propiedades físicas como de las químicas, o sea, de la composición, estructura estereoquímica, tamaño de la partícula, porosidad y área superficial; la reducción de una o todas estas propiedades dará como resultado una reducción de la actividad catalítica. Otros factores que afectan la capacidad de la cama de catalizador son: temperatura, presión, tiempo de contacto y concentración de reactivos y productos.

Lo más importante de un catalizador es que tenga la suficiente actividad catalítica para provocar que las reacciones alcancen el equilibrio dentro del convertidor. Como se puede ver en la figura VI.2<sup>21</sup> tanto la Bauxita como la Alúmina Activada satisfacen este criterio ya que la conversión de equilibrio se alcanza dentro del primer pie de catalizador, en esta figura también se puede observar que la actividad de la Bauxita es menor que la de la Alúmina Activada por lo que actualmente se prefiere utilizar ésta última.

Se ha encontrado, tanto por investigación, como por experiencia en planta, que la vida de los catalizadores puede variar desde 1 hasta 13 años dependiendo de la forma y condiciones de operación.

En las plantas Claus-Modificado el problema principal es el deterioro de la actividad catalítica lo cual está relacionado, más que con las propiedades intrínsecas del catalizador, con los con

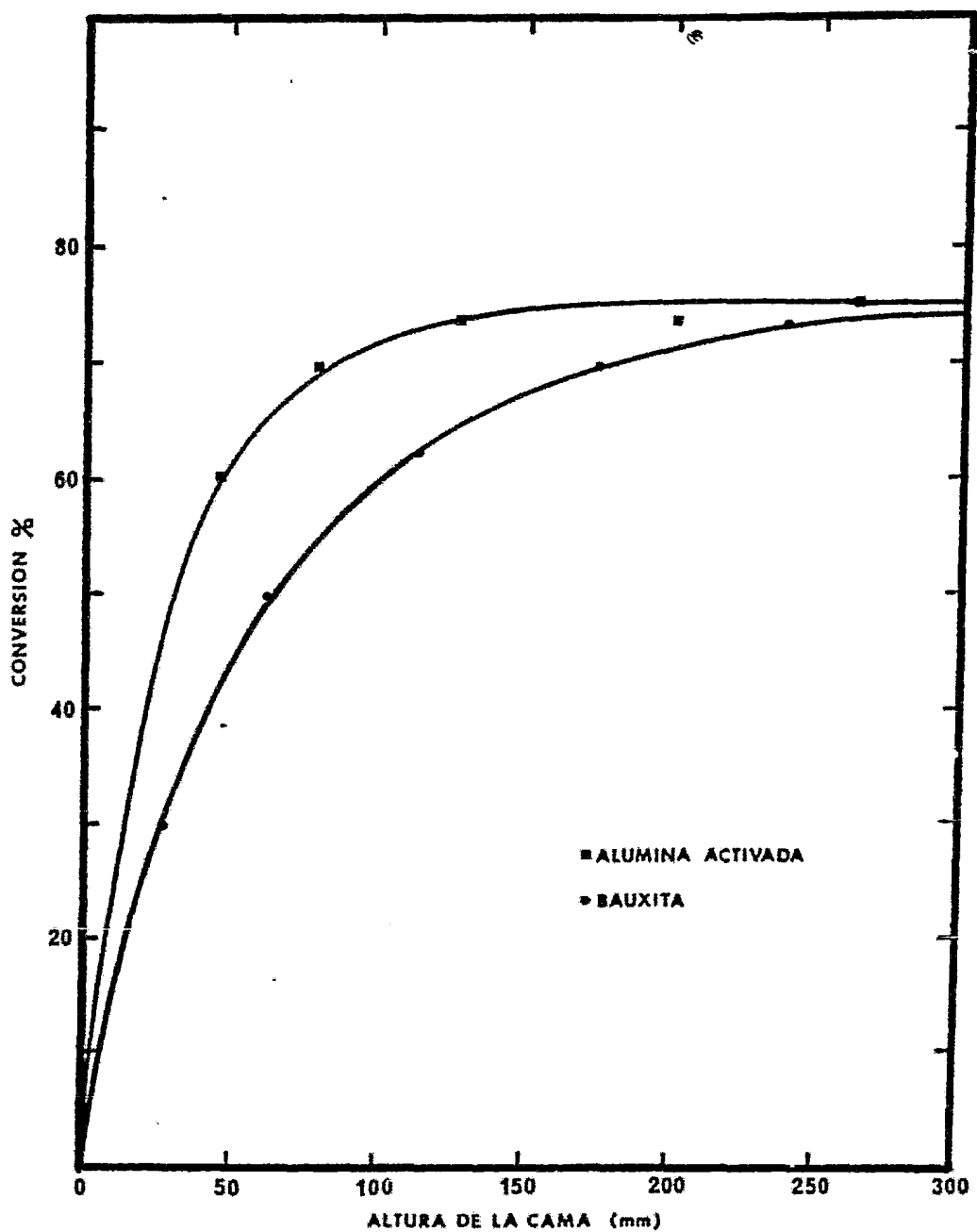


FIGURA VI.2-COMPARACION DE LA ACTIVIDAD CATALITICA<sup>(21)</sup> DE LA ALUMINA ACTIVADA Y BAUXITA FRESCAS.

taminantes de la alimentación y con las condiciones de operación.<sup>20</sup>

La determinación de la cinética de la reacción de Claus en presencia de un catalizador es importante por las siguientes razones:<sup>21</sup>

- Para predecir, basándose en la actividad de un catalizador dado, la conversión alcanzada en un convertidor.
- Para diseñar el tamaño óptimo del recipiente basándose en la actividad del catalizador, temperatura y presión de operación, tiempo de residencia de la fase gaseosa y en las concentraciones de los reactivos y productos.
- Para un mejor entendimiento de los fundamentos que rigen los procesos comerciales y abatidores de contaminación.

Así mismo, es importante establecer una ley de velocidad la cual tenga en cuenta los siguientes factores:

- Cinética de la reacción Claus-Modificado,
- Influencias de las transferencias de masa y calor a través de las partículas de catalizador,
- Influencia de la granulometría del catalizador,
- Influencia de los depósitos en el catalizador con relación a las condiciones de operación,
- Influencia del envejecimiento reversible e irreversible de los catalizadores.

Hasta ahora sólo se han publicado resultados parciales que no permiten abordar el problema en su conjunto,<sup>19 21 33 100</sup> esta observación puede parecer sorprendente si se considera que más de 15 millones de toneladas de azufre se recuperan a partir de gases naturales y de refinería. Sin embargo, actualmente se sigue investigando en estos aspectos<sup>25</sup> con el fin de llegar a entender completamente la cinética y la ley de velocidad de la reacción Claus. En lo que se refiere a los mecanismos de desactivación también se ha investigado<sup>19 23 33 100</sup> con el objetivo principal de desarrollar métodos de regeneración y así prolongar la vida del catalizador. Aunque no completamente la investigación en ambas áreas ha sido provechosa.

En 1979 en Alberta, Canadá, la *Western Research & Development*<sup>26</sup> demostró

en estudios de laboratorio de la reacción Claus-Modificado sobre Alúmina Activada o Bauxita, que el período de estabilización para estos catalizadores puede ser muy largo. El experimento realizado consistió en hacer pasar un gas ácido de concentración constante sobre una muestra de Bauxita por un lapso de 85 hrs. de operación continua y 20 hrs. de operación adicional durante las cuales la Bauxita fue enfriada, removida del reactor, mezclada, recargada al reactor y recalentada hasta la temperatura de operación. Durante estas 105 hrs. de experimentación se hicieron mediciones a tres diferentes alturas de la cama de catalizador con el fin de determinar las conversiones alcanzadas, los resultados obtenidos se muestran en la figura VI.3. En esta gráfica se observa claramente que el sistema no alcanza el equilibrio dinámico, es decir, el balance entre las velocidades de adsorción y desorción del azufre elemental producto, hasta después de 80 hrs. de operación. Este mismo experimento se llevó a cabo para otro tipo de Bauxita de mayor actividad; mediciones después de 1, 5, 10 y 58 hrs. de operación continua mostraron que el equilibrio dinámico se alcanza en 10 hrs. (figura VI.4). La mayor diferencia entre las condiciones de operación de estos dos experimentos fue una temperatura de operación de 50°F mayor para el último.

El tiempo requerido para la estabilización del sistema dependerá del tipo de catalizador, contenido total de azufre en la corriente de entrada, concentración de agua, extensión de la reacción y temperatura y presión de operación.<sup>24</sup>

Los datos de las figuras VI.3 y VI.4 señalan la necesidad de que los datos publicados sobre la reacción Claus-Modificado sean vistos con escepticismo, particularmente aquellos en donde no se especifica si el problema de la estabilización ha sido tomado en cuenta.

#### VI.A.2. DEACTIVACION DEL CATALIZADOR

En la mayoría de las plantas Claus la altura de la cama de catalizador es de 0.9 a 1.2 m (3 a 4 ft), observandose que generalmente



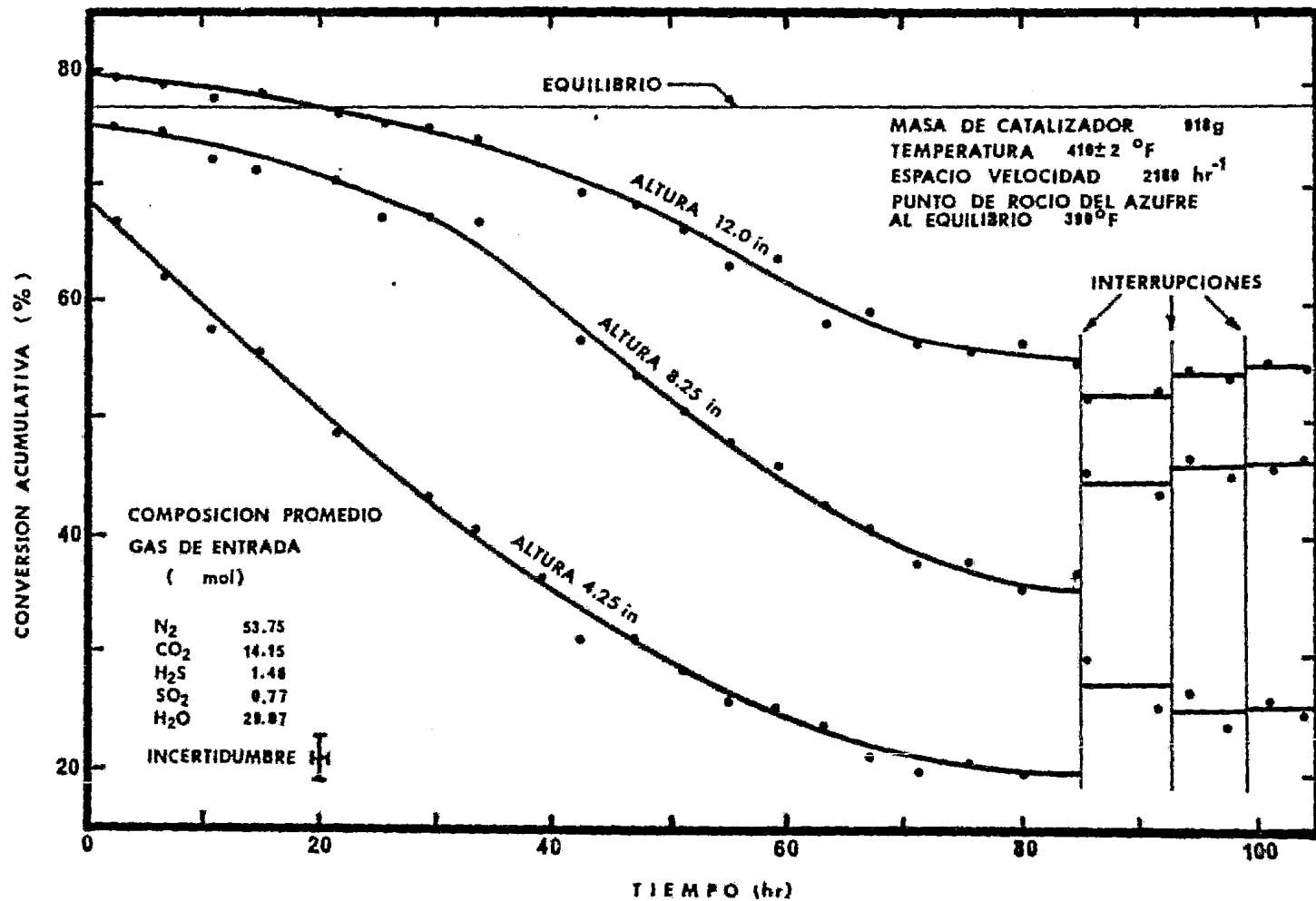
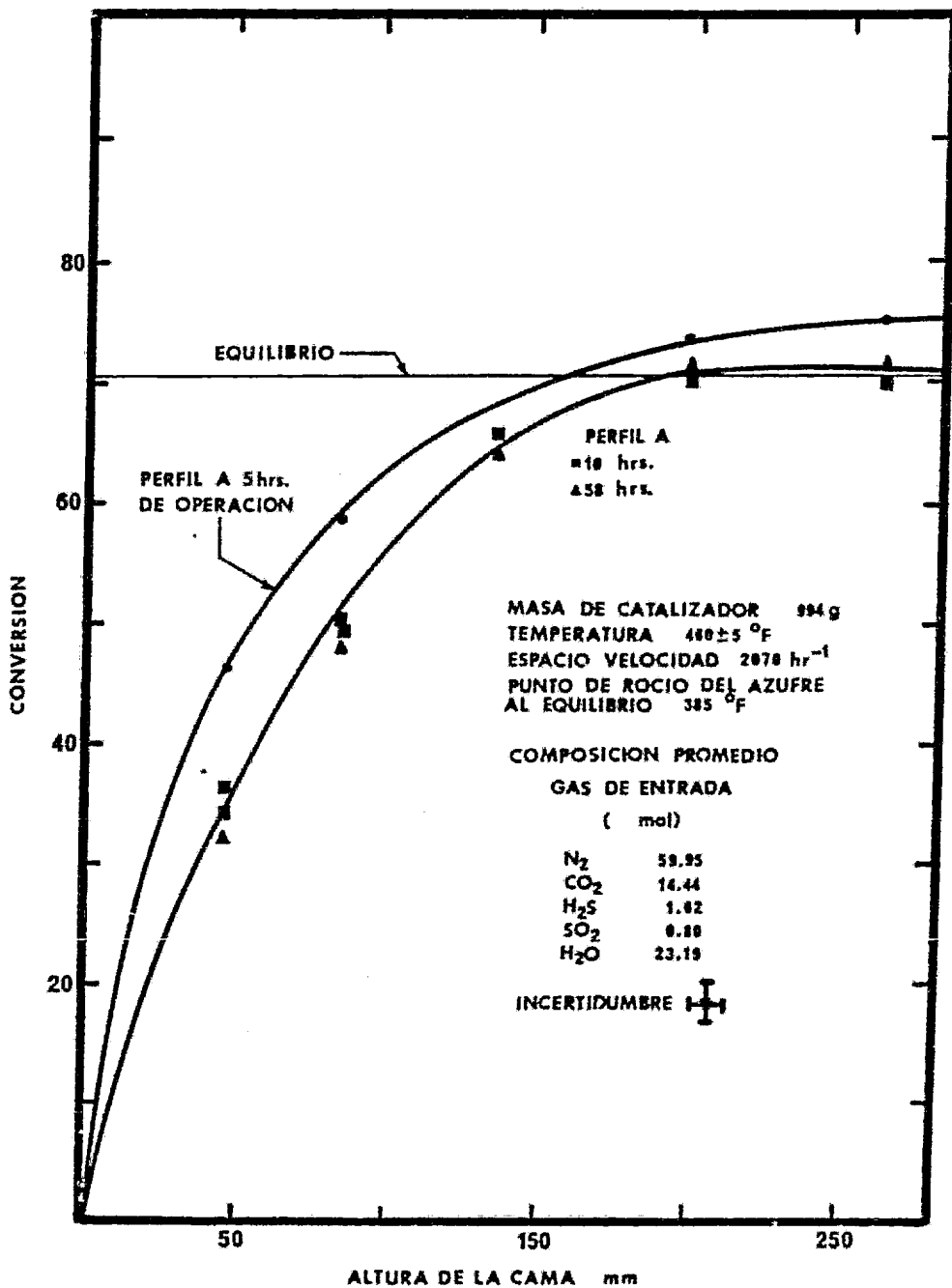


FIGURA VI.3—PERIODO DE ESTABILIZACION PARA UN CATALIZADOR DE BAUXITA.<sup>80</sup>



**FIGURA VI.4—PERFILES DE LA REACCION CLAUS—MODIFICADO A DIFERENTES PERIODOS DE OPERACION CONTINUA.<sup>66</sup>**

con un catalizador nuevo las reacciones alcanzan el equilibrio dentro de los primeros 15 ó 30 cm (6 ó 12 pulg) de altura<sup>21 25</sup>. La actividad catalítica de la Alúmina Activada o de la Bauxita depende del área superficial, de tal forma que entre mayor es el área superficial mayor es el número de sitios activos disponibles para que se lleve a cabo la reacción entre el  $H_2S$  y el  $SO_2$ ; desafortunadamente, las altas temperaturas y los contaminantes característicos de las plantas Claus en operación causan un decremento substancial en el área superficial. Se ha observado que inicialmente existe una pérdida rápida de la alta actividad del catalizador fresco, seguida de un periodo de desactivación lenta<sup>78</sup>. Conforme la desactivación avanza la conversión total del convertidor no se ve afectada hasta que la altura total de la cama es insuficiente para que las reacciones alcancen el equilibrio, en este punto se dice que la conversión está limitada cinéticamente debido a la falta de actividad del catalizador. Cuando esto sucede se observará un decremento en la temperatura alcanzada a través de la cama y un incremento en la temperatura alcanzada en el siguiente convertidor. Cuando todos los convertidores estén cinéticamente limitados se observará un decremento inmediato en la eficiencia general de recuperación.

Aún cuando la desactivación del catalizador Claus es un fenómeno muy complejo que no se ha entendido completamente, sí se ha podido determinar que existen dos diferentes tipos de mecanismos<sup>22</sup>:

**\*\*Mecanismos Inherentes:**

Estos mecanismos involucran una alteración de la estructura propia del catalizador, es decir, una pérdida en el área superficial debido a: Compactación (Sinterización), Desmoronamiento (Atrición), Envejecimiento térmico y/o Hidrotérmico, Cambio de Fases, etc.. Para las condiciones de operación normales de las plantas Claus, este tipo de mecanismos normalmente son muy lentos, son muy difícil de prevenir y la desactivación causada no se puede regenerar. Este tipo de desactivación se debe más que a las condiciones normales de operación, a las altas temperaturas que se tienen durante los arranques, paros y procedimientos regenerativos por calcinación de los depósitos del catalizador.

### \*\*Mecanismos Externos:

Estos mecanismos involucran un depósito o reacción química de sustancias extrañas en o con el catalizador de tal manera que se bloquea el acceso de los reactivos a los sitios activos; entre estos mecanismos se encuentra: la Sulfatación, la Carbonización, el Alquitranado, depósitos de azufre líquido o de productos de corrosión, etc.. En general este tipo de desactivación es parcialmente reversible, por algún mecanismo de regeneración; aunque en el caso de carbonizaciones o depósitos de productos de corrosión, la regeneración puede acortar severamente la vida del catalizador por alguno de los mecanismos inherentes de desactivación.

Al contrario de los mecanismos inherentes, en éste caso la desactivación puede ser prevenida por un cambio en las corrientes de proceso tal como la desviación de parte de la corriente de gas ácido, por el cambio de los quemadores o bien por la eliminación de los contaminantes de la corriente de alimentación, tales como agentes endulzantes (MEA y/o DEA) e hidrocarburos.

Con el objeto de poder determinar el tipo de desactivación en alguna circunstancia dada se han hecho muchas investigaciones en esta área<sup>19 23 39</sup>, a continuación se describen algunas características de los mecanismos de desactivación más importantes.

#### VI.A.2.1 ENVEJECIMIENTO TERMICO O HIDROTERMICO:

Este tipo de desactivación se presenta cuando el catalizador es expuesto a temperaturas elevadas (arriba de 600°C en el caso de Alúmina Activada<sup>19</sup>) y se manifiesta por una reducción en el área superficial con una porosidad constante por lo que es fácil deducir que existe un aumento en el diámetro promedio de los poros<sup>19 23</sup>. La velocidad de disminución del área superficial es función de: temperatura, tiempo y tamaño de partículas y poros, sin embargo, el área mínima o estable sólo depende de la temperatura y del tamaño de los poros<sup>19 78</sup>.

Estas transformaciones térmicas sólo se presentan durante los pro

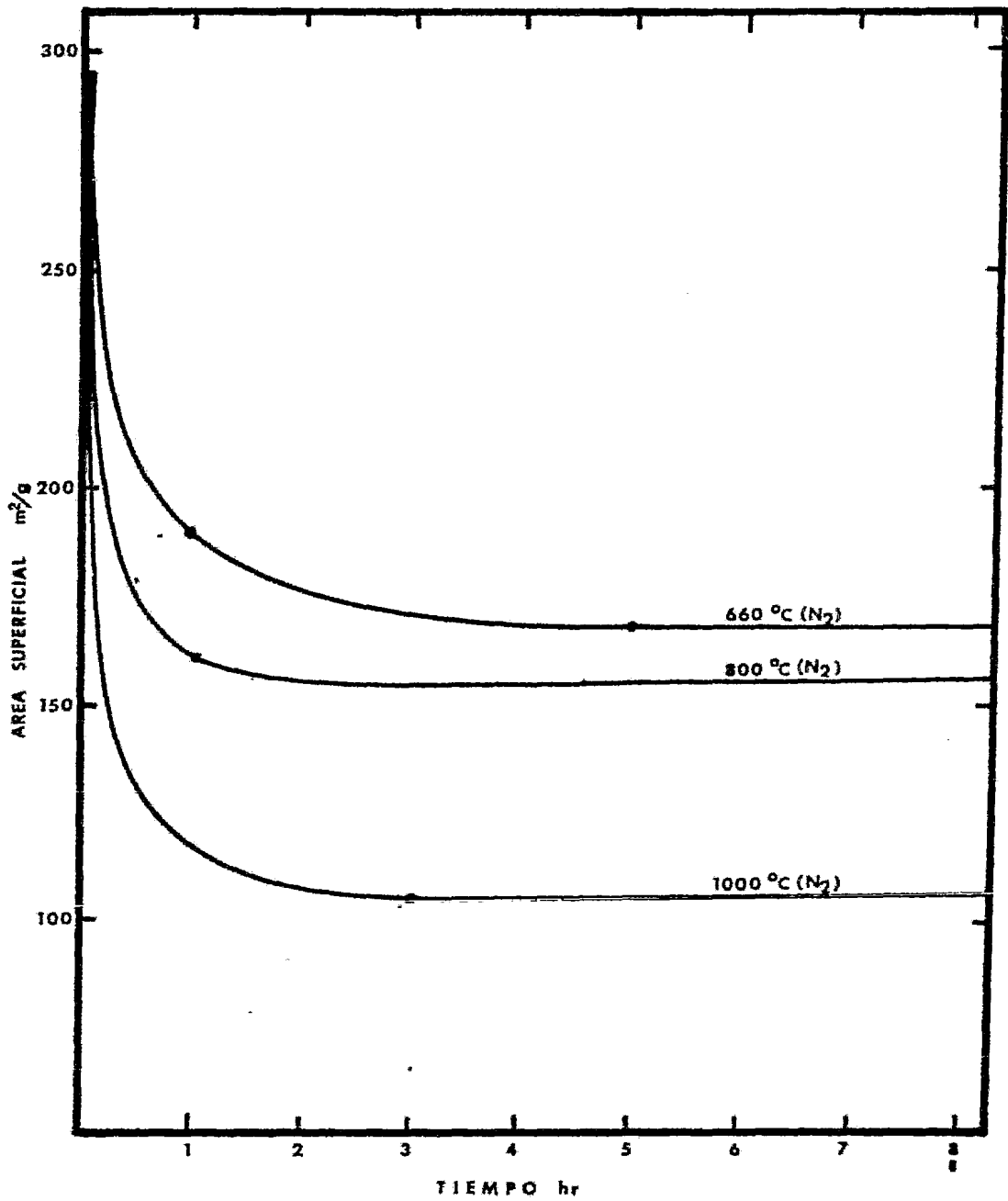


FIGURA VI.5—EFECTOS DEL SINTERISMO TERMICO EN EL AREA SUPERFICIAL ESPECIFICA (23)

cedimientos de arranque, paro y regeneración del catalizador por lo que las temperaturas en cada uno de los convertidores deberá mantenerse bajo estricto control. Durante las operaciones de endulzamiento y desorción de azufre y en ocasiones de paro es preferible no prolongar el contacto del catalizador con vapor de agua sobrecalentado ya que este provoca una disminución del área superficial por efectos de hidratación, de hecho se recomienda el uso de gases inertes, tales como Nitrogeno, gases de combustión libres de aire y materiales carbonosos, etc., para llevar a cabo esta operación.<sup>19</sup>

En la figura V.5 se encuentran graficados los resultados obtenidos por el Dr. Richard K. Kerr<sup>23</sup> en una de sus investigaciones sobre mecanismos de desactivación. En esta gráfica es fácil ver la gran dependencia que hay entre la reducción del área superficial y la temperatura, así mismo se demuestra que el envejecimiento térmico reduce el area superficial en forma limitada ya que la curva se hace asintotica a cierto valor.

Por medio de la experiencia en planta se ha encontrado que en la mayoría de los casos, un catalizador después de 3 ó 4 años de uso retiene una superficie de aproximadamente 150 m<sup>2</sup>/g, la cual es su ficientemente grande para asegurar una buena conversión cualesquiera que sean las condiciones de operación (fig. VI.6)<sup>19</sup> .

#### VI.A.2.2 DEACTIVACION POR SULFATACION:

La Sulfatación de los centros activos es considerada la mayor deac tivación de los catalizadores Claus, no sólo porque reduce la capacidad de catalizar la reacción entre el H<sub>2</sub>S y el SO<sub>2</sub>, sino también porque tiene un efecto inhibitor sobre la conversión de com puestos de azufre y carbón (CS<sub>2</sub> y COS) para formar azufre elemen tal<sup>19 23 26</sup> . En la figura VI.7 se encuentra gráficada la variación del porcentaje de conversión en función del porcentaje de sulfatación de la Alúmina Activada, como se puede apreciar, un aumento de 4% en la cantidad de sulfatos representaría una disminución en la conversión de aproximadamente 40%.

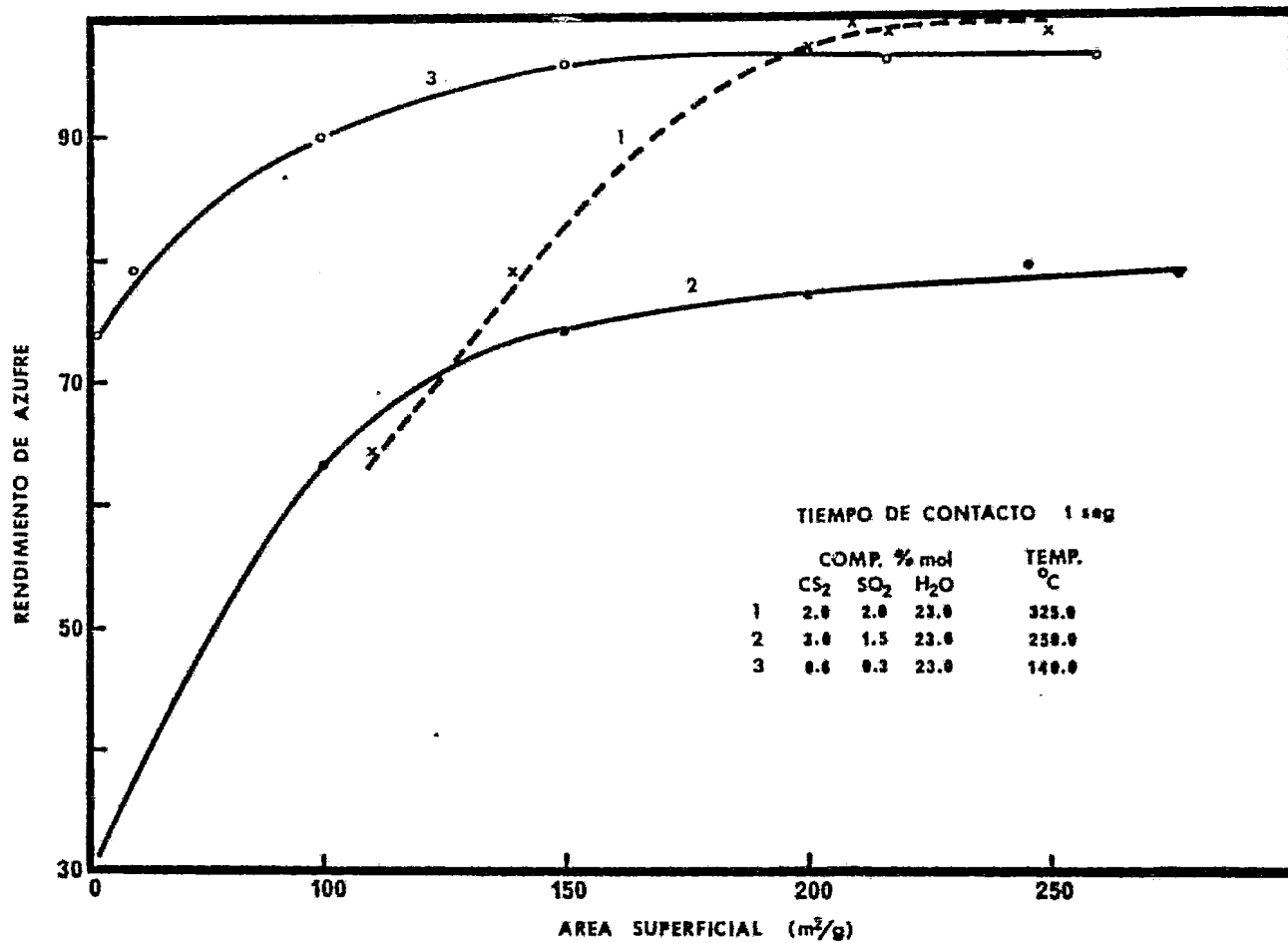


FIGURA VI.6<sup>(10)</sup>-RECUPERACION DE AZUFRE EN FUNCION DEL AREA SUPERFICIAL (LIBRE DE SULFATOS)

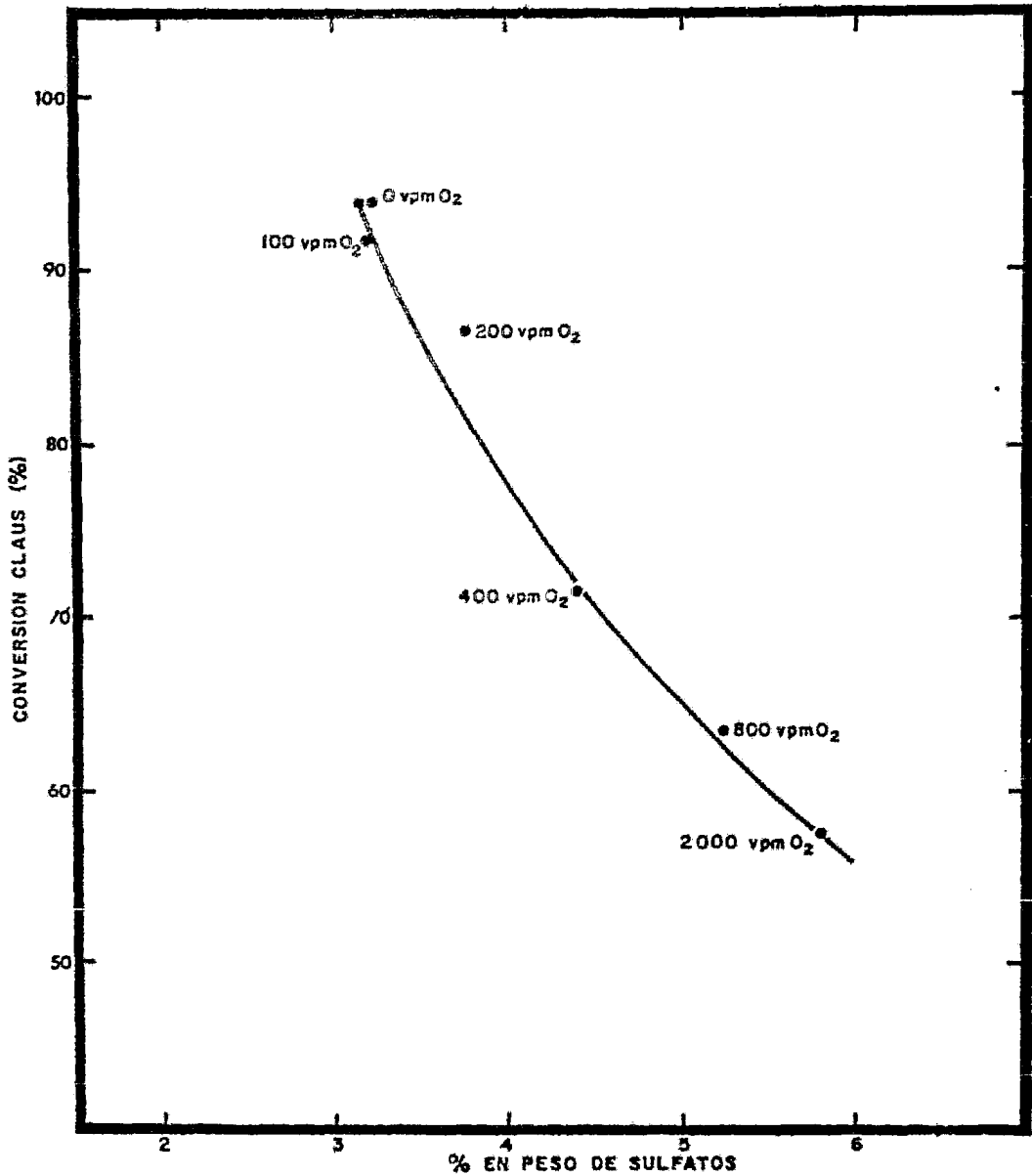


FIGURA VI.7-VARIACION DEL PORCENTAJE DE CONVERSION CLAUS EN FUNCION DEL PORCENTAJE DE SULFATACION DE LA ALUMINA



Muchos experimentos se han realizado por diferentes investigadores con el objeto de determinar los mecanismos de sulfatación<sup>19</sup>  
<sup>23 76 80 38</sup> y los procedimientos de regeneración más efectivos<sup>19 23</sup>  
<sup>76 80</sup>. Existen dos mecanismos básicos por los cuales ocurre la sulfatación del catalizador. El primero es por la adsorción del SO<sub>2</sub> parte del cual, en realidad, es quimisorbido y fijado irreversiblemente aún aplicando vacío a la temperatura de adsorción. Este SO<sub>2</sub> quimisorbido no es químicamente estable y tiende a reaccionar con los grupos hidroxilo de la superficie del catalizador formando enlaces de grupos sulfatos cuya estructura puede ser representada por<sup>19</sup>  $\text{>Al-SO}_4\text{-Al<}$

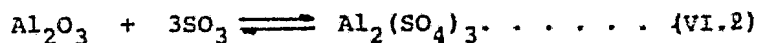
Pruebas precisas de ALCOA<sup>76</sup> mostraron que cuando un convertidor Claus es alineado en la corriente de proceso, primeramente no se detecta SO<sub>2</sub> en los gases de salida, sin embargo, después de un corto tiempo aparecen relaciones altas de H<sub>2</sub>S/SO<sub>2</sub> indicando que existe una deficiencia de SO<sub>2</sub>. Estas relaciones decrecen rápidamente hasta que se alcanza una relación estable igual a 2.0. Un balance de masa del sistema vía Cromatografía de Gases indica lógicamente que el SO<sub>2</sub> "reacciona" con la Alúmina Activada a las temperaturas normales de operación, para comprobar ésto se expuso Alúmina Activada a una corriente de SO<sub>2</sub> bajo condiciones cuidadosamente controladas, los resultados (Tabla VI.2) demostraron que a 316°C el SO<sub>2</sub> es quimisorbido por la Alúmina Activada.

TABLA VI.2<sup>76</sup>  
 SO<sub>2</sub> QUIMISORBIDO EN ALUMINA A 316°C

TIEMPO (MIN.)	GRAMOS DE SO <sub>2</sub> EN 100 g DE CATALIZADOR	% DEL PESO TOTAL GANADO
0	0.00	0.0
15	2.84	81.8
30	2.96	85.3
45	3.10	89.3
60	3.17	91.4
90	3.34	96.3
120	3.44	99.1
150	3.46	99.7
180	3.47	100.0
210	3.47	100.0

La sulfatación formada por este tipo de mecanismo siempre estará presente en los convertidores Claus debido a la inevitable quimisorción del  $\text{SO}_2$  en el catalizador,<sup>80</sup> por lo que para el diseño de unidades industriales se deberá tomar en cuenta la presencia de este fenómeno.

El segundo mecanismo de la sulfatación del catalizador es la reacción del  $\text{SO}_3$  con la Alúmina para formar Sulfato de Aluminio de acuerdo a la siguiente reacción:



El  $\text{SO}_3$  puede ser formado en las altas temperaturas de los quemadores, tanto en el horno de reacción como en los quemadores auxiliares de recalentamiento, ya que desde el punto de vista termodinámico es posible que se forme más de 1 ppm de  $\text{SO}_3$  a las condiciones de operación de un quemador típico.<sup>78</sup>

También se ha demostrado<sup>23 80</sup> que la presencia de oxígeno dentro de los convertidores, debido a un mal mezclado o a un exceso de aire durante la combustión, deteriora rápidamente el catalizador por un aumento en el nivel de sulfatación del mismo. En el experimento que se representa en la figura VI.8,<sup>80</sup> inmediatamente después de las mediciones de la curva superior se inyectó Oxígeno a un nivel de 0.5% a la corriente de entrada, la exposición a este nivel de  $\text{O}_2$  se continuó por una hora, encontrándose que el nivel de sulfatos se incremento de 0.03% a 0.54% con una pérdida de la actividad de 40%; este mismo fenómeno puede ser observado en la gráfica de la figura VI.7.

El arrastre de Oxígeno de los quemadores a los convertidores también es dañino en otros aspectos ya que incrementa la temperatura alcanzada en los convertidores trayendo como consecuencia una disminución en la conversión. Para evitar este problema se recomienda que los quemadores utilizados sean los más eficientes disponibles, darles un buen mantenimiento y que la relación aire/com

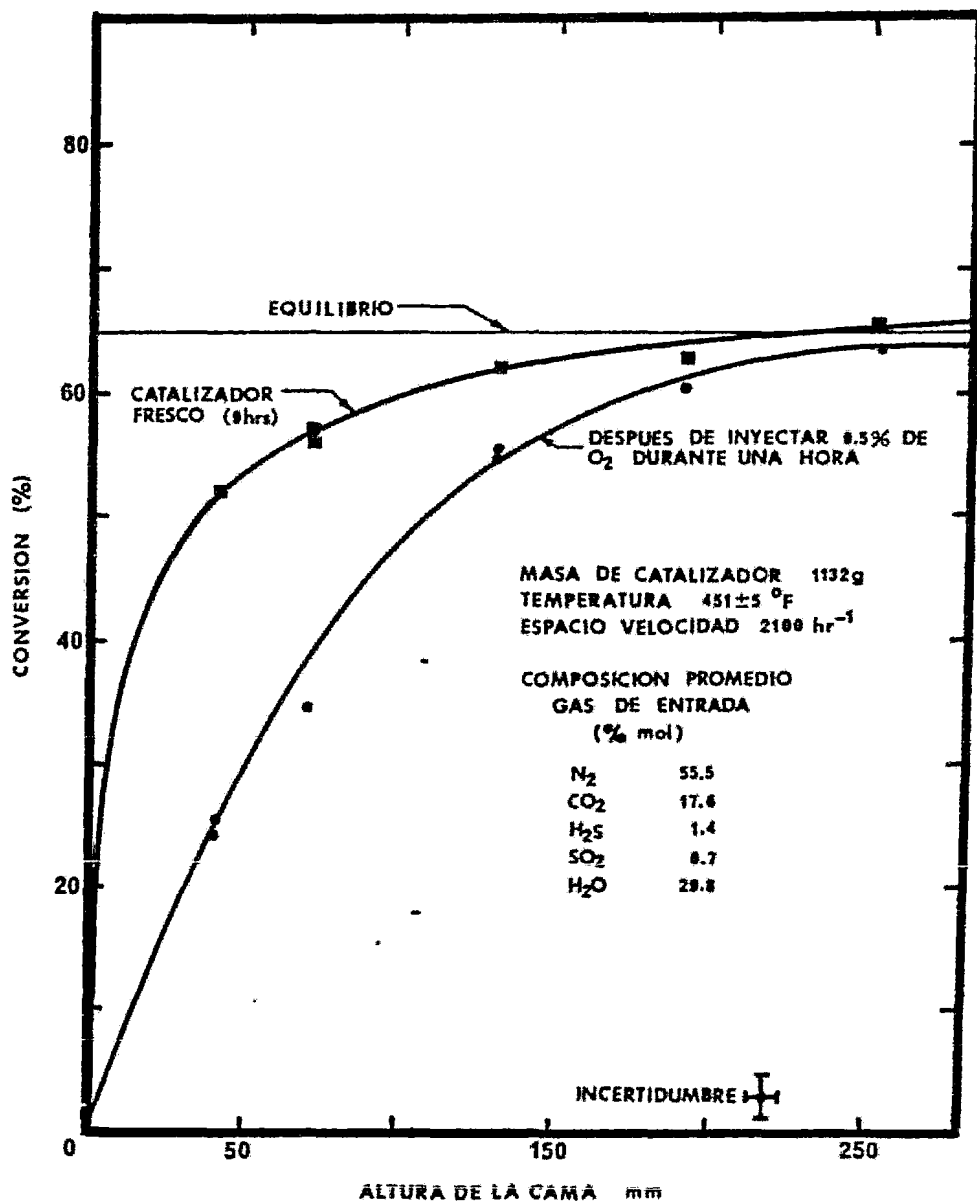


FIGURA VI.6— RELACION CLAUS-MODIFICADO SOBRE BAUXITA<sup>60</sup>

bustible sea cuidadosamente monitoreada especialmente durante arranques y paros.

Por medio de la experiencia en planta se ha observado que los catalizadores son más sensibles a la sulfatación en un segundo convertidor e incluso en un tercero que en un primero, la figura V.9<sup>23</sup> representa esquemáticamente, el contenido de sulfatos en los catalizadores de los diferentes convertidores del tren de recuperación, como es evidente, la sulfatación es más drástica en los convertidores corriente abajo. Este fenómeno podría ser resultado de una o varias de las siguientes posibilidades:<sup>19</sup>

- La temperatura en los últimos convertidores es menor y la sulfatación podría ser una función inversa de la temperatura.
- Durante los procedimientos de calcinado, el efecto acumulativo de oxígeno en presencia de azufre es mayor en los últimos convertidores debido a los mayores contenidos de azufre y mayores tiempos de residencia ya que el calcinado es un proceso que va de los primeros a los últimos convertidores.
- A una operación impropia de los quemadores auxiliares de recalentamiento.

Sin embargo, no se ha podido determinar la causa principal de este comportamiento<sup>23</sup>.

El efecto que tiene la sulfatación sobre la actividad catalítica es muy complejo, ya que para contenidos de sulfatos similares la reducción de la actividad depende fuertemente de las condiciones de operación, tal como se muestra en la figura V.10,<sup>19</sup> un catalizador que contiene 0.03% de sulfatos por m<sup>2</sup>/g es:

- Inactivo en la hidrólisis del CS<sub>2</sub> en el primer convertidor
- Poco activo (60%) para la reacción de Claus a las condiciones de operación del tercer convertidor.
- Mantiene toda su eficiencia para la reacción de Claus a las condiciones del primer y segundo convertidor.

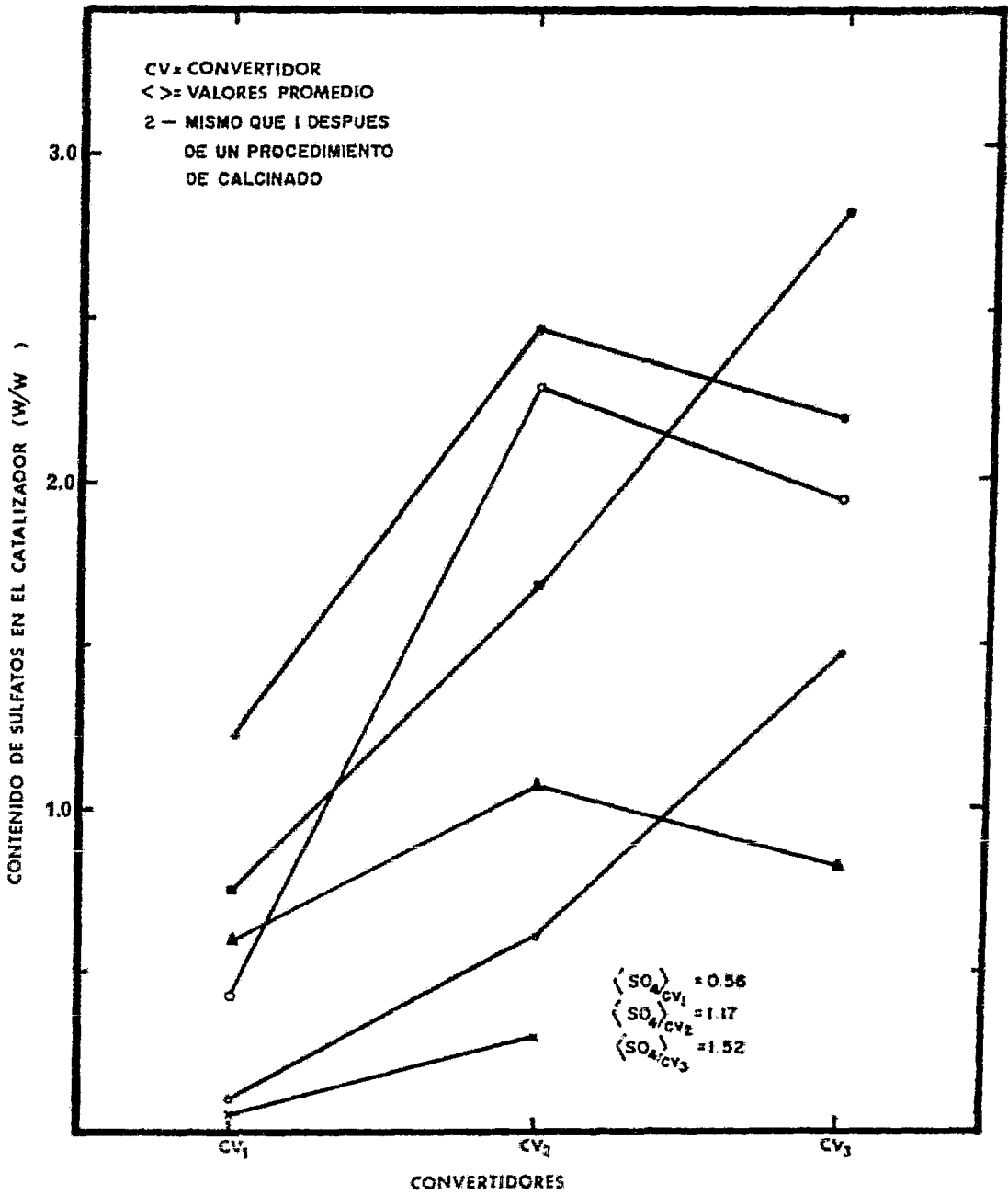


FIGURA VI.9—REPRESENTACION ESQUEMATICA DEL CONTENIDO DE SULFATOS EN EL CATALIZADOR DE LOS DIFERENTES CONVERTIDORES (23)

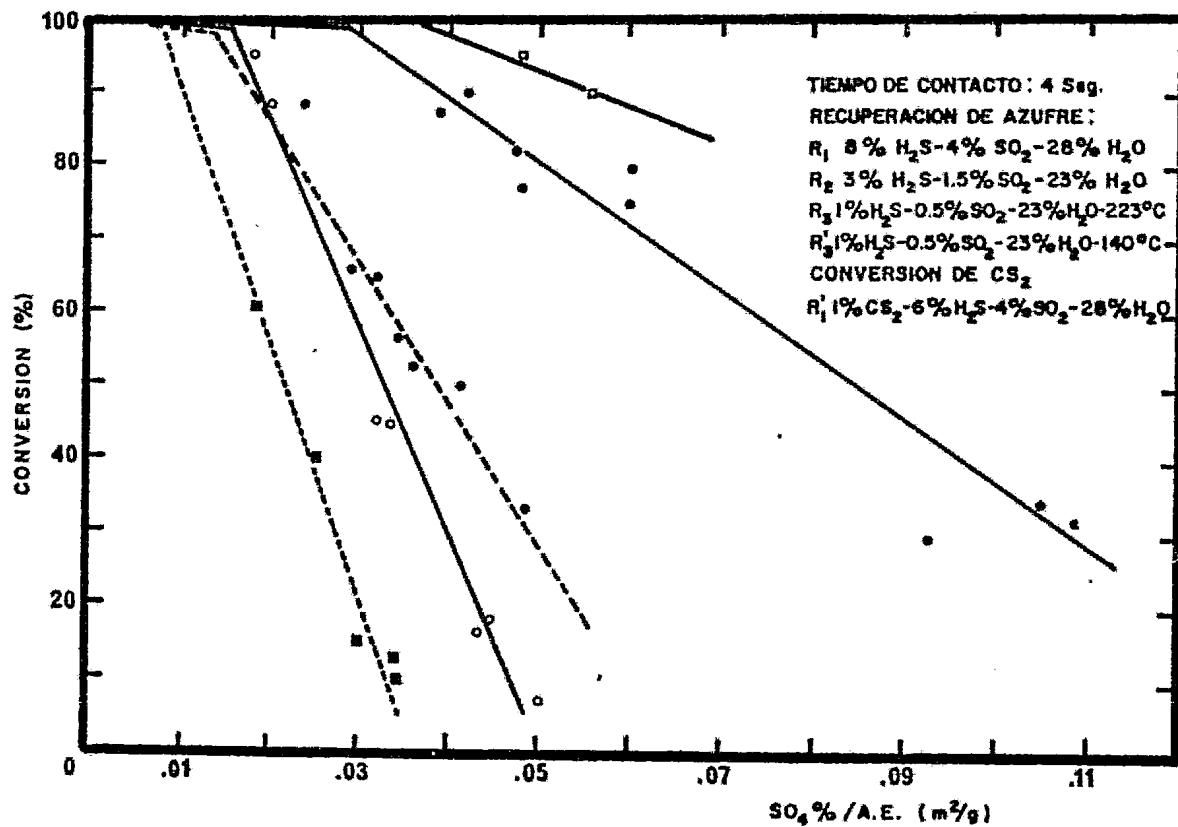


FIGURA VI.10<sup>(19)</sup>—INFLUENCIA DEL AREA ESPECIFICA (A.E.) Y LA SULFATACION ( $SO_4^-$ ) EN LA  
 ACTIVIDAD DE CATALIZADORES CLAUS.

La sulfatación es, al menos parcialmente, reversible utilizando-se para esto un gran número de agentes reductores ( $H_2S$ ,  $S_2$ ,  $H_2O$ ) junto a una simple descomposición térmica<sup>23 39</sup>. El Dr. Richard K. Kerr<sup>23</sup> en 1977 publicó los resultados de unos experimentos para de terminar los procedimientos de regeneración más efectivos, lle gando a las siguientes conclusiones:

- La presencia de agua en las corrientes de gases de regene ración ayuda a que ésta se efectúe con mayor eficiencia.
- La corriente más efectiva para la regeneración fue vapor de agua y azufre a 400°C (95% de reducción en los niveles de sulfatos).
- A temperaturas menores de 300°C el  $H_2S$  por sí solo es ina decuado para la regeneración<sup>19</sup>.

En la Tabla VI.3 se resumen los resultados obtenidos por este in vestigador.

TABLA VI.3<sup>23</sup>  
MECANISMOS DE REGENERACION

EXPERIMENTO	% DE REDUCCION DE SULFATOS
2.5% $H_2S$ a 25°C, 3 hrs.	6
$H_2S$ a 250°C, 3 hrs.	4
$H_2S$ a 300 - 350°C, 5 hrs.	44
2% $H_2S$ + 13% $H_2O$ a 250°C, 5 hrs.	45
$H_2S$ + $H_2O$ a 209°C, 5 hrs.	42
$H_2S$ + $H_2O$ a 350°C, 4 hrs.	35
10% $CH_4$ a 250°C, 3 hrs:	44
10% $CH_4$ + 18% $H_2O$ a 250°C, 5 hrs.	62
2% $CH_4$ + $H_2O$ a 300°C, 5 hrs.	68
S vapor + $H_2O$ a 400°C, 6 hrs.	95
S vapor a 400°C, 6 hrs.	0

Así mismo, otros autores recomiendan los siguientes procedimien tos de regeneración:

- Un barrido de  $H_2S$  diluido a temperatura de cuando menos 300°C<sup>19</sup>.
- Antes de reducir la temperatura, después del ablandamien-

to térmico para remover azufre (descrito más adelante) se hace pasar por las líneas de proceso un exceso de  $H_2S$  por una operación de la planta deficiente en aire, de tal manera que se obtenga una relación de  $H_2S/SO_2$  entre 2.5 y 10. Después de 24 hrs. de operación, la planta se regresa a sus temperaturas y relaciones normales de operación.

#### VI.A.2.3 DEACTIVACION POR AZUFRE LIQUIDO:

El envenenamiento por azufre, como su nombre lo indica, es causado por la presencia de azufre en la superficie del catalizador. El contenido de azufre elemental en un catalizador se debe a dos mecanismos: Adsorción y Condensación<sup>23</sup>.

La cantidad de azufre elemental adsorbido por el catalizador es función principalmente de la temperatura del catalizador y de la concentración de azufre en la fase gaseosa. Si bien, la adsorción de vapores de azufre por el catalizador reduce su actividad catalítica esto obviamente es inevitable. La adsorción de azufre es reversible y explica parcialmente las altas eficiencia de recuperación seguidas al arranque de la planta y las altas emisiones en los paros.

El azufre elemental en forma condensada es un agente deactivante severo. Los operarios de planta, generalmente evitan este problema operando los convertidores arriba del punto de rocío del azufre, sin embargo, frecuentemente ocurren operaciones abajo de este punto debido a una mala eficiencia de los condensadores o por la falta de un dispositivo eliminador de niebla a la salida de los condensadores o bien por un error en la medición de las temperaturas de las corrientes. Cuando se presenten estos problemas de operación abajo del punto de rocío se deberá aumentar la temperatura de operación del convertidor para evitar una deactivación severa del catalizador<sup>23</sup>.

El problema de deactivación por depósitos de azufre es más severo



en el tercer y cuarto convertidor ya que son los que se operan a más bajas temperaturas.

La acumulación de azufre dentro de los poros del catalizador tanto por adsorción como por condensación capilar puede bloquear completamente el acceso a los sitios activos y limitar cinéticamente la conversión. Este tipo de desactivación puede ser remediada por medio de un ablandamiento térmico, es decir, aumentando temporalmente la temperatura de entrada del convertidor por aproximadamente 25 o 50°F para liberar el azufre<sup>88</sup>. Después de un lapso de 24 a 36 hrs. la temperatura de entrada se reduce lentamente hasta alcanzar la temperatura normal de operación.

#### VI.A.2.4 DEACTIVACION POR DEPOSITOS DE CARBON:

El envenenamiento por carbón resulta del depósito de materia carbonosa sobre el catalizador proveniente principalmente de tres fuentes<sup>38</sup>:

- Arrastre de derivados de hidrocarburos de gran peso molecular por ejemplo Dietanol-Amina y Monoetanol-Amina los cuales son adsorbidos por el catalizador y se carbonizan en su superficie.
- Craqueo o polimerización de pequeñas cantidades de hidrocarburos que están presentes en la corriente de gas.
- Condiciones reductoras que se desarrollan durante la regeneración.

Existen dos grandes mecanismos por medio de los cuales se forman los depósitos de carbón sobre el catalizador. En el primero, aminas de gran peso molecular, tales como MEA o DEA, son arrastradas desde el proceso de endulzamiento, para ser adsorbidas por el catalizador donde se carbonizan. El carbón depositado es de la forma vítrea, alquitrán o complejos azufre-hidrocarburos que envuelven los granos del catalizador con una película "protectora" que bloquea completamente el acceso de los reactivos a los sitios activos, causando una desactivación rápida y severa<sup>76</sup>.

Dentro del segundo mecanismo se tiene la formación de coque por el craqueo de hidrocarburos pesados y la formación de hollín por el craqueo del  $CS_2$ <sup>22</sup> o por la combustión subestequiométrica de hidrocarburos ligeros<sup>22</sup>.

El grado de desactivación no es proporcional a la concentración sino más bien a la forma del Carbón depositado, por ejemplo uno o dos por ciento en peso de alquitrán es suficiente para una desactivación casi total, mientras que concentraciones mucho mayores de coque o de hollín producen una pequeña o ninguna desactivación<sup>23</sup>. Sin embargo, con concentraciones altas de Carbón hay una gran posibilidad de que éste reaccione con Azufre elemental e Hidrógeno para formar polímeros alquitranados desactivando al catalizador de acuerdo al primer mecanismo. También, se ha encontrado que el hollín en grandes cantidades puede causar una gran caída de presión y/o contaminar el Azufre producto.

La figura VI.11<sup>23</sup> muestra esquemáticamente, la dependencia del contenido de Carbón en el catalizador con la posición del convertidor en el tren de recuperación de Azufre, como se puede ver, el coquizado es evidentemente un fenómeno de los primeros convertidores catalíticos.

Parte de los depósitos de Carbón pueden ser removidos por medio de una calcinación (representada en la fig. VI.11 por las líneas punteadas), sin embargo, esto trae como consecuencia una pérdida de área superficial por envejecimiento térmico y un posible aumento de la cantidad de sulfatos por la presencia de Oxígeno en la cama de catalizador.

### VI.A.3 ELIMINACION DE SULFURO DE CARBONILO Y DISULFURO DE CARBONO:

El Sulfuro de Carbonilo ( $COS$ ) y el Disulfuro de Carbono ( $CS_2$ ) formados en las altas temperaturas del horno de reacción (Cap. V), pueden afectar la eficiencia de conversión total de la planta ya que frecuentemente constituyen un gran porcentaje de las emisio

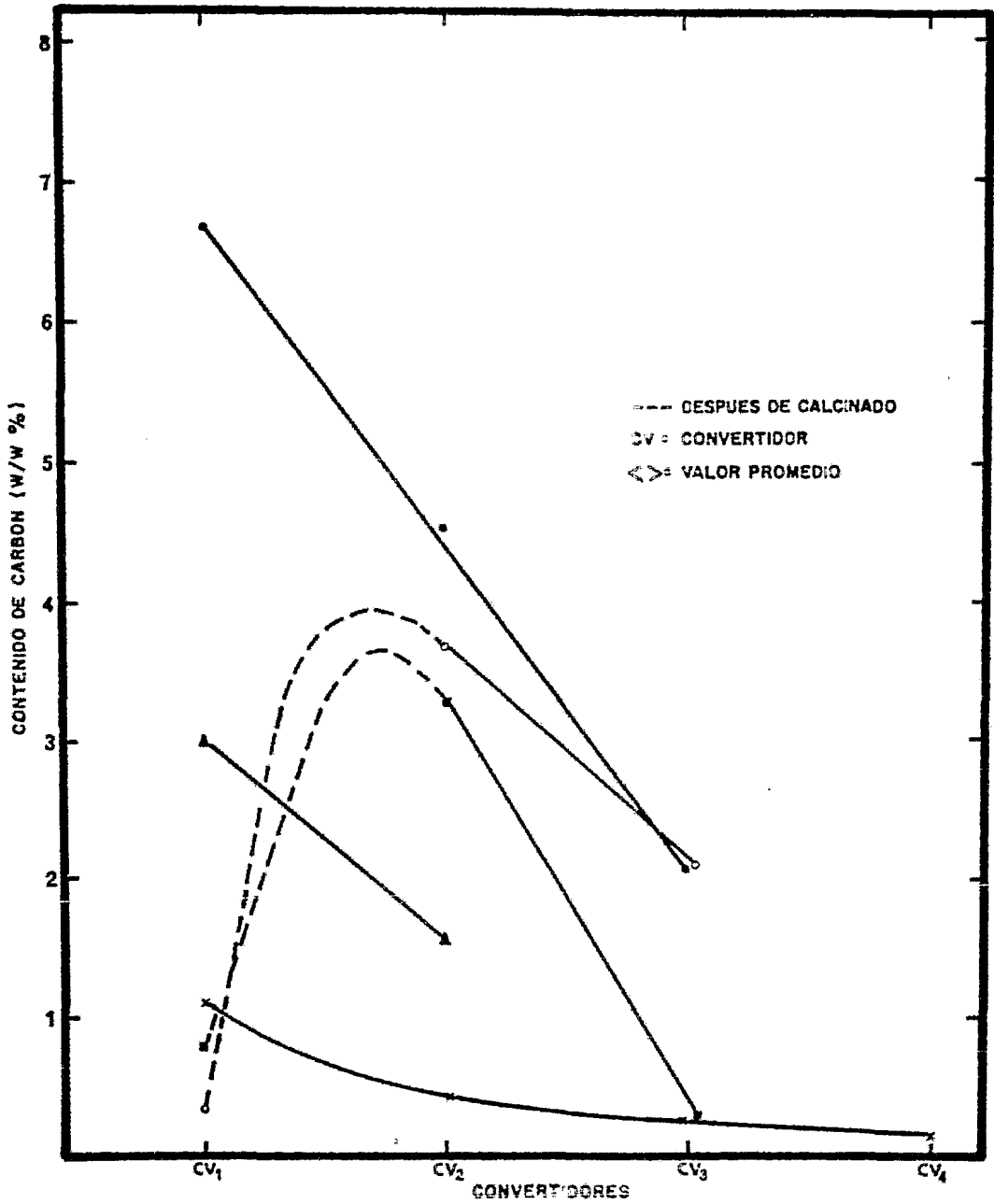


FIGURA VIII<sup>(25)</sup> - REPRESENTACION ESQUEMATICA DEL CONTENIDO DE CARBON EN EL CATALIZADOR DE LOS DIFERENTES CONVERTIDORES

nes totales de azufre en los gases de salida del tren de recuperación<sup>53 55</sup>.

Por otra parte, como se puede ver en la figura VI.12, desde el punto de vista termodinámico, la disociación (craqueo) del CS<sub>2</sub> de acuerdo a la ecuación de reacción VI.3 puede llevarse a cabo a las temperaturas de reacción de los convertidores catalíticos, trayendo como consecuencia un aumento en la deactivación del catalizador por carbonización.



Por lo tanto, con el objeto de alcanzar altas recuperaciones de azufre, estos compuestos deben ser convertidos a azufre elemental dentro de los convertidores catalíticos. La descomposición del COS y CS<sub>2</sub> ocurre por los siguientes mecanismos de hidrólisis<sup>22 55</sup>:

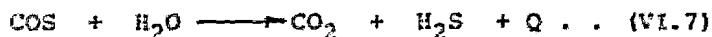
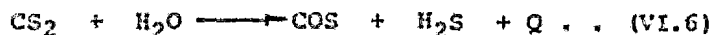


donde: Q es el calor desprendido.

Los cálculos termodinámicos indican que, a las temperaturas normales de operación, el equilibrio se favorece hacia el lado derecho de la reacción, teniéndose que la reacción inversa es despreciable, sin embargo las velocidades de reacción para ambas reacciones y en especial para la del CS<sub>2</sub> son muy lentas, por lo que la conversión sólo está limitada por la actividad del catalizador<sup>28 22 53 39</sup>.

Por experimentación se ha demostrado<sup>22 55</sup> que el CS<sub>2</sub> es aproximadamente dos veces más difícil de hidrolizar que el COS, esto puede ser explicado de la siguiente manera:

- La hidrólisis de CS<sub>2</sub> se lleva a cabo en dos pasos:



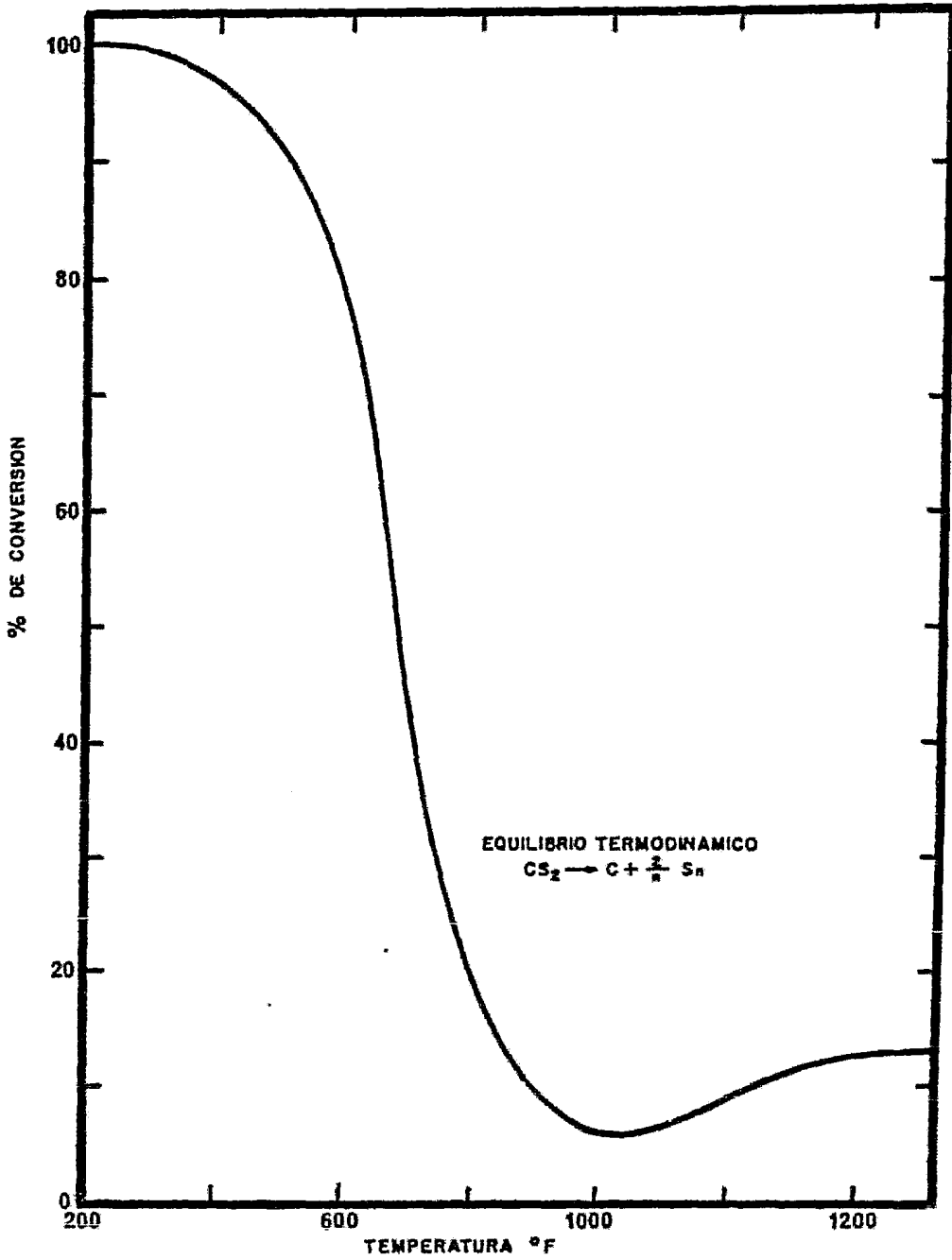


FIGURA VI.12 - EQUILIBRIO TERMODINAMICO PARA LA DISOCIACION DEL  $\text{CS}_2$  <sup>(22)</sup>

- La "disponibilidad" de los sitios activos es equivalente para cada caso.
- Las energías de activación para cada reacción son equivalentes.

Debido a este fenómeno la mayoría de los investigadores han concentrado sus esfuerzos principalmente en el estudio de la hidrólisis del  $\text{CS}_2$  ya que si se logran altos niveles en la conversión de éste, entonces se completará esencialmente la reacción del  $\text{COS}$ .

En la figura VI.13<sup>39</sup> se observa que cuando se hace pasar un gas ácido sobre un catalizador fresco a temperaturas de operación normales de los convertidores, el porcentaje de conversión del  $\text{CS}_2$  disminuye rápidamente con el tiempo, este tipo de observaciones motivó a algunos investigadores<sup>22 53 39</sup> a realizar una serie de experimentos para determinar las causas de este fenómeno.

En un sistema formado por una corriente gaseosa de  $\text{CS}_2$  y agua el cual se hace pasar por un catalizador de Alúmina Activada, se encontró que la hidrólisis es completa en un rango de temperaturas de 200 a 300°C. Sin embargo, cuando se agregó  $\text{SO}_2$  a la corriente de alimentación se observó que la conversión disminuyó y de hecho varió con la cantidad de  $\text{SO}_2$  presente en la corriente (fig. VI.14)<sup>55</sup>

Uno de los estudios más completos en este campo fue el realizado por la *Western Research & Development Ltd.*, en donde se llevaron a cabo una serie de experimentos para determinar los efectos del  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{SO}_2$ ,  $\text{H}_2\text{O}$  y  $\text{CO}_2$  en la hidrólisis del  $\text{CS}_2$ . A continuación se describen los resultados obtenidos por esta institución<sup>22</sup>.

- Efectos del  $\text{H}_2\text{S}$  y  $\text{SO}_2$ .- Como se puede observar en la figura V.15 el  $\text{H}_2\text{S}$  no tiene efectos significativos ya que el perfil de conversión es similar al de la corriente pura, sin embargo, la adición de 1% de  $\text{SO}_2$  en la corriente de alimentación reduce la velocidad de hidrólisis del  $\text{CS}_2$  en aproximadamente 40%, esto podría ser explicado, al menos parcialmente por la adsorción inevitable del  $\text{SO}_2$  en los sitios activos del catalizador (sec. VI.A.2.2).

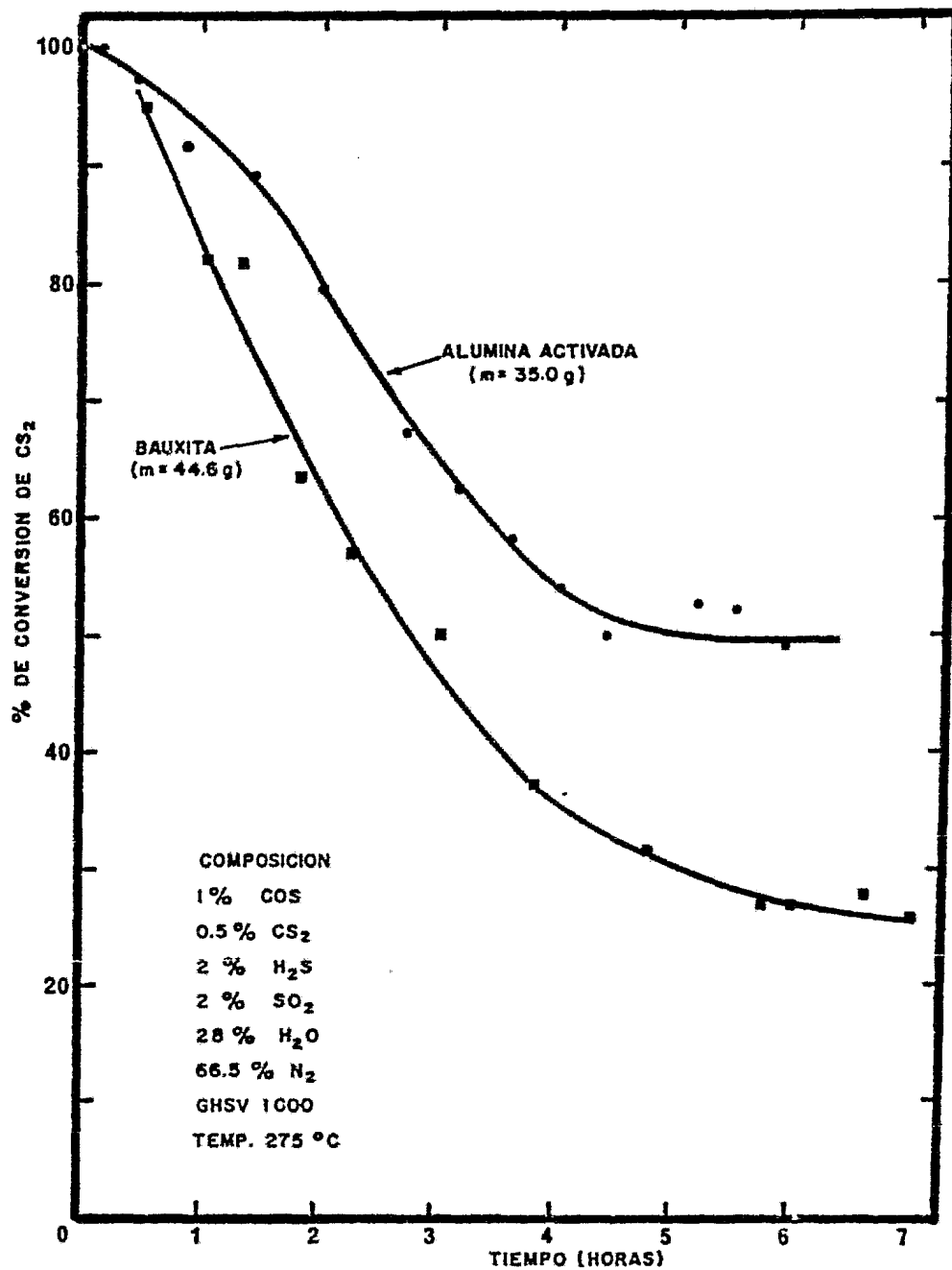


FIGURA VI.13 - VARIACION DE LA CONVERSION DE CS<sub>2</sub> SOBRE CATALIZADOR NUEVO <sup>(39)</sup>

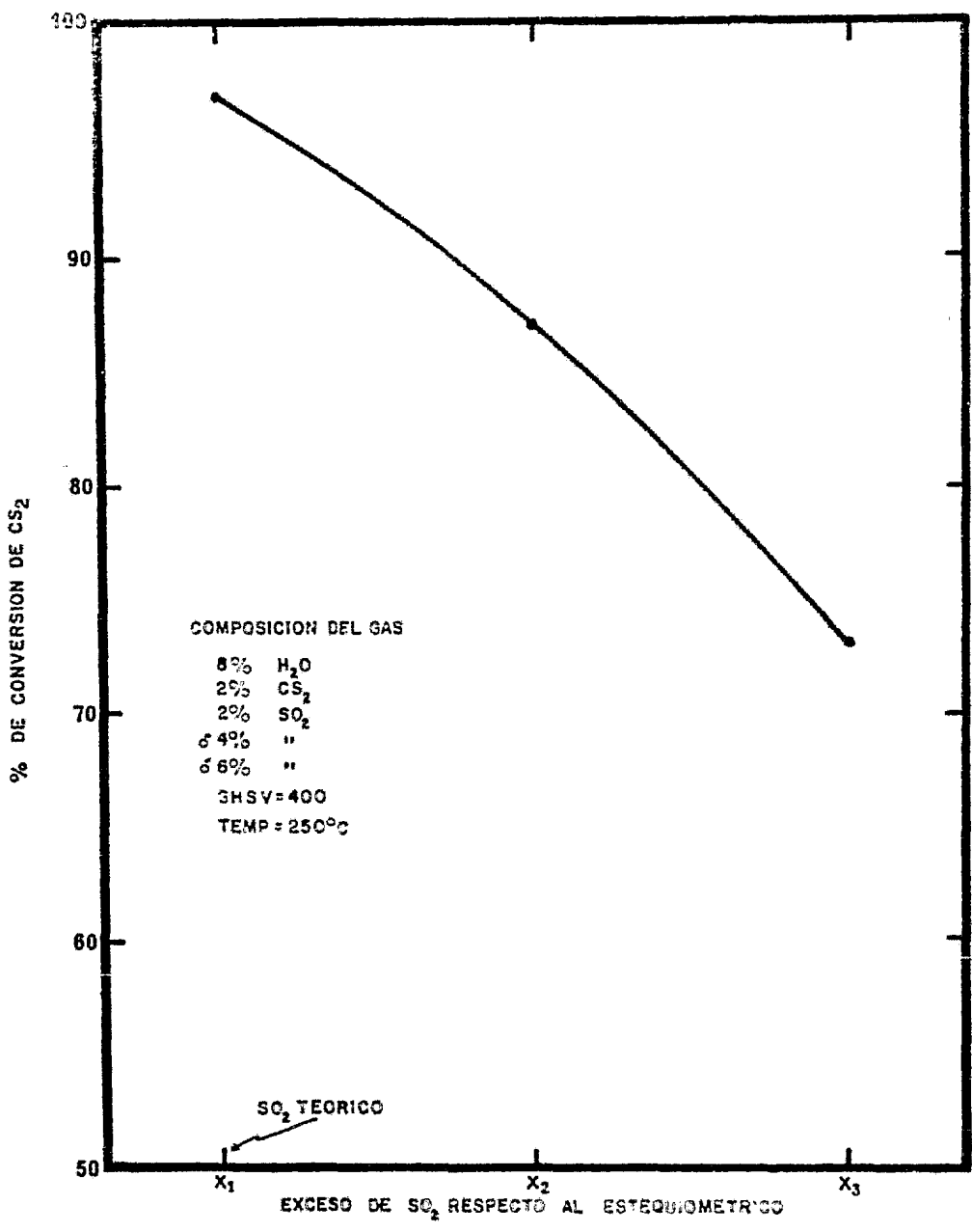


FIGURA VI.14<sup>55</sup> - VARIACION DE LA CONVERSION DE CS<sub>2</sub> RESPECTO A LA CONCENTRACION DE SO<sub>2</sub>



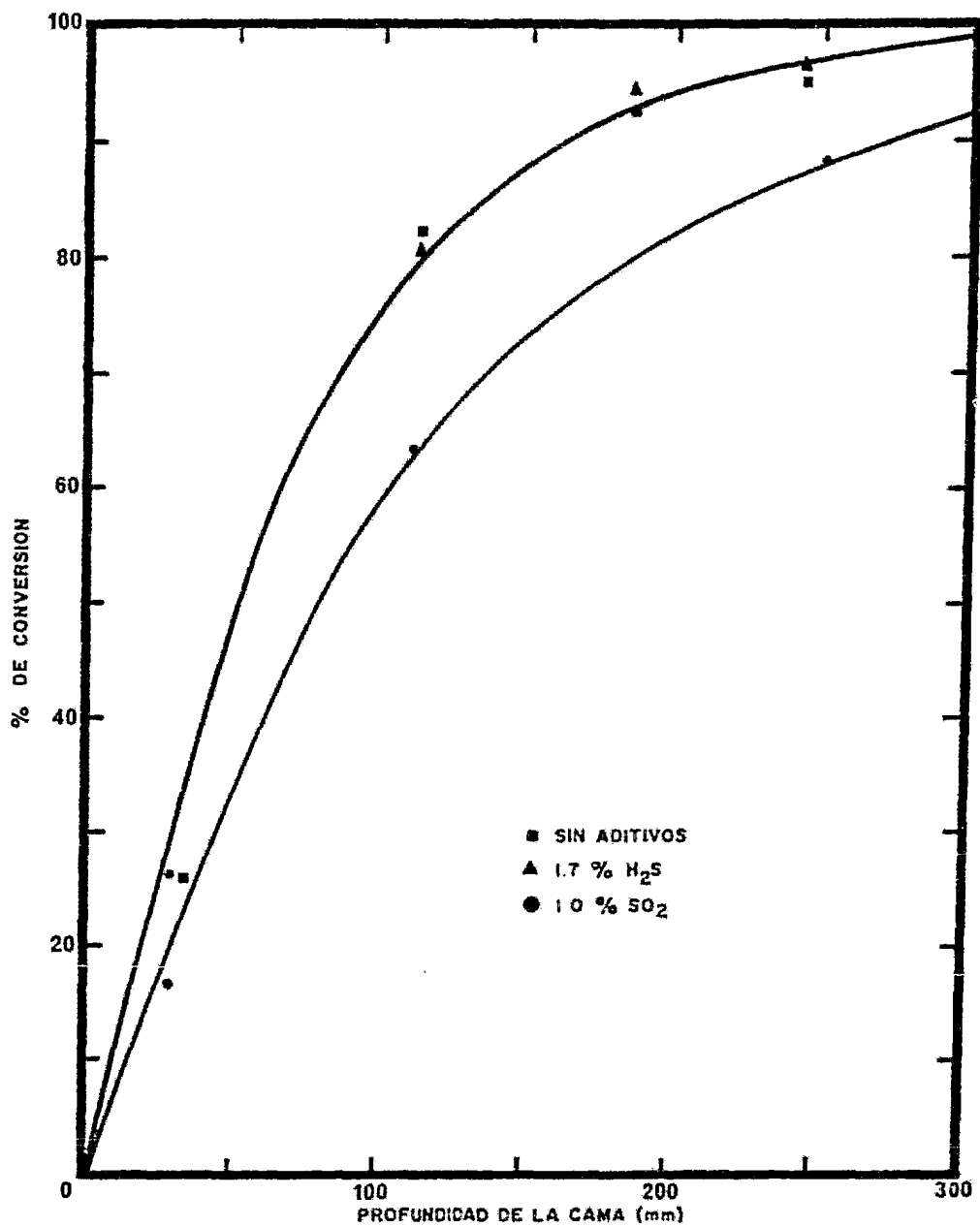


FIGURA VI.15<sup>22</sup>—EFECTO DEL  $H_2S$  Y/O  $SO_2$  EN LA HIDROLISIS DEL  $CS_2$

- Efectos del  $H_2O$ .- En este caso se observó que las concentraciones de agua presentan un efecto consistente sobre las velocidades de reacción ya que al aumentar la concentración de agua se incrementó ligeramente la conversión en un punto determinado de la cama del convertidor, sin embargo, estos efectos son muy pequeños en todo el rango de concentraciones de agua encontradas en las corrientes de las plantas Claus (15 a 30%) por lo cual estos efectos pueden ser despreciados (fig. VI.16).

- Efectos del  $CO_2$ .- Como se puede observar en la figura VI.17 los efectos del  $CO_2$  sobre la velocidad de la hidrólisis del  $CS_2$  no son ni consistentes ni significativos por lo que generalmente son despreciados.

También se ha encontrado que los sulfatos en la superficie del catalizador tienen un fuerte efecto inhibitor en la conversión de estos compuestos de Azufre-Carbón, sobre todo en el caso de la Bauxita, ya que ésta es más susceptible a la formación de sulfatos, por ejemplo, bajo condiciones equivalentes la Alúmina forma 4% de sulfatos y es capaz de convertir 65% de COS a  $275^\circ C$  y un espacio velocidad de  $400 \text{ hr}^{-1}$ , mientras que la Bauxita forma 6.4% de sulfatos y no convierte nada de COS a las mismas condiciones<sup>39</sup>.

#### VI.A.3.1 DEPENDENCIA DE LA HIDROLISIS CON LA TEMPERATURA:

Las figuras VI.18<sup>39</sup> y VI.19<sup>39</sup> muestran la variación de la conversión con la temperatura para las reacciones de hidrólisis del COS y  $CS_2$  respectivamente. Observando y comparando estas dos figuras se puede concluir que:

- Las conversiones se incrementan con la temperatura,
- En el caso del COS no existe ninguna limitación ya que se alcanzó el 100% de conversión, mientras que para el  $CS_2$  solo se logró un máximo de 95%.
- La Alúmina Activada presentó una mayor actividad catalítica en todo el rango de temperaturas investigado.
- Se requieren temperaturas arriba de  $350^\circ C$  ( $662^\circ F$ ) para obtener conversiones significativas de  $CS_2$  (55%<sup>+</sup>) y COS (78%<sup>+</sup>).

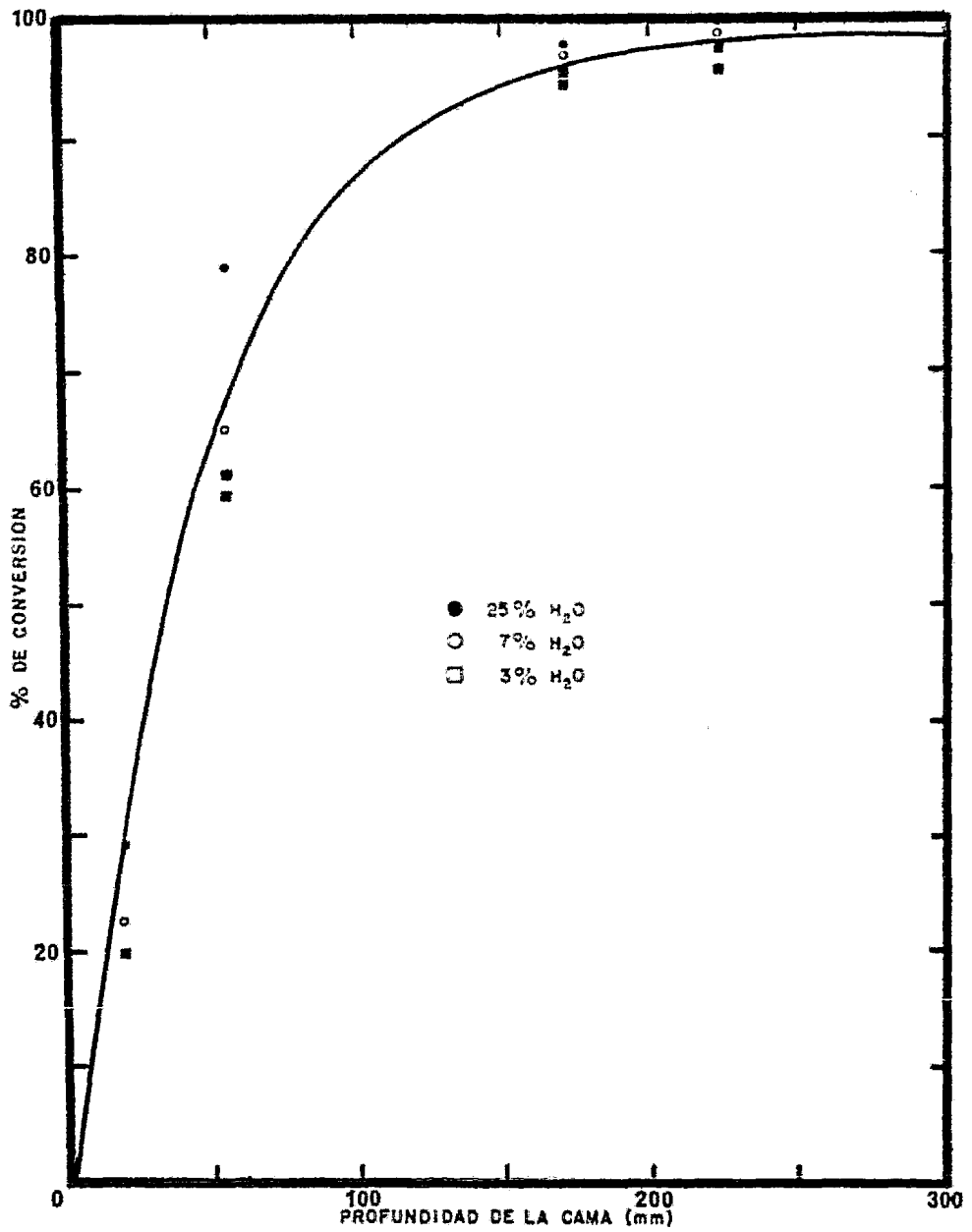
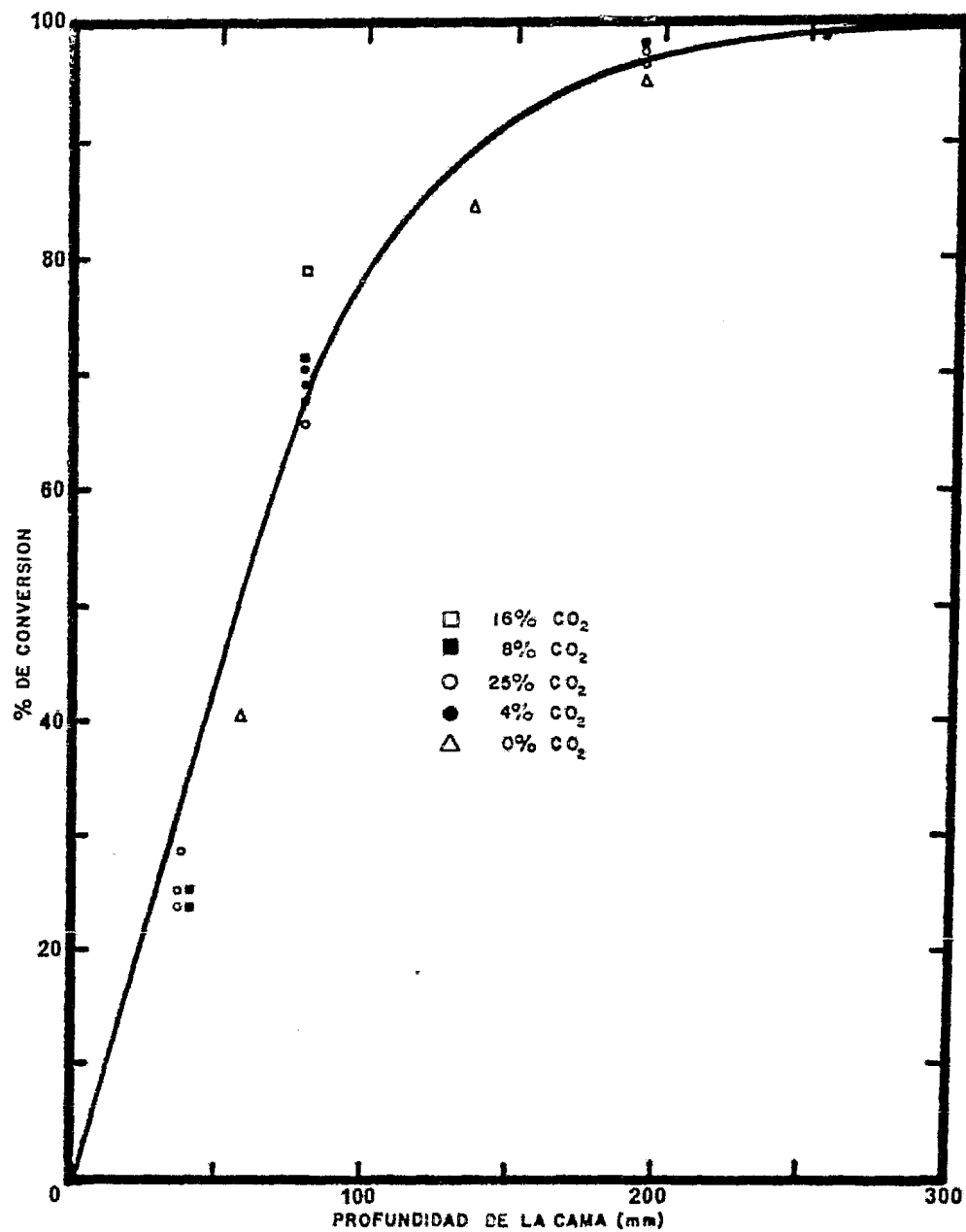


FIG.VI.16<sup>22</sup> EFECTO DEL AGUA EN LA HIDROLISIS DEL  $CS_2$



22  
FIG. VM7 EFECTO DEL  $\text{CO}_2$  EN LA HIDROLISIS DEL  $\text{CS}_2$

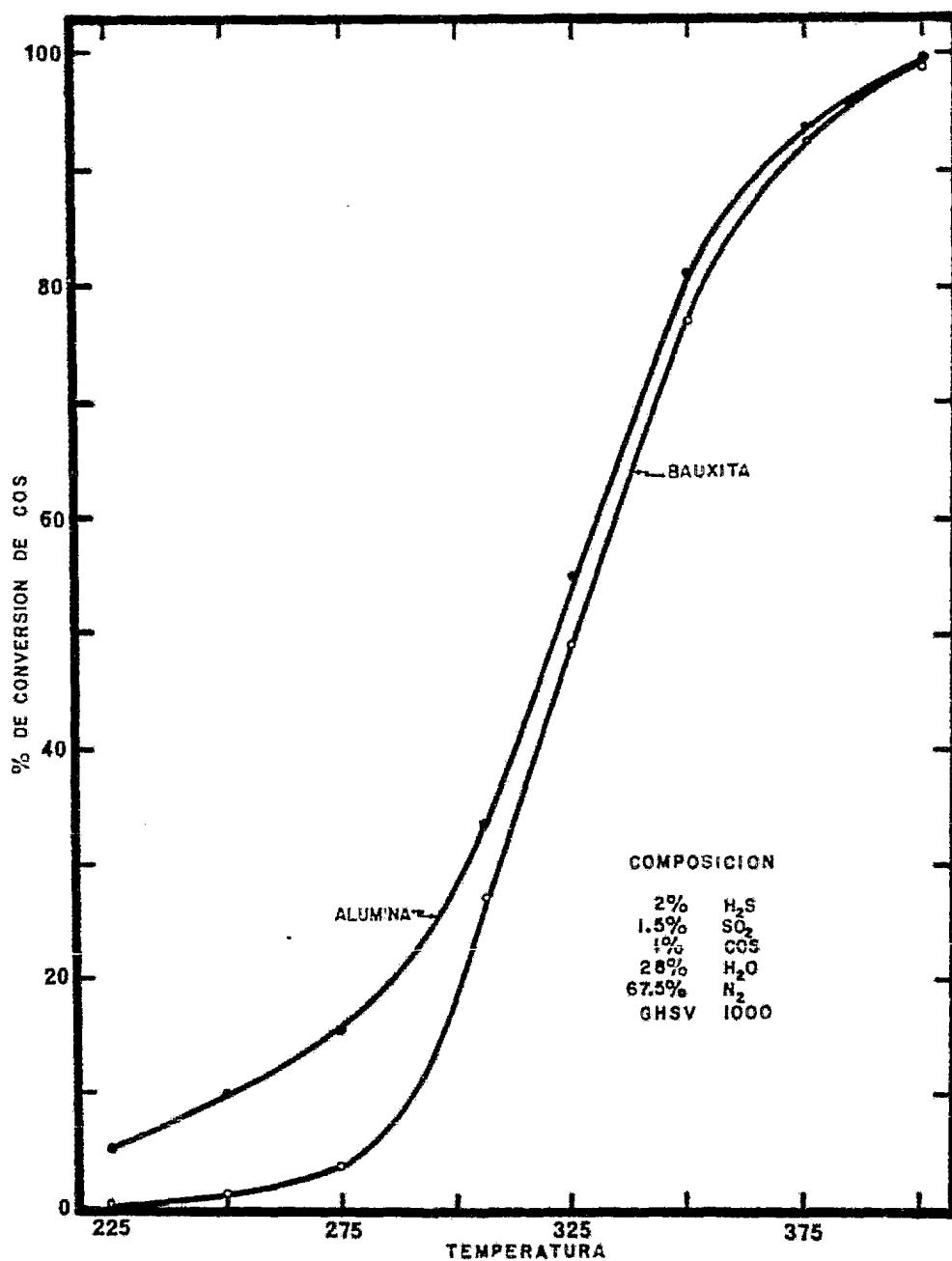


FIG.VI.18<sup>39</sup> CONVERSION DEL COS SOBRE UN CATALIZADOR SULFATADO

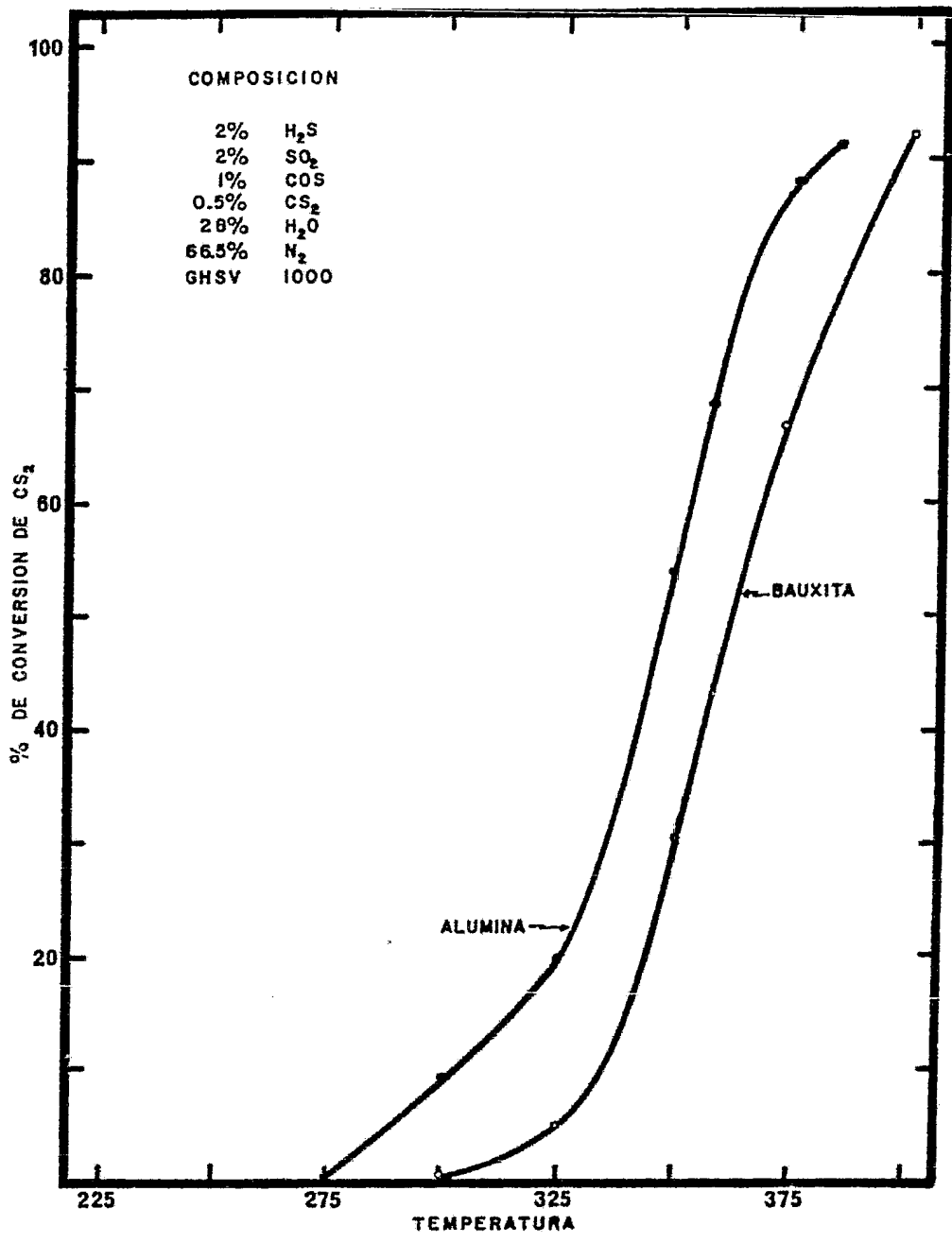


FIG. VI.19<sup>38</sup> CONVERSION DEL CS<sub>2</sub> SOBRE UN CATALIZADOR SULFATADO

Por lo tanto para obtener altas recuperaciones de Azufre en plantas Claus se tendrá que convertir los compuestos de Azufre-Carbón a temperaturas de cuando menos 350°C lo que trae como consecuencia una disminución de la conversión de  $H_2S/SO_2$  por una represión del equilibrio termodinámico del sistema (fig. VI.1). Sin embargo, si la conversión del  $CS_2$  y  $COS$  se lleva a cabo en el primer convertidor, la pérdida de conversión de  $H_2S/SO_2$  puede ser recuperada en los convertidores subsecuentes. Así pues, las mejores eficiencias totales de recuperación se obtendrán cuando el primer convertidor sea operado a la mínima temperatura, arriba del punto de rocío, a la cual se obtenga una conversión satisfactoria de  $COS$  y  $CS_2$  con el objeto de evitar una gran pérdida en la conversión de  $H_2S/SO_2$ . Esta temperatura dependerá principalmente de la composición de la corriente de alimentación al tren de convertidores catalíticos y generalmente tendrá que ser ajustada una vez que la planta esté en operación.

#### VI.B CRITERIOS DE DISEÑO DE LOS CONVERTIDORES CATALITICOS:

Aún cuando los convertidores Claus son ampliamente usados para la recuperación de Azufre a partir de Acido Sulfhídrico, solamente se han publicado <sup>21 22 25</sup> modelos cinéticos que representan en forma parcial o a determinadas condiciones de operación el comportamiento de los convertidores, pero no se ha podido encontrar un modelo cinético lo suficientemente preciso que tome en cuenta los efectos de las reacciones laterales, el envejecimiento del catalizador y las condiciones de operación. Debido a ésto, para el diseño de los convertidores catalíticos, los fabricantes utilizan modelos y reglas empíricas para sus criterios de diseño las cuales han sido obtenidas en plantas piloto y por la experiencia en la operación de plantas comerciales.

Los recipientes más usados para los convertidores catalíticos de las plantas Claus son esencialmente cilindros horizontales con la entrada de gas en la parte superior y la salida en la parte inferior (fig. VI.20). El catalizador se soporta en una cama de 0.9

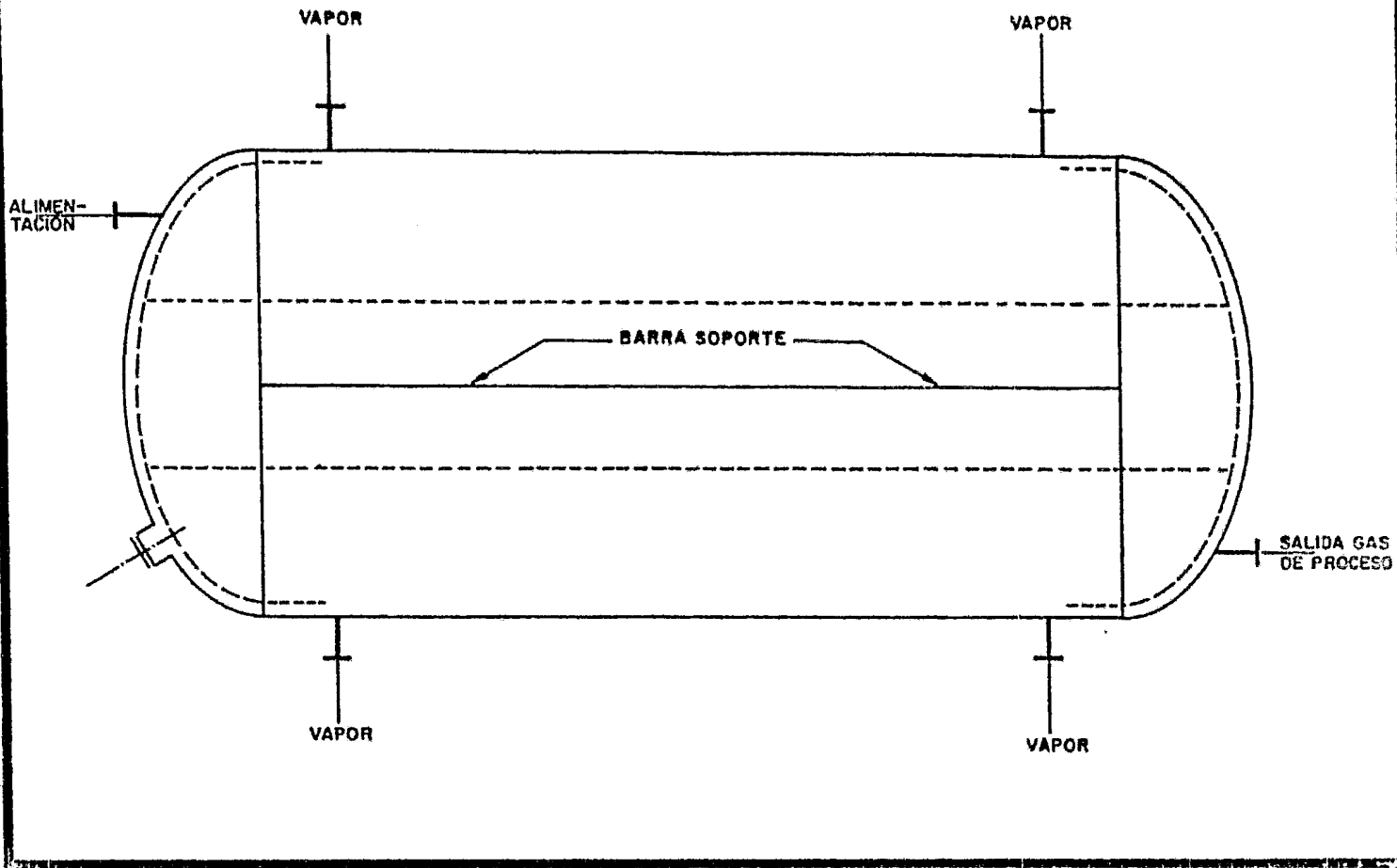


FIGURA VI.20 - ESQUEMA DEL REACTOR CATALITICO.



a 1.2 m (3 a 4 ft) de altura, aún cuando, como se vió en las sec ciones anteriores, la conversión de equilibrio se alcanza dentro del primer pie de catalizador, ésto se hace en parte para compen sar la deactivación del catalizador con el tiempo. Las camas de catalizador pueden ser acomodadas en recipientes separados o bien es posible seccionar un recipiente cilíndrico, lo suficientemente grande, por medio de paredes internas longitudinales o radiales de tal forma que se puede tener más de un convertidor en un solo recipiente, lo cual disminuye los costos de contrucción del equipo. Cuando un cilindro vertical es seccionado por medio de pa redes radiales de tal forma que los convertidores se apilan uno encima del otro las entradas y salidas del gas forzosamente debe rán estar en los lados del recipiente con un flujo de gas descen dente. Este tipo de arreglo ahorra espacio, sin embargo presenta ciertas inconveniencias para reemplazar el catalizador por lo que normalmente el espesor de la cama es un poco mayor (4 a 5 ft) que en el caso de los recipientes horizontales.

En todos estos arreglos las camas de catalizador se caracterizan por tener un espesor pequeño y una area transversal grande lo que puede traer como consecuencia una mala distribución del gas a tra vés de la cama reduciendose significativamente el eficiencia de los catalizadores. En muchos convertidores que no cuentan con dis positivos distribuidores de gas sólo se utiliza, en forma eficaz, el catalizador que se encuentra en la parte central de la cama.

La razón de utilizar este diseño de "pancake" es por su baja ca da de presión lo cual, además de disminuir los costos de operación ayuda a prevenir la condensación de Azufre sobre el catalizador, ya que al disminuir la presión total del sistema se aumenta la tem peratura de rocío de los gases efluentes del convertidor. No obstante, es esencial tener una buena distribución de gas dentro del convertidor para obtener un uso óptimo del catalizador.

Como se mencionó anteriormente, en la literatura no se encontró un modelo cinético con el cual se pudiera dimensionar el convertidor

catalítico , por lo que la tendencia actual es predimensionar los convertidores utilizando espacios velocidad bajos, por ejemplo, aquellos que estén comprendidos en el rango de 300 a 1000 hr<sup>-1</sup> lo cual parece ser adecuado en la mayoría de los casos. Sin embargo, espacios velocidad significativamente menores serían apropiados en los convertidores corriente abajo para compensar los efectos de las grandes reducciones en las concentraciones de los reactivos ya que estas concentraciones a la entrada del primer convertidor pueden ser de 5 a 25 veces las concentraciones en los convertidores corriente abajo.

Por otra parte se ha encontrado<sup>4</sup> que la máxima velocidad lineal aparente del gas se debe encontrar en el rango de 15 a 30 cm/seg (540 a 1080 m/hr) para asegurar que se alcance la conversión de equilibrio. El Dr. Richard K. Kerr<sup>22</sup> en un estudio sobre la cinética catalítica del proceso Claus, encontró que la relación del tamaño de las camas para los tres primeros convertidores debería ser 3:2:8, sin embargo una variación de este tipo no ha sido utilizada todavía a nivel industrial.

Así pues, basandose en las recomendaciones anteriores, es posible hacer un predimensionamiento de la cama del catalizador para los convertidores catalíticos, en el cual se podrá estimar el volumen de catalizador y la forma de la cama catalítica, es decir, su altura y su área transversal, de acuerdo a las siguientes ecuaciones:

$$V_{ct} = \frac{F_w}{\xi \cdot \rho_c} \dots \dots \dots (VI.8)$$

$$A_{ct} = \frac{F_w}{v \cdot \rho_c} \dots \dots \dots (VI.9)$$

$$H_{ct} = \frac{V_{ct}}{A_{ct}} \dots \dots \dots (VI.10)$$

en donde:  $F_w$  = Flujo masa total, Kg/hr.  
 $\xi$  = Espacio velocidad, hr<sup>-1</sup>.  
 $\rho_c$  = Densidad promedio de la corriente de entrada, kg/m<sup>3</sup>.

- $v$  = Velocidad lineal, m/hr.  
 $H_{ct}$  = Altura de la cama catalítica, m.  
 $A_{ct}$  = Area transversal de la cama catalítica,  $m^2$ .  
 $V_{ct}$  = Volumen del catalizador,  $m^3$ .

Por lo que se refiere a la temperatura de salida de los convertidores, en las secciones anteriores se vió que la conversión se incrementa al disminuir la temperatura, sin embargo, ésta temperatura no puede ser seleccionada en forma arbitraria ya que una temperatura muy baja limitaría cinéticamente las reacciones dentro del convertidor puesto que las velocidades de reacción disminuyen al disminuir la temperatura, además al tener temperaturas bajas se puede presentar condensación de Azufre sobre la superficie del catalizador, basandose en esta última restricción se ha encontrado que la temperatura óptima de operación de los convertidores es la temperatura de rocío de la mezcla efluente, no obstante, durante la operación de la planta es extremadamente difícil controlar la temperatura en un punto dado, por lo que se ha optado por diseñar los convertidores para que operen de 15 a 25°F arriba del punto de rocío<sup>4 10</sup>. En el caso del primer convertidor se ha encontrado que es más conveniente operarlo a una temperatura de aproximadamente 344°C (650°F) con el objeto de favorecer la hidrólisis del COS y CS<sub>2</sub> (sec. VI.C).

#### VI.C COMPORTAMIENTO IDEAL DE LOS CONVERTIDORES CLAUS:

En las secciones anteriores se describieron las características principales de la reacción catalítica Claus, así como las limitaciones cinéticas por las cuales esta reacción no alcanza el equilibrio dentro de los convertidores catalíticos. En esta sección se estudiará el comportamiento ideal de los convertidores ya que su conocimiento nos dará una base para:

- Evaluar el comportamiento y eficiencia de operación de una planta o equipo existente y poder determinar si se debe o no hacer mejoras técnicas al proceso.

- Crear nuevos criterios que permitan hacer diseños más eficientes de plantas futuras.

Desde el punto de vista conceptual, el comportamiento ideal de una planta o equipo se alcanza cuando se satisfacen todos los requisitos estequiométricos de las reacciones básicas del proceso bajo las condiciones termodinámicas más favorables y cuando se alcanza el equilibrio en todos los puntos del proceso.

La simulación del comportamiento termodinámico de los Convertidores Catalíticos de las plantas Claus consiste en determinar la composición de equilibrio considerando solamente los estados final e inicial del sistema, sin importar el tiempo, los mecanismos de reacción y las limitaciones cinéticas. Así mismo, se efectúa el cálculo de la temperatura de rocío de la corriente efluente de los convertidores para determinar la temperatura mínima a la cual es posible operar estos equipos sin tener problemas de envenenamiento del catalizador.

Por otra parte, el módulo CONCAT efectúa un predimensionamiento del equipo con el objeto de tener una idea del volumen mínimo de catalizador, necesario para efectuar las reacciones. En el apéndice A.4 se presenta la descripción del módulo CONCAT.

## VII CONDENSADOR DE AZUFRE

Una vez que se ha formado Azufre elemental, ya sea en el reactor térmico o en el catalítico, es preciso separarlo. Para ello, la corriente gaseosa pasa al condensador donde se enfría, dando como resultado la condensación de Azufre. Esta se puede realizar mediante tres métodos, que son:

- Precipitación electrostática,
- Torres de lavado, y
- Cambiadores de calor de tubos y coraza.

Una práctica común en Europa para recuperar el Azufre formado es utilizar el método de precipitación electrostática, el cual consiste en la formación intencionada de niebla por sobrecalentamiento de los gases calientes efluentes del reactor térmico o catalítico, a una temperatura de alrededor de 135°C (275°F) mediante un sistema de agua atomizada; las pequeñísimas gotas de Azufre así formadas en la corriente gaseosa son removidas mediante una precipitación electrostática<sup>73</sup>.

En el método de torre de lavado, actualmente en desuso, la corriente de proceso se inyecta en el fondo de una torre empacada o bien de platos mampara donde, al ascender y ponerse en contacto con Azufre líquido, se enfría y condensa el vapor de Azufre. El calor absorbido de la corriente de proceso, tanto sensible como latente, por el Azufre líquido descendente es extraído de él por medio de serpentines de enfriamiento o por cambiadores de calor que se encuentran en el fondo de la torre donde se enfría con agua hasta una temperatura de entre 121 y 135°C (250 y 275°F). Una parte del Azufre líquido enfriado se bombea a la parte superior de la torre para utilizarse como medio condensante y el resto, que representa el Azufre recuperado, se envía a almacenamiento<sup>6 56 59 61 73</sup>.

El uso de este sistema de condensación ha decaído debido a su alta inversión inicial y costo de mantenimiento comparado con otros sistemas, además de que presentan problemas mecánicos para bombear el Azufre de lavado.

Actualmente, el método más empleado para condensar el Azufre es el del condensador de tubos y coraza. Este puede ser vertical o de tubos inclinados; el vertical es poco utilizado hoy en día y emplea como medio de enfriamiento aire o agua, presentando el problema de esfuerzos térmicos provocados por una mala distribución de calor ya que al escurrir el Azufre condensado por la pared del tubo forma una película cada vez más gruesa, lo que produce variaciones en el coeficiente de transferencia de calor <sup>73</sup> .

En el condensador de tubos inclinados normalmente se genera vapor de agua, aunque en ocasiones solo se precalienta agua para caldera, como una forma de utilizar el calor absorbido durante la condensación del Azufre. El vapor generado es de baja presión, entre 2.5 y 5 Kg/cm<sup>2</sup> man. (35 y 70 psig) y puede ser utilizado como medio de calentamiento dentro de la planta o fuera de ella. Dentro de estos condensadores la corriente de proceso se enfría a temperaturas de entre 127 y 193°C (260 y 380°F) <sup>38 48 58 66 68 70</sup>

Aunque en este caso el Azufre condensado también cubre parte de la superficie de los tubos inclinados, la variación del coeficiente de calor es menor que en el caso de tubos verticales <sup>73</sup>. El esquema de este tipo de cambiadores se muestra en la figura VII.1.

La selección de cualquiera de los métodos de condensación anteriores, dependerá de las condiciones particulares del sistema, de la ubicación de la planta y de un análisis económico de los mismos.

En el presente trabajo se considera el empleo de condensadores de tubos y coraza, por ser los más utilizados actualmente y por ser relativamente más económicos.

#### VII.A COMPORTAMIENTO DEL AZUFRE RESPECTO A LA TEMPERATURA:

Durante la condensación del Azufre se presentan algunos problemas debido a que tanto su vapor como su líquido son mezclas de sus diferentes formas alotrópicas. El vapor está constituido por las especies S<sub>2</sub> a S<sub>8</sub>, siendo las más abundantes las de S<sub>2</sub>, S<sub>6</sub> y S<sub>8</sub> a ca

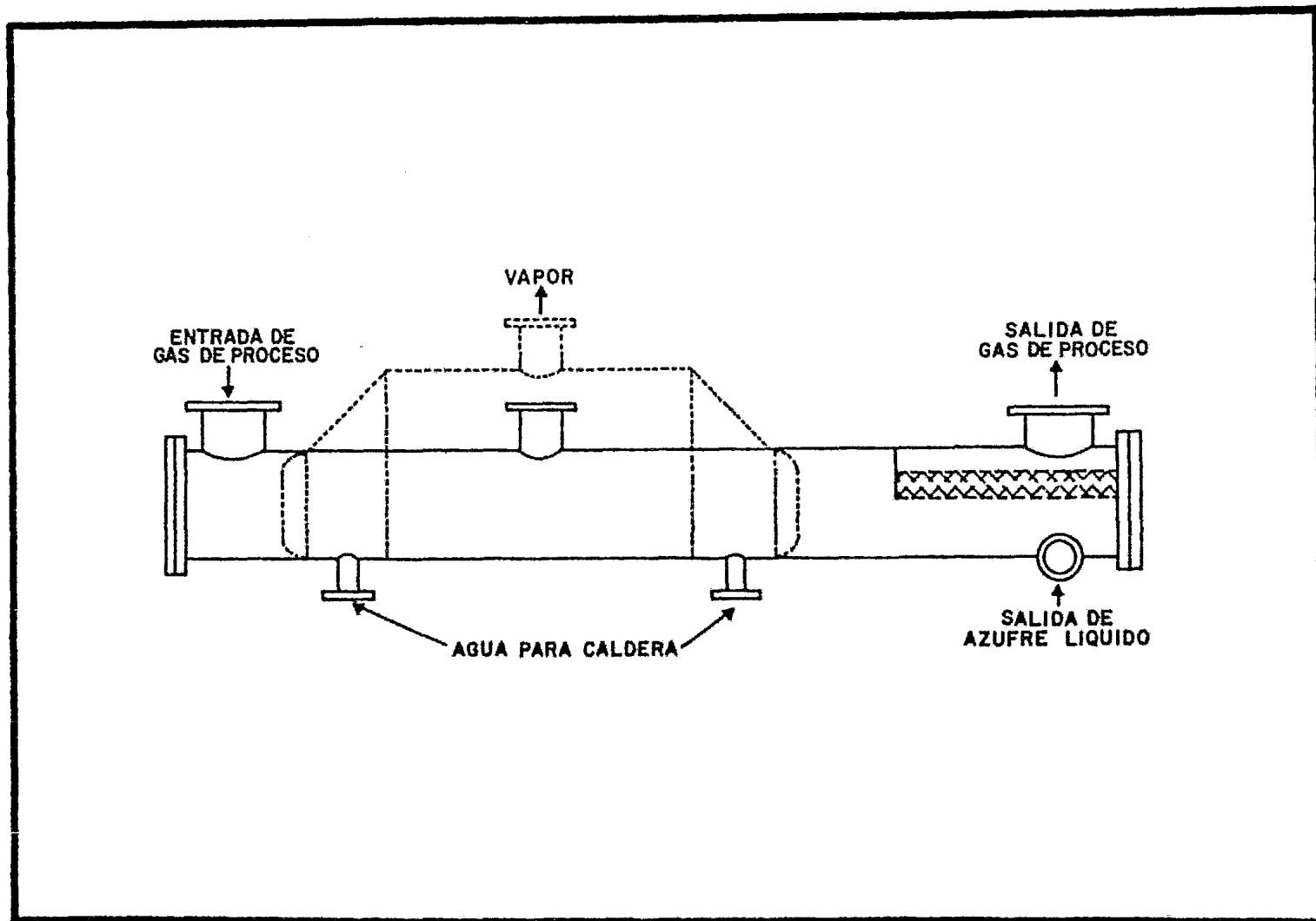


FIGURA VII.1 CONDENSADOR DE AZUFRE

si cualquier temperatura, mientras que el líquido es una mezcla de anillos de  $S_8$  y cadenas polímeras de  $S_n$ , donde  $n$  es un número indefinido. La composición de cada especie en su respectiva fase está controlada por el equilibrio de interconversión y por lo tanto depende de la temperatura.<sup>17 66 70 94</sup>

Como es sabido, la presión de saturación de un líquido depende de la temperatura y, por lo general, es directamente proporcional a ella. Así, la presión parcial del Azufre en la mezcla gaseosa es igual a la presión de vapor saturado del líquido a la temperatura de la corriente. De aquí que el contenido de vapor de Azufre del efluente del condensador se vea disminuido por la temperatura de operación más baja posible.<sup>66 68</sup>

Las temperaturas de operación del condensador están limitadas por el punto de solidificación del Azufre, el cual es de  $115^\circ\text{C}$  ( $239.4^\circ\text{F}$ ), como límite inferior y por su punto de ebullición, que es de  $445^\circ\text{C}$  ( $832.3^\circ\text{F}$ ) como límite superior.<sup>17 94</sup>

El comportamiento de la viscosidad del Azufre líquido con respecto a la temperatura, tiene un aspecto muy particular ya que mientras que en la mayoría de los líquidos la viscosidad decrece al incrementar la temperatura, el Azufre líquido puro presenta variaciones como se muestra en la figura VII.2. Esto se debe a que abajo de  $160^\circ\text{C}$  ( $320^\circ\text{F}$ ), el Azufre líquido está formado principalmente por anillos de  $S_8$  lo que hace que la viscosidad se comporte en forma normal, es decir decrece conforme aumenta la temperatura.

Arriba de  $160^\circ\text{C}$  se observa un aumento repentino de la viscosidad causado por la formación de largas cadenas polímeras de  $S_n$ . Al incrementarse aún más la temperatura, aumenta la concentración de estas cadenas hasta llegar a un punto en donde, debido al rompimiento térmico de las uniones, se disminuye la longitud de las cadenas trayendo como consecuencia un decremento gradual de la viscosidad comprendida entre  $188^\circ\text{C}$  ( $370^\circ\text{F}$ ) y el punto de ebullición.<sup>66 84</sup>

Por otra parte, se ha encontrado que algunas sustancias tienen la



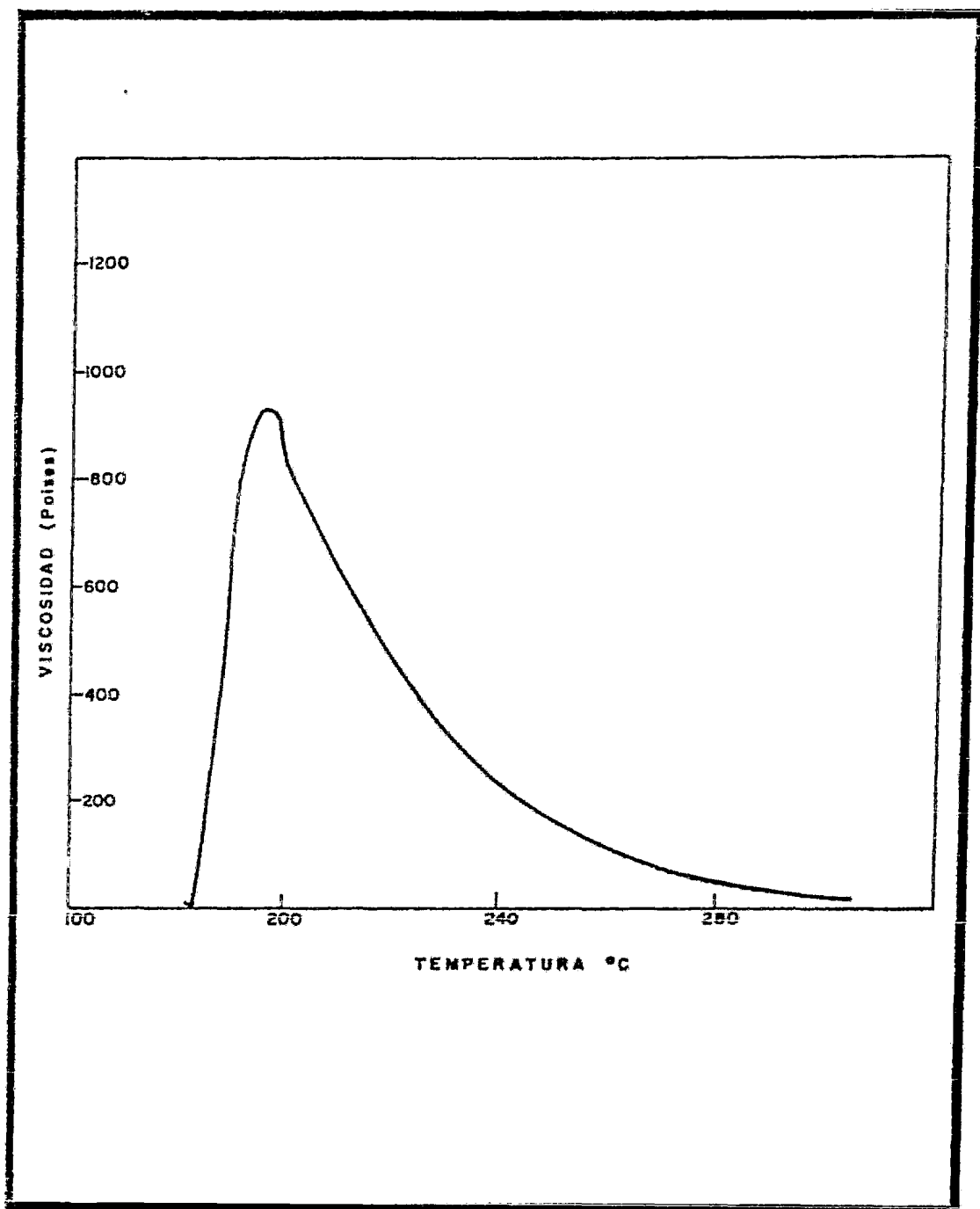


FIGURA VI.2 VISCOSIDAD DEL AZUFRE LIQUIDO

## VII.B FORMACION Y ELIMINACION DE NIEBLA:

Dentro de los condensadores de Azufre de las plantas Claus pueden existir dos formas de niebla. Una consiste en gotas suspendidas y suficientemente pequeñas que se comportan casi como un gas y no es posible retenerlas en dispositivos normales de eliminación de niebla. En la otra forma, las gotas son más grandes y aunque se encuentran suspendidas en el gas, es posible eliminarlas por medio de mallas o algún otro dispositivo. Este último tipo de niebla puede formarse a partir de la unión de las primeras para generar gotas más grandes o bien por arrastre del Azufre condensado debido a una alta velocidad del gas.

La formación de niebla en un condensador depende de la rapidez relativa de disminución de temperatura y concentración de Azufre en el gas. La niebla aparecerá si la trayectoria de enfriamiento de la mezcla gaseosa atraviesa la curva de saturación en cualquier punto. Termodinámicamente, la niebla puede formarse si existen condiciones de supersaturación del gas, lo cual ocurre cuando se remueve calor de la corriente de gas a una rapidez comparable a la de transferencia de masa, suficiente para que la temperatura del gas caiga por debajo del punto de rocío de la mezcla gaseosa<sup>48 73</sup>.

Aunque la niebla se forma sin núcleos de condensación presentes, ésta se ve fuertemente favorecida en caso de que existan, por lo que es recomendable evitarlos. Estos núcleos de condensación podrían ser partículas de catalizador arrastradas o partículas producidas por corrosión y/o erosión.

En cualquier método de condensación de Azufre que se use, se presenta el problema de la formación de niebla; excepto en el caso del método de precipitación electrostática, en donde su generación es intencionada.

En caso de que no se cuente con un sistema adecuado de eliminación de niebla a la salida del condensador, se tendrá una disminución en la recuperación de Azufre y contribuirá a aumentar su emisión

a la atmósfera. Además, al pasar por el recalentador y evaporarse, afectará la operación del convertidor catalítico ya que aumenta el punto de rocío de la mezcla gaseosa y, por lo tanto, se requerirá de una temperatura de operación mayor para mantener de esta forma un margen adecuado de operación arriba del punto de rocío. Otro efecto adverso que ejerce la presencia de estos vapores de Azufre en el convertidor catalítico es que favorece el equilibrio hacia la izquierda de la reacción entre el  $H_2S$  y el  $SO_2$  (ec. VI.1). Estos efectos contribuyen a disminuir la conversión y, por ende, la recuperación.

Por el contrario, si no se vaporiza la niebla, se depositará en el catalizador deactivándolo. Esto es más nocivo para la conversión ya que la disminución de la misma por incremento en la presión parcial del Azufre es menor que la producida por la deactivación del lecho catalítico<sup>48</sup>.

Estos eliminadores de niebla deben colocarse en forma horizontal. Por otra parte, se ha probado que el eliminador tipo *York Style - 360* o equivalente, con aproximadamente 98% de huecos en la malla, opera con muy buenos resultados<sup>48</sup>.

La velocidad lineal de la corriente gaseosa a través de los eliminadores de niebla es de primordial importancia ya que afecta directamente en su eficiencia y caída de presión causada. En la tabla VII.1 se muestran las máximas velocidades permitidas y sus respectivas caídas de presión aproximadas para los eliminadores de niebla según la colocación del condensador dentro del tren de recuperación de la planta Claus.<sup>48</sup>

TABLA VII.1

CONDENSADOR	1°	2°	3°	4°
VELOCIDAD (m/seg)	3.05	3.35	3.66	3.81
CAIDA DE PRESION (mmH <sub>2</sub> C)	30.5	32.5	34.3	35.6

A partir de las velocidades lineales del gas recomendadas es posible calcular el área transversal requerida del eliminador de acuerdo a la ecuación VII.2.

$$A_e = G/v \quad (\text{VII.2})$$

en donde:

$A_e$  = Área transversal de eliminador

$G$  = Flujo volumétrico del gas

$v$  = Velocidad del gas

Es importante hacer notar que este tipo de dispositivos requieren de revisión constante ya que un excesivo ensuciamiento provocaría una alta caída de presión y, obviamente, una disminución de su eficiencia.

#### VII.C CONSECUENCIAS DE LA OPERACION DEL CONDENSADOR:

Una buena selección de las condiciones de operación del condensador de Azufre y la operación misma, incluyendo la del eliminador de niebla, contribuyen a aumentar la recuperación y la conversión. El efecto de una operación deficiente se explica a continuación.

En el primer convertidor catalítico del tren de recuperación, que opera a una temperatura relativamente alta para hidrolizar al COS y CS<sub>2</sub>, no habría problema por condensación de Azufre en el catalizador del siguiente convertidor catalítico, pero sí disminuiría la conversión por efecto del aumento de la presión parcial del Azufre en el sistema, aunque como se vió anteriormente, no es tan nociva<sup>26</sup>. En el resto de los condensadores una operación deficiente tendrá un impacto mayor en la condensación de Azufre en el catalizador de los convertidores causando un mayor efecto adverso a la conversión.

Puesto que una alta recuperación requiere de una alta conversión y ésta se efectúa en los convertidores, se requiere de un buen funcionamiento de los equipos anteriores a ellos.

Si los condensadores operan a altas temperaturas, se presentarán

los efectos arriba mencionados ; por el contrario, si operan a bajas temperaturas, se tendrán problemas de taponamiento de tubería por solidificación o por la alta viscosidad del Azufre. Sin embargo, se recomienda que el último condensador opere a bajas temperaturas, esto es, 11°C (20°F) arriba del punto de solidificación de el Azufre, ya que así se asegura una buena recuperación y, principalmente una baja emisión a la atmósfera del mismo.<sup>26 68 70 71</sup>

Por otra parte, cuando la unidad de condensación empieza a ensuciarse, trae por consecuencia una disminución en el área de flujo del gas, lo que provoca un aumento en su velocidad y caída de presión favoreciendo así la formación de niebla; para evitar este tipo de problemas de operación se deberá limpiar con cierta frecuencia los condensadores.

#### VII.D CRITERIOS DE DISEÑO DE LOS CONDENSADORES:

Como se vió anteriormente, la selección de la temperatura de operación del condensador es muy importante. En base a estudios de laboratorio y campo se recomienda que los primeros condensadores operen a temperaturas comprendidas entre 171 y 193°C (340 y 380°F) mientras que para el último se recomienda entre 127 y 132°C (260 y 270°F)<sup>26 68 70</sup>.

Sin embargo, cualquiera de ellos puede operar en el intervalo comprendido entre los valores mínimo y máximo arriba mencionados y su selección dependerá de las condiciones particulares del sistema, como son: tipo de proceso seleccionado, concentración de H<sub>2</sub>S en la alimentación, método de recalentamiento seleccionado, pérdidas de Azufre y contaminación del catalizador.

Como se mencionó antes, el calor involucrado en la condensación se utiliza para producir vapor de agua de baja presión -entre 2.5 y 5.0 Kg/cm<sup>2</sup> man (35 y 70 psig)- y su selección dependerá de la temperatura de operación del condensador y de los requerimientos de vapor en la planta, utilizandose éste básicamente como medio de calentamiento.

En el aspecto mecánico, debido a que se requieren bajas caídas de presión del lado de los tubos y evitar la formación de niebla, su diseño y dimensionamiento es ligeramente diferente al común de los condensadores de tubo y coraza.

Una variable muy importante es la masa-velocidad del gas a través de los tubos. Para prevenir la formación de niebla, esta variable no deberá exceder de  $6.1 \text{ lb/seg}\cdot\text{ft}^2$ ; es importante hacer notar que este valor considera que el equipo tendrá un ensuciamiento normal sin embargo, en el caso de que algún o algunos de los tubos se taponen o fallen, la masa velodiada aumentará y podría ocasionar la formación de niebla<sup>48</sup> .

Por otro lado, el coeficiente total de transferencia de calor no deberá ser mayor de  $13 \text{ BTU/h}\cdot\text{ft}^2\cdot^\circ\text{F}$ ; los valores recomendados para diseño se encuentran entre 8 y  $13 \text{ BTU/h}\cdot\text{ft}^2\cdot^\circ\text{F}$  para el caso en que se genere vapor o se precaliente agua como forma de utilizar el calor involucrado. Si se emplea una mezcla de agua-glicol o aceite como medio de enfriamiento, se recomienda un coeficiente de entre 8 y  $11 \text{ BTU/h}\cdot\text{ft}^2\cdot^\circ\text{F}$  .

Se recomienda evitar el uso de altas velocidades de transferencia ya que puede ocasionar la necesidad de una excesiva masa velocidad del lado de los tubos, el cual, como se mencionó antes, es contraproducente para la formación de niebla.

Para el diseño de los condensadores de Azufre se recomienda utilizar un factor de ensuciamiento de 0.005 para el lado de los tubos mientras que para el lado de la coraza se recomienda 0.001<sup>48</sup> .

Por lo que respecta a los tubos, su selección también es importante, recomendandose utilizar de  $1\frac{1}{2}$  pulgadas de diámetro nominal, y 10, 12 o 14 BWG, pudiendo seleccionar un diámetro mayor si se requieren muy bajas caídas de presión (0.2 psi). Por lo que respecta a las longitudes de los tubos, éstas estarán comprendidas también dentro de las comerciales, las cuales son: 32, 24, 16, 12, 10

y 8 ft<sup>81</sup>. Para la selección de las dimensiones de los tubos es importante recordar que la máxima caída de presión permitida dentro de este tipo de condensadores es de 1 psi.

El número de tubos y su respectivo diámetro de coraza, sin considerar el espacio de vapor requerido, también se encuentra dentro de los estándares comerciales, algunos de los cuales se enlistan en la tabla VII.2 y corresponden a un arreglo para tubos de 1.5 in en cuadro de  $1\frac{7}{8}$  y un paso, que son los recomendados para estos equipos<sup>48 81 90</sup>.

TABLA VII.2

Núm. de tubos	Diám. de coraza
62	21½
78	23½
94	25
112	27
131	29
151	31

A partir de un gran número de corridas para determinar la inclinación óptima de los tubos se ha encontrado que cuando se opera con una inclinación de aproximadamente 0.6° (3.2 mm/305 mm) se obtiene una menor superficie del tubo cubierta por el Azufre condensado<sup>88</sup>.

## APENDICE A

En este apéndice se describirá con más detalle todos los módulos de simulación con que cuenta el programa SIMCLA para la simulación de las plantas Claus.

### A.1 MODULO DE DATOS DE ENTRADA (DATENT):

De los cinco módulos con que cuenta el programa SIMCLA, el módulo DATENT es el único que no simula algún equipo de las plantas de recuperación de Azufre, sino que, como su nombre lo indica, a través de él se alimenta al programa los datos de la corriente de alimentación a la planta, así como los números identificadores de las especies químicas involucradas en la simulación (Cap. III.A) y por último la matriz  $a_{ij}$  que contiene el número de átomos del  $j$ -ésimo elemento de las  $i$ -ésimas especies gaseosas.



Por otro lado, el módulo DATENT también tiene como función la evaluación de las propiedades físicas a la temperatura y presión de la corriente de alimentación, los flujos masa de cada especie, etc para después transferir todas estas variables al módulo siguiente de acuerdo a lo representado en la figura III.1. Es por esto que, para cualquier simulación, ya sea de un solo equipo o de una planta completa, siempre se deberá iniciar la simulación precisamente con este módulo. Este procedimiento tiene la ventaja adicional de poder simular, en una sola corrida de computadora, equipos o plantas con diferentes alimentaciones.

La forma de alimentar los datos requeridos por este módulo es como sigue:

TARJETA # 1:

\$DATOS TENT= $\lambda.\lambda$ ,PENT= $\lambda.\lambda$ ,M= $e$ ,N= $e$ ,IRAST= $e$ ,\$SEND

en donde:

- $\lambda.\lambda$  = Número real.
- $e$  = Número entero.
- TENT = Temperatura de la corriente de ENTRada a la planta o equipo a simular, °K.
- PENT = Presión de la corriente de ENTRada a la planta o equipo a simular, atm.
- M = Número de elementos químicos diferentes comprendidos en las distintas especies involucradas en la simulación.
- N = Número de especies químicas involucradas en la simulación.
- IRAST = Indicador de RASTreo.  
0; el programa solo imprimirá los resultados finales de la simulación.  
1; el programa imprimirá, además de los resultados finales, algunos resultados parciales que serán de utilidad para poder detectar problemas en caso de una mala convergencia.

TARJETA # 2:

\$SISTEM IDENT=E(1),E(2),...,E(i),...,E(N),\$SEND

en donde:

$E\{i\}$  = Números identificadores de las diferentes especies químicas involucradas. Estos números se muestran en la tabla A.1 (para mayor información referirse al Apéndice C.7).

TABLA A.1  
IDENTIFICADORES DE ESPECIES QUIMICAS

IDENTIFICADOR	ESPECIE
1	H <sub>2</sub> S
2	SO <sub>2</sub>
3	O <sub>2</sub>
4	CH <sub>4</sub>
5	N <sub>2</sub>
6	S <sub>2</sub>
7	S <sub>6</sub>
8	S <sub>8</sub>
9	H <sub>2</sub> O
10	CS <sub>2</sub>
11	COS
12	CO <sub>2</sub>

Notece que el número de identificadores alimentados a esta tarjeta deberá coincidir con el valor asignado a la variable N en la tarjeta anterior.

N-TARJETAS ADICIONALES:

Mediante este conjunto de N-tarjetas de datos se alimentan los flujos molares de cada una de las especies químicas involucradas en la simulación, así como los elementos de la matriz  $a_{ij}$  que contiene el número de los  $j$ -ésimos elementos de las  $i$ -ésimas especies químicas. El formato de alimentación es F10.5 para los flujos molares, mientras que para los elementos de la matriz es I10. Estos últimos deberán ser alimentados en el siguiente orden: Hidrógeno, Azufre, Carbón, Oxígeno y Nitrógeno.

Es importante hacer notar que el orden de estas tarjetas deberá

estar acorde con el orden de los números identificadores alimentados en tarjeta de datos número 2.

Con el objeto de hacer más claro el procedimiento de alimentación de estos datos, supongase el siguiente caso:

TARJETA # 2:

\$\$SISTEM IDENT=1,2,3,4,5,6,7,8,9,10,11,12,\$\$END

entonces, las N-tarjetas adicionales quedarán de la siguiente forma:

H										S										C										O										N																				
1	2	3	4	5	6	7	8	9	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9	0											
nn.nnn										2										1										0										0										0										H <sub>2</sub> S
nn.nnn										0										1										0										2										0										SO <sub>2</sub>
nn.nnn										0										0										0										2										0										O <sub>2</sub>
nn.nnn										4										0										1										0										0										CH <sub>4</sub>
nn.nnn										0										0										0										0										2										N <sub>2</sub>
nn.nnn										0										2										0										0										0										S <sub>2</sub>
nn.nnn										0										6										0										0										0										S <sub>6</sub>
nn.nnn										0										8										0										0										0										S <sub>8</sub>
nn.nnn										2										0										0										1										0										H <sub>2</sub> O
nn.nnn										0										2										1										0										0										CS <sub>2</sub>
nn.nnn										0										1										1										1										0										COS
nn.nnn										0										0										1										2										0										CO <sub>2</sub>

en donde:

nn.nnn = Flujos molares de cada especie.

Con lo cual quedará integrada la matriz  $a_{ij}$  necesaria para los cálculos de minimización de energía libre.

#### A.1.1 INSTRUCTIVO PARA EL USO DEL PROGRAMA SIMCLA:

Al igual que otros programas de computadora, el programa SIMCLA cuenta con tarjetas de control y de datos; a continuación solamente las segundas, ya que las de control dependerán del modelo de la computadora que se utilice.

TARJETA # 1:

Por medio de esta tarjeta se alimenta al programa el número total de módulos que se desean simular, es decir, el total de números i identificadores de módulos y sus datos respectivos que el programa debe leer. Esta tarjeta utiliza un formato NAMELIST, como se muestra a continuación:

```
$PLANTA NTM=e,$END
```

en donde:

NTM = Número Total de Módulos.

TARJETA # 2:

En esta tarjeta se alimenta el número identificador del módulo DA TENT, utilizando un formato I5, es decir:

```
123456789012345678901234567890. . . .
```

1

A continuación se alimenta las tarjetas de datos necesarias para este módulo que, como se mencionó al principio de este apéndice es el módulo con el cual se inicia una simulación cualquiera que ésta sea. Una vez hecho lo anterior, se procede a alimentar en forma alternada el número identificador y sus datos correspondientes de los módulos siguiendo la misma secuencia que los equipos tienen dentro de la planta que se quiere simular.

A.2 MODULO DE SIMULACION HORNO:

Con el objeto de poder simular el comportamiento ideal o termodinámico del Horno de Reacción, se creó el programa HORNO, el cual está dividido en dos partes principales; en la primera, se determina la composición de equilibrio correspondiente a la temperatura de salida de la cámara de reacción. En la segunda parte del programa (subrutina CAMCOM) se llevan a cabo los cálculos necesarios para predimensionar la cámara de reacción.

Para el desarrollo de este programa se tomaron en cuenta las siguientes consideraciones:

- El Horno de Reacción opera en forma adiabática, es decir, las pérdidas de energía por calor son iguales a cero, por lo tanto, la temperatura de salida de los gases será aquella que resulte de un balance de energía en el cual todo el calor liberado por las reacciones de combustión es absorbido por la mezcla de gases (Temperatura de Flama Adiabática).
- La temperatura de operación del Horno es lo suficientemente alta y estable para que las reacciones no estén limitadas cinéticamente y se pueda alcanzar el equilibrio.
- Debido a que se opera a bajas presiones (1 atm.), los gases siguen el comportamiento de los gases ideales.
- El predimensionamiento de la cámara de combustión se basa principalmente en recomendaciones, por lo que se deberá tomar sólo como una aproximación a las dimensiones reales del equipo.
- El programa de simulación deberá ser lo más flexible posible con el objeto de poder simular diferentes alternativas de operación.

Como se dijo anteriormente, este programa de computadora está dividido en dos partes principales; una de simulación del comportamiento ideal y otra de predimensionamiento del equipo (Subrutina CAMCOM). Con el objeto de tener una mejor comprensión del funcionamiento de este programa, la descripción se ha dividido en estas mismas partes.

#### A.2.1 SUBROUTINA HORNO; SIMULACION DEL COMPORTAMIENTO IDEAL:

La simulación del comportamiento ideal del Horno de Reacción consiste en calcular la composición de equilibrio de los gases efluentes de la cámara de combustión por medio del método de Minimización de Energía de Gibbs, en el cual los equilibrios individuales de las reacciones no son tomados como tales, sino más bien se introducen todas las posibles especies que se pueden formar para después encontrar la distribución de éstas por medio de la minimización de Energía de Gibbs del sistema. De esta forma tene

mos que, sin conocer los mecanismos de reacción ni la estequiometría de todas las posibles reacciones que se llevan a cabo en el Horno, es posible encontrar una composición de equilibrio a la temperatura y presión de operación y que además satisface los requisitos del balance de masa.

El módulo de simulación HORNO cuenta con cuatro opciones de cálculo por medio de las cuales el usuario tendrá la flexibilidad de simular diferentes situaciones de operación según sean sus necesidades.

- Opción de simulación número 1:

Por medio de esta opción es posible simular un Horno de Reacción el cual opera con una configuración de flujo directo y una temperatura de operación igual a la temperatura de flama adiabática.

El algoritmo de cálculo consiste en suponer una temperatura de salida de la cámara de reacción a partir de la cual se calcula una composición de equilibrio por medio de la minimización de la energía de Gibbs total del sistema (Subrutina MINER, Cap. IV.A). Una vez conocida esta composición de equilibrio se procede a realizar un balance de energía del sistema adiabático representado por la ecuación A.1

$$\Delta H_p = \Delta H_r + Q_r \quad \dots \dots \dots (A.1)$$

en donde:

$\Delta H_p$  = Entalpía total de los productos.

$\Delta H_r$  = Entalpía total de los reactivos.

$Q_r$  = Calor total de reacción.

El objeto de hacer este balance de energía (Subrutina ADIAB) es el de encontrar una nueva temperatura de flama basándose en la composición inicial y en la composición de equilibrio calculada con la temperatura supuesta. El procedimiento para calcular la nueva temperatura de operación consiste en despejar de la ecuación A.1 la entalpía total de los productos, para después, por el método de Di

sección, encontrar una temperatura tal que, al calcular la entalpía total de los productos por medio de la Subrutina ENTAL se cumpla la igualdad de la ecuación A.1 (para más detalles ver Subrutina ADIAB, Apéndice B.1). Si la diferencia absoluta entre las temperaturas supuesta y calculada es mayor que la tolerancia deseada se substituye la temperatura calculada por la temperatura supuesta y se reinician los cálculos, repitiéndose el procedimiento hasta alcanzar la convergencia deseada. Una vez que la diferencia en temperaturas es menor que la tolerancia especificada se hace un último cálculo de la composición de equilibrio utilizando la última temperatura calculada, de esta forma se tendrá un cálculo más preciso de la composición de equilibrio a la temperatura de flama adiabática.

Después de haber encontrado la temperatura y composición a la salida de la cámara de reacción del Horno la ejecución del programa se envía a la Subrutina CAMCOM (descrita más adelante), para que se efectúe el predimensionamiento de la cámara de reacción.

- Opción de simulación número 2:

Al igual que en la opción anterior, en este caso también se simula un Horno con una configuración de flujo directo, con la única diferencia de que la composición de equilibrio es calculada a una temperatura de operación especificada por el usuario, para lo que la temperatura de salida supuesta que se da como dato se toma como temperatura real de salida la cual se transfiere a la Subrutina MINER para que se efectúe el cálculo correspondiente a la composición de equilibrio de los gases efluentes.

En forma adicional, se efectúa el cálculo de la temperatura de flama adiabática utilizando el mismo procedimiento descrito en la opción número 1. Esta temperatura de flama sólo se reporta como un dato adicional, sin influir en los demás cálculos de la simulación sin embargo, se pensó en incluir este cálculo ya que el conocimiento de esta temperatura puede ayudar a conocer si la temperatura de operación asignada por el usuario es mayor que la máxima temperatura que se puede alcanzar desde el punto de vista termo-

dinámico, o bien para conocer la cantidad de energía perdida por fugas de calor u otras causas.

Esta opción es muy recomendable para simular Hornos de Reacción existentes ya que se tiene la facilidad de poder alimentar como dato la temperatura real de operación.

- Opción de simulación número 3:

Con esta opción es posible simular un Horno de Reacción operando a flujo dividido y a una temperatura de salida de la cámara de combustión igual a la temperatura de flama adiabática.

El algoritmo de cálculo se inicia con la división de la corriente de alimentación a la planta en las corrientes de alimentación al Horno (una tercera parte) y de desviación (dos terceras partes). Debido a que la definición de la corriente de entrada a la planta Claus se hace alimentando como datos los flujos molares individuales de las especies que forman el gas ácido y el flujo molar de aire ( $N_2$  y  $O_2$ ) necesario para quemar sólo una tercera parte del  $H_2S$  y a que en la Subrutina DATENT se evalúan las propiedades termofísicas del gas como un todo, es decir, tomando en cuenta la composición de gas ácido y aire, la división de corrientes se hace dividiendo entre tres solamente los flujos molares individuales de las especies que forman el gas ácido con lo que se conoce el flujo de cada una de estas especies que se alimenta al Horno, que sumados al flujo de aire nos dará el flujo total de alimentación. Por otra parte, para conocer los flujos molares desviados, se multiplican por dos los flujos molares individuales de las especies de gas ácido que se alimentan al Horno, sin tomar en cuenta el Oxígeno y el Nitrógeno; traduciendo esto a expresiones matemáticas tenemos:

sea:

$C_E^T$  = Flujo molar total de entrada a la planta (gas ácido más aire)

$C_E^i$  = Flujo molar de la  $i$ -ésima especie del gas de entrada a la planta.



$C_A^T$  = Flujo molar total de alimentación al Horno  
(gas ácido más aire).

$C_A^i$  = Flujo molar de la  $i$ -ésima especie del gas  
de alimentación al Horno.

$C_D^T$  = Flujo molar total que se desvía del Horno  
(sólo gas ácido).

$C_D^i$  = Flujo molar de la  $i$ -ésima especie del gas  
que se desvía del Horno.

entonces:

$$C_E^T = \sum_{i=1}^n C_E^i \dots \dots \dots (A.2)$$

$$C_A^i = \frac{C_E^i}{3} \quad i=3,5 \dots \dots \dots (A.3)$$

$$C_A^T = \sum_{i=1}^n C_A^i + C_E^3 + C_E^5 \dots \dots \dots (A.4)$$

$$C_A^i = C_A^i \times 2.0 \quad i=3,5 \dots \dots \dots (A.5)$$

$$C_D^T = \sum_{i=1}^n C_A^i \quad i=3,5 \dots \dots \dots (A.6)$$

Una vez hecha la división de corrientes, se procede a evaluar las propiedades termofísicas de las mismas, mediante el uso del banco de datos de propiedades descrito en el Apéndice C. Esta nueva evaluación de propiedades es necesaria ya que las composiciones relativas de las nuevas corrientes son diferentes a la composición de la corriente de alimentación a la planta Claus.

El siguiente paso de la simulación es el cálculo de la temperatura de flama adiabática y de la composición de equilibrio de los gases efluentes de la cámara de combustión. El algoritmo utilizado para estos cálculos es el mismo que el descrito en la opción de simulación número 1.

- Opción de simulación número 4:

En esta última opción se simula un Horno de Reacción con una configuración de flujo dividido, calculándose la composición de equi

librio de los gases de salida a la temperatura especificada por el usuario.

En este caso, al igual que en la opción número 2, también se calcula, en forma adicional, la temperatura de flama que se alcanzaría si el Horno operara a régimen adiabático. Como puede verse esta opción es una combinación de las opciones dos y tres, por lo que, necesariamente el algoritmo de cálculo también es una combinación de estas opciones.

Después de haber calculado la temperatura y composición de equilibrio de los gases efluentes de la cámara de combustión por alguna de las cuatro opciones anteriores, se pasa a la segunda parte del programa para calcular el predimensionamiento del equipo.

#### A.2.2 SUBROUTINA CAMCOM; PREDIMENSIONAMIENTO DE LA CAMARA DE COMBUSTION:

En el diseño de la cámara de combustión, ya sea que se utilice el Horno Mufla o la Caldera de Tunel de Fuego, el objetivo principal consiste en determinar la longitud y el diámetro característicos de ésta que cumplan con los criterios de calor liberado por unidad de volumen y del tiempo de residencia. Estas dimensiones deberán corresponder al mínimo volumen requerido para cumplir con las especificaciones, las cuales se establecieron en 0.6 seg para el tiempo de residencia y de 50,000 BTU/h-ft<sup>3</sup> (444,965 Kcal/h-m<sup>3</sup>) para el calor liberado por las reacciones exotérmicas por unidad de volumen de la cámara de combustión<sup>26 52 80</sup>. Además se recomienda tener una relación L/D de 4:1<sup>3</sup>.

El algoritmo de cálculo para el predimensionamiento de la cámara de combustión se puede resumir en los siguientes pasos:

- 1.- Establecer el tiempo de residencia y el calor liberado por unidad de volumen que servirán como criterios de diseño. En este caso se establecieron los siguientes:

Tiempo de Residencia = 0.6 seg.

Calor Liberado = 444,965 Kcal/h-m<sup>3</sup>.

- 2.- Calcular el flujo volumétrico de la corriente de alimentación a las condiciones actuales de operación.
- 3.- Calcular el volumen de la cámara de combustión en base al tiempo de residencia establecido.
- 4.- Calcular el calor liberado por unidad de volumen, considerando para ello la diferencia de entalpías entre la entrada y la salida.
- 5.- Si el calor liberado por unidad de volumen es menor o igual al valor fijado como máximo se procede a calcular las dimensiones de la cámara de combustión.
- 6.- En el caso de que no se cumpla lo anterior se deberá calcular el volumen de cámara que cumpla con la restricción.
- 7.- Con este nuevo volumen se evalúan las dimensiones de la cámara y el tiempo de residencia correspondiente.

En el cálculo del flujo volumétrico, por medio de la ecuación A.7, se utiliza la densidad promedio de la mezcla gaseosa, obtenida de la Subrutina PDENS a la cual se le suministró la temperatura de operación de la cámara.

$$FV = W / DENM \quad . . . . . (A.7)$$

en donde:

FV = Flujo volumétrico.

W = Flujo másico.

DENM = Densidad promedio de la mezcla.

Para evaluar las dimensiones de la cámara de combustión, se considera una relación L/D de 4:1. como se mencionó anteriormente ; con esta consideración el cálculo de las dimensiones se hace de la siguiente manera:

$$V = \frac{\pi D^2}{4} L \quad . . . . . (A.8)$$

$$L = 4D \quad . . . . . (A.9)$$

en donde:

V = Volumen de la cámara (cilíndrica).

D = Diámetro de la cámara.

L = Longitud de la cámara.

Sustituyendo la ecuación A.9 en A.8 y simplificando se obtiene:

$$V = \pi D^3 \dots \dots \dots (A.10)$$

Despejando el diámetro de la ecuación anterior tenemos:

$$D = \sqrt[3]{\frac{V}{\pi}} \dots \dots \dots (A.11)$$

Debido a que el volumen se puede calcular a partir del flujo volumétrico y del tiempo de residencia, se tiene:

$$V = FV \times TR \dots \dots \dots (A.12)$$

en donde:

TR = Tiempo de residencia.

A partir de la ecuación A.11 es posible evaluar el diámetro, para después calcular la longitud de la cámara utilizando la ecuación A.9, quedando establecidas de esta manera las dimensiones de la cámara de combustión.

Por otra parte, cuando no se cumpla la restricción del calor liberado por unidad de volumen mencionada anteriormente, es necesario calcular un volumen que sí la satisfaga. Para ello se hace lo siguiente:

$$V = \frac{[HA - HE]}{QLUV} \dots \dots \dots (A.13)$$

en donde:

HV = Volumen requerido de la cámara.

HA = Entalpía de la corriente a las condiciones de operación.

E = Entalpía de la corriente de entrada.

QLUV = Calor máximo liberado por unidad de volumen.

Con este nuevo volumen calculado, se evalúan las dimensiones de la cámara, terminando así el dimensionamiento de la misma. En la figura A.1 se presenta el diagrama de bloques de la Subrutina CAMCOM.

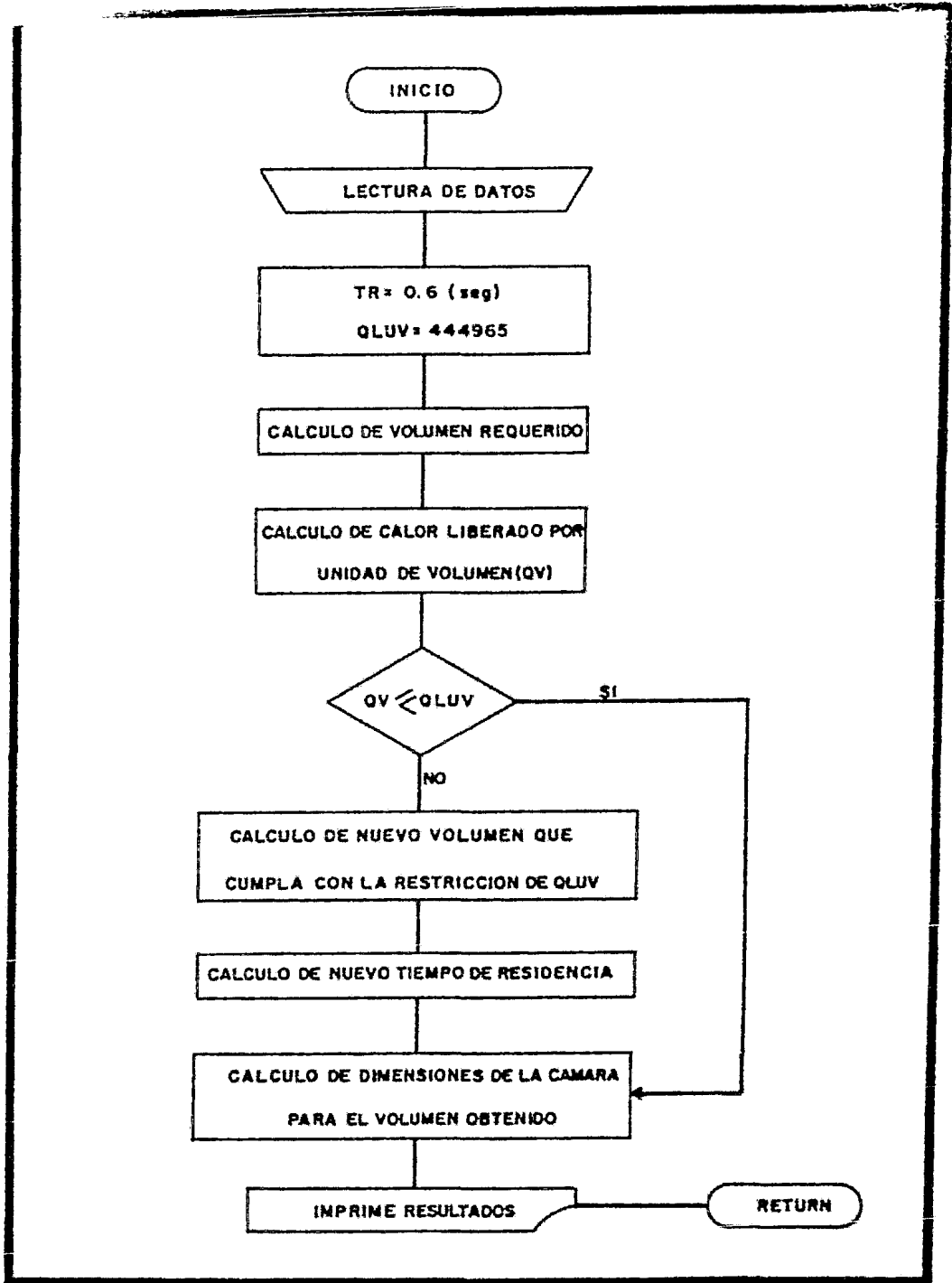


FIGURA A.1-DIAGRAMA DE BLOQUES DE LA SUBROUTINA CAMCOM

Como se ha visto, esta subrutina requiere como datos: el flujo má sico de la corriente de proceso, la entalpía de alimentación a la cámara, la entalpía a las condiciones de operación, la temperatura y presión de operación y la composición en fracción mol de la corriente a estas mismas condiciones.

Así mismo, esta subrutina requiere de la temperatura de entrada a la cámara y de la temperatura de flama adiabática, que si bien no se utilizan en los cálculos de predimensionamiento, sí se imprimen en la tabla de resultados junto con las otras características de la cámara de combustión.

#### A.2.3 DATOS REQUERIDOS POR EL MODULO:

En esta sección se enlistan los nombres, unidades y valores recomendados de los diferentes datos requeridos por el módulo de simulación del Horno de Reacción:

IYSUP: Indicador de Composición de Equilibrio SUPuesta.

= 0; la composición de equilibrio supuesta se estima por medio de la subrutina EQUIMO (Apéndice A.2), para lo cual se requiere de la alimentación del dato FCON.

= 1; se alimenta la composición de equilibrio supuesta, la cual deberá cumplir las restricciones del balance de masa.

Cuando se lleva a cabo una simulación por primera vez es recomendable utilizar la primera opción (IYSUP=0) de esta variable, ya que se evitarán cálculos manuales, los cuales, si contienen algún error causarían que la subrutina MINER no converga. Sin embargo, si se conoce alguna composición cercana al equilibrio se recomienda utilizarla, ya que de esta forma se reducirá el número de iteraciones totales.

IOP: Indicador del tipo de Operación del horno.

= 1, la temperatura de salida del Horno es igual a la temperatura de flama adiabática del sistema.

= 2; la temperatura de salida del Horno es igual a la temperatura deseada.

IDAL: Indicador Del tipo de Alimentación.

= 1; la configuración seleccionada para la planta es flujo directo.

= 2; la configuración seleccionada para la planta es flujo dividido.

TAS: Temperatura Adiabática Supuesta, °K.

Con el valor dado a esta variable se inicia, los cálculos de la temperatura de flama adiabática y puesto que la mayoría de los casos tienen una temperatura comprendida entre 1200 y 1700°K que abarcan composiciones de alimentación pobre y rica, es recomendable dar un valor de 1300 y 1600°K para alimentación pobre y rica, respectivamente.

TOLTA: TOLerancia en Temperatura de flama Adiabática, °K.

Esta variable es usada en el cálculo de la temperatura de flama adiabática y es recomendable darle un valor de 0.5°K.

TOLEQ: TOLerancia de EQUilibrio, moles.

Esta tolerancia es utilizada por la subrutina MINER para efectuar el cálculo de la composición de equilibrio. Se recomienda usar un valor igual o menor a 0.0001 moles.

NTI: Número Total de Iteraciones.

Por medio de esta variable se alimenta al programa el número total de iteraciones disponibles para alcanzar la convergencia. Cuando el número de iteraciones hechas por el programa es igual o mayor al valor de este dato y no se ha alcanzado la convergencia, el programa imprime un mensaje de que no convirgió y se detiene la ejecución de la simulación.

FCON: Factor de CONversión.

Este dato es utilizado en la subrutina EQUIMO para calcular la composición de equilibrio supuesta que requiere la subrutina MINER para iniciar los cálculos. Sólo se alimenta al programa cuando el indicador de composición de equilibrio (IYSUP) es igual a cero.

Para el caso de una configuración de flujo dividido el valor de esta variable deberá ser de 1. Sin embargo, para el caso de una configuración de flujo directo se recomienda utilizar un valor de 0.75 que es la conversión típica que se tiene en estos equipos.

IYSUP: Composición de Equilibrio SUPuesta, moles.

En realidad este nombre representa un vector de datos que contiene la composición supuesta de cada una de las especies involucradas en la simulación y sólo se alimenta al programa en el caso de que el indicador de composición de equilibrio (IYSUP) sea igual a uno. Es importante hacer notar que cuando se utilice esta opción es necesario que la composición de equilibrio supuesta cumpla con el balance de masa ya que de lo contrario la Subrutina MINER no alcanzará la convergencia.

El formato para alimentar al programa los datos antes mencionados está dividido en dos tarjetas diferentes en donde se utiliza la modalidad de alimentación conocida con el nombre de NAMELIST, esto es:

TARJETA # 1:

```
$DATOS  IYSUP=e, IOP=e, IDAL=e, TAS=r.r, TOLTA=r.r, TOLEQ=r.r,
NTI=e, $END
```

en donde:

e = Números enteros.

r.r = Números reales.

Como se puede observar, por medio de esta tarjeta se le indica al programa el tipo de opción a simular, así como el tipo de datos que deberá leer en la segunda tarjeta para los valores de la composi-



ción de equilibrio supuesta.

#### TARJETA # 2:

Esta tarjeta esta relacionada con el valor de la variable IYSUP, asignado en la primera tarjeta, de tal forma que se tienen las siguientes dos opciones:

- IYSUP = 0

\$CONVER FCON=*r.r*, \$END

en donde: *r.r* = Número real, Factor de CONversión.

- IYSUP = 1

\$EQSUP YSUP=*y*<sub>1</sub>, *y*<sub>2</sub>, *y*<sub>3</sub>, *y*<sub>i</sub>, . . . , *y*<sub>n</sub>, \$END

en donde:

*y*<sub>i</sub> = Composición de equilibrio supuesta para la *i*-ésima especie involucrada. Es importante que el orden sea igual al de la variable IDENT (Apéndice A.1)

#### A.3 MODULO DE SIMULACION CALDER; SUBROUTINAS CALDER Y DIMCAL:

El módulo de simulación de la Caldera Recuperadora de Calor está dividido en dos Subrutinas principales que son:

- Subrutina CALDER.- En donde se simula el comportamiento ideal del equipo, es decir, se llevan a cabo los balances de materia y energía.
- Subrutina DIMCAL.- En donde se lleva a cabo los cálculos para el predimensionamiento del equipo.

El algoritmo para la evaluación de las características de la Caldera, tales como: calor transferido, vapor producido, longitud, diámetro y número de tubos, caída de presión, etc. se muestra en la figura A.2 y consta de los siguientes pasos:

- 1.- Realizar el balance de energía para la corriente de proceso, el cual deberá incluir tanto el calor cedido por enfriamiento como el absorbido por las reacciones inversas que se efectúan durante el enfriamiento (flujo directo).
- 2.- Verificar si con la temperatura de salida especificada para los gases existe o no condensación de Azufre.

- 3.- En el caso de existir condensación de Azufre, calcular la cantidad condensada y modificar el balance global de calor.
- 4.- Suponer la longitud, diámetro y número de tubos para iniciar los cálculos.
- 5.- Con los valores supuestos en el paso anterior, calcular la caída de presión para el gas de proceso.
- 6.- Si la caída de presión es menor o igual a 703 mm H<sub>2</sub>O (1 lb/in<sup>2</sup>) continuar con los cálculos; en caso contrario, suponer una nueva longitud de tubo, sin variar el número y diámetro de estos y repetir el paso 5. En el caso de haber usado todas las longitudes sin satisfacer la caída de presión, seleccionar un diámetro mayor.
- 7.- Calcular el área de transferencia requerida y el área de transferencia disponible, de acuerdo a las dimensiones y número de tubos.
- 8.- Si el área disponible es mayor que la requerida, dentro de cierta tolerancia (15% máximo), imprimir resultados y terminar la ejecución.
- 9.- Si el área disponible es mayor al área requerida más la tolerancia seleccionar otra longitud, permaneciendo invariable el diámetro y número de tubos.
- 9'.- Si ya se han usado todas las longitudes y aún persiste el punto anterior, cambiar entonces a un diámetro mayor y seleccionar una nueva longitud, sin variar el número de tubos, e irse al paso número 5
- 9".- En caso que también se hayan usado todos los diámetros disponibles en el programa y aún el área disponible sea mayor que la requerida, entonces, disminuir el número de tubos e irse al paso número 5.
- 10.- Si el área disponible es menor al área requerida, aumentar el número de tubos e irse al paso número 4.

El balance de energía para el caso de una configuración de flujo dividido se efectúa de manera diferente que para el caso de flujo directo.

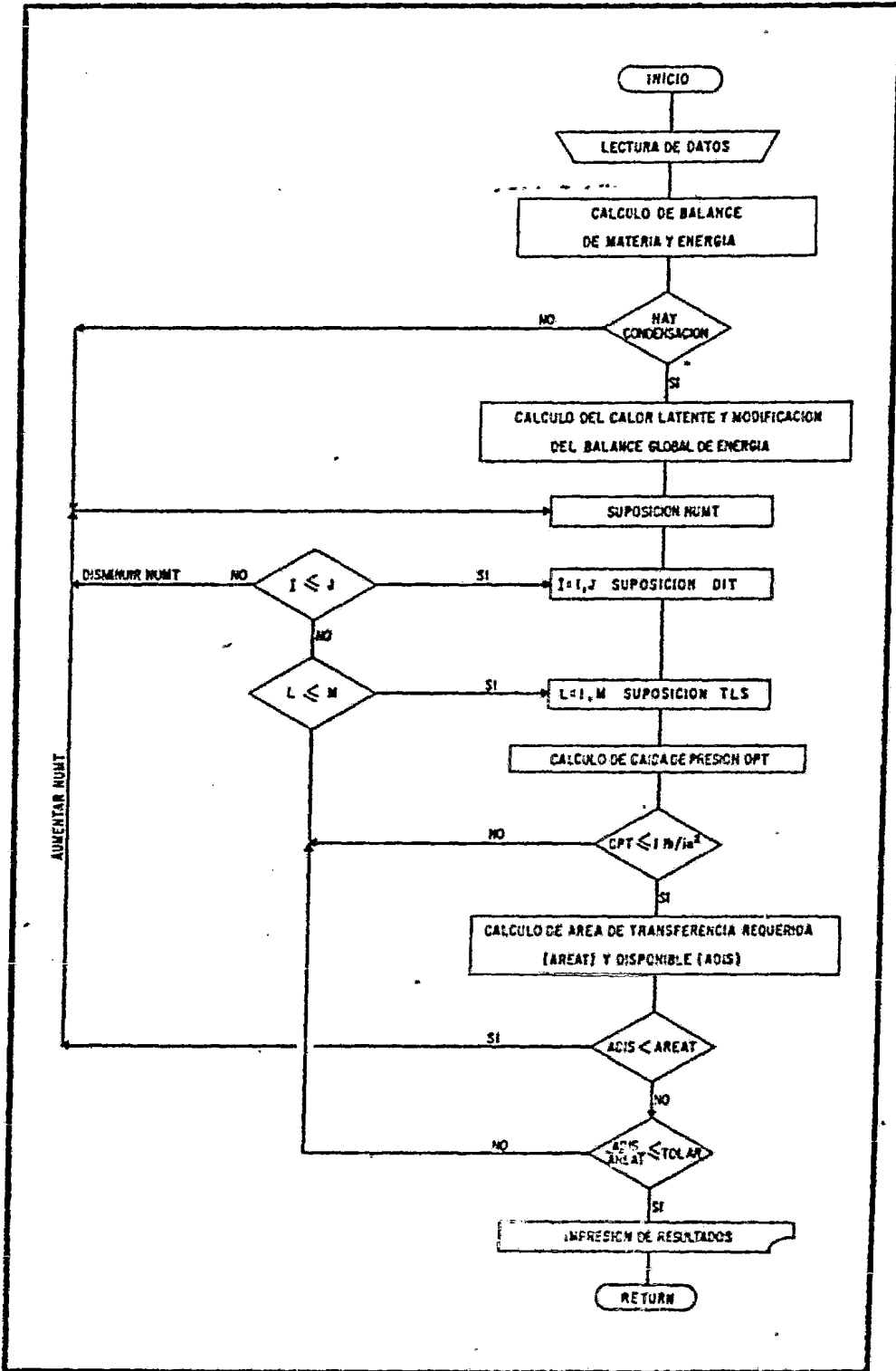


FIGURA A.2-DIAGRAMA DE BLOQUES SUBROUTINA DINCAL

Si la configuración de la planta a simular es de flujo directo, el balance global se realiza en dos partes. En la primera, además de considerar el enfriamiento, se toma en cuenta el calor absorbido por las reacciones que se efectúan durante el enfriamiento, desde la temperatura de operación del Horno hasta la temperatura de corte, para esto se utiliza la subrutina ENTAL Apéndice C.2 con el indicador adecuado para considerar el calor de formación de las diferentes especies químicas ( $INCF=1$ ). En esta primera parte del balance de energía es necesario conocer también la composición al equilibrio de la corriente de proceso a la temperatura de corte, lo cual se lleva a cabo mediante la subrutina MINER, con esta composición y la composición de entrada a la Caldera es posible efectuar el balance de energía para esta sección.

La segunda parte del balance de energía, considera únicamente el enfriamiento de la corriente de proceso desde la temperatura de corte hasta la temperatura de salida de la Caldera. Representando todo lo anterior en forma matemática se tiene:

$$H_2 = H_3 + Q_R + Q_C \dots \dots \dots (A.14)$$

en donde:

$H_C$  = Entalpía de la corriente de entrada

$H_3$  = Entalpía de la corriente de salida

$Q_R$  = Calor total de reacción

$Q_C$  = Calor transferido durante el enfriamiento

rearrreglando, se llega a:

$$Q_C = H_C - H_3 - Q_R \dots \dots \dots (A.15)$$

Por otra parte, se tiene que el calor total de reacción se calcula de la siguiente manera:

$$Q_R = \sum_p (H^T + \Delta H_f^\circ)_p - \sum_r (H^T + \Delta H_f^\circ)_r \dots \dots \dots (A.16)$$

en donde:

$H^T$  = Entalpía del componente a la temperatura  
T °K

$\Delta H_f^\circ$  = Calor de formación estándar

subfijos: p = Productos.  
r = Reactivos.

Cuando se simula un proceso cuya configuración sea flujo dividido el balance de energía se reduce al cálculo del calor transferido únicamente por enfriamiento debido a que en este caso el término  $Q_R$  es igual a cero por no haber reacciones reversibles, es decir:

$$Q_C = H_2 - H_1 \dots \dots \dots (A.17)$$

Como se mencionó anteriormente, uno de los pasos en la simulación de la Caldera es la verificación de si existe o no condensación de Azufre, para esto es necesario calcular la temperatura de rocío del Azufre por medio de la subrutina ROCIO (Apendice B.5), la cual requiere únicamente de los moles de Azufre y de las demás especies, las cuales son consideradas como inertes. En caso de que la temperatura de rocío de la mezcla gaseosa sea mayor que la temperatura de salida de la Caldera, es decir, que exista condensación, la cantidad de Azufre condensado se calcula en forma similar a la usada en la subrutina CONDEN. Una vez conocida la cantidad de Azufre depositada, se calcula el calor latente transferido mediante la siguiente correlación:

$$\lambda_c = 231.4979 - 0.143417 T + 4.3830 \times 10^{-5} T^2. \quad (A.18)$$

en donde:

$\lambda_c$  = Calor latente, BTU/lb.  
T = Temperatura, °K.

Los valores usados para regresionar esta correlación fueron tomados del libro "SULFUR DATA BOOK"<sup>34</sup>. Una vez hecha la corrección al balance total de energía por concepto de calor latente de condensación se procede a predimensionar el equipo.

Para calcular el número total de tubos, se inicia el cálculo con un valor arbitrario de 40 tubos y en caso necesario se harán incrementos de 5 en 5 para las siguientes iteraciones hasta encontrar el número adecuado; se fijaron 90 tubos como número máximo

para efectuar estos cálculos. Esto se hizo con el propósito de dar protección al algoritmo y no hacer una cantidad indefinida de cálculos, ya que si se excede de este valor se manda un mensaje y se detiene la ejecución de esta subrutina.

En el caso de las longitudes de tubos, el programa selecciona el primer valor de los que le fueron suministrados como datos o de los que cuenta el programa (las longitudes comerciales mencionadas anteriormente) para iniciar los cálculos, si se requiere, el programa seleccionará la siguiente longitud que aparezca en forma ordinal y continuará con los cálculos.

En cuanto a los diámetros, ocurre algo similar a lo anterior. Para ello se suministró al programa los valores del diámetro interno, área transversal de flujo y área de transferencia por unidad de longitud. El programa selecciona el diámetro menor (1.5 in) para iniciar la iteración y si es necesario selecciona al inmediato superior hasta encontrar el que satisfaga los requerimientos.

Una vez seleccionado el número de tubos, la longitud y el diámetro de los mismos, es posible evaluar la caída de presión, para lo cual es necesario calcular la masa velocidad y el factor de fricción, el cual es calculado con la subrutina FACTOR (Ap. B.4) de esta forma se tiene que:

$$M_v = \frac{F_w}{A_f \cdot N_t} \dots \dots \dots (A.19)$$

$$P = \frac{f \cdot M_v^2 \cdot L}{5.22 \times 10^{12} \cdot D \cdot \delta_s} \dots \dots \dots (A.20)$$

en donde:

- $M_v$  = Masa velocidad, lb/h·ft<sup>2</sup>.
- $A_f$  = Area transversal de flujo por tubo, ft<sup>2</sup>.
- $N_t$  = Número de tubos.
- $\Delta P$  = Caída de presión, psi.
- $f$  = Factor de fricción.
- $L$  = Longitud de tubo, ft.
- $D$  = Diámetro de tubo, ft.
- $\delta_s$  = Densidad específica.

Cuando se satisface la restricción de la máxima caída de presión es posible continuar con el resto de los cálculos, los cuales corresponden a evaluar el área requerida para la transferencia de calor, es decir:

$$A_t = \frac{Q}{U_T \cdot \text{LMTD}} \dots \dots \dots \quad (\text{A.21})$$

$$\text{LMTD} = \frac{\Delta T_2 - \Delta T_1}{\ln(\Delta T_2 / \Delta T_1)} \dots \dots \dots \quad (\text{A.22})$$

en donde:

$A_t$  = Área de transferencia de calor requerida

$Q$  = Calor total transferido

$U_T$  = Coeficiente global de transferencia de calor

LMTD = Diferencia media logarítmica de temperaturas.

$\Delta T_1$  = Diferencia de temperaturas en un extremo del equipo

$\Delta T_2$  = Diferencia de temperaturas en el otro extremo del equipo

En la evaluación del coeficiente global de transferencia de calor es necesario conocer el coeficiente de transferencia interno de los tubos así como el externo, el factor de incrustación y la resistencia del material de la tubería; este último se puede considerar despreciable ya que es muy pequeño comparado con el del sistema. Los factores de incrustación fueron obtenidos de la literatura<sup>51</sup> y son de 0.001 h·ft<sup>2</sup>°F/BTU para el lado de la generación de vapor y de 0.005 h·ft<sup>2</sup>°F/BTU para el lado del gas de proceso.

El coeficiente de transferencia involucrado en la generación de vapor de agua también se obtuvo de la literatura y es de 1000 BTU/h·ft<sup>2</sup>°F y se considera variable para dicho sistema<sup>51</sup>.

En cuanto al coeficiente del lado interno de los tubos, es decir, para el gas de proceso, se utiliza la siguiente expresión para evaluarlo:<sup>36 33</sup>

$$Nu = \frac{h_i d_i}{k_g} = 0.023 \cdot Re^{0.8} Pr^{0.4} \dots \dots \dots (A.23)$$

en donde:

- $Nu$  = Número de Nusselt (=  $h_i d_i / k$ )
- $Re$  = Número de Reynolds (=  $d_i M_v / \mu$ )
- $Pr$  = Número de Prandtl (=  $C_p \mu / k$ )
- $h_i$  = Coeficiente de transferencia
- $d_i$  = Diámetro interno del tubo
- $k_g$  = Conductividad térmica del gas
- $M_v$  = Masa velocidad
- $\mu$  = Viscosidad
- $C_p$  = Capacidad Calorífica

De esta expresión se despeja  $h_i$  y se corrige para obtenerlo referido a la superficie exterior del tubo, de la siguiente forma:

$$h_{i0} = h_i \cdot \frac{d_i}{d_e} \dots \dots \dots (A.24)$$

en donde:

- $h_{i0}$  = Coeficiente de transferencia corregido
- $d_i$  = Diámetro interno del tubo
- $d_e$  = Diámetro externo del tubo

Las propiedades físicas del gas de proceso necesarias en las evaluaciones anteriores se obtienen mediante las subrutinas PDENS, PVIS, PCTC y PCP (Banco de datos de propiedades, (Apendice B) para la densidad, viscosidad, conductividad térmica y capacidad calorífica respectivamente

Conocido lo anterior, el coeficiente global de transferencia puede ser calculado de la siguiente forma:

$$\frac{1}{U_T} = \frac{1}{h_{i0}} + \frac{1}{h_o} + 0.001 + 0.005 \dots \dots \dots (A.25)$$

en donde;

- $U_T$  = Coeficiente global de transferencia
- 0.001 y 0.005 = Factores de incrustación

De esta forma, es posible ahora aplicar la ecuación A.21 para ob





El vapor producido en este equipo es de media presión, siendo normalmente de 19 atm.

PURGA: porcentaje de agua de PURGA.

La cantidad de agua purgada oscila generalmente entre 5 y 10% del agua total alimentada.

TCORTE: Temperatura de CORTE, °K

Como se mencionó en el Capítulo V, el valor de esta variable deberá ser igual a la temperatura correspondiente al punto mínimo de la curva %conversion vs. temperatura. Sin embargo, en caso de no conocer este punto, el programa tiene un valor de protección para esta variable igual a 1185°K que corresponde a la temperatura de corte para la mayoría de los gases ácidos.

ITUB: Indicador de lectura de longitudes de TUBos.

= 0; el programa asumirá los valores de las longitudes comerciales almacenados en memoria.

= 1; se deberá alimentar la cantidad y valor de las longitudes de los tubos, por medio de la tarjeta de datos \$TUBCAL.

Si no se desea contar con longitudes especiales para los tubos de la caldera, es recomendable utilizar la primera opción (ITUB=0), es decir, que el programa utilice las longitudes comerciales que tiene en memoria. En el caso de que se quiera incluir longitudes de tubo especiales (ITUB=1) será necesario adicionar una tarjeta más (\$TUBCLA), la cual deberá incluir las siguientes variables:

NLT: Número de Longitudes de Tubo a proporcionar.

Esta variable tiene un valor arbitrario y deberá corresponder a la cantidad de longitudes que se vayan a alimentar como datos.

TUBL: vector de Longitudes de TUBo, ft.

Aquí se darán los valores de las longitudes deseadas en forma de vector, cuya dimensión será el valor de la variable NLT.

El formato para alimentar al programa los datos antes mencionados

es por medio de una proposición NAMELIST, es decir:

TARJETA # 1:

\$DATOS TSAL= $\lambda.\lambda$ , TEACAL= $\lambda.\lambda$ , PVCAL= $\lambda.\lambda$ , PURGA= $\lambda.\lambda$ , TCORTE= $\lambda.\lambda$ , ITUB= $e$ , \$SEND

en donde:

$e$  = Números enteros.

$\lambda.\lambda$  = Números reales.

En el caso de la variable ITUB sea igual a uno, se deberá adicionar la siguiente tarjeta de datos.

\$TUBCAL NLT= $e$ , TUBL= $\ell_1, \ell_2, \ell_3, \dots, \ell_{NTL}$ , \$SEND

en donde:

$e$  = Número entero.

$\ell_i$  = Números reales.

A.4 MODULO DE SIMULACION CONCAT:

Con el objeto de poder simular el comportamiento termodinámico o ideal de los Convertidores Catalíticos se creó el modulo CONCAT, que al igual que el módulo HORNO hace uso del método de minimización de energía libre de Gibbs (Subrutina MINER, Cap. IV) para determinar la composición de equilibrio de los gases efluentes del convertidor.

Para el desarrollo de este programa se tomaron en cuenta las siguientes consideraciones:

- Los Convertidores Catalíticos operan en forma adiabática, es decir, las pérdidas de energía por calor son iguales a cero, por lo tanto la temperatura de los gases de salida será aquella que resulte de un balance de energía en el cual todo el calor liberado por las reacciones que se llevan a cabo dentro del convertidor es absorbido por la mezcla de gases (temperatura de reacción adiabática).
- La temperatura mínima de los gases de salida del convertidor

está restringida por la temperatura de rocío.

- En el cálculo de la temperatura de rocío de los gases efluentes todos los componentes que no sean Azufre elemental se consideran como inertes ya que sus fracciones mol son mucho mayores que las del Azufre y además sus temperaturas de rocío son mucho menores que la temperatura de operación.
- En el cálculo de la temperatura de rocío de los gases efluentes se debe considerar el intercambio que existe entre las diferentes especies moleculares de Azufre al variar la temperatura.
- Debido a que se opera a presiones bajas (1 atm), el comportamiento de los gases se considera ideal.
- La caída de presión dentro de los convertidores no será calculada, ya que en el cálculo del equilibrio químico no se toma en cuenta el tipo de catalizador, la velocidad lineal aparente, mecanismos de reacción, etc. Sin embargo, se podrá alimentar al programa una caída de presión (estimada por algún otro método) con el objeto de hacer más reales los cálculos debido a que la función de energía libre molar, así como algunas otras propiedades de las corrientes gaseosas dependen de la presión.
- Con el objeto de tener una idea de las dimensiones de los Convertidores Catalíticos, se efectuará un predimensionamiento de los mismos basándose en las recomendaciones hechas por la literatura.
- El programa de simulación deberá ser lo más flexible posible con el objeto de poder simular diferentes alternativas de operación de los Convertidores.
- Se deberá evaluar la carga térmica del recalentador necesa

ría para elevar la temperatura de la corriente de proceso desde la temperatura de salida del Condensador hasta la de entrada al Convertidor que se está simulando.

Este programa de computadora cuenta con cuatro opciones de cálculo por medio de las cuales el usuario tendrá la flexibilidad de simular diferentes situaciones de operación según sean sus necesidades. A continuación se explican cada una de estas modalidades.

- Opción de simulación número 1:

En esta opción el programa estima la composición de equilibrio a una temperatura igual a la temperatura de rocío del gas efluente del convertidor. Así mismo, se determina la temperatura de entrada, puesto que, por tratarse de un sistema adiabático, las temperaturas de entrada y salida están ligadas mediante el balance de energía representado por la siguiente ecuación:

$$\Delta H_p = \Delta H_r + Q_r \quad \dots \dots \dots (A.27)$$

en donde:

$\Delta H_p$  = Entalpía total de los productos.

$\Delta H_r$  = Entalpía total de los reactivos.

$Q_r$  = Calor total de reacción.

De esta forma la temperatura de salida estimada cumplirá no solamente con ser igual a la temperatura de rocío de la mezcla, sino también con el balance energético del sistema.

El algoritmo de cálculo, presentado en la figura A.3, se basa, primeramente en el método iterativo de sustituciones sucesivas para encontrar el punto en donde se cruza la curva de porcentaje de conversión con la curva de temperatura de rocío. Este punto nos dará directamente una temperatura de salida a la cual corresponde una composición de equilibrio tal que su temperatura de rocío es igual a la temperatura de salida. Como se puede ver en la figura A.3, el método de sustituciones sucesivas consiste en suponer una temperatura de salida a partir de la cual se calcula una composición de equilibrio utilizando al subrutina MINER. Una vez

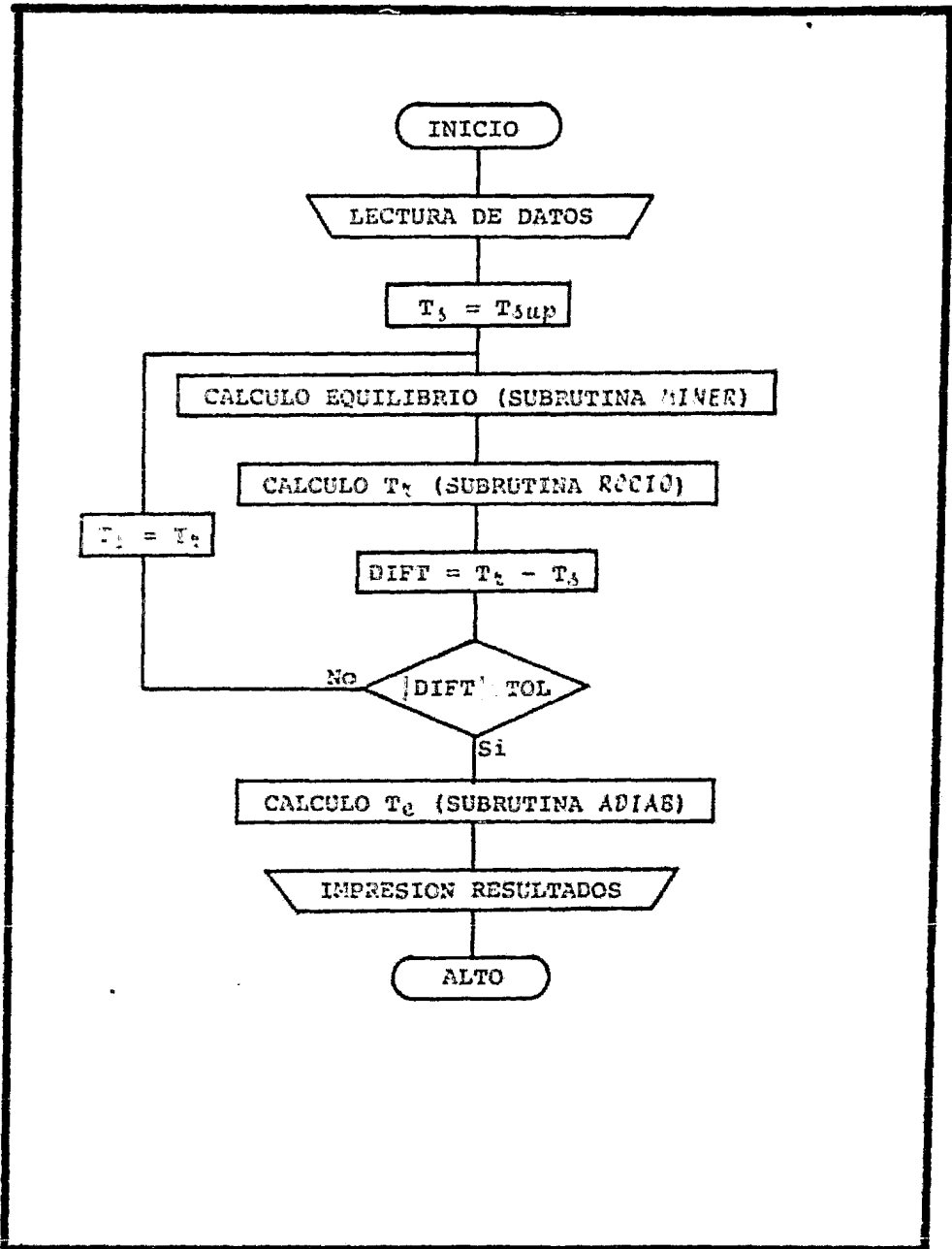
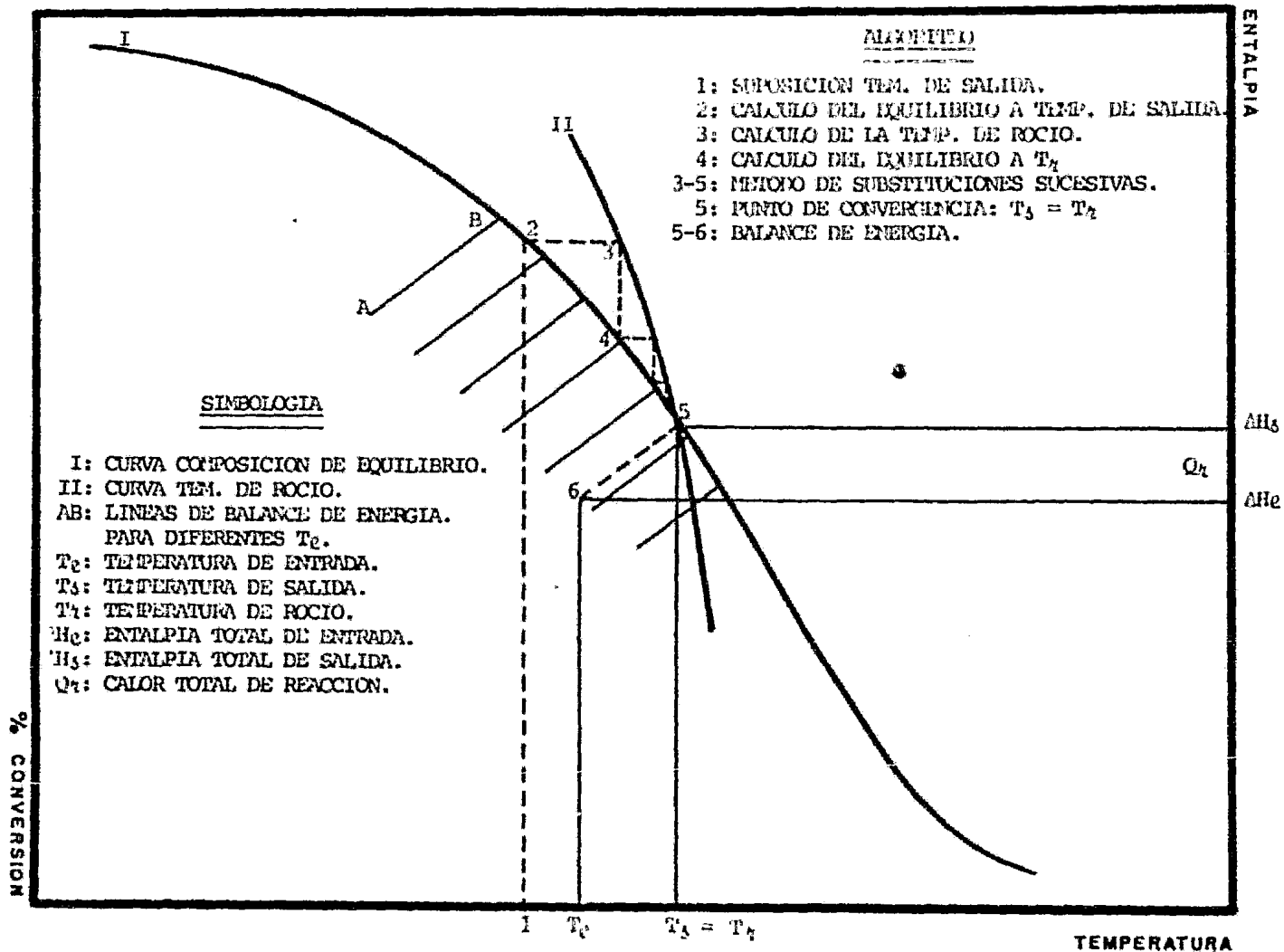


FIGURA A.3 - DIAGRAMA DE FLUJO PARA LA SIMULACION DE LOS CONVERTIDORES CATALITICOS (OPCION N° 1: TEMP. SALIDA IGUAL TEMP. ROCIO)

FIGURA A.f.—REPRESENTACION ESQUEMATICA DEL ALGORITMO DE SIMULACION DE LOS CONVERTIDORES CATALITICOS (OPCION No 1: TEMP. SALIDA IGUAL A TEMP. ROCIO.



conocida la temperatura de salida se procede a calcular la temperatura de rocío de esta mezcla por medio de la subrutina ROCIO, si la diferencia entre esta temperatura y la temperatura de salida supuesta es mayor que cierta tolerancia se substituye la temperatura calculada por la supuesta y se reinician los cálculos. Este procedimiento se repite hasta que la diferencia en temperaturas sea menor que la tolerancia. Una vez conocida la temperatura y composición de salida se procede a hacer un balance de energía (ec. A.27) para determinar la temperatura de entrada requerida, este balance se lleva a cabo mediante el uso de la subrutina ADIAB en sentido inverso, es decir, conociendo la entalpía total de los productos y el calor de reacción se calcula la entalpía total de los reactivos y su temperatura correspondiente. En la figura A.4 se representa esquemáticamente el camino seguido por este método para alcanzar la convergencia.

- Opción de simulación número 2:

Esta opción consiste en el cálculo de la composición de equilibrio a una temperatura igual a la temperatura de rocío de la mezcla efluente más una diferencial de temperatura ( $\Delta T$ ) deseada, la cual se alimenta como dato al programa. Al igual que la opción de cálculo número 1, también se determina la temperatura de entrada que cumpla el balance de energía del sistema.

Como puede verse en la figura A.5, el procedimiento de cálculo es básicamente igual al de la opción anterior, con la única diferencia de que el punto de convergencia no es donde se cruza la curva de porcentaje de conversión con la de temperatura de rocío, sino aquel punto en el cual, a la temperatura de salida corresponde una composición de equilibrio tal que su temperatura de rocío es  $\Delta T$  grados menor que la primera. Esto se puede apreciar mejor en la figura A.6, en donde se representa esquemáticamente el algoritmo de cálculo.

- Opción de simulación número 3:

En este caso se calcula la composición de equilibrio a una temperatura de salida especificada por el usuario, así como la tempe-



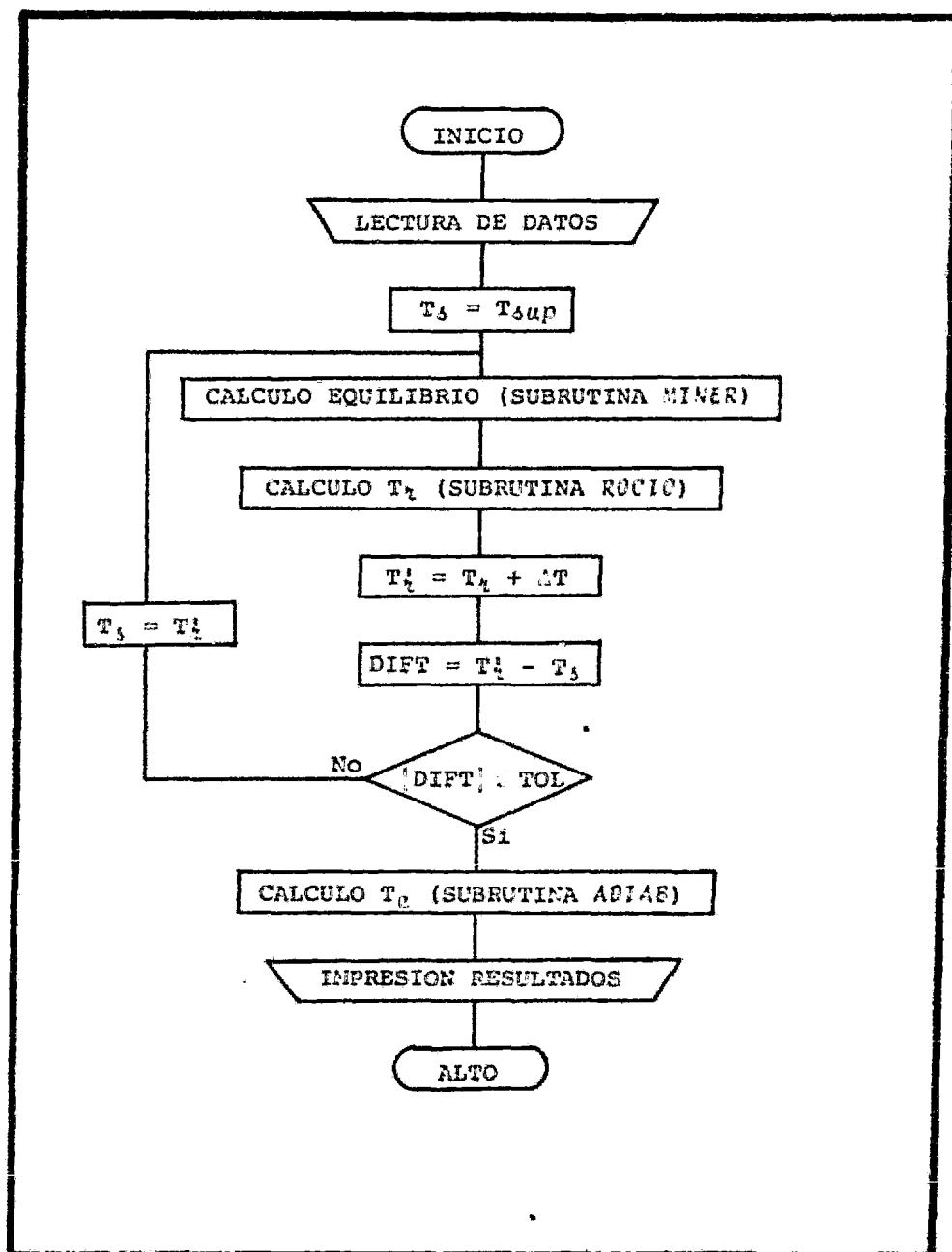


FIGURA A.5—DIAGRAMA DE FLUJO DEL ALGORITMO DE SIMULACION DE LOS CONVERTIDORES CATALITICOS (OPCION N° 2: TEMP. SALIDA IGUAL TEMP. DE ROCIO MAS AT).

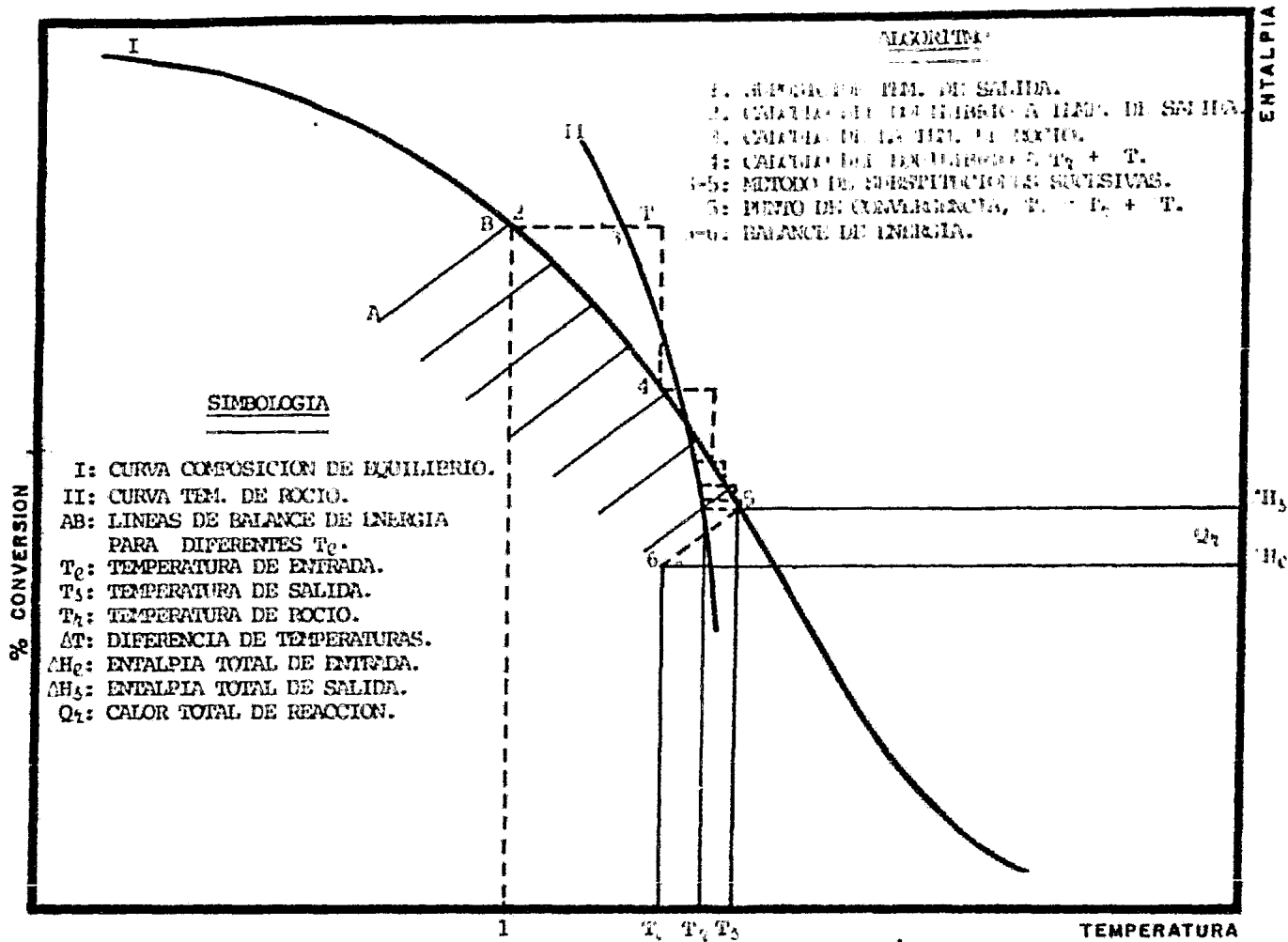


FIGURA A.6—REPRESENTACION ESQUEMATICA DEL ALGORITMO DE SIMULACION DE LOS CONVERTIDORES CATALITICOS (OPCION N° 2 : TEMP. DE SALIDA IGUAL TEMP. ROCIO MAS  $\Delta T$ ).

ratura de entrada necesaria para que el convertidor alcance la temperatura deseada. Como resultado adicional, se calcula la temperatura de rocío de la mezcla de gases efluente, mandandose un mensaje de advertencia en el caso de que la temperatura de rocío calculada sea mayor que la temperatura de operación, ya que en dicho caso, se presentará condensación de Azufre sobre el catalizador causando una deactivación severa del mismo.

El algoritmo de cálculo se presenta en la figura A.7 y consiste simplemente en calcular la composición de equilibrio a la temperatura deseada por medio de la subrutina MINER. Después de esto se hace uso de la subrutina ADIAB para calcular la temperatura de entrada requerida de acuerdo al balance de energía del sistema. Por último, se calcula la temperatura de rocío de los gases efluentes del convertidor por medio de la subrutina ROCIO. La representación esquemática de estos cálculos se presenta en la fig. A.8.

- Opción de simulación número 4:

En esta opción la temperatura de entrada al convertidor es fijada por el usuario para que se determine la temperatura y composición de equilibrio del convertidor.

El procedimiento de cálculo (fig. A.9), al igual que en la opción número 1, se basa en el método de substituciones sucesivas, en el cual se supone una temperatura de salida a partir de la cual se calcula la composición de equilibrio utilizando la subrutina MINER, con esta composición y con la ayuda de la subrutina ADIAB se encuentra la temperatura de salida que cumple el balance de energía del convertidor; si la diferencia entre esta temperatura y la supuesta es menor que la tolerancia especificada se procede al cálculo de la temperatura de rocío de los gases efluentes del convertidor, en el caso contrario se substituye la temperatura calculada por la supuesta y se reinician los cálculos.

A.4.1 DATOS REQUERIDOS POR EL PROGRAMA:

En esta sección se enlistarán los nombres, unidades y valores re-

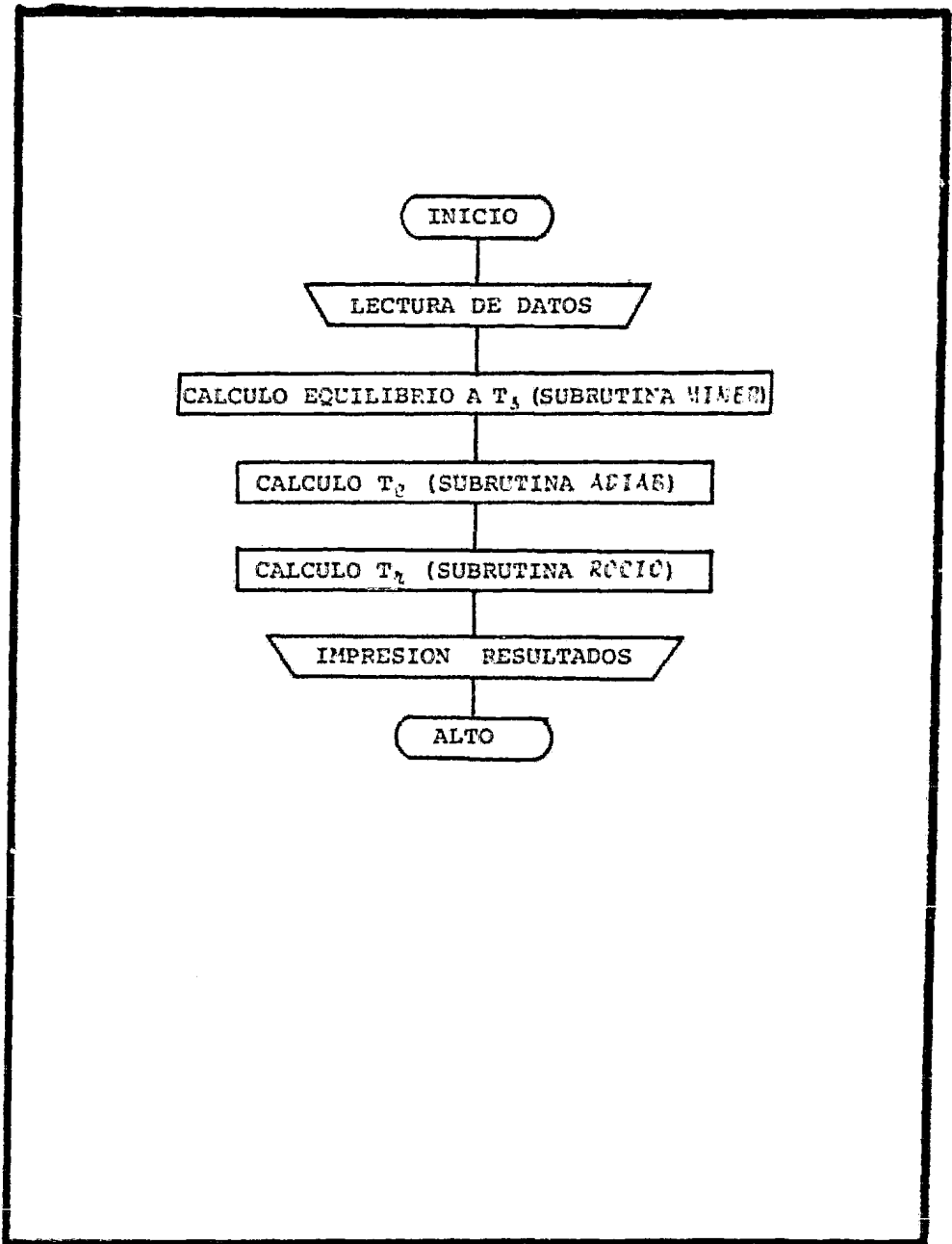
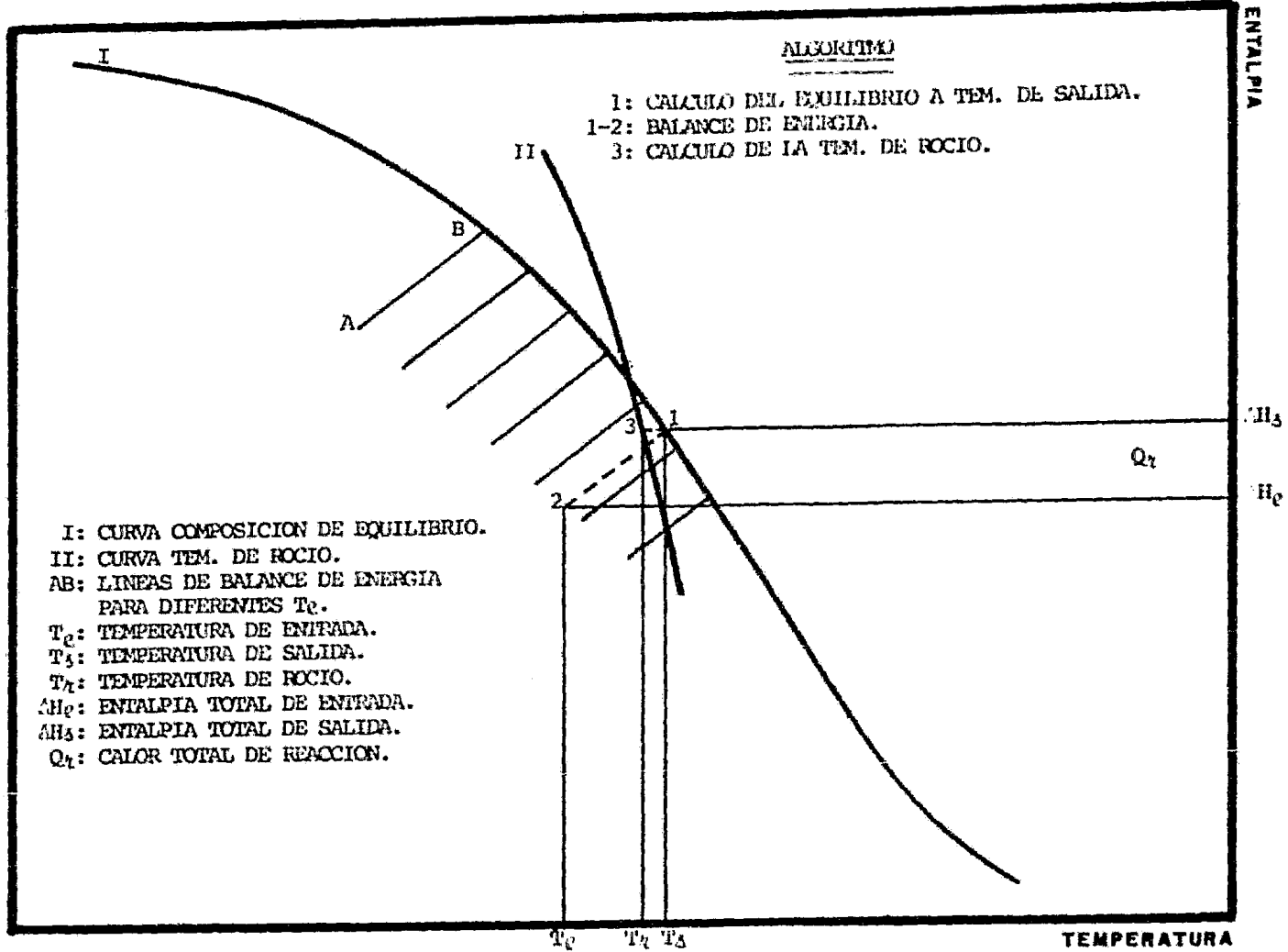


FIGURA A.7 -- DIAGRAMA DE FLUJO DEL ALGORITMO DE SIMULACION DE LOS CONVERTIDORES CATALITICOS (OPCION N° 3: TEMP. DE SALIDA DESEADA)

FIGURA A.9 - REPRESENTACION ESQUEMATICA DEL ALGORITMO DE SIMULACION DE LOS CONVERTIDORES CATALITICOS (OPCION N° 3: TEMP. DE SALIDA DESEADA).



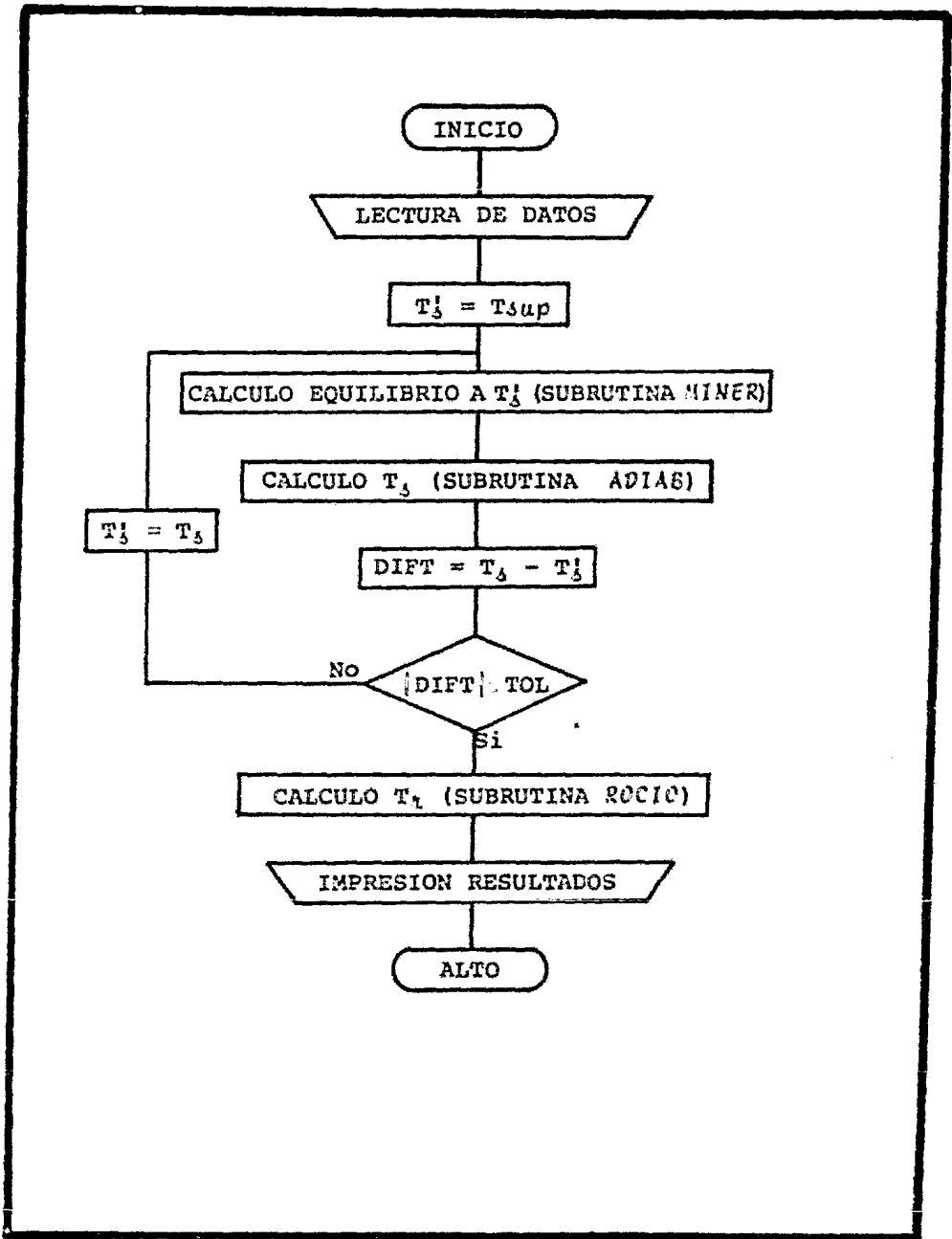


FIGURA A.9 - DIAGRAMA DE FLUJO DEL ALGORITMO DE SIMULACION DE LOS CONVERTIDORES CATALITICOS (OPCION N° 4: TEMP. DE ENTRADA DESEADA).

comendados de los diferentes datos requeridos por la subrutina CONCAT. Así mismo, se indicará el formato de alimentación de los mismos.

IYSUP: Indicador de Composición de Equilibrio Supuesta.

= 0; la composición de equilibrio supuesta se estima por medio de la subrutina EQUIMO (Ap. B.2), para lo cual se requiere de la alimentación del dato FCON.

= 1; se alimenta la composición de equilibrio supuesta, que deberá cumplir las restricciones del balance de masa.

Cuando se lleva a cabo una simulación por primera vez es recomendable utilizar la primera opción (IYSUP=0) de esta variable ya que se evitarán cálculos a mano, los cuales si contienen algún error causarían que la subrutina MINER no converja. Sin embargo, si se conoce alguna composición cercana al equilibrio se recomienda utilizar la opción YSUP=1, ya que de esta forma se reducirá el número de iteraciones totales.

IOP: Indicador del tipo de Operación.

= 1; la temperatura de salida del convertidor es igual a la temperatura de rocío de la mezcla efluente.

= 2; la temperatura de salida del convertidor es igual a la temperatura de rocío de la mezcla efluente más una diferencial de temperatura (variable DT).

= 3; La temperatura de salida del convertidor es igual a la temperatura deseada. En este caso la temperatura de salida supuesta (TSALS) se iguala a la temperatura de salida real.

= 4; la temperatura de entrada al convertidor es igual a la temperatura deseada. En este caso se iguala la temperatura de entrada supuesta (TENTS) a la temperatura de entrada real mientras que la temperatura de salida se estima mediante el balance energético.

DT: Diferencial de Temperatura, °K

Esta variable deberá tener un valor igual a 0.0 cuando el indicador del tipo de operación (IOP) tenga un valor de 1, 3 ó 4. Para el caso de que IOP=2, se recomienda que la diferencial de temperatura tenga un valor comprendido en el rango de 8 a 14°K (15 a 25 °F) que es el margen de operación recomendado para evitar condensación de Azufre<sup>23</sup> .

DP: Caída de Presión a través de la cama de catalizador, Atm. El valor de esta variable deberá ser estimado en forma externa o bien alimentar la caída de presión real de un equipo existente el cual se quiere simular.

TOLTEM: TOLerancia en TEMperaturas, °K  
Esta tolerancia se utiliza en los cálculos iterativos de las temperaturas de reacción adiabática y de rocío, como es de suponerse cuanto más pequeño sea el valor asignado a esta variable, más exactos serán los calculos efectuados. Un valor recomendable es 0.5°K.

TOLEQ: TOLerancia de EQUilibrio, moles.  
Esta tolerancia es utilizada por la subrutina MINER para efectuar el cálculo de la composición de equilibrio. Se recomienda usar un valor igual o menor a 0.0001 moles.

NTI: Número Total de Iteraciones.  
Como su nombre lo indica, por medio de esta variable se alimenta al programa el número total de iteraciones disponibles para alcanzar la convergencia. Cuando el número de iteraciones hechas por el programa es igual o mayor al valor de este dato y no se ha alcanzado la convergencia el programa imprime un mensaje de que no convergió y se detiene.

FCON: Factor de CONversión.  
Este dato es utilizado en la subrutina EQUIMO para calcular la composición de equilibrio supuesta que requiere la subrutina MINER para iniciar los cálculos. Sólo se alimenta al programa cuando el



indicador de composición de equilibrio (IYSUP) es igual a cero. Los valores recomendados para este dato dependen de la posición del convertidor dentro del tren de recuperación, esto es:

Primer Convertidor	IYSUP = 0.60
Segundo Convertidor	IYSUP = 0.85
Tercer Convertidor	IYSUP = 0.75
Cuarto Convertidor	IYSUP = 0.75
Horno de Reacción	IYSUP = 0.75

YSUP: Composición de Equilibrio SUPuesta, moles.

En realidad este nombre representa un vector de datos que contiene la composición supuesta de cada una de las especies involucradas en la simulación y sólo se alimenta al programa en el caso de que el indicador de composición de equilibrio (IYSUP) sea igual a uno. Es importante hacer notar que cuando se utilice esta opción es necesario que la composición de equilibrio supuesta cumpla con el balance de masa ya que de lo contrario la subrutina MINER no alcanzará la convergencia.

ESPVEL: ESPacio VELOCidad,  $h^{-1}$ .

De acuerdo a las recomendaciones mencionadas anteriormente el valor de esta variable deberá estar comprendido entre 300 y 1000  $h^{-1}$ .

VELLIN: VELOCidad LINEal, m/h.

Esta variable representa la máxima velocidad lineal del gas a través del convertidor catalítico y su valor deberá estar comprendido entre 540 y 1080 m/h.

El formato para alimentar al programa los datos antes mencionados esta dividido en tres tarjetas diferentes en donde se utiliza la modalidad de alimentación conocida con el nombre de NAMELIST, esto es:

TARJETA # 1:

\$DATOS IYSUP=c, IOP=c, DT=r. r, DP=r. r, TOLTEM=r. r, TOLEQ=r. r, NFI=c,  
ESPVEL=r. r, VELLIN=r. r, \$END

TARJETA # 2:

\$TEMP TENTS= $\lambda.\lambda$ , TSALS= $\lambda.\lambda$ , \$END

en donde:

$e$  = Números enteros.

$\lambda.\lambda$  = Números reales.

TARJETA # 3:

Esta tarjeta está relacionada con el valor asignado a la variable IYSUP en la primera tarjeta, de tal forma que se tienen las siguientes dos opciones:

- IYSUP = 0

\$CONVER FCON= $\lambda.\lambda$ , \$END

en donde:

$\lambda.\lambda$  = Números reales.

- IYSUP = 1

\$EQSUP YSUP= $y_1, y_2, y_3, y_4, \dots, y_n$ , \$END

$y_i$  = Composición de equilibrio supuesta para la  $i$ -ésima especie involucrada. Es importante que el orden de las especies sea igual al asignado en la variable IDENT

A.5 MODULO DE SIMULACION CONDENS:

Con esta subrutina se realiza el balance de materia y energía para el condensador. Dentro de los cálculos realizados en esta subrutina se encuentran: cantidad de Azufre condensado, temperatura de rocío y cantidad de vapor de agua generado. Así mismo, se calculan algunas de las características del condensador tales como: área de transferencia de calor requerida, longitud, diámetro y número de tubos requeridos y la caída de presión a través de los mismos.

Utilizando los valores propuestos por W. P. Knight<sup>48</sup>, para la masa velocidad del gas y el coeficiente global de transferencia de calor, es posible simplificar los cálculos y utilizar los métodos propuestos en la literatura para el diseño de condensadores gas-vapor<sup>7 8 10 18 20 29</sup>, una vez hechas las modificaciones necesarias para el caso particular del condensador de Azufre se obtiene, finalmente, la siguiente secuencia de cálculo (fig. A.10).

- 1.- Calcular los moles de inertes y de Azufre en la corriente gaseosa de entrada al condensador.
- 2.- Calcular los moles al equilibrio de las diferentes especies alotrópicas del Azufre ( $S_2$ ,  $S_6$  y  $S_8$ ) a la temperatura existente.
- 3.- Considerar, para efectos de cálculo, varias secciones en el condensador dividiendo la diferencia de temperaturas (entrada menos salida) y la máxima caída de presión esperada entre un número arbitrario que se considere adecuado.
- 4.- Calcular la presión de vapor del Azufre a la temperatura de la sección de cálculo.
- 5.- Si la presión de vapor del Azufre es mayor que la presión de la sección en cuestión, evaluar el calor sensible que se ha transferido. En caso contrario, hacer el balance de masa a esas condiciones de presión y temperatura para determinar si hay o no condensación de Azufre.
- 6.- En caso de existir condensación calcular la temperatura de rocío a la presión de la sección en que se inició y realizar el balance de calor tomando en cuenta el calor sensible y latente transferido.
- 7.- Repetir los puntos 4, 5 y 6 tantas veces como secciones se hayan hecho e ir sumando el balance de calor de cada una de estas para obtener el total.
- 8.- Con el calor total transferido y el coeficiente de transferencia, calcular el área de transferencia requerida.
- 9.- Seleccionar una longitud y diámetro de tubo y con el área de transferencia requerida calcular el número de tubos necesarios.
- 10.- Con el número de tubos requerido, seleccionar el número

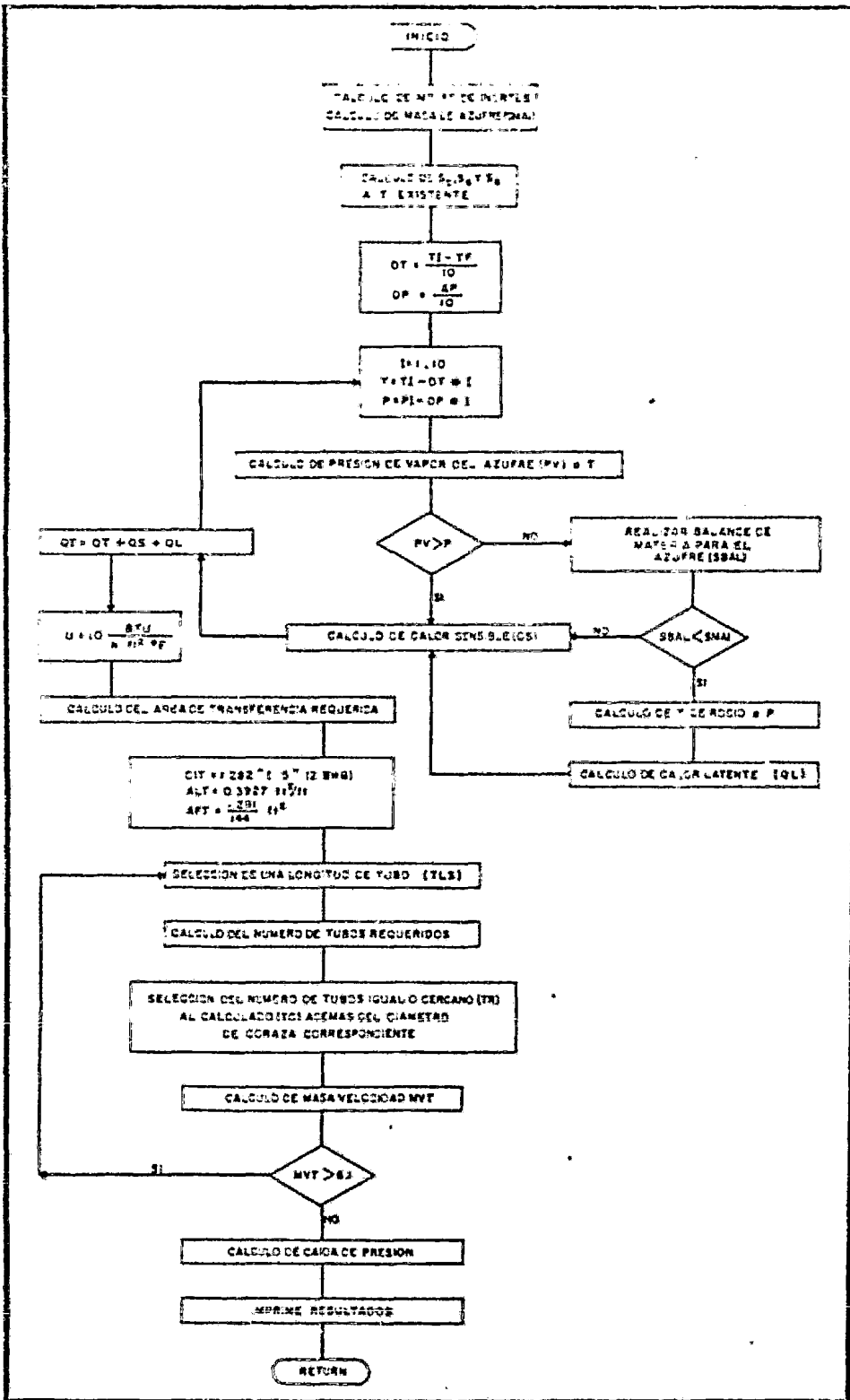


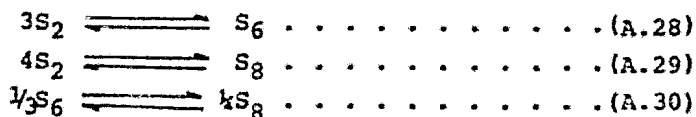
FIGURA A-10 DIAGRAMA DE BLOQUES, SUBROUTINA CONDENS.

de tubos disponible (junto con su diámetro de coraza correspondiente) que sea igual o, en su defecto, que sea el inmediato superior a los primeros de acuerdo a los disponibles comercialmente.

- 11.- Calcular la masa velocidad de la corriente gaseosa. Si ésta es mayor que la máxima permitida ( $6.1 \text{ lb/seg}\cdot\text{ft}^2$ ), seleccionar una longitud menor de los tubos y regresar al punto número 9. En caso contrario, calcular la caída de presión y la cantidad de vapor generado con lo que se terminan los cálculos.

Para la simulación de los condensadores de Azufre se consideran como inertes e incapaces de reaccionar o de cambiar de fase, a las temperaturas normales de operación, al  $\text{CO}_2$ ,  $\text{COS}$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{H}_2\text{S}$ ,  $\text{SO}_2$ , y en general a todas las especies comúnmente existentes en las plantas Claus exceptuando, obviamente, a las especies de Azufre de las cuales sólo se consideran las de  $\text{S}_2$ ,  $\text{S}_6$  y  $\text{S}_8$  ya que además de que son las más abundantes se ha encontrado que la recuperación calculada es prácticamente la misma que si además se incluyen las especies  $\text{S}_3$ ,  $\text{S}_4$ ,  $\text{S}_5$  y  $\text{S}_7$ <sup>32 39 70</sup>.

Debido a que las especies alotrópicas del Azufre se intercambian y varían su equilibrio al cambiar la temperatura, es necesario evaluar estos cambios a lo largo de las diferentes etapas de enfriamiento. Las ecuaciones A.28, A.29 y A.30 nos muestran las relaciones que hay entre las diferentes especies de Azufre:



Como se verá más adelante el equilibrio obtenido con la subrutina MINER (Cap. IV), es un equilibrio termodinámico en el que se considera a todos los componentes de la mezcla gaseosa como un sistema reaccionante; esto es útil cuando se quiere obtener el equilibrio que se alcanza en el convertidor catalítico o térmico, sin em

bargo, para el caso del condensador en que no hay reacción química entre todos los componentes sino sólo entre las especies de Azufre, se hace necesario mantener invariables los moles de los demás componentes y variar únicamente los de Azufre de acuerdo al equilibrio correspondiente entre ellos.

El equilibrio entre las especies de Azufre consideradas, a la temperatura deseada, se obtiene utilizando la subrutina EQUIAZ, la cual proporciona la fracción mol de cada especie de Azufre como si sólo existiere él en el sistema (para más información referirse a la sección B.3 ). Para adaptar este equilibrio al resto del sistema se calcula el peso molecular promedio del Azufre correspondiente y junto con su masa en el vapor se calculan los moles totales para dicho equilibrio; con estos últimos y las fracciones mol al equilibrio obtenidas se calculan los moles de cada especie de Azufre y se incorporan al resto del sistema.

En cuanto a la obtención del calor transferido, ya que éste tiene un carácter diferencial dentro de los equipos de transferencia, es necesario dividir el intervalo de enfriamiento en un número adecuado de secciones, realizando el balance de energía -y el de materia cuando se inicie la condensación- en cada una de ellas y sumar para obtener el total, lo que equivaldría a integrar la ecuación de calor. Lo mismo se hace para la caída de presión, en cuyo caso se divide la máxima caída de presión (0.5 psi) entre el número de secciones.

En el presente trabajo se utilizaron diez secciones para realizar el balance; como se mencionó anteriormente, este número es arbitrario.

En el inicio del balance para cada sección, se calcula la presión de vapor del Azufre a la temperatura correspondiente. Si ésta es mayor que la presión del sistema no hay posibilidad de condensación por lo que se evalúa únicamente el calor sensible; por el contrario, si es menor, puede haber condensación siendo necesario re

alizar el balance de materia para verificar si hay condensación o no; si la hay, será necesario considerar, además del calor sensible, el calor latente.

El balance de materia se hace calculando la cantidad de masa de A zufre en el vapor, la cual, si es menor que la de entrada significa que hubo condensación. Expresando esto en forma matemática:

$$y_S = \frac{P_V^o}{P} \dots \dots \dots (A.31)$$

$$y_I = 1 - y_S \dots \dots \dots (A.32)$$

$$n_T = \frac{n_I}{y_I} \dots \dots \dots (A.33)$$

$$n_S = n_T y_S \dots \dots \dots (A.34)$$

$$m_S = n_S \overline{PM}_S \dots \dots \dots (A.35)$$

$$\overline{PM}_S = \sum y_{S_i} PM_{S_i} \dots \dots \dots (A.36)$$

en donde:

$y_S$  = Fracción mol total de las especies de Azufre

$y_I$  = Fracción mol total de los inertes

$n_I$  = Moles de inertes

$n_T$  = Moles globales de la fase gaseosa

$n_S$  = Moles de Azufre de la fase gaseosa

$m_S$  = Masa de Azufre de la fase gaseosa

$\overline{PM}_S$  = Peso molecular promedio del Azufre para el equilibrio correspondiente

$y_{S_i}$  = Fracción mol de Azufre al equilibrio para cada una de las especies consideradas (valores obtenidos en la subrutina EQUIAZ)

$PM_{S_i}$  = Peso molecular de Azufre para cada especie considerada.

Como se ve, es necesario calcular el equilibrio para las especies de Azufre a la temperatura de la sección, con el que se calcula su peso molecular promedio correspondiente (ec. A.36) y junto con los

moles obtenidos con la ecuación A.34 se calcula su masa.

Si ésta es menor que la de entrada significa que hubo condensación por lo que la diferencia de ambas será el Azufre condensado.

Para la evaluación de la temperatura de rocío se utiliza la subrutina ROCIO, la cual requiere como datos la masa de Azufre existente en la fase gaseosa, la presión de la sección donde se inició la condensación, los moles de inertes y los pesos moleculares de las especies de Azufre.

En el cálculo del calor sensible transferido se utiliza la subrutina ENTAL (Apéndice C.2), de donde se obtienen las entalpías necesarias. Por otra parte, el calor latente se obtiene con la correlación descrita en el Apéndice B.6.

Para obtener la presión de vapor del Azufre se utiliza la correlación descrita también en el Apéndice B.5 (ec. B.49).

Una vez que se tiene el calor total transferido evaluar el área de transferencia de calor requerida mediante la siguiente ecuación:

$$A_R = \frac{Q_T}{U \cdot \Delta T} \dots \dots \dots (A.37)$$

en donde:

$A_R$  = Área de transferencia de calor requerida

$Q_T$  = Calor total transferido

$U$  = Coeficiente global de transferencia de calor

$\Delta T$  = Diferencia de temperaturas

En el presente trabajo se utilizó un coeficiente de transferencia de calor de 10 BTU/h-ft<sup>2</sup>·°F por considerarse conservador dentro de los propuestos en la literatura<sup>48</sup>.

Del mismo modo, se seleccionó un diámetro nominal de tubería de 1.5 pulgadas BWG 12, fijándose así su diámetro nominal, su área transversal de flujo y su área de transferencia por unidad de longitud,



cuyos respectivos valores se muestran a continuación:<sup>80</sup>

$$d_i = 1.282 \text{ pulg.}$$

$$a_{t\phi} = 1.291 \text{ pulg}^2$$

$$a_{\ell t} = 0.3927 \text{ ft}^2/\text{ft}$$

Las longitudes de tubería se encuentran, como se mencionó anteriormente, dentro de las comerciales.

El número de tubos requeridos se determina mediante la ecuación A.38 .

$$T_r = \frac{A_r}{a_{ex}} \dots \dots \dots \text{ (A.38)}$$

$$a_{ex} = a_{\ell t}(l_t - k) \dots \dots \dots \text{ (A.39)}$$

en donde:

$T_r$  = Número de tubos requeridos.

$a_{ex}$  = Área externa de transferencia del tubo

$a_{\ell t}$  = Área externa de transferencia por unidad de longitud de tubo

$k$  = Espesor del o los espejos que soportan los tubos.

$l_t$  = Longitud de los tubos.

Para calcular el área de transferencia externa por tubo (ec. A.38) se selecciona una longitud de tubo y se le resta el o los espesores de los espejos que soportan los tubos a fin de obtener la longitud efectiva neta del tubo. En la literatura<sup>81</sup> se recomiendan espejos de 2 a 3 pulgadas para cambiadores que operan a presiones altas. En este trabajo se utilizó un espesor de espejo de 3 pulgadas y puesto que el condensador cuenta con dos espejos se restarán 6 pulgadas a la longitud de los tubos; este espesor se seleccionó así ya que el condensador opera a relativa alta presión en el lado de la coraza durante la generación de vapor de agua.

Finalmente, se multiplica la longitud efectiva neta por el área de transferencia externa por unidad de longitud, obteniendo así el área de transferencia externa por tubo (ec. A.39).

De acuerdo al número de tubos requeridos, obtenidos con la ecuación A.38, se selecciona el número de tubos disponibles de acuerdo a los arreglos comerciales que sea igual o, en su defecto, el inmediato superior a ellos, junto con su diámetro de coraza correspondiente.

Con el número de tubos disponibles se calcula la masa velocidad según la ecuación A.40.

$$M_v = \frac{F_m}{a_{t\phi} * T_d} \dots \dots \dots (A.40)$$

en donde:

- $M_v$  = Masa velocidad
- $F_m$  = Flujo másico
- $a_{t\phi}$  = Área transversal de flujo
- $T_d$  = Número de tubos disponible.

Si esta masa velocidad es mayor de la máxima permitida se seleccionará una nueva longitud de tubos menor a la ya utilizada, para aumentar el número de tubos requeridos para satisfacer las necesidades de área de transferencia de calor. Esto, a su vez, aumentará el área transversal de flujo, produciendo así una disminución de la masa velocidad del gas.

Esta operación se repite tantas veces como sea necesario hasta lograr cumplir con la restricción de la masa velocidad; una vez cumplida esta restricción se calcula la caída de presión a través de los tubos mediante la ec. A.41 y el vapor generado, utilizando la subrutina VAPOR, con la que se terminan los cálculos.

$$\Delta P = \frac{\phi \cdot M_v^2 \cdot l_t}{5.22 \times 10^{10} \cdot d_i^5 \cdot s} \dots \dots \dots (A.41)$$

en donde:

- $\Delta P$  = Caída de presión, lb/in<sup>2</sup>.
- $\phi$  = Factor de fricción, ft<sup>2</sup>/in<sup>2</sup>.
- $M_v$  = Masa velocidad, lb/h·ft<sup>2</sup>.
- $l_t$  = Longitud de tubos, ft.

$d_i$  = Diámetro de tubos, ft.

$s$  = Densidad específica.

Los datos que se le deben suministrar a la subrutina CONDEN son: temperatura, presión, flujo másico, flujo molar total e individual, entalpía, densidad, viscosidad y capacidad calorífica, todos ellos a las condiciones de entrada al equipo. Estos se pueden considerar como datos fijos, ya que se generan dentro del programa global y se van transfiriendo a la subrutina que los requiera. Otros datos, que se pueden considerar como variables ya que se suministran en forma externa de acuerdo a los requerimientos del proceso son: temperatura de alimentación del agua, presión del vapor de agua a generar y la purga de agua de caldera deseada.

Aunque el programa cuenta con seis longitudes de tubos comerciales y veinte pares de valores para número de tubos-diámetro de coraza se dejó la flexibilidad de poderle suministrar estos valores por medio de una tarjeta de datos para el caso en que se quiera o requiera de dimensiones especiales. Para ello se cuenta con el indicador ITUB en la tarjeta de datos, si se le da el valor de 0 indica que se utilizarán los valores dados en el programa. Cuando se suministren en forma externa, deberá hacerse de la siguiente manera:

- En la primera tarjeta se darán la cantidad de longitudes de tubos a suministrar, la cantidad de pares número de tubos-diámetro de coraza y, finalmente, las longitudes de los tubos.
- En las tarjetas siguientes se darán el par número de tubos-diámetro de coraza, un par de estos valores por tarjeta.

#### A.5.1 DATOS REQUERIDOS POR EL PROGRAMA:

En esta sección se enlistarán los nombres, unidades y valores recomendados de los diferentes datos requeridos por la subrutina CONDEN. Así mismo, se indicará el formato de alimentación de los mismos.

TSAL: Temperatura de la corriente de SALida del condensador, °K.  
Con el valor dado a esta variable, se fijará la temperatura de salida para la corriente de proceso que pasa por el condensador; es usual fijarla en 400°K para todos los condensadores usados en las plantas Claus.

TEACON: Temperatura de Entrada de Agua al CONDensador, °K.  
Con esta variable se establece la temperatura de entrada del agua al condensador para la producción de vapor. El valor dado deberá ser o estar cerca de la temperatura de burbuja para la presión de vapor desada; es recomendable utilizar un valor de 350 °K para una presión de vapor de 5 atm. ( 75 psia aproximadamente).

PVCON: Presión del Vapor producido en el CONDensador, atm.  
Con esta variable se fija la presión del vapor a ser generado en el condensador, el cual generalmente es vapor de media presión. Se recomienda utilizar un valor de 5 atm. ( 75 psia aproximadamente).

PURGA: Porcentaje de agua de PURGA.  
Por medio de esta variable se establece la cantidad de agua purgada del condensador; generalmente oscila entre 5 y 10% del agua total alimentada.

ITUB: Indicador de alimentación de datos de TUBos  
= 0; El programa asumirá las longitudes, número de tubos y diámetro de coraza comerciales contenidos en su memoria.  
= 1; Se suministran los datos deseados para las mismas variables.

En el caso de utilizar la opción ITUB = 1, será necesario alimentar, además, las siguientes variables.

NLT: Número de Longitudes de Tubos a suministrar.  
Debido a la dimensión asignada, esta variable no deberá ser mayor de 10.

NDT: Número de pares de Diámetro de coraza/número de Tubos a suministrar.

Debido a la dimensión asignada, esta variable no deberá ser mayor a 25.

TL: Longitudes de Tubos deseadas, ft.

A esta variable es posible darle un máximo de 10 valores diferentes.

El formato para alimentar las variables antes mencionadas es como se explica a continuación:

TARJETA # 1:

\$DATOS TSAL=*n.n*,TEACON=*n.n*,PVCON=*n.n*,PURGA=*n.n*,ITUB=*e*,\$SEND

en donde:

*e* = Números enteros.

*n.n* = Números reales.

Solo en el caso de que ITUB = 1, se deberá agregar las siguientes tarjetas:

TARJETA # 2;

\$TUBCON NLT=*e*,NDT=*e*,TL=*L<sub>1</sub>,L<sub>2</sub>,L<sub>3</sub>, . . . ,L<sub>NLT</sub>*,\$SEND

en donde:

*e* = Números enteros.

*L<sub>1</sub>,L<sub>2</sub>,L<sub>3</sub>* = Longitudes de tubos propuestas.

NDT TARJETAS:

Por medio de estas tarjetas se alimentan los pares de valores para diámetro de coraza/número de tubos. El formato de lectura de estos datos es 15 para el número de tubos y F7.2 para el diámetro de la coraza correspondiente. El número de tarjetas alimentadas deberá ser igual al valor asignado a la variable NDT de tal forma que si ésta es igual a 3, tendremos:

TARJETAS # 3,4,5:

123456789012345678901234567890123456789012345678901234567890.....  
*t* *n.nnnnn*  
*t* *n.nnnnn*                    en donde: *t* = Número de tubos (entero)  
*t* *n.nnnnn*                    *n.nnnnn* = Diámetro de la coraza en in.

APENDICE B: SUBROUTINAS AUXILIARES.

B.1 SUBROUTINA ADIAB:

En esta subrutina se efectúa el cálculo iterativo de la temperatura de reacción adiabática, es decir, la temperatura máxima que se alcanza cuando el recipiente en donde se lleva a cabo la reacción no intercambia calor con los alrededores y además no se presentan otros fenómenos tales como eléctricos, de trabajo, de ionización, etc. En el cálculo de la temperatura de flama adiabática para las reacciones de combustión, como las que se llevan a cabo en el Horno Claus (Cap. V), se supone además que existe una combustión total.

El cálculo de la temperatura de reacción adiabática es de gran utilidad para seleccionar los tipos de materiales que deben especificarse para el recipiente en donde se lleva a cabo la reacción ya que esta temperatura es la máxima que, desde el punto de vista termodinámico, puede lograrse en el proceso.

El principio en el que se basa el cálculo de la temperatura de reacción adiabática consiste en suponer que toda la energía desprendida de la reacción a una cierta temperatura de referencia, más la energía que se introduce con la corriente de alimentación (relativa a la misma temperatura de referencia) se encuentran disponibles para aumentar la energía de los productos. Para un sistema en operación continua este balance de energía se representa por:

$$\Delta H_p \Big|_{298.15}^{T_2} = \Delta H_R \Big|_{298.15}^{T_1} - Q_{R_{298.15}} \dots \dots \dots (B.1)$$

en donde:

$\Delta H_p \Big|_{298.15}^{T_2}$  = Entalpía total de los productos a la temperatura adiabática ( $T_2$ ) relativa a una temperatura de 298.15°K, Kcal/hr.

$\Delta H_R \Big|_{298.15}^{T_1}$  = Entalpía total de los reactivos a la temperatura de alimentación ( $T_1$ ) relativa a una temperatura de 298.15°K, Kcal/hr.

$Q_{R_{298.15}}$  = Cambio de entalpía debido a las reacciones a una temperatura de 298.15°K, Kcal/hr.

Antes de aplicar la ecuación B.1 para la determinación de la temperatura de reacción adiabática es necesario recordar que para una reacción exotérmica, como las del proceso Claus, el calor de reacción  $Q_R$  es negativo y los productos estarán a una temperatura mayor que los reactivos.

Por otra parte, la forma de calcular cada uno de los términos de dicha ecuación, en un sistema de operación continua es :

$$\Delta H_p \Big|_{298.15}^{T_2} = \sum_{i=1}^n (H_{T_2} - H_{298.15}) p_i W_{p_i} \dots \quad (B.2)$$

$$\Delta H_r \Big|_{298.15}^{T_1} = \sum_{i=1}^n (H_{T_1} - H_{298.15}) r_i W_{r_i} \dots \quad (B.3)$$

$$Q_R = \sum_{i=1}^n (\Delta H_{f,298.15}^\circ) p_i W_{p_i} - \sum_{i=1}^n (\Delta H_{f,298.15}^\circ) r_i W_{r_i} \dots \quad (B.4)$$

en donde:

$T_2$  = Temperatura de reacción adiabática, °K

$T_1$  = Temperatura de alimentación al sistema, °K

$(H_{T_2} - H_{298.15}) p_i$  = Cambio de entalpía del  $i$ -ésimo producto desde la temperatura de referencia hasta la temperatura  $T_2$ , Kcal/mol

$(H_{T_1} - H_{298.15}) r_i$  = Cambio de entalpía del  $i$ -ésimo reactivo desde la temperatura de referencia hasta la temperatura  $T_1$ , Kcal/mol

$W_{p_i}$  = Flujo molar del  $i$ -ésimo producto, mol/hr

$W_{r_i}$  = Flujo molar del  $i$ -ésimo reactivo, mol/hr

$(\Delta H_{f,298.15}^\circ) p_i$  = Calor de formación estándar del  $i$ -ésimo producto a 298.15°K, Kcal/mol (como gas ideal)

$(\Delta H_{f,298.15}^\circ) r_i$  = Calor de formación estándar del  $i$ -ésimo reactivo a 298.15°K, Kcal/mol (como gas ideal)

Sustituyendo las ecuaciones B.2, B.3 y B.4 en la ecuación B.1 tenemos:

$$\sum_{i=1}^n (H_{T_2} - H_{298.15}) p_i W_{p_i} = \sum_{i=1}^n (H_{T_1} - H_{298.15}) n_i W_{n_i} - \left[ \sum_{i=1}^n (\Delta H_{f,298.15}^{\circ}) p_i W_{p_i} - \sum_{i=1}^n (\Delta H_{f,298.15}^{\circ}) n_i W_{n_i} \right] \quad \dots \dots (B.5)$$

rearrreglando, se llega finalmente a:

$$\sum_{i=1}^n [(H_{T_2} - H_{298.15}) + (\Delta H_{f,298.15}^{\circ})] p_i W_{p_i} = \sum_{i=1}^n [(H_{T_1} - H_{298.15}) + (\Delta H_{f,298.15}^{\circ})] n_i W_{n_i} \quad \dots \dots (B.6)$$

que representa el balance de energía para un sistema de reacción adiabática. Por lo tanto, la solución de esta ecuación nos dará la temperatura final de los productos de reacción.

Para resolver la ecuación B.6 la subrutina ADIAB recibe los siguientes datos:

- Temperatura de alimentación al sistema,
- Vector de flujos molares de los reactivos, y
- Vector de flujos molares de los productos.

La temperatura de alimentación  $T_1$  se envía a la subrutina ENTAL en donde se realiza el cálculo de los cambios de entalpía más los calores de formación para cada uno de los reactivos, para después multiplicar cada uno de estos valores por el flujo molar del reactivo correspondiente y sumar estos productos de acuerdo al término del lado derecho de la ecuación B.6. Una vez conocido este valor, se procede a encontrar una temperatura  $T_2$  tal que el valor del término del lado izquierdo de la ecuación del balance de energía sea igual al valor calculado para el lado derecho.

Debido al carácter de la información disponible en la subrutina ENTAL, la determinación de la temperatura de reacción adiabática  $T_2$  implica un método iterativo. Para facilitar la explicación de este método, supongase que la ecuación B.6 puede escribirse de la siguiente manera:

$$A(T_2) = B(T_1)$$



Entonces, para encontrar una  $T_2$  tal que se cumpla la igualdad de esta ecuación, se debe suponer una temperatura y efectuar el cálculo del término A, si este valor es igual al del término B dentro de los límites de tolerancia el problema se habrá terminado, sin embargo, en el caso contrario habrá dos alternativas para seleccionar la siguiente suposición de  $T_2$ :

- a)  $A > B$ : En este caso se deberá disminuir sucesivamente  $T_2$  hasta una temperatura a la cual se alcance la convergencia o bien se invierta esta desigualdad; en este punto se dice que la solución está limitada entre  $T_k$  y  $T_{k-1}$ .
- b)  $A < B$ : En este caso se deberá aumentar sucesivamente  $T_2$  hasta una temperatura a la cual se alcance la convergencia o bien se invierta esta desigualdad; en este punto se dice que la solución está limitada entre  $T_k$  y  $T_{k-1}$ .

Una vez que la solución ha sido limitada entre el rango  $T_k$  y  $T_{k-1}$  se procede a utilizar el método del punto medio para encontrar la nueva temperatura supuesta. Este método consiste simplemente en sacar el punto medio entre los límites, esto es:

$$T_2 = \frac{T_{k-1} + T_k}{2} = \frac{t_1 + t_2}{2}$$

en donde:

$k$  = Número de iteración.

y para  $t_1$ :  $A > B$  y  $t_2$ :  $A < B$

Supongase que para esta nueva temperatura supuesta el resultado de evaluar la función A es  $A < B$ ; entonces, lógicamente, ahora la solución está limitada por  $t_2$  y  $T_2$  por lo que se substituye  $t_1$  por  $T_2$  y se vuelve a sacar el punto medio entre los nuevos límites. Este procedimiento se repite hasta alcanzar la convergencia deseada.

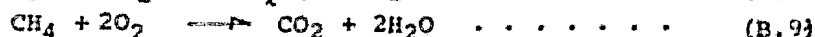
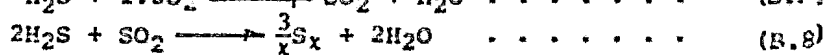
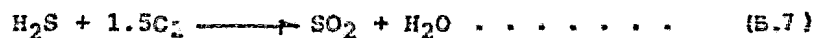
## B.2 SUBROUTINA EQUIMO:

Como se explicó en la descripción de la subrutina MINER (Cap. IV A) el método de Minimización de Energía Libre para el cálculo de la composición de equilibrio requiere de una composición de equilibrio supuesta que cumpla con las restricciones del balance de masa para iniciar los cálculos.

En el programa de computadora propuesto en esta tesis, la composición inicial supuesta puede ser alimentada al programa mediante una tarjeta de lectura de datos (en el caso de que  $IYSUP = 1$ , ver Apéndice A), o bien utilizando la opción  $IYSUP = 0$  en cuyo caso se hace uso de la subrutina EQUIMO para proponer la composición de equilibrio inicial.

En el primer caso es indispensable hacer estimaciones a mano o contar con cálculos previos que muestren una composición cercana al equilibrio o cuando menos que cumplan con las restricciones del balance de materia. Sin embargo, con el uso de la subrutina EQUIMO sólo se requiere el suministro de un factor de conversión (FCON) y de la composición de la corriente de entrada al equipo a simular, para que esta subrutina calcule por sí sola una composición de equilibrio inicial que cumpla con la restricción establecida y que será tan cercana al equilibrio como el factor de conversión supuesto lo sea. Es importante hacer notar que esta subrutina cuenta con un valor de protección de 0.6 para el factor de conversión, el cual será utilizado en el caso de que no se suministrará un valor para esta variable.

Los cálculos de esta subrutina se basan en el balance de materia de las siguientes tres reacciones que, aunque el sistema reactivo de una planta Claus es muy complejo, son las más importantes:



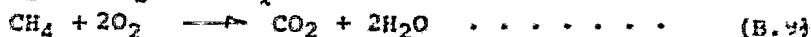
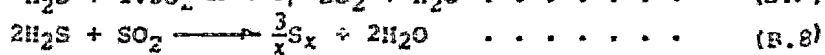
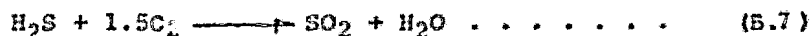
## B.2 SUBROUTINA EQUIMO:

Como se explicó en la descripción de la subrutina MINER (Cap. IV A) el método de Minimización de Energía Libre para el cálculo de la composición de equilibrio requiere de una composición de equilibrio supuesta que cumpla con las restricciones del balance de masa para iniciar los cálculos.

En el programa de computadora propuesto en esta tesis, la composición inicial supuesta puede ser alimentada al programa mediante una tarjeta de lectura de datos (en el caso de que IYSUP = 1, ver Apéndice A), o bien utilizando la opción IYSUP = 0 en cuyo caso se hace uso de la subrutina EQUIMO para proponer la composición de equilibrio inicial.

En el primer caso es indispensable hacer estimaciones a mano o contar con cálculos previos que muestren una composición cercana al equilibrio o cuando menos que cumplan con las restricciones del balance de materia. Sin embargo, con el uso de la subrutina EQUIMO sólo se requiere el suministro de un factor de conversión (FCON) y de la composición de la corriente de entrada al equipo a simular, para que esta subrutina calcule por sí sola una composición de equilibrio inicial que cumpla con la restricción establecida y que será tan cercana al equilibrio como el factor de conversión supuesto lo sea. Es importante hacer notar que esta subrutina cuenta con un valor de protección de 0.6 para el factor de conversión, el cual será utilizado en el caso de que no se suministrará un valor para esta variable.

Los cálculos de esta subrutina se basan en el balance de materia de las siguientes tres reacciones que, aunque el sistema reactivo de una planta Claus es muy complejo, son las más importantes:



Basándose en el hecho de que los hidrocarburos reaccionan más rápidamente que el Acido Sulfhídrico con el Oxígeno, el primer paso consiste en calcular el Oxígeno consumido en la reacción B.9 y restarlo al flujo de entrada de acuerdo a la siguiente ecuación:



Así mismo, se calculan los flujos de salida de esta subrutina, o sea, las composiciones de equilibrio supuestas para las demás especies involucradas en la reacción B.9 de acuerdo a las siguientes ecuaciones:



El segundo paso consiste en calcular los cambios de composición de las especies involucradas en la reacción B.7, considerando que todo el Oxígeno remanente reacciona con el Acido Sulfhídrico presente en la corriente, esto es:



Finalmente se hacen los cálculos correspondientes a la reacción B.8, para lo cual, por simplicidad se considera que la única forma alotrópica de azufre formada es la diatómica, mientras que las formas  $\text{S}_6$  y  $\text{S}_8$  permanecen constantes. Entonces, a partir del factor de conversión (FCON), es posible calcular las cantidades de  $\text{H}_2\text{S}$  y  $\text{SO}_2$  que reaccionan, las cuales al restarlas a las ya existentes nos darán las composiciones de equilibrio supuestas para estas especies. Así mismo, es posible calcular el Azufre y el Agua formados por esta reacción, esto es:

$$\begin{aligned}
 R &= {}^1\text{H}_2\text{S} * \text{FCON} \quad \dots \dots \dots \quad (\text{B.19}) \\
 \Delta\text{H}_2\text{S} &= {}^1\text{H}_2\text{S} - R \quad \dots \dots \dots \quad (\text{B.19}) \\
 \Delta\text{SO}_2 &= {}^1\text{SO}_2 - R/2.0 \quad \dots \dots \dots \quad (\text{B.20}) \\
 \Delta\text{H}_2\text{O} &= {}^2\text{H}_2\text{O} + R \quad \dots \dots \dots \quad (\text{B.21}) \\
 \Delta\text{S}_2 &= {}^e\text{S}_2 + 0.75*R \quad \dots \dots \dots \quad (\text{B.22})
 \end{aligned}$$

en donde:

$R$  = Moles de  $\text{H}_2\text{S}$  que reaccionan.  
 $\text{FCON}$  = Factor de CONversión.

Por otro lado, se tiene que para el resto de las especies:

$$\begin{aligned}
 \Delta\text{N}_2 &= {}^e\text{N}_2 \quad \dots \dots \dots \quad (\text{B.23}) \\
 \Delta\text{S}_6 &= {}^e\text{S}_6 \quad \dots \dots \dots \quad (\text{B.24}) \\
 \Delta\text{S}_8 &= {}^e\text{S}_8 \quad \dots \dots \dots \quad (\text{B.25}) \\
 \Delta\text{CS}_2 &= {}^e\text{CS}_2 \quad \dots \dots \dots \quad (\text{B.26}) \\
 \Delta\text{COS} &= {}^e\text{COS} \quad \dots \dots \dots \quad (\text{B.27})
 \end{aligned}$$

en donde para todas las ecuaciones anteriores:

$e$  = Entrada.  
 $\Delta$  = Salida.  
 $1, 2$  = Composiciones intermedias.

A manera de aclaración, cabe mencionar que en las ecuaciones anteriores las diferentes especies químicas fueron representadas por su notación química para una fácil identificación y que sólo representan los moles que se forman o reaccionan; así, por ejemplo, en el caso de la ecuación B.11 se tiene que el  $\text{CO}_2$  que entra más el producido por la reacción B.9 es igual al  $\text{CO}_2$  de salida o de equilibrio. El  $\text{CO}_2$  producido es posible representarlo con  $\text{CH}_4$  ya que un mol de éste último produce un mol de  $\text{CO}_2$ .

B.3 SUBROUTINA EQUIAZ:

Como se ha mencionado anteriormente, el Azufre en fase vapor se encuentra formando una mezcla en equilibrio de sus diferentes formas alotrópicas; teniéndose que, a las condiciones de operación de las plantas Claus, las especies de S<sub>8</sub>, S<sub>6</sub> y S<sub>2</sub> son las más abundantes.<sup>104</sup>

El equilibrio de dichas especies alotrópicas depende de la temperatura y de la presión parcial total del Azufre dentro del sistema, por lo que, para evaluar el equilibrio se regresionaron los datos de fracción mol contra temperatura<sup>104</sup> para cada una de las tres especies de Azufre consideradas, encontrándose las siguientes expresiones:

para S<sub>2</sub>:

$$\ln y_c = A + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^2} + \frac{D}{T^3} + \frac{E}{T^4} \dots \dots \dots (B.28)$$

para S<sub>6</sub> y S<sub>8</sub>:

$$y_c = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 \dots \dots \dots (B.29)$$

en donde:

y<sub>c</sub> = Porcentaje mol calculado para cada especie.

T = Temperatura, °F

En la figura B.1, se presentan las curvas de equilibrio en función de la temperatura para las diferentes especies alotrópicas de Azufre, mientras que en la tabla B.1 se encuentran tabulados los valores de las constantes de las ecuaciones que representan este equilibrio a 1 atm de presión.

A pesar de que el coeficiente de correlación obtenido para estas ecuaciones fué muy bueno, la suma de los porcentajes individuales no es exactamente igual a cien, por lo que es necesario normalizar los valores obtenidos. Para ello, se dividen cada uno de estos valores entre la suma de los mismos y se multiplican por cien, es decir:

$$ST = \frac{y_{ci}}{\sum y_{ci}} \dots \dots \dots (B.30)$$

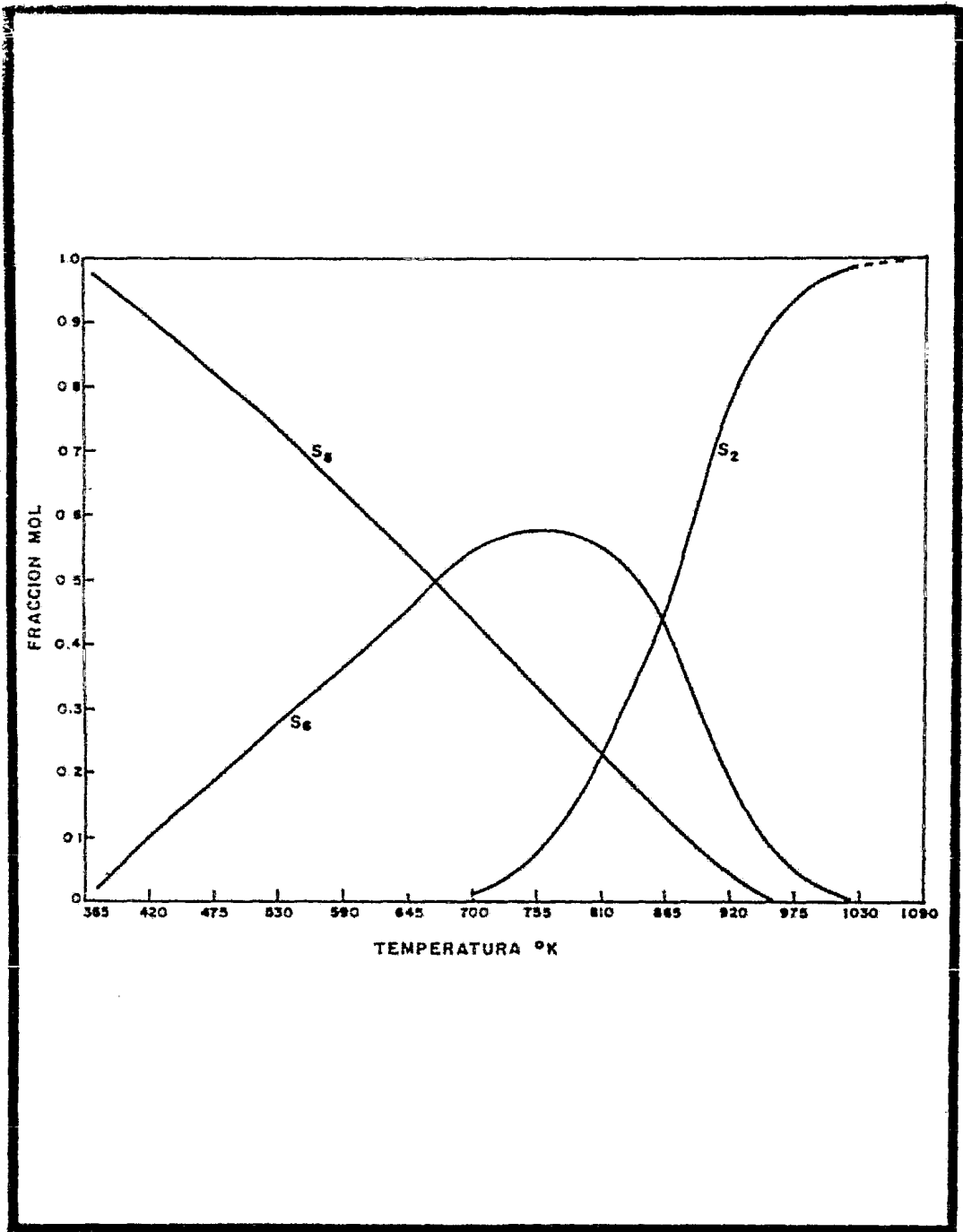


FIGURA B.1 EQUILIBRIO EN LA FASE VAPOR PARA LAS PRINCIPALES ESPECIES DE AZUFRE

$$y_{N_i} = \frac{y_{c_i}}{ST} * 100 \quad \dots \dots \dots \quad (B.31)$$

$$\Sigma y_{N_i} = 100$$

en donde:

ST = Suma de los porcentajes calculados.

$y_{N_i}$  = Porcentaje mol normalizado de la  $i$ -ésima especie de Azufre.

La composición de Azufre obtenida de esta forma correspondería al caso de que la presión total del sistema se debiera solamente a éste, es decir, que en el sistema solo existiera Azufre. En el caso contrario, será necesario modificar esta composición de acuerdo a la presión parcial del Azufre y la composición de los demás componentes, lo cual se lleva a cabo dentro de la subrutina ROCIO, que es la que hace uso de estas composiciones.

Esta subrutina requiere como único dato la temperatura a la cual se desea calcular el equilibrio.

TABLA B.1

CONSTANTES PARA EL CALCULO DEL EQUILIBRIO  
DE LAS ESPECIES ALOTROPICAS DE AZUFRE

CONSTANTES	S <sub>2</sub>	S <sub>6</sub>	S <sub>8</sub>
A	8.3541031	17.856299	87.153299
B	-6943.313	-7.7642053*10 <sup>-2</sup>	4.178522*10 <sup>-2</sup>
C	741318.290	3.2991874*10 <sup>-4</sup>	-2.4414646*10 <sup>-4</sup>
D	1.362252*10 <sup>8</sup>	-2.7514032*10 <sup>-7</sup>	2.0136666*10 <sup>-7</sup>
E	-2.5085495*10 <sup>10</sup>	6.3966142*10 <sup>-11</sup>	-5.4816336*10 <sup>-11</sup>



#### B.4 SUBROUTINA FACTOR:

En esta subrutina se efectúa el cálculo del factor de fricción necesario para evaluar la caída de presión dentro de los tubos de los equipos de transferencia de calor, como lo son la Caldera Recuperadora de Calor y los Condensadores de Azufre.

Como se recordará, cuando un fluido pasa a través de una tubería experimenta una caída de presión, la cual está en función de la rugosidad de la tubería y del número de Reynolds<sup>90</sup>.

Cuando el fluido fluye a régimen laminar, es decir, con un número de Reynolds menor de 2300, es posible calcular el factor de fricción por medio de la ecuación de Hagen-Poiseville :

$$f = \frac{16}{DG/\mu} \quad \dots \dots \dots \quad (B.32)$$

en donde:

$f$  = Factor de fricción.

$D$  = Diámetro del tubo,

$G$  = Masa velocidad,

$\mu$  = Viscosidad,

$DG/\mu$  = Número de Reynolds =  $Re$

En el caso de que el número de Reynolds de un fluido sea mayor de 2300, se tiene que éste fluye con un régimen turbulento y el factor de fricción puede ser calculado por medio de dos ecuaciones. La primera es la ecuación de Drew, Koo y McAdams (ecuación B.33, la cual se aplica en el caso de que se utilicen tubos de poca rugosidad, los cuales provocan bajas caídas de presión a través de los equipos de transferencia de calor.<sup>90</sup>

$$f = 0.0014 + \frac{0.125}{Re^{0.32}} \quad \dots \dots \dots \quad (B.33)$$

Por otra parte, cuando se utilizan tubos con paredes de mayor rugosidad y que por tanto producen una mayor caída de presión, para las mismas condiciones que el caso anterior, se recomienda utili

zar la ecuación de Wilson, McAdams y Seltzer para tubos de hierro y acero comercial<sup>30</sup> :

$$f = 0.0035 + \frac{0.264}{Re^{0.42}} \dots \dots \dots (B.34)$$

Estas tres ecuaciones se aplican con buenos resultados cuando el fluido fluye en forma isotérmica.

Para fluidos que experimentan transferencia de calor dentro de la tubería, Sieder y Tate correlacionaron los factores de fricción graficados en la fig. 26 de la referencia<sup>30</sup> en forma dimensional (ft<sup>2</sup>/pulg<sup>2</sup>).

Debido a que en la referencia mencionada no se dan los valores de las constantes que representan dicha gráfica, se procedió a correlacionar esta gráfica tomando como modelo las ecuaciones

B.32 y B.34 ; teniendo que para fluidos a régimen laminar la ecuación del factor de fricción es:

$$f = \frac{0.5}{Re} \dots \dots \dots (B.35)$$

Por lo que se refiere a fluidos en régimen turbulento, solo se regresionó la curva correspondiente a tubería comercial de acero y hierro, ya que es el material más utilizado para los equipos de las plantas Claus; la correlación obtenida fue:

$$f = 1.108559 \times 10^{-4} + \frac{8.3617071 \times 10^{-3}}{Re^{0.42}} \dots \dots (B.36)$$

El factor de fricción calculado con estas ecuaciones tiene las dimensiones de ft<sup>2</sup>/in<sup>2</sup>.

Para la evaluación del factor de fricción, esta subrutina requiere como datos la masa velocidad y viscosidad del fluido así como el diámetro de la tubería. Con estos datos se calcula, primeramente el número de Reynolds de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$Re = \frac{G \cdot D}{\mu} \dots \dots \dots (B.37)$$

en donde:

- G = Masa velocidad,
- D = Diámetro de la tubería,
- $\mu$  = Viscosidad del fluido

Si el número de Reynolds resultante es menor a 2300 se utiliza la ecuación B.35 para evaluar el factor de fricción (régimen laminar); en el caso de que sea mayor, se utiliza la ecuación B.36 (régimen turbulento).

### B.5 SUBROUTINA ROCIO :

En esta subrutina se evalúa el punto de rocío de la mezcla gas/vapor, en base a su contenido de Azufre y a una presión dada.

Como se recordará, el punto de rocío es aquel en el cual el sistema se encuentra saturado y donde con una pequeñísima disminución de la temperatura, se iniciaría la condensación<sup>22 23 24</sup>; en este caso particular, la condensación del Azufre.

A las condiciones de operación de las plantas Claus (aprox. entre 120 - 1250°C y 1 - 1.5 atm), todos los componentes de la mezcla gaseosa, a excepción del agua y el Azufre, se comportan como gases y no como vapor, sin que haya posibilidad de condensación. En cuanto al agua, estas condiciones hacen que se encuentre como vapor sobrecalentado, por lo que tampoco presenta posibilidades de condensación. Así, en la evaluación del punto de rocío de la mezcla, se considera al vapor de Azufre como único componente susceptible de condensación y al resto de los componentes como incondensables.

De esta forma se tiene que mientras la composición de las especies gaseosas de Azufre varía con la temperatura, la composición de los incondensables permanece constante, pudiéndose establecer lo siguiente:

$$N_T = N_I + N_A \quad \dots \dots \dots \quad (B.38)$$

$$N_A = N_T \cdot y_A \quad \dots \dots \dots \quad (B.39)$$

$$y_A = \frac{\sum N_{Ai}}{N_T} \quad \dots \dots \dots \quad (B.40)$$

en donde:

$N_T$  = Moles totales del sistema

$N_I$  = Moles totales de incondensables

$N_A$  = moles totales de Azufre ( $S_2+S_6+S_8$ )

$y_A$  = Fracción mol total de Azufre

$N_{Ai}$  = Moles de la  $i$ -ésima especie de Azufre

Sustituyendo la ecuación B.39 en B.40 y simplificando se obtiene:

$$N_T = \frac{N_I}{1 - y_A} \quad \dots \dots \dots \quad (B.41)$$

Para evaluar el equilibrio de las diferentes especies de Azufre con sideradas a una temperatura dada, se utiliza la subrutina EQUIAZ, la cual se explica en la sección B.3 de este apéndice.

Considerando un comportamiento ideal de los gases dentro de la plan ta Claus, es posible aplicar la ley de Dalton, la cual establece que la presión total de un sistema, para una mezcla gaseosa, es igual a la suma de las presiones parciales de cada uno de los componentes<sup>22</sup>:

$$P_T = \sum P_i \quad . . . . . \quad (B.42)$$

$$P_i = P_T \cdot y_i \quad . . . . . \quad (B.43)$$

$$y_i = \frac{P_i}{P_T} \quad . . . . . \quad (B.44)$$

en donde:

$P_T$  = Presión total del sistema

$P_i$  = Presión parcial del  $i$ -ésimo componente

$y_i$  = Fracción mol en la fase gaseosa del  $i$ -ésimo componente

Por otra parte se tiene que en el punto de rocío la presión parcial de un componente en la fase gaseosa es igual a la presión de vapor del mismo, siempre y cuando condense como componente puro y la presión sea baja, esto es<sup>22, 23</sup>:

$$P_i^o = P_i \quad . . . . . \quad (B.45)$$

de aquí que la ecuación B.44 se convierta en:

$$y_i = \frac{P_i^o}{P_T} \quad . . . . . \quad (B.46)$$

en donde:

$P_i^o$  = Presión de vapor del  $i$ -ésimo componente

Tomando en cuenta que  $\sum y_i = 1$  y con la ecuación B.46 se llega a:

$$y_I = 1 - y_A$$

$$y_I = 1 - \frac{P_A^o}{P_T} \quad . . . . . \quad (B.47)$$

en donde:

$P_A^o$  = Presión de vapor del Azufre

$y_I$  = Fracción mol total de incondensables

Como se mencionó en el capítulo VII, el Azufre líquido está formado por cadenas polímeras de  $S_n$  y anillos de  $S_8$ , mientras que el vapor está formado principalmente por  $S_2$ ,  $S_6$  y  $S_8$ . Debido a esta característica se complicarían los cálculos del equilibrio líquido-vapor; sin embargo, en la determinación del punto de rocío se solventa dicha complicación realizando un balance de materia del Azufre en el vapor -descrito en seguida- utilizando las ecuaciones planteadas anteriormente, eliminando así la necesidad de conocer cualquier propiedad del líquido.

Para poder evaluar la presión de vapor del Azufre a una temperatura dada, se correlacionaron los datos encontrados en la bibliografía<sup>M</sup>, obteniéndose el mejor coeficiente de correlación para la siguiente expresión:

$$\log P_A^\circ = 3.10438 - \frac{1368.08312}{T} - \frac{621926.76562}{T^2} \quad . \quad (B.48)$$

en donde:

$P_A^\circ$  = Presión de vapor del Azufre, atm

$T$  = Temperatura, °K

Por otra parte, es importante hacer notar que en el cálculo de la presión parcial del Azufre, utilizando la ecuación B.43, la fracción mol utilizada deberá corresponder a la total, es decir, considerando todas las especies de Azufre existentes en la simulación (ec. B.41).

Tomando en cuenta lo anterior, es posible evaluar el punto de rocío del Azufre, lo cual deberá hacerse en forma iterativa, ya que al variar la temperatura se ven afectados: el equilibrio de las diferentes especies de Azufre, la fracción mol total y la presión parcial del mismo<sup>32</sup>.

El método utilizado aquí es el conocido por el nombre de Método de la Bisección, el cual aplicado en este caso particular es el siguiente:

- 1.- Establecer las temperaturas  $T_1$  y  $T_2$  como cotas inferior y superior respectivamente, dentro de las cuales se encuentran la raíz que se busca.
- 2.- Calcular el punto medio  $T_3$  como estimación a la raíz buscada

$$T_3 = \frac{T_1 + T_2}{2}$$

- 3.- Evaluar la presión de vapor (ec. B.48) y el equilibrio de las especies de Azufre (Subrutina EQUIAZ) a la temperatura  $T_3$ .
- 4.- Con los valores obtenidos en el punto anterior, estimar la fracción mol total del Azufre utilizando la ecuación B.46 y los moles totales del sistema con la ecuación B.41. En seguida, calcular los moles de Azufre mediante la ecuación B.39 y calcular la masa que le corresponde.
- 5.- Si la diferencia absoluta entre la masa de Azufre calculada en el punto 4 y la masa real existente en el sistema es menor que cierta tolerancia, se habrá encontrado el punto de rocío con lo que se dan por terminados los cálculos.
- 6.- En el caso contrario, se termina si la masa calculada es mayor o menor a la real.

Si es mayor, se tiene que la temperatura de rocío es menor que la temperatura  $T_3$  por lo que esta última se fija como nueva cota superior, es decir:

$$T_2 = T_3$$

Si es menor, indica que la temperatura de rocío está localizada entre las temperaturas  $T_3$  como cota inferior y  $T_2$  como cota superior, por lo que:

$$T_1 = T_3$$

- 7.- Una vez establecidos los nuevos límites, se reinician los cálculos a partir del paso 2.

En este programa las temperaturas  $T_1$  y  $T_2$  que sirven como límites para iniciar los cálculos se fijaron considerando las temperaturas de congelación y de ebullición a una atmósfera para el Azufre puro de tal manera que se tiene<sup>31</sup>:

$$T_1 = 392 \text{ }^\circ\text{K} (246.1 \text{ }^\circ\text{F})$$

$$T_2 = 718 \text{ }^\circ\text{K} (832.3 \text{ }^\circ\text{F})$$

Esto se basa en el hecho de que a las presiones de operación de los condensadores la presión parcial del Azufre en la mezcla gaseosa mu

ca será mayor a una atmósfera y por lo tanto su presión de vapor en el punto de rocío tampoco lo será y ya que a 718 °K la presión de vapor del Azufre sería igual a una atmósfera, es válido fijar esta temperatura como límite superior. Por otra parte, las temperaturas de operación existentes no permitirían la congelación del Azufre líquido formado, por lo que también es válido suponer al punto de congelación como límite inferior.

En el inciso 4, para calcular la masa del Azufre es necesario calcular el peso molecular del mismo, considerando todas las especies existentes. Para ello se utiliza el equilibrio calculado con la subrutina EQUIAZ, el cual se da como fracción mol de cada especie, de tal forma que para calcular el peso molecular promedio se tiene:

$$\overline{PM}_A = \sum PM_i \cdot z_i \quad \dots \dots \dots \quad (B.49)$$

en donde:

- $\overline{PM}_A$  = Peso molecular promedio del Azufre
- $PM_i$  = Peso molecular de la  $i$ -ésima especie de Azufre
- $z_i$  = Fracción mol al equilibrio de la  $i$ -ésima especie de Azufre

Por lo tanto, la masa total de Azufre calculada será:

$$W_A = \overline{PM}_A \cdot N_A \quad \dots \dots \dots \quad (B.50)$$

Para realizar todos los cálculos descritos, la subrutina ROCIO requiere como datos: la masa de Azufre real en la fase gaseosa, la presión total del sistema, los moles totales de los componentes incondensables y el peso molecular de cada especie de Azufre.



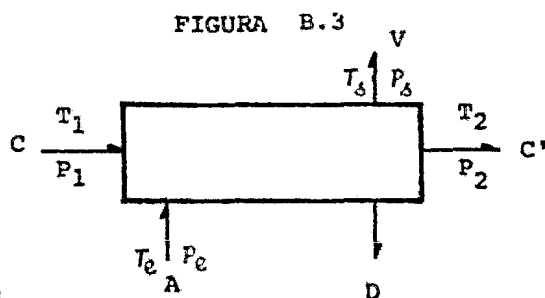
### B.6 SUBROUTINA VAPOR:

Esta subrutina tiene como finalidad la de efectuar los balances de materia y energía para conocer la cantidad de vapor saturado que se genera en la Caldera Recuperadora de Calor y en los Condensadores de Azufre.

Para el cálculo de dicho vapor saturado es necesario alimentar a esta subrutina los siguientes datos: temperatura del agua de entrada al sistema, presión deseada del vapor a generar, cantidad de calor disponible (calculada en las subrutinas CALDER o CONDEN según sea el caso) y el porcentaje de purga deseado. Con estos datos se efectúan los balances de materia y energía por el lado de la envolvente (lado del agua) del equipo para calcular la cantidad de vapor generado y la cantidad total de agua requerida.

Como se recordará, la purga consiste en drenar en forma continua cierta cantidad de agua a las condiciones de saturación con el fin de evitar o disminuir la acumulación de materias incrustantes, logrando con ello una mejor transferencia de calor y una vida útil de los equipos más larga. Generalmente la cantidad de agua drenada corresponde a un 10% de la cantidad total de agua alimentada, sin embargo puede variar según las necesidades<sup>90</sup>.

La figura B.3 representa un sistema de producción de vapor similar a los utilizados en las plantas Claus



en donde:

A = Flujo total de agua limentada  
D = Purga.

- V = Flujo total de vapor generado.
- C,C' = Corriente de proceso a la entrada y salida del equipo respectivamente.
- T<sub>1</sub>,T<sub>2</sub> = Temperaturas para las corrientes C y C' respectivamente.
- P<sub>1</sub>,P<sub>2</sub> = Presión para las corrientes C y C' respectivamente.
- T<sub>e</sub> = Temperatura de entrada del agua.
- P<sub>e</sub> = Presión de entrada del agua.
- T<sub>Δ</sub> = Temperatura de saturación.
- P<sub>Δ</sub> = Presión de vapor.

Para este sistema el balance de materia por el lado del agua está representado por:

$$A = V + D \quad \dots \dots \dots (B.51)$$

$$D = \delta_p A \quad \dots \dots \dots (B.52)$$

en donde:

$\delta_p$  = Fracción de purga.

Substituyendo la ecuación B.52 en B.51 tenemos:

$$A = \frac{V}{1 - \delta_p} \quad \dots \dots \dots (B.53)$$

Ahora substituyendo B.53 en B.52 se llega a una expresión del flujo de purga en función de la cantidad de vapor producido, es decir:

$$D = \frac{\delta_p}{1 - \delta_p} V \quad \dots \dots \dots (B.54)$$

Por otra parte el balance de energía por el lado del agua está representado por:

$$Q_T + AH_A = DH_D + VH_V \quad \dots \dots \dots (B.55)$$

$$H_A = C_p(T_e - T_R) \quad \dots \dots \dots (B.56)$$

$$H_D = C_p(T_\Delta - T_R) \quad \dots \dots \dots (B.57)$$

$$H_V = C_p(T_\Delta - T_R) + \lambda_V \dots \dots \dots \quad (\text{B.58})$$

en donde:

$T_R$  = Temperatura de referencia.

$Q_T$  = Calor total trasferido por la corriente de proceso.

$\lambda_V$  = Calor latente de vaporización.

Sustituyendo las ecuaciones B.53 y B.54 en B.55 , tenemos:

$$Q_T + \frac{V}{1 - \delta_p} H_A = \frac{\delta_p}{1 - \delta_p} V H_D + V H_V \dots \dots \dots \quad (\text{B.59})$$

rearrreglando,

$$\frac{1 - \delta_p}{V} Q_T = \delta_p H_D + (1 - \delta_p) H_V - H_A \dots \dots \dots \quad (\text{B.60})$$

Sustituyendo las ecuaciones B.56 , B.57 y B.58 en B.60 tenemos:

$$\begin{aligned} \frac{1 - \delta_p}{V} Q_T = & \delta_p C_p (T_\Delta - T_R) + C_p (T_\Delta - T_R) - \delta_p C_p (T_\Delta - T_R) + \\ & + (1 - \delta_p) \lambda_V - C_p (T_e - T_R) \dots \dots \dots \quad (\text{B.61}) \end{aligned}$$

Cancelando términos iguales y rearrreglando para obtener la cantidad de vapor producido,  $V$ , se llega finalmente a:

$$V = \frac{Q_T}{\frac{1}{1 - \delta_p} C_p (T_\Delta - T_e) + \lambda_V} \dots \dots \dots \quad (\text{B.62})$$

Como puede verse en esta última ecuación, para calcular la cantidad de vapor producido es necesario conocer la temperatura de saturación ( $T_\Delta$ ) que corresponde a la presión de saturación ( $P_\Delta$ ) de seada del vapor que se está generando, así como el calor latente de vaporización a las condiciones de operación ( $\lambda_V$ ). Sin embargo, no será necesario alimentar estos datos a la subrutina, ya que ésta cuenta con dos correlaciones; una para la temperatura de satu

ración en función de la presión de saturación (ecuación B.63), y otra para el calor latente de vaporización en función de la temperatura de saturación (ecuación B.64).

Para encontrar estas correlaciones se regresionaron los valores de temperatura de saturación y calores latentes de vaporización comprendidos entre 14.696 y 308.82 psia<sup>96</sup>, obteniéndose un mejor coeficiente de correlación para los siguientes polinomios:

$$\ln T_{\Delta} = 4.7362381 + 0.23717625 \ln P_{\Delta} - 1.693701 * 10^{-3} (\ln P_{\Delta})^2 \quad \dots \quad (B.63)$$

$$\lambda_V = -6042.112 + 2665.5667 \ln T_{\Delta} - 253.5663 (\ln T_{\Delta})^2 \quad (B.64)$$

en donde:

$T_{\Delta}$  = Temperatura de saturación, °F.

$P_{\Delta}$  = Presión de saturación, psia.

$\lambda_V$  = Calor latente de vaporización, BTU/lb masa.

De ésta forma, se tiene que el algoritmo de cálculo consiste primeramente en calcular la temperatura de saturación del vapor (ec. B.63), para después calcular el calor latente de vaporización (ec. B.64). Una vez hecho lo anterior se procede a sustituir estos valores calculados junto con los datos alimentados a la subrutina en la ecuación B.62 para calcular la cantidad de vapor generado y finalmente calcular la purga y el flujo total de agua alimentado y así concluir el balance de masa para el lado de la envoltente de los condensadores o de la caldera según sea el caso.

APENDICE C: BANCO DE DATOS.

Este banco de datos consiste en una serie de ecuaciones que representan la variación, respecto a la temperatura, de las diferentes propiedades termodinámicas de los 12 compuestos disponibles en este programa para simular plantas Claus. Todas estas ecuaciones fueron encontradas a partir de una regresión por el método de mínimos cuadrados de los datos reportados en las tablas de propiedades termodinámicas que se encuentran en la literatura<sup>12 14 15 13 15 14 13 14</sup>.

Para tener una mayor flexibilidad, este banco de datos fue dividido en las siguientes subrutinas:

Subrutina SFEL: Cálculo de las Funciones de Energía Libre.

Subrutina ENTAL: Cálculo de las Entalpías.

Subrutina PCP: Cálculo de las Capacidades Caloríficas.

Subrutina PCTC: Cálculo de las Conductividades Térmicas.

Subrutina PVIS: Cálculo de las Viscosidades.

Subrutina PDENS: Cálculo de las Densidades.

Subrutina NOMBRE: Asignación del nombre a las especies.

Las cinco primeras subrutinas trabajan en forma similar a la subrutina NOMBRE, es decir, por medio de la proposición GO TO CALCULADO y el vector IDENT (Identificador de compuestos) se va formando un vector que contiene los valores de la propiedad requerida a la temperatura deseada de los diferentes compuestos involucrados.

C.1 SUBROUTINA SFEL:

Dentro de esta subrutina se lleva a cabo el cálculo de las funciones de energía libre que se utilizan en el método de minimización de energía libre de Gibbs. Como se vió en el capítulo IV (Subrutina MINER), la contribución de una especie gaseosa a la energía libre total del sistema está dada por:

$$g_i = x_i \left( c_i + \ln \frac{x_i}{x} \right) \dots \dots \dots \quad (C.1)$$

en la que:

$$c_i = \left( \frac{G}{RT} \right)_i + \ln P \dots \dots \dots \quad (C.2)$$

en donde:

$\left(\frac{G}{RT}\right)_i$  = Función de Energía de Gibbs estándar de la  $i$ -ésima especie gaseosa como gas ideal a la temperatura  $T$  y 1 atm. de presión.  
 $P$  = Presión total del sistema, atm.

Por otra parte, el término de Energía de Gibbs se define de la siguiente manera<sup>57</sup>:

$$\left(\frac{G}{RT}\right)_i = \frac{1}{R} \left[ \frac{G_i^0}{T} - \frac{H_{298.15}^T}{T} \right]_i + \left[ \frac{\Delta H_{i,298.15}^0}{RT} \right]_i \quad \dots \quad (C.3)$$

en donde:

$\Delta H_{i,298.15}^0$  = Entalpía de formación estándar a 298.15°K.

$H_{298.15}^T$  = Diferencia de entalpías entre 298.15°K y  $T$ .

$\frac{F_i^0}{T} - \frac{H_{298.15}^T}{T}$  = Función de Energía de Gibbs.

$R$  = Constante de los gases.

$T$  = Temperatura, °K.

Para obtener una ecuación de la variación de la función de Energía de Gibbs molar estándar respecto a la temperatura, se regresionaron los valores de la función de Energía de Gibbs a diferentes temperaturas reportados en las tablas termoquímicas JANAF<sup>55</sup>, encontrándose que un polinomio de segundo grado representa en forma adecuada las variaciones de esta función dentro del intervalo de temperaturas de operación de las plantas Claus. De esta forma la ecuación C.3 se transforma en:

$$\left(\frac{G}{RT}\right)_i = \frac{1}{R} (A_i + B_i T + C_i T^2) + \left[ \frac{\Delta H_{i,298.15}^0}{RT} \right]_i \quad \dots \quad (C.4)$$

que al sustituir en la ecuación C.2 se llega a:

$$c_i = \frac{1}{R} (A_i + B_i T + C_i T^2) + \left[ \frac{\Delta H_{i,298.15}^0}{T} \right] + \ln P \quad \dots \quad (C.5)$$

en donde:

$T$  = Temperatura, °K

$P$  = Presión, atm

En la tabla C.1 se muestran los valores obtenidos para las constantes A, B, y C de la ecuación C.4, así mismo se encuentran tabulados los valores de las Entalpías de Formación de los doce compuestos disponibles.

TABLA C.1  
CONSTANTES DE LA FUNCION DE ENERGIA LIBRE MOLAR  
(ECUACION C.4 )

COMPUESTO	A	B	$C * 10^5$	$\Delta H_f^\circ$ cal/mol
H <sub>2</sub> S	-46.17518	-0.00836	0.090226287	-4880.0
SO <sub>2</sub>	-55.37097	-0.01096	0.150547020	-79947.0
O <sub>2</sub>	-46.45677	-0.00725	0.095520353	0.0
CH <sub>4</sub>	-40.98003	-0.00929	0.025762762	-17895.0
N <sub>2</sub>	-43.34298	-0.00696	0.094570899	0.0
S <sub>2</sub>	-51.61911	-0.00826	0.118451810	30840.0
S <sub>6</sub>	-00.02610	-76.5710	0.0	27780.0
S <sub>8</sub>	-88.66132	-0.04042	0.582268920	24200.0
H <sub>2</sub> O	-42.27431	-0.00805	0.095972003	-57797.9
CS <sub>2</sub>	-52.58158	-0.01196	0.153517330	27980.0
COS	-51.37581	-0.01103	0.131415010	-33080.0
CO <sub>2</sub>	-47.49589	-0.00992	0.107332142	-93962.0

## C.2 SUBROUTINA ENTAL:

En esta subrutina se realizan los cálculos de los cambios de entalpía desde una temperatura de referencia de 298.15°K hasta una temperatura T deseada que se recibe como dato.

Los cálculos del cambio de entalpía de una temperatura  $T_1$  a una temperatura  $T_2$  pueden hacerse mediante la integración de la ecuación de capacidad calorífica de acuerdo a la siguiente ecuación:

$$\Delta H = H_2 - H_1 = \int_{T_1}^{T_2} C_p dT \dots \dots \dots (C.6)$$

Sin embargo, si se tienen datos reales de entalpía tabulados a diferentes temperaturas no será necesario utilizar la ecuación anterior, sino simplemente restar las entalpías correspondientes a las temperaturas final e inicial del sistema.

Para desarrollar las ecuaciones de cambio de entalpía que utiliza esta subrutina se recurrió a datos reales de entalpía relativos a una temperatura de referencia de 298.15°K publicados en las Tablas Termoquímicas JANAF<sup>85</sup>. A partir de una regresión por mínimos cuadrados de estos datos se encontró que un polinomio de segundo grado representa en forma adecuada los cambios de entalpía dentro del rango de temperaturas normales de operación de plantas Claus. Por consiguiente la ecuación que representa el cambio de entalpía del componente  $i$  es de la forma:

$$[H_T - H_{298.15}]_i = A_i + B_i T + C_i T^2 \dots \dots \dots (C.7)$$

en donde:

$[H_T - H_{298.15}]_i$  = Cambio de entalpía del componente  $i$  desde 298.15°K hasta la temperatura T, Kcal/mol.

A, B, C = Constantes para el componente  $i$ .

T = Temperatura, °K.

De esta forma, si se quiere calcular el cambio de entalpía entre



las temperatura  $T_1$  y  $T_2$  para el  $i$ -ésimo compuesto, primero se calculan las diferencias de entalpía que hay entre estas temperaturas y la temperatura de referencia por medio de la ecuación C.7 para después efectuar la diferencia entre estos dos resultados, es decir:

$$[H_{T_2} - H_{298.15}] - [H_{T_1} - H_{298.15}] = [H_{T_2} - H_{T_1}] \dots \quad (C.8)$$

Debido a que esta subrutina es utilizada, entre otras, por la subrutina ADIAB en donde se requiere de los calores de formación de cada uno de los compuestos para el cálculo del calor de reacción a la ecuación C.7 se le adicionó el término de calor de formación multiplicado por un indicador (INCF) de tal forma que este último término se incluye solamente en el caso de un balance de energía para determinar la temperatura de reacción adiabática. Así, la ecuación C.7 se transforma en:

$$[H_T - H_{298.15}]_i = A + B T + C T^2 + \Delta H_{298.15}^{\circ} \text{INCF} \dots \quad (C.9)$$

en donde:

$\Delta H_{298.15}^{\circ}$  = Calor de formación estándar a 298.15°K del  $i$ -ésimo componente.

INCF = INDICADOR de Calor de Formación,  
 = 1 se incluye el calor de formación  
 = 0 no se incluye el calor de formación.

En la tabla C.2 se presentan los valores de las constantes A, B y C de los doce diferentes compuestos disponibles. En esta tabla se puede ver que en el caso del  $S_6$  la ecuación de cambios de entalpía es diferente a todas las demás, esto se debe a que en las tablas JANAF<sup>45</sup> no se encuentran datos reales del cambio de entalpía de este compuesto, por lo que se recurrió a la integración de la ecuación de la capacidad calorífica desde una temperatura de referencia de 298.15°K hasta una temperatura T, es decir:

$$C_p = A + BT + CT^2 + DT^3 \dots \dots \dots \quad (C.10)$$

que representa la variación de la capacidad calorífica con la tem

peratura. Entonces, la ecuación de la variación de la entalpía para el  $S_6$  quedará:

$$[H_T - H_{298.15}]_{S_6} = \int C_p dT = A(T - T_r) + \frac{B}{2}(T^2 - T_r^2) + \frac{C}{3}(T^3 - T_r^3) + \frac{D}{4}(T^4 - T_r^4) + \Delta H_{f,298.15}^\circ * \text{INCF} \dots \quad (\text{C.11})$$

en donde:

$T_r$  = Temperatura de referencia = 298.15°K.

$\Delta H_{f,298.15}^\circ$  = Calor de formación estándar del  $S_6$  a 298.15°K  
Kcal/mol.

TABLA C.2

CONSTANTES DE LA ECUACION PARA LA VARIACION DE LA ENTALPIA  
(ECUACION C.9 )

COMPUESTO	A	B	C * 10 <sup>5</sup>	$\Delta H_f^\circ$ Kcal/mol
H <sub>2</sub> S	-2.49734	0.00761	0.1588453360	-4.8800
SO <sub>2</sub>	-3.48159	0.01062	0.1067986360	-70.9470
O <sub>2</sub>	-2.25025	0.00712	0.0555518716	0.0000
CH <sub>4</sub>	-3.14497	0.00799	0.4321800170	-17.8950
N <sub>2</sub>	-2.02543	0.00656	0.0596881073	0.0000
S <sub>2</sub>	-2.55971	0.00828	0.0237799952	30.8400
S <sub>6</sub>	*	*	*	27.7800
S <sub>8</sub>	-12.83711	0.04130	0.0750088959	24.2000
H <sub>2</sub> O	-2.21749	0.00703	0.1399701020	-57.7979
CS <sub>2</sub>	-3.94957	0.01225	0.0790950161	27.9800
COS	-3.48159	0.01062	0.1067986360	-33.0800
CO <sub>2</sub>	-3.34916	0.00997	0.1374119230	-93.9650

\* En el caso del  $S_6$  las constantes de la ecuación C. 11 son:

$$A = 19.4970 \quad B = 1.5894 * 10^{-2}$$

$$C = -1.664 * 10^{-5} \quad D = 2.8560 * 10^{-9}$$

C. 3      SUBROUTINA PCP:

En esta subrutina se lleva a cabo el cálculo de la capacidad calorífica media de las corrientes gaseosas involucradas en la simulación de las plantas Claus.

Del mismo modo que para otras propiedades las constantes de los polinomios de tercer grado utilizados en esta subrutina fueron obtenidos de la referencia<sup>12</sup>, a excepción de las del  $S_2$  y  $S_8$ , las cuales fueron obtenidas mediante la regresión de los datos reportados en las Tablas Termodinámicas JANAF<sup>15</sup> (tabla C.3), así como las del  $COS$  y  $CS_2$ , obtenidas con datos del Physical Thermodynamic Properties of Elements and Compounds<sup>16</sup> (tabla C.4).

TABLA C. 3  
CAPACIDAD CALORIFICA DEL  $S_2$  Y  $S_8$

TEMPERATURA °K	Cp (cal/g-mol°K)	
	$S_2$	$S_8$
400	8.144	39.841
500	8.389	41.137
600	8.549	41.887
700	8.658	42.355
800	8.735	42.665
900	8.792	42.882
1000	8.836	43.038
1100	8.870	43.154

TABLA C. 4  
CAPACIDAD CALORIFICA DEL  $COS$  Y  $CS_2$

TEMPERATURA °K	Cp (cal/g-mol°K)	
	$COS$	$CS_2$
477	11.520	12.390
533	11.850	12.700
588	12.160	12.960
644	12.410	13.180

TABLA C. 4 (continuación)

755	12.830	13.530
811	13.020	13.680
977	13.440	13.980
1089	13.670	14.150

A partir de los datos anteriores se encontraron los siguientes polinomios:

- Para el caso del  $S_2$  y  $S_8$ :

$$C_p = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 + FT^5 \dots \dots \dots \quad (C.12)$$

en donde:

CONSTANTE	$S_2$	$S_8$
A	6.0583357	29.26098000
B	$0.88632469 \cdot 10^{-2}$	0.04639888
C	$-0.11875352 \cdot 10^{-4}$	$-0.64847227 \cdot 10^{-4}$
D	$0.83066971 \cdot 10^{-8}$	$0.46260836 \cdot 10^{-7}$
E	$-0.29291050 \cdot 10^{-11}$	$-0.16517587 \cdot 10^{-11}$
F	$0.41111578 \cdot 10^{-15}$	$0.23375548 \cdot 10^{-14}$

- Para el caso del COS y  $CS_2$ :

$$C_p = A + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^2} + \frac{D}{T^3} \dots \dots \dots \quad (C.13)$$

en donde:

CONSTANTE	COS	$CS_2$
A	0.0641543	0.0643794
B	15.659230	9.8456600
C	-3307.7018	-1688.0178
D	273926.67	115013.03

Por lo que respecta a las demás especies, en la tabla C.5 se presentan las constantes de los polinomios de tercer grado que representan las variaciones de la capacidad calorífica de estas especies.

En todos los polinomios utilizados en esta subrutina, la temperatura se utiliza en grados Kelvin y la capacidad calorífica se obtiene en cal/g-mol °K, por lo que para obtener esta propiedad en cal/g °K es necesario dividir el valor resultante a la temperatura deseada entre el peso molecular de la especie correspondiente.

Para el cálculo de la capacidad calorífica media de una mezcla gaseosa, primeramente se calcula la capacidad calorífica de cada una de las especies involucradas, utilizando el mismo algoritmo que en la subrutina NOMBRE, es decir, por medio de una proposición GO TO CALCULADO y el valor del identificador IDENT, el control del programa se trasfiere al polinomio de la especie respectiva. Una vez hecho lo anterior para cada una de las especies, se procede a calcular la capacidad calorífica promedio de la mezcla mediante el método de la media aritmética ponderada, es decir:

$$C_{P_m} = \sum_{i=1}^N y_i \cdot C_{P_i} \dots \dots \dots (C.14)$$

en donde:

$C_{P_m}$  = Capacidad calorífica media, cal/g°K

$C_{P_i}$  = Capacidad calorífica de la  $i$ -ésima especie gaseosa, cal/g°K

$y_i$  = Fracción mol de la  $i$ -ésima especie gaseosa.

Los datos requeridos por esta subrutina para evaluar la capacidad calorífica individual y de la mezcla son: temperatura y fracción mol de cada componente.

TABLA C.5  
 CONSTANTES DE LA ECUACION PARA CALCULAR LA  
 CAPACIDAD CALORIFICA

COMPUESTO	A	B	C *10 <sup>6</sup>	D * 10 <sup>9</sup>
H <sub>2</sub> S	6.662	0.005134	-0.8540	0.0000
SO <sub>2</sub>	5.850	0.015400	-11.1000	2.9100
O <sub>2</sub>	6.220	0.002710	-0.3700	-0.2200
CH <sub>4</sub>	5.040	0.009320	8.8700	-5.3700
N <sub>2</sub>	7.070	-0.001320	3.3100	-1.2600
H <sub>2</sub> O	8.100	-0.000720	3.6300	-1.1000
CO <sub>2</sub>	5.140	0.015400	-9.9400	2.4200

#### C.4 SUBROUTINA PCTC:

Por medio de esta subrutina se realiza el cálculo de la conductividad térmica de la mezcla gaseosa, propiedad que se utiliza para el cálculo del coeficiente de transferencia de calor.

Al igual que en las otras subrutinas del banco de datos, se obtuvieron correlaciones para cada una de las especies a partir de los datos reportados en la literatura<sup>14</sup>. Para el caso del COS, no se encontraron reportados valores de esta propiedad como tampoco la correlación que la representara, por lo que en la subrutina aparece con un valor de cero; esto no causa gran error ya que en la mayoría de las corrientes de proceso, la concentración del COS es menor a 0.1% mol, teniendo así poca influencia en la conductividad térmica de la mezcla. Tampoco se encontraron valores para el S<sub>3</sub> y S<sub>8</sub>, pero aquí se asumió que tenían el mismo valor que para el S<sub>2</sub> por lo que la correlación es la misma para estos tres componentes.

A partir de una regresión por mínimos cuadrados de los datos presentados en la literatura se encontraron expresiones del tipo de un polinomio de tercer grado, cuyas constantes se muestran en la tabla C.6. Con estas constantes se obtiene la conductividad térmica en  $\mu\text{cal}/\text{seg}\cdot\text{cm}\cdot^{\circ}\text{K}$  por lo que para obtenerla en  $\text{cal}/\text{seg}\cdot\text{cm}\cdot^{\circ}\text{K}$  se multiplica por  $1 \times 10^{-6}$ , tal como se muestra en la siguiente ecuación:

$$\ln k = (A + BT + CT^2 + DT^3) * C \quad \dots \quad (\text{C.15})$$

en donde:

A,B,C,D = Constantes (Tabla C.6)

T = Temperatura, °K

C = Constante =  $1 \times 10^{-6}$ .

Por lo que se refiere al CS<sub>2</sub>, la correlación utilizada no corresponde al mismo tipo que las demás, presentandose la adecuada al calze de la tabla C.6.

Al igual que en la subrutina NOMBRE, para calcular la conductivi-

dad de las especies involucradas se hace uso del indicador IDENT y de la proposición GO TO CALCULADO. Una vez obtenido el valor de la conductividad térmica de cada una de las especies, se procede a calcular la conductividad térmica de la mezcla gaseosa para lo que se utiliza el método de Fried-Adler<sup>95</sup>, cuya expresión es:

$$k_m = \frac{\sum_{i=1}^N y_i \cdot k_i \cdot PM_i^{1/3}}{\sum_{i=1}^N y_i \cdot PM_i^{1/3}} \dots \dots \dots (C.16)$$

en donde:

- $k_m$  = Conductividad térmica de la mezcla
- $y_i$  = Fracción mol del  $i$ -ésimo componente
- $k_i$  = Conductividad térmica del  $i$ -ésimo componente
- $PM_i$  = Peso molecular del  $i$ -ésimo componente.

Se ha observado que el error promedio producido por este método es de aproximadamente el 2.7%<sup>95</sup>. La subrutina requiere como datos: número de componentes, temperatura, peso molecular y fracción mol de cada componente.

TABLA C.6

CONSTANTES DE LA ECUACION DE CONDUCTIVIDAD TERMICA  
(ECUACION C.15 )

COMPUESTO	A	B	C * 10 <sup>4</sup>	D * 10 <sup>8</sup>
H <sub>2</sub> S	-33.1100	0.2613	0.909	0.000
SO <sub>2</sub>	-19.3100	0.1515	-0.330	0.550
O <sub>2</sub>	-0.7816	0.2380	-0.894	2.324
CH <sub>4</sub>	-4.4630	0.2084	2.815	-8.631
N <sub>2</sub>	0.9359	0.2344	-1.210	3.591
S <sub>2</sub>	-31.4121	0.1818	-1.983	7.624
S <sub>6</sub>	-31.4121	0.1818	-1.983	7.624
S <sub>8</sub>	-31.4121	0.1818	-1.983	7.624
H <sub>2</sub> O	17.5300	-0.0242	4.300	-21.730
CS <sub>2</sub> *	1.8159	-0.01219	1.0212	-16.3167
COS	0.0	0.0	0.0	0.0
CO <sub>2</sub>	-17.2300	0.1914	0.131	-2.514

\*  $k_i = A + BT + CT^2 + DT^3$



C.5 SUBROUTINA PVIS:

El propósito de esta subrutina es el de calcular la viscosidad de la mezcla gaseosa a diferentes temperaturas.

Las constantes de las correlaciones utilizadas para calcular las viscosidades de las diferentes especies químicas involucradas en el programa se obtuvieron de la referencia 14 , excepto para el caso del Azufre y del CS<sub>2</sub>, cuyas correlaciones se obtuvieron por la regresión por mínimos cuadrados de los datos mostrados en las tablas C.7 y C.8 respectivamente.

TABLA C.7 <sup>84</sup>

## VISCOSIDAD DEL VAPOR DE AZUFRE

TEMPERATURA (°F)	VISCOSIDAD ( $\mu$ lb/seg-ft)
832	13.2
950	13.9
1100	12.6
1200	11.1
1400	10.6
1600	11.8
1800	13.0
1900	13.6

TABLA C.8 <sup>83</sup>VISCOSIDAD DEL VAPOR DE CS<sub>2</sub>

TEMPERATURA (°F)	VISCOSIDAD ( $\mu$ lb/seg-ft)
32	6.12
57	6.47
238	8.75
374	10.48
590	13.20
752	15.84
932	18.53
1292	23.50

En cuanto al COS, no se obtuvieron datos experimentales ni la expresión que representara la variación de la viscosidad con la temperatura, por tal motivo, este componente no se toma en cuenta para el cálculo de viscosidad media de la mezcla, lo cual no produce un gran error ya que la concentración de COS en las corrientes del proceso Claus es menor de 0.1%.

Las expresiones que se presentan en la tabla C.9, utilizan la temperatura en °K, obteniéndose la viscosidad en micro-poise, por lo que para obtenerla en poise se multiplica por  $1 \times 10^{-6}$ . Una excepción es para el caso del Azufre, donde se obtiene la viscosidad en  $\mu\text{lb}/\text{seg}\cdot\text{ft}$ , por lo que deberá ser multiplicada por el factor de conversión de  $14.876034 \times 10^{-6}$  para obtenerla en poise.

Una vez calculadas las viscosidades de las diferentes especies involucradas, utilizando un algoritmo igual al de la subrutina NOMBRE, se procede a evaluar la viscosidad de la mezcla para lo cual se utiliza el método de Bromley-Wilke<sup>95</sup>, cuyas ecuaciones se muestran a continuación:

$$\mu_{mez} = \frac{\sum_{i=1}^n \frac{\mu_i}{1 + \sum_{j=1}^n \left(\frac{\mu_j}{\mu_i}\right) \phi_{ij}}}{\dots} \quad (C.17)$$

$$\phi_{ij} = \frac{[1 + (\mu_i/\mu_j)^{1/2} (M_i/M_j)^{1/4}]^2}{2 [2(1 + M_i/M_j)^{1/2}]^{1/2}} \quad \dots \quad (C.18)$$

en donde:

$j = m, \dots, n$  con  $m \neq i$

$\mu_i$  = Viscosidad del  $i$ -ésimo componente.

$\mu_{mez}$  = Viscosidad de la mezcla gaseosa.

$y_i, y_j$  = Fracción mol del  $i$ -ésimo y  $j$ -ésimo componente.

$M_i, M_j$  = Peso molecular de  $i$ -ésimo y  $j$ -ésimo componente.

Esta subrutina requiere como datos: número de componentes involucrados en la simulación, temperatura, peso molecular y fracción mol de cada componente.

TABLA C.9  
CONSTANTES DE LA ECUACION PARA LA VARIACION DE LA VISCOSIDAD  
(ECUACION C.19 )

COMPUESTO	A	B	C * 10 <sup>6</sup>
H <sub>2</sub> S	87.0000	0.4023	12.9859
SO <sub>2</sub>	-3.7930	0.4645	-72.7600
O <sub>2</sub>	18.1100	0.6632	-187.9000
CH <sub>4</sub>	15.9600	0.3439	-81.4000
N <sub>2</sub>	30.4300	0.4989	-109.3000
H <sub>2</sub> O	-31.8900	0.4145	-8.2720
COS	0.0000	0.0000	0.0000
CO <sub>2</sub>	25.4500	0.4549	-86.4900

En donde la ecuación para la variación de la viscosidad tiene la forma:

$$\mu = [A + BT + CT^2] * F \dots \dots \dots (C.19)$$

En donde:

$\mu$  = Viscosidad en poise

T = Temperatura, °K

F = Factor de conversión = 1 \* 10<sup>6</sup>

Para el caso del Azufre cualquiera que sea su forma alotrópica se tiene:

$$\frac{1}{\mu} = [A + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^2} + \frac{D}{T^3} + \frac{E}{T^4} + \frac{F}{T^5}] * G \dots \dots \dots (C.20)$$

en donde:

$\mu$  = Viscosidad en poise

T = Temperatura, °K

$$\begin{aligned}
 A &= -0.90624932 \\
 B &= 518.19954 \\
 C &= -1694238.2 \\
 D &= 0.34188658 * 10^{10} \\
 E &= -0.2900946 * 10^{13} \\
 F &= 0.84164996 * 10^{15} \\
 G &= \text{Factor de conversión} = 14.876034 * 10^{-6}
 \end{aligned}$$

Mientras que para el CS<sub>2</sub> tenemos:

$$\mu = [\exp(A + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^2} + \frac{D}{T^3})] * F \dots \dots \dots \quad (C.21)$$

en donde:

$$\begin{aligned}
 \mu &= \text{Viscosidad en poise} \\
 T &= \text{Temperatura, } ^\circ\text{K} \\
 A &= 7.3029901 \\
 B &= -1833.7738 \\
 C &= 470147.12 \\
 D &= -48495337.0 \\
 F &= \text{Factor de conversión} = 1 * 10^{-6}
 \end{aligned}$$

#### C.6 SUBROUTINA PDENS:

Con esta subrutina se evalúa la densidad promedio de las corrientes gaseosas involucradas en la simulación de las plantas Claus.

Para efectuar estos cálculos, se considera un comportamiento ideal de los gases, lo cual es una aproximación válida ya que estas plantas operan a presiones bajas. De aquí que sea posible utilizar la ecuación general de los gases para el cálculo de las densidades de las diferentes especies gaseosas, esto es:

$$PV = nRT \dots \dots \dots \quad (C.22)$$

$$n = w/PM \dots \dots \dots \quad (C.23)$$

en donde:

$n$  = Número de moles.

$w$  = Masa del componente, Kg.

$PM$  = Peso molecular del componente, Kg/mol.

$R$  = Constante de los gases, 0.082057 l-atm/mol $^{\circ}$ K.

$P$  = Presión, atm.

$T$  = Temperatura,  $^{\circ}$ K.

Sustituyendo la ecuación C.23 en la ecuación C.22 se llega a:

$$PV = \frac{w}{PM}RT \quad \dots \dots \dots (C.24)$$

Ahora, recordando que la densidad es la masa que tiene una unidad de volumen y haciendo los ajustes necesarios en la ecuación C.24 se llega finalmente a:

$$\delta = w/V = \frac{PM \cdot P}{RT} = (g/l) \quad \dots \dots \dots (C.25)$$

A partir de esta última ecuación se calcula la densidad de cada una de las especies involucradas, después de lo cual se procede a calcular la media aritmética ponderada de estos valores, la cual se reporta como densidad media de la mezcla gaseosa, esto es:

$$\bar{\delta} = \sum_{i=1}^n \delta_i \cdot y_i \quad \dots \dots \dots (C.26)$$

en donde:

$\bar{\delta}$  = Densidad promedio de la mezcla.

$\delta_i$  = Densidad de la  $i$ -ésima especie.

$y_i$  = Fracción mol de la  $i$ -ésima especie.

Como se puede ver esta subrutina requiere como datos el número de componentes, su fracción mol y peso molecular, así como la presión y temperatura del sistema.

C.7 SUBROUTINA NOMBRE:

Esta subrutina almacena los nombres y pesos moleculares de las 12 especies químicas disponibles en el banco de datos de propiedades termodinámicas necesarias para la ejecución de los programas descritos en los capítulos anteriores.

La función de esta subrutina es crear los vectores NOMB y PEMOL, los cuales contienen, respectivamente, los nombres y pesos moleculares de los compuestos involucrados en los cálculos de los programas de simulación de plantas Claus.

Como se puede ver en la figura C.1 , para crear estos vectores, la subrutina NOMBRE recibe como datos el número total de compuestos (N) y el vector IDENT que contiene el número identificador de los compuestos que intervienen en la simulación. Por medio de una proposición *GO TO CALCULADO* y dependiendo del valor del elemento *IDENT(I)*, la ejecución del programa es enviada a la dirección correspondiente para asignar los elementos *NOMB(I)* y *PEMOL(I)* a sus respectivos vectores. Este procedimiento se repite hasta que se alcanza el *n*-ésimo componente.

En la tabla C.10 se muestran los números identificadores y pesos moleculares de los 12 compuestos disponibles en este programa para simular el comportamiento ideal de plantas Claus.

TABLA C.10  
IDENTIFICADORES Y PESOS MOLECULARES  
DE COMPUESTOS DISPONIBLES

IDENTIFICADOR	COMPUESTO	PESO MOLECULAR
1	H <sub>2</sub> S	34.07994
2	SO <sub>2</sub>	64.06600
3	O <sub>2</sub>	31.99880
4	CH <sub>4</sub>	16.04300
5	N <sub>2</sub>	28.01340
6	S <sub>2</sub>	64.12800

TABLA C.10 (continuación)		
IDENTIFICADOR	COMPUESTO	PESO MOLECULAR
7	S <sub>6</sub>	192.38400
8	S <sub>8</sub>	256.52800
9	H <sub>2</sub> O	18.01600
10	CS <sub>2</sub>	76.14300
11	COS	60.07700
12	CO <sub>2</sub>	44.00995

Con el objeto de ilustrar la forma en que trabaja esta subrutina supongase que se reciben los siguientes datos:

Número de compuestos, N = 5

Vector de identificadores, IDENT = (1,2,5,9,12)

Entonces, los valores de los elementos NOMB(I) y PEMOL(I) serán asignados de la siguiente manera:

NOMB(1) = "H <sub>2</sub> S"	PEMOL(1) = 34.07994
NOMB(2) = "SO <sub>2</sub> "	PEMOL(2) = 64.06600
NOMB(3) = "N <sub>2</sub> "	PEMOL(3) = 28.01340
NOMB(4) = "H <sub>2</sub> O"	PEMOL(4) = 18.01600
NOMB(5) = "CO <sub>2</sub> "	PEMOL(5) = 44.00995

Por lo que los vectores resultantes de la subrutina NOMBRE serán:

NOMB("H<sub>2</sub>S", "SO<sub>2</sub>", "N<sub>2</sub>", "H<sub>2</sub>O", "CO<sub>2</sub>")

PEMOL(34.07994, 64.06600, 28.01340, 18.01600, 44.00995)

Los cuales son transferidos al programa o subrutina que hace uso de la subrutina NOMBRE. La ventaja de trabajar con este sistema de construcción de vectores es que en una simulación no es necesario incluir todos los compuestos químicos de que se dispone en este programa.

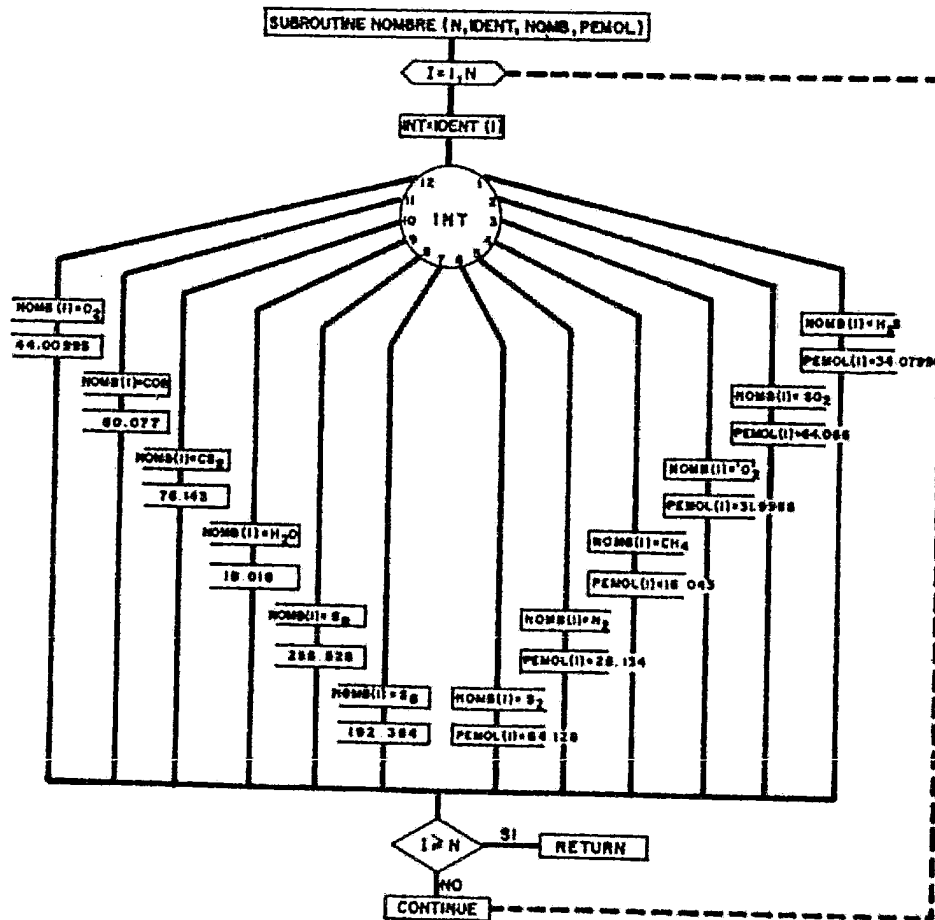


FIGURA C.1—DIAGRAMA DE FLUJO SUBROUTINA NOMBRE



## CONCLUSIONES

Analizando y comparando los resultados obtenidos mediante el programa SIMCLA respecto a los datos reportados en la literatura se llegó a las siguientes conclusiones.

- La aplicación del método de Minimización de Energía Libre de Gibbs en la determinación de la composición de equilibrio termodinámico de un sistema complejo de reacción es bastante aceptable.
- Las conversiones de equilibrio de Acido Sulfhídrico a Azufre elemental obtenidas mediante el programa SIMCLA dentro del rango de temperaturas de operación de las plantas recuperadoras de Azufre se considera bastante aceptable ya que como se vio en el ejemplo número 1 (fig. III.2) la diferencia máxima obtenida fue de 18.12% respecto a los resultados reportados en la literatura para un sistema de reacción de un gas ácido pobre.
- Se pudo detectar que los errores máximos arrojados por el programa SIMCLA se encuentran en el rango de temperaturas comprendido entre 700 y 1050 °F, que es precisamente el intervalo en el cual las especies alotrópicas  $S_3$ ,  $S_4$ ,  $S_5$  y  $S_7$  son las más abundantes.
- En forma general las conversiones de Acido Sulfhídrico a Azufre elemental obtenidas por el programa SIMCLA son menores a las reportadas por la literatura para todo el rango de temperaturas de operación de las plantas Claus. Esto se debe principalmente a que el programa desarrollado en el presente trabajo solamente considera la formación de las especies  $S_2$ ,  $S_6$ ,  $S_8$ .

- Durante la simulación de trenes de recuperación de Azufre con alimentaciones de gases pobre y rico se obtuvieron resultados bastante satisfactorios para el porcentaje de conversión acumulada ya que los errores máximos fueron 4.79 y 3.21% respectivamente. Mientras que los errores máximos para el porcentaje de recuperación acumulada fueron 3.89 % para alimentación pobre y 3.48% para alimentación rica.
  
- Por lo que respecta a la determinación de la temperatura rocfo de la corriente efluente de los Convertidores Catalíticos se encontró, mediante el ejemplo número 3, que la diferencia máxima respecto a los valores dados en la literatura fue de 2.01%. Esta diferencia se debe principalmente a la forma en que se calcula el intercambio que existe entre las diferentes formas alotrópicas del Azufre durante el enfriamiento y a que el programa SIMCLA no considera la existencia de todas estas formas de Azufre.
  
- Se encontró que utilizando una temperatura de corte igual a 1185°F en la Caldera Recuperadora de Calor para el cálculo del equilibrio de las reacciones reversibles se obtienen resultados bastante buenos.
  
- En cuanto a las dimensiones y características de los diferentes equipos de las plantas Claus obtenidas por el programa SIMCLA no se pudo hacer una comparación del todo satisfactoria debido a la falta de información en la literatura.
  
- El programa generado es susceptible de mejoras y/o correcciones en diferentes partes del mismo, como por ejemplo , incluir dentro del cálculo del equilibrio todas las especies alotrópicas de Azufre, utilizar métodos más rigurosos para la predicción de propiedades, etc.
  
- En términos generales se pueden considerar conceptuales los resultados obtenidos con el programa desarrollado.

## BIBLIOGRAFIA

**\*\* CANADIAN GAS JOURNAL \*\***

- 1.- LEES R.S. and RYAN J.T.  
"Computer Design and Simulation of Sulphur Plant" part I  
July, August, 1970 pp. 38 - 47.
- 2.- LEES R.S. and RYAN J.T.  
"Computer Design and Simulation of Sulphur Plant" part II  
September, October, 1970 pp. 32 - 37.
- 3.- LEES R.S. and RYAN J.T.  
"Computer Design and Simulation of Sulphur Plant" part III  
January, February, 1971 pp. 12 - 16
- 4.- LEES R.S. and RYAN J.T.  
"Computer Design and Simulation of Sulphur Plant" part IV  
July, August, 1971 pp. 16 - 18.
- 5.- HYNE J.B.  
"Design and Chemistry of Front End Reaction Furnaces"  
March, April, 1972 pp. 12 - 16.

**\*\* CANADIAN PULP AND PAPER INDUSTRY \*\***

- 6.- "How Elemental Sulphur will be Produced at Jumping Pound"  
Vol. 4, No. 8, August, 1951 pp. 6 - 9.

**\*\* CHEMICAL ENGINEERING \*\***

- 7.- BRAS G.H.  
"Design of Cooler Condensers for Vapor-Gas Mixtures I"  
April, 1953 pp. 223 - 226

- 8.- BRAS G.H.  
"Design of Cooler Condenser for Vapor-Gas Mixtures II"  
May, 1953 pp. 238 - 240
  
- 9.- OLIVER R.C., STEPHANOU S.E. and BAIER R.W.  
"Calculating Free-Energy Minimization"  
February 19, 1962 pp. 121 - 128.
  
- 10.- VOTTA F.Jr.  
"Condensing from Vapor-Gas Mixtures"  
June 8, 1964 pp. 223 - 228
  
- 11.- HINCHLEY P.  
"How to avoid problems of Waste-Heat Boilers"  
September 1, 1975 pp. 94 - 98
  
- 12.- YAWS CARL L.  
"Correlation Constants for Chemical Compounds"  
August 16, 1976 pp. 79 - 87.
  
- 13.- GANAPATHY V.  
"Quick Estimation of Gas Heat-Transfer Coefficients"  
September 13, 1976 pp. 199 - 202.
  
- 14.- YAWS CARL L.  
"Correlation Constants for Chemical Compounds"  
November 22, 1976 pp. 153 - 161.
  
- 15.- GANAPATHY V., RAVICHANDRAN V. and RAJAMOHAN A.  
"Physical Properties of Selected Gas-Streams"  
February 28, 1977 pp. 195 - 199.

- 16.- HINCHLEY P.  
"Specifying and operating Reliable Waste-Heat Boilers"  
August 13, 1979 pp. 120 - 134.
- 17.- GAMSON B.W. and ELKINS R.H.  
"Sulfur from Hydrogen Sulfide"  
April, 1953 pp. 203 - 215
- 18.- STANDIFORD F.C.  
"Effect of Non-Condensibles on Condenser Design and Heat  
Transfer"  
July, 1979 pp. 59 - 62
- \*\* ENERGY PROCESSING CANADA \*\*
- 19.- GRAULIER M. and PAPEE D.  
"Optimization of a Claus Unit - Aging and Regeneration  
Mechanisms"  
March, April, 1974 pp. 32 - 38.
- 20.- KERR K. R.  
"The Claus Process; Capability / Thermodynamics"  
July, August, 1976 pp. 28 - 35.
- 21.- KERR K.R., PASKALL H.G. and BALLASH N.  
"Claus Process: Catalytic Kinetics"  
Part I - Modified Claus Reaction  
September, October, 1976 pp. 66 - 72.
- 22.- KERR K.R. and PASKALL H.G.  
"Claus Process: Catalytic Kinetics"  
Part II - COS and CS<sub>2</sub> Hydrolysis  
November, December, 1976 pp. 38 - 44.

- 23.- KERR R.K., PASKALL H.G. and BALLASH N.  
"Claus Process: Catalytic Kinetics  
Part III - Deactivation Mechanisms Evaluations and Catalyst  
January, February, 1977 pp. 40 - 51.
- 24.- KERR R.K. and BERLIE E.M.  
"The Claus Process: Reaction Furnace / Burner Operation"  
May, June, 1977 pp. 42 - 46.
- 25.- LANA D.  
"Catalysis Research on the Modified Claus Process"  
March - April, 1978 pp. 34 - 38.
- \*\* GAS PROCESSING / CANADA \*\*
- 26.- MATHES A.F.  
"Optimization of Claus Plants"  
March, April, 1973 pp. 12 - 17.
- \*\* GAS PROCESSORS ASSOCIATION \*\*
- 27.- GODDIN C.S., HUNT E.B. and PALM J.W.  
PROCEEDINGS OF FIFTY THIRD ANNUAL CONVENTION  
"Amoco CBA Process for Improving Claus Plant Recovery"  
pp. 134 - 137.
- \*\* HYDROCARBON PROCESSING \*\*
- 28.- BRAS G.H.  
"How to Desing Cooler-Condensers"  
June, 1956 pp. 177 - 185
- 29.- GULLEY D.L.  
"Use Computers to Select Exchangers"  
July, 1960 pp. 149 - 156

- 29.- GULLEY D.L.  
"Use Computers to Select Exchangers"  
July, 1960 pp. 149 - 156
- 30.- VALDES A.R.  
" New Look at Sulfur Plants Part 1: Design"  
Vol. 43, No. 3, March 1964 pp. 104 - 109.
- 31.- VALDES A.R.  
"New Look at Sulfur Plants Part 2: Operations"  
Vol. 43, No. 4, April 1964 pp. 122 - 124.
- 32.- OPEKAR P.C. and GOAR B.G.  
"This Computer Program Optimizes Sulfur Plant Design and  
Operation"  
Vol. 45, No. 6, June 1966 pp. 181 - 184
- 33.- GENE GOAR B.  
"Today's Sulfur Recovery Processes"  
Vol. 47, No. 9, September 1968 pp. 248 - 252.
- 34.- JOHNSON D.W. and COLVER C.P.  
"Mixture Properties by Computer"  
Vol. 47, No. 12, December 1968 pp. 79 - 84.
- 35.- JOHNSON D.W. and COLVER C.P.  
"Mixture Properties by Computer"  
Vol. 48, No. 3, March 1969 pp. 113 - 122.
- 36.- STARCZEWSKI J.  
"Short Cut to Tubside Heat Transfer Coefficient"  
February 1970 pp. 129 - 130.
- 37.- BOAS A.H. and ANDRADE R.C.  
"Simulate Sulfur Recovery Plants"  
March, 1971 pp. 81 - 84

- 38.- PALM J.W.  
"Watch these trends in Sulfur plant design"  
March 1972 pp. 105 - 108.
- 39.- PEARSON J.  
"Development in Claus Catalysts"  
February 1973 pp. 81 - 85.
- 40.- MARTIN J.E.  
"Plant peaks Sulfur recovery"  
April 1973 pp. 135 - 137.
- 41.- GENE GOAR B.  
"Impure Feeds Cause Claus Plant Problems"  
July 1974 pp. 129 - 132.
- 42.- FISCHER H.  
"Burner/fire box design improves Sulfur recovery"  
October 1974 pp. 125 - 130.
- 43.- MEISEN A. and BENNETT H.A.  
"Consider all Claus reactions"  
November 1974 pp. 171 - 174.
- 44.- RAYMONT M.E.D.  
"Make Hydrogen from Hydrogen Sulfide"  
July 1975 pp. 139 - 142.
- 45.- RAYMONT M.E.D.  
"Role of Hydrogen in Claus Plants"  
May 1975 pp. 177 - 179.
- 46.- CHUTE A.E.  
"Tailor Sulfur Plants to Unusual Conditions"  
April 1977 pp. 119 - 124.



- 47.- NOBLES J.E., PALM J.W. and KNUDTSON D.K.  
"Plant Performance Proves Process"  
July 1977 pp. 143 - 145.
- 48.- KNIGHT W.P.  
"Improve Sulfur Condensers"  
May, 1978 pp. 239 - 241
- 49.- GRANCHER P.  
"Advances in Claus Technology" Part 1  
July 1978 pp. 155 - 160.
- 50.- MAADAH A.G. and MADDOX R.N.  
"Predict Claus Products"  
August 1978 pp. 143 - 146.
- 51.- GRANCHER P.  
"Advances in Claus Technology" Part 2  
September 1978 pp. 257 - 262.
- 52.- ROYAN T.S. and LOISELLE C. E.  
"Make Sulfur from Lean Acid Gases"  
November 1978 pp. 219 - 222.
- 53.- SUBRAHMANYAM N.V.R.S.S., PANDIAN G. and GANAPATHY V.  
"How to Size Waste Heat Boilers"  
September, 1979 pp. 261 - 264
- 54.- WILEY S.  
"Off-gas aids Calus Operations"  
April 1980 pp. 127 - 129.
- 55.- PEARSON M.J.  
"Special Catalyst Improves C-S Compounds Conversion"  
April 1980 pp. 131 - 134.

**\*\* INDUSTRIAL AND ENGINEERING CHEMISTRY \*\***

- 56.- SAWYER F.G. and HADER R.N.  
"Sulfur from Sour Gases"  
Vol. 42, No. 10 pp. 1938 - 1950.

**\*\* THE JOURNAL OF CHEMICAL PHYSICS \*\***

- 57.- WHITE W.B., JOHNSON S.M. and DANTZING G.B.  
"Chemical Equilibrium in Complex Mixtures"  
Vol. 28, No. 5, May 1958 pp. 751 - 755.

**\*\* THE OIL AND GAS JOURNAL \*\***

- 58.- WEBB M.  
"Production of Sulfur"  
January 11, 1951 pp. 71 - 72.
- 59.- "Sulfur Recovery in Canada at Shell's Jumping Pound Plant"  
October 25, 1951 pp. 102 - 107.
- 60.- BLOHM C.L.  
"How light on Processing Sulfur-Bearing Gases"  
April 29, 1952 pp. 89 - 93.
- 61.- KOHL A.L. and FOX E.D.  
"Economics of Sulfur Production From Hydrogen Sulfide"  
January 25, 1952 pp. 154 - 177.
- 62.- KILMER J.W., RAHMES M.H. and LAWLER H.L.  
"Stanolind Fights Corrosion in Three Recovery Plants"  
July 9, 1956 pp. 84 - 85.
- 63.- GREKEL H.  
"H<sub>2</sub>S to S . . . by direct oxidation"  
July 20, 1959 pp. 76 - 79.

- 64.- GRAFF R.A.  
"Sulfur Recovery from Petroleum Gases"  
October 17, 1960 pp. 118 - 122.
- 65.- OPEKAR P.C. and GOAR B.G.  
"How a Computer Optimize Sulfur Plant Design and Operations"  
May 2, 1966 pp.86 - 89.
- 66.- MADDOX R.N. and BURNS R.N  
"Sulfur Recovery"  
September 9, 1968 pp. 130 - 133.
- 67.- BRIANT H.S.  
"Environmental needs guide refinery Sulfur recovery"  
March 26, 1973 pp. 70 - 75.
- 68.- GOAR B.G.  
"Sulfur recovery from natural gas involves big investment"  
July 14, 1975 pp. 78 - 85.
- 69.- NORMAN W.S.  
"There are ways to smoother operation of Sulfur Plants"  
November 15, 1976 pp. 55 - 60.
- 70.- GOAR B.G.  
"Tighter control of Claus plants"  
August 22, 1977 pp. 134 - 137.
- 71.- "GPA panelist outlines Claus process"  
August 7, 1978 pp. 92 - 99.
- \*\* OILWEEK \*\***
- 72.- BERLIE M.E.  
"Sulphur Plant at Okotoks solves unique problems"  
July 2, 1960 pp. 25 - 29.

**\*\* THE PETROLEUM ENGINEER \*\***

73.- GRAFF R.A.

"Sulfur Recovery Practices in Oil Industry"

April, 1953 pp. C-19 - C-24.

**\*\* PETROLE INFORMATION \*\***

74.- MESSENGER J.

"Recent Progress in the Design of Sulphur Plants"

October 18/31, 1979 pp. 31 -36.

**\*\* SULFUR \*\***

75.- "Some factors affecting the performance of Claus Sulphur recovery plant"

No. 115 November/December pp. 33 - 37.

**\*\* FOLLETOS DE FABRICANTES \*\***

76.- "ACTIVATED ALUMINA FOR CLAUS CATALYSIS"

Alcoa Chemicals Product Applications

May, 1977.

77.- "SPHERICAL CLAUS CATALYSIS FOR SULFUR RECOVERY FROM ACID GAS STREAMS"

KAISER Chemicals

1973.

78.- "DELTA IS . . . SULFUR RECOVERY"

Delta Engineering Corporation

**\*\* LIBROS DE CONSULTA \*\***

79.- CARNAHAN, B. y otros

"APPLIED NUMERICAL METHODS"

United States of America

John Wiley &amp; Sons, Inc. 1969

- 80.- PASKALL, H.G.  
"Capability of the Modified Claus Process"  
Calgary, Alberta, Canada  
Western Research and Development  
Division of Bow Valley Resource Services, Ltd.  
March, 1979
- 81.- LUDWIG,  
"Applied Process Design for Chemical and Petrochemical  
Plants" Vol. III  
Gulf Publishing Co. , USA, 1964
- 82.- CASTELLAN, G.W.  
"Fisicoquímica"  
Fondo Educativo Interamericano, S.A.  
Segunda Edición, Puerto Rico, 1975
- 83.- WEAST, R.C. and others  
"CRC Handbook of Chemistry and Physics"  
59th Edition  
CRC Press, Inc. , USA, 1979
- 84.- SMITH, J.M.  
"Ingeniería de la Cinética Química"  
Segunda Edición  
Compañía Editorial Continental, S.A. , México, 1977
- 85.- STULL, D.R. y otros  
"JANAF Thermochemical Tables"  
Second Edition, National Bureau of Standards  
Washington D.C. , USA, 1971
- 86.- TREYBAL, R.E.  
"Mass-Transfer Operations"  
Second Edition  
McGraw-Hill Kogakusha, Ltd. , Japan

- 87.- HENLEY, E.J. and ROSEN, E.M.  
"Material and Energy Balance Computations"  
John Wiley and Sons, Inc. , USA, 1969
- 88.- GIRLER CHEMICAL, INC.  
"Physical and Thermodynamic Properties of Elements and  
Compounds"
- 89.- HIMMELBLAU, D.M.  
"Principios y Cálculos Básicos de la Ingeniería Química"  
Primera Edición, Décima Impresión  
Compañía Editorial Continental, S.A. , México, 1976
- 90.- KERN, D.Q.  
"Procesos de Transferencia de Calor"  
Primera Edición, 12a. Impresión  
Compañía Editorial Continental, S.A. , México, 1976
- 91.- McCRACKEN, D.D.  
"Programación Fortran IV"  
Primera Edición, 9a. Reimpresión  
Editorial LIMUSA, S.A. , México, 1973
- 92.- MCKEE, A.G. and CO.  
"Sulfur Recovery Unit"  
A.G. McKee and Co. , Septiembre 1966, Francia
- 93.- SHERWOOD,  
"The Properties of Gases and Liquids"  
Second Edition  
McGraw-Hill Book Company, New York, USA

- 94.- TULLER, W.N.  
 "The Sulfur Data Book"  
 McGraw-Hill, USA, 1954

\*\* REFERENCIAS ADICIONALES \*\*

- 95.- HYMAN, M.H.  
 "Fundamentals of Engineering HPI Plants with the Digital Computer" Chapter 4, Part 2  
 Petrochemical Engineer, April, 1969, pp. 29 - 42
- 96.- HINCHLEY, P.  
 "Waste Heat Boilers: Problems and Solutions"  
 Chemical Engineering Progress, March, 1977, pp. 90 - 96
- 97.- KERR, R.K. and BERLIE, E.M.  
 "The Claus Process: Thermodynamics of Sulphane Production"  
 Energy Processing/Canada, July-August, 1977, pp. 48 - 51
- 98.- KRIENBERG, M.  
 "Handling molten sulfur"  
 Chemical Engineer, December 4, 1978, pp. 125 - 126
- 99.- WATSON, E.A.; HARTLEY, D. and LEDFORD, T.H.  
 "Catalytically degas Claus sulfur"  
 Hydrocarbon Processing, May, 1981, pp. 102 - 103
- 100.- BURNS, R.A. ; LIPPERT, R.B. and KERR, R.K.  
 "Chcose Catalyst Objectively"  
 Hydrocarbon Processing, November, 1974, pp. 181 - 186
- 101.- GIRAL, J.; BARNES, F. y RAMIREZ, A.  
 "Ingeniería de Procesos"  
 Segunda Edición  
 Editorial Alhambra Mexicana, S.A. , México, 1979