

Universidad de Matanzas
Sede “Camilo Cienfuegos”
Facultad de Ciencias Técnicas
Departamento de Química



Trabajo de Diploma

Trabajo de Diploma en opción al título de Ingeniería Química

TÍTULO: *Influencia de parámetros de operación del proceso de producción de ácido sulfúrico en el análisis de zonas de riesgos en la UEB Rayonitro*

Autora:

Alexandra Lorenzo Jiménez

Tutores:

Dr. C. Yamilé Martínez Ochoa

Ing. Pavel Ramos Fundora

Matanzas, Cuba

Diciembre, 2022

DECLARACIÓN DE AUTORIDAD

Yo, Alexandra Lorenzo Jiménez, declaro que soy la única autora de este trabajo de diploma y lo pongo a la disposición de la UEB Rayonitro de Matanzas y de la Universidad de Matanzas, para hacer uso del mismo con el objetivo y finalidad que se estime conveniente, siempre que se respeten mis derechos como autora.

Alexandra Lorenzo Jiménez

"Los científicos estudian el mundo tal y como es, los ingenieros crean el mundo que nunca ha sido".

Theodore von Karman.

DEDICATORIA

A mis padres, por ellos soy todo....

Y a ellos les debo todo....

AGRADECIMIENTOS

- A mis padres porque son mi guía y ejemplo, por amarme incondicionalmente, por los consejos que me dan y por siempre apoyarme y creer en mí.
- A Agu, por aguantarme, por comprenderme, por hacerme reír cuando estaba triste o estresada, por los momentos felices, por compartir su vida conmigo.
- A mi suegra Yamilé por la paciencia que tuvo y que tiene conmigo, por quererme como una hija y estar siempre que la necesito.
- A mi suegro Agustín por ayudarme cuando Hysys no me daba en verdecito.
- A mi tutor Pavel por confiar en mí y por la ayuda que me brindó para la realización de esta investigación.
- A Claudita por estar siempre a mi lado transmitiendo pensamientos positivos.
- A mis amigos, los de verdad: Hectico, Eduardo, Dailys, el Médico, Doris, Fer, Jonathan. Los voy a llevar siempre en el corazón, gracias por todos los momentos compartidos.
- A mami Lourdes y papá Héctor por malcriarme, por quererme como una hija, por estar siempre al pendiente, por brindarme su casa para estudiar.
- A mis compañeros de grupo, nunca los voy a olvidar.
- A mis profesores a los cuales respeto y admiro, de algunos no solo me llevo sus enseñanzas, también su amistad.
- A todas las personas que contribuyeron en mi formación y me ayudaron de una forma u otra.

A todos,
Muchas Gracias.

RESUMEN

La presente investigación se realiza en la planta de producción de ácido sulfúrico UEB Rayonitro situada en la provincia de Matanzas con el objetivo de evaluar la influencia de parámetros de operación del proceso de producción de ácido sulfúrico sobre posibles escenarios de accidente mayor. Para esto se obtiene un modelo de simulación de la planta utilizando el simulador modular HYSYS que representa adecuadamente el proceso en estudio. A partir de dicho modelo se realiza un estudio de caso en el horno modificando el flujo de azufre de alimentación, para aumentar la relación aire seco de entrada/azufre de entrada y comprobar el comportamiento de la temperatura y de la composición de dióxido de azufre y oxígeno del gas de salida. En el intervalo de temperatura de 400 – 600 °C recomendado por la bibliografía para la entrada de los gases al convertidor, se evalúa la posibilidad de ocurrencia de accidente de nube tóxica de vapor de dióxido y trióxido de azufre mediante el software ALOHA. En la estimación de estos accidentes se demuestra que la extensión de la nube tóxica de dióxido de azufre y trióxido de azufre para una temperatura de 640°C es mayor que para una temperatura de 400°C y que en ambos casos se dirige hacia la zona del Valle de Yumurí, no afectando a los barrios cercanos a la empresa y alcanzando una distancia máxima de 7 km y 4,9 km respectivamente.

ABSTRACT

This research is carried out in the sulphuric acid production plant UEB Rayonitro located in the province of Matanzas, with the aim of evaluating the influence of operating parameters of the sulphuric acid production process on possible major accident scenarios. For this purpose, a simulation model of the plant was obtained using the HYSYS modular simulator, which adequately represents the process under study. Based on this model, a case study is carried out in the furnace by modifying the feed sulphur flow, in order to increase the dry inlet air/inlet sulphur ratio and to check the behaviour of the temperature and the sulphur dioxide and oxygen composition of the flue gas. In the temperature range of 400 - 600 °C recommended by the literature for the inlet gases to the converter, the possibility of occurrence of a toxic cloud accident of sulphur dioxide and trioxide vapour is evaluated using the ALOHA software. The estimation of these accidents shows that the extent of the toxic cloud of sulphur dioxide and sulphur trioxide for a temperature of 640 °C is greater than for a temperature of 400 °C and that in both cases it is directed towards the area of the Yumurí Valley, not affecting the neighbourhoods near the company and reaching a maximum distance of 7 km and 4,9 km respectively.

Índice

INTRODUCCIÓN	1
CAPITULO I: Análisis Bibliográfico	4
1.1 Azufre	4
1.1.1 Propiedades del azufre	4
1.1.2 Usos del azufre	4
1.1.3 Riesgos a la exposición del azufre	5
1.2 Ácido Sulfúrico	5
1.2.1 Propiedades del ácido sulfúrico	5
1.2.2 Métodos de obtención del ácido sulfúrico	6
1.2.3 Aplicaciones del ácido sulfúrico	7
1.2.4 Riesgos a la exposición del ácido sulfúrico	8
1.3 Simulación de procesos químicos	9
1.3.1 Tipos de simulación	10
1.3.2 Simuladores de procesos	11
1.3.3 Simuladores secuenciales modulares	12
1.3.4 Aplicaciones de la simulación en ácido sulfúrico	16
1.4 Riesgos industriales	17
1.4.1 Clasificación de riesgos	18
1.4.2 Métodos cualitativos de análisis de riesgos	19
1.4.3 Métodos cuantitativos para el análisis de riesgos	20
1.4.4 ALOHA	21
1.4.5 Estudios sobre análisis y evaluación de riesgos	22
Conclusiones parciales	23
CAPITULO II: Materiales y Métodos	24

2.1 Descripción tecnológica del proceso	24
2.1. Metodologías para la obtención y validación del modelo de simulación.....	26
2.2.1 Obtención del modelo de simulación	26
2.2.2 Validación del modelo de simulación	31
2.2.3 Análisis de sensibilidad del modelo.....	32
2.3 Evaluación del proceso de combustión de azufre en el horno.....	33
2.4 Evaluación del alcance de los escenarios de accidentes	34
Conclusiones parciales.....	36
CAPITULO III: Análisis de Resultados	37
3.1. Modelo de simulación de la planta de producción de ácido sulfúrico	37
3.2 Validación del modelo de simulación a través del ajuste del caso base.....	38
3.3 Análisis de sensibilidad del modelo de simulación de la planta de producción de ácido sulfúrico.....	40
3.4 Evaluación del proceso de combustión de azufre en el horno.....	44
3.5 Evaluación del alcance de los escenarios de accidentes	47
3.5.1. Escenario nube tóxica de vapor de SO₂ para el sistema horno-caldera.	47
3.5.2. Escenario nube tóxica de vapor de SO₃ para el convertidor.	50
3.6 Consecuencias de las nubes toxicas de óxidos de azufre.....	52
Conclusiones parciales.....	53
CONCLUSIONES	55
RECOMENDACIONES.....	56
BIBLIOGRAFÍA	57
ANEXOS	64

INTRODUCCIÓN

A nivel mundial, el ácido sulfúrico es uno del producto más utilizado en la industria química básica (King *et al.*, 2013). Las plantas de ácido sulfúrico son muy importantes en la industria de procesamiento moderna, debido a la diversidad de aplicaciones que tiene este compuesto, principalmente en la producción y procesamiento de fertilizantes como el sulfato de amonio y el superfosfato; y de productos químicos como ácido clorhídrico, tintes y pigmentos, sales de sulfato, explosivos, detergentes sintéticos y medicamentos.

La producción de ácido sulfúrico, en sus inicios, consistía en la combustión de azufre en presencia de vapor y nitrato natural. Actualmente existen diversas tecnologías disponibles para llevar a cabo el proceso de producción. El proceso de contacto es el más popular (Oni *et al.*, 2018), en general, el ácido sulfúrico se produce en dos pasos principales: (1) oxidación de dióxido de azufre a trióxido de azufre y (2) absorción de trióxido de azufre por ácido sulfúrico diluido para formar ácido sulfúrico concentrado. De hecho, el proceso de contacto ha pasado por dos etapas: un único proceso de absorción, donde el 97% del SO_2 se oxida a SO_3 , y el SO_2 no oxidado se emite al ambiente. Luego, en 1968, se introdujo el método de doble contacto para alcanzar el 99,5 % o más tasa de conversión, mientras que el SO_2 y SO_3 sin reaccionarse liberan al medio ambiente. En este contexto, mejorar el desempeño del proceso de doble contacto para lograr una mayor eficiencia energética y maximizar los ingresos, y minimizar impacto ambiental siguen siendo desafíos importantes (Lee *et al.*, 2019).

En tal caso, hay dos enfoques disponibles: ensayos experimentales y/o simulación y modelado. De hecho, las pruebas experimentales muestran algunos inconvenientes, como el alto costo de adquisición de materiales y mantenimiento, y área de validez de la solución compleja. Por el contrario, los principales beneficios de simulación y control y optimización basados en modelos para plantas industriales se pueden resumir como: minimización del tiempo de ensayos experimentales y costo, elaboración de un diagrama de flujo con alta flexibilidad y capacidad de cambios (Boschert y Rosen, 2016), y también el desarrollo de modelos de gemelos digitales.

Por otra parte, numerosos estudios se han llevado a cabo para analizar el modelado de reactores de oxidación de SO_2 , centrándose en el diseño y las condiciones de operación para describir la dinámica de oxidación del SO_2 y diseñar un modelo de cero emisiones al medio ambiente. (Günther *et al.*, 2012). Así como describir el comportamiento de las etapas de conversión en función de los caudales iniciales y la temperatura en la eficiencia del proceso y su impacto medioambiental. (Sørensen *et al.*, 2015)

La mayoría de los estudios llevados a cabo para analizar las condiciones de operación abarcan solamente el modelado de los reactores de oxidación de SO_2 . Muy pocos estudios abarcan la totalidad del proceso. Algunos autores han desarrollado modelos completos donde se logran reducir las emisiones de SO_x hasta un 40% aproximadamente. (Kiss *et al.*, 2010). La simulación del proceso de producción de ácido sulfúrico en Aspen HYSYS exhibe un enfoque eficaz para la optimización del beneficio anual de la planta. (Chowdhury *et al.*, 2012). En este contexto, es importante disponer de más potentes y flexibles soluciones de modelado y simulación, que reflejen la realidad experimental, y resuelvan las limitaciones de los modelos existentes.

Por otra parte, la evaluación de consecuencias es uno de los métodos cruciales en los campos de la ingeniería de seguridad de procesos para determinar y cuantificar la zona de amenaza derivada de la planta química respectiva y este método guiará al diseñador sobre la medida preventiva más adecuada para evitar el desastre de una planta química.

Todos los productos químicos relacionados con la producción de ácido sulfúrico se consideran peligrosos y pueden llegar a afectar las personas que los rodean. El ácido sulfúrico concentrado es altamente corrosivo y puede causar quemaduras graves si no se trata adecuadamente. En ciertos casos, estos químicos dañinos corroerán la piel, el papel, metales e incluso rocas. Si el ácido sulfúrico entra en contacto directo con los ojos, esto puede causar ceguera permanente. Puede causar además quemaduras internas, daño permanente a los órganos y probablemente la muerte si se ingiere. La digestión constante de ácido sulfúrico causaría graves problemas renales y enfermedades pulmonares (Cheremisinoff y Rosenfeld, 2009).

La planta de ácido sulfúrico puede enfrentar un problema accidental si no se toma en serio la evaluación de riesgos y los aspectos de seguridad de la planta y los trabajadores. Independientemente de qué tan bien se planee y opere una planta, existe la posibilidad de

que ocurran incidentes. Los incidentes pueden ser desde leves como una ligera fuga o desbordamiento hasta un desastre grave como una explosión química que permite una respuesta de emergencia inmediata para toda la planta.

Por tal motivo se plantea el siguiente **problema** de investigación: ¿Cómo estimar la influencia de parámetros de operación del proceso de producción de ácido sulfúrico sobre el alcance de los escenarios de accidentes tóxicos en la UEB Rayonitro?

Con el propósito de resolver el problema anterior se establece como **hipótesis**: Si se realiza la evaluación de parámetros de operación del proceso de producción de ácido sulfúrico, se podrá estimar el alcance de los escenarios de accidentes tóxicos en la UEB Rayonitro.

Objetivo general: Evaluar la influencia de parámetros de operación del proceso de producción de ácido sulfúrico sobre posibles escenarios de accidente mayor.

Objetivos específicos:

1. Obtener un modelo de simulación de la planta a partir de HYSYS
2. Validar el modelo obtenido a partir de parámetros del proceso.
3. Evaluar el proceso de combustión de azufre en el horno.
4. Evaluar, con el software ALOHA, la influencia de la variación de la temperatura a la salida del horno en la magnitud del escenario nube tóxica ante un posible accidente en la planta.

CAPITULO I: Análisis Bibliográfico

En este capítulo se abordan diferentes temáticas sobre la simulación y el análisis y evaluación de riesgos del proceso de producción de ácido sulfúrico a partir de lo reportado en la literatura especializada con el fin de definir las metodologías para el desarrollo del presente trabajo.

1.1 Azufre

El azufre es un elemento muy abundante en la corteza terrestre, se encuentra en grandes cantidades combinado en forma de sulfuros y de sulfatos. En forma nativa se encuentra en las cercanías de aguas termales, zonas volcánicas y en minas de cinabrio, galena, esfalerita y estibina. También está presente, en pequeñas cantidades, en combustibles fósiles (carbón y petróleo).

1.1.1 Propiedades del azufre

El azufre es un elemento químico de número atómico 16 y símbolo S. Es un no metal abundante e insípido. Es un elemento químico esencial para todos los organismos y necesario para muchos aminoácidos y por consiguiente también para las proteínas. (Meyer, 1976)

Este no metal tiene un color amarillo, es blando, frágil, ligero, desprende un olor característico a huevo podrido al mezclarse con hidrógeno y arde con llama de color azul desprendiendo dióxido de azufre. Es insoluble en agua pero se disuelve en disulfuro de carbono. (Tabatabai y Properties, 1983)

1.1.2 Usos del azufre

El azufre se usa en multitud de procesos industriales como la producción de ácido sulfúrico para baterías, la fabricación de pólvora y el vulcanizado del caucho. El azufre tiene usos como fungicida y en la manufactura de fertilizantes fosfatados. Los sulfitos se usan para blanquear el papel y en cerillas. El tiosulfato de sodio o amonio se emplea en la industria fotográfica como fijador ya que disuelve el bromuro de plata; y el sulfato de magnesio (sal Epsom) tiene usos diversos como laxante, exfoliante, o suplemento nutritivo para plantas. (Boyd, 2016)

1.1.3 Riesgos a la exposición del azufre

El disulfuro de carbono, el sulfuro de hidrógeno (sulfhídrico), y el dióxido de azufre deben manejarse con precaución. El sulfhídrico y algunos de sus derivados, los mercaptanos, son bastante tóxicos (más que cianuro). Aunque muy maloliente incluso en concentraciones bajas, cuando la concentración se incrementa el sentido del olfato rápidamente se satura o se narcotiza desapareciendo el olor, por lo que a las víctimas potenciales de la exposición les puede pasar desapercibida su presencia en el aire hasta que se manifiestan sus efectos, posiblemente mortales. El dióxido de azufre reacciona con el agua atmosférica para producir la lluvia ácida. Irrita las mucosidades y los ojos y provoca tos al ser inhalado. Los vapores del ácido sulfúrico pueden provocar hemorragias en los pulmones, llenándolos de sangre con la consiguiente asfixia.

1.2 Ácido Sulfúrico

El ácido sulfúrico se presenta como un líquido aceitoso y viscoso, transparente o ligeramente amarillo y, en función de su concentración, con un olor bastante particular. Y es que los compuestos de azufre suelen emitir un inconfundible hedor a huevos podridos, asociado también a los volcanes. Es soluble en agua y tiene un gran efecto deshidratante, por lo que puede utilizarse para el secado de gases y líquidos. Además, es un potente agente oxidante y, a altas temperaturas, reacciona con muchos metales.

1.2.1 Propiedades del ácido sulfúrico

La molécula del ácido sulfúrico se compone de hidrógeno, oxígeno y azufre, dispuestos de manera piramidal con el azufre ubicado en el centro y el oxígeno en los vértices. Se le conoce como ácido tetraoxosulfúrico, tetraoxosulfato (VI) de hidrógeno, aceite de vitriolo, licor de vitriolo o espíritu de vitriolo. (Al-Hassan y Hill, 1986)

Según los datos plasmados por Elvers (1991), su punto de ebullición es 290 °C para un 100% de pureza y de 310 a 335 °C para un 98% de pureza. Mientras su punto de fusión es de 10 °C para un 100% de pureza y 3 °C para un 98%.

El ácido sulfúrico diluido actúa como un ácido dibásico. El ácido sulfúrico concentrado y caliente es una sustancia altamente oxidante y ataca metales preciosos. (Yan *et al.*, 2021). En este mismo estado reacciona con carbono, fósforo y azufre produciendo dióxido de azufre (SO₂); además descompone las sales de muchos otros ácidos, como lo demuestran los estudios de Battsengel *et al.* (2018) y Gagol *et al.* (2020), lo cual representa una

oportunidad industrial en diversos campos como en la producción de sulfato de sodio (Na_2SO_4) y cloruro de hidrógeno (HCl) a partir del cloruro de sodio (NaCl), la descomposición de sulfitos a dióxido de azufre y la descomposición de fosfatos de calcio naturales ($\text{Ca}_3(\text{PO}_4)_2$) hasta ácido fosfórico (H_3PO_4) y sulfato de calcio (CaSO_4).

1.2.2 Métodos de obtención del ácido sulfúrico

La obtención del ácido sulfúrico se realiza a partir del SO_2 , este se oxida a SO_3 y luego se obtiene ácido sulfúrico por reacción con el agua. En la actualidad hay dos variantes para la obtención del trióxido de azufre (proceso lento), denominadas el método de contacto y el método de las cámaras de plomo. El primero es más caro, pero produce ácido sulfúrico muy concentrado (95%) y de elevada pureza. El segundo es más económico, tiene mayor capacidad de producción, pero el ácido sulfúrico que se obtiene es de menor concentración (70%) y pureza.

En ambos métodos, se parte del dióxido de azufre previamente obtenido (a partir de la tostación de la pirita) y se oxida a trióxido de azufre utilizando un catalizador. El método de contacto necesita un trióxido de azufre muy puro para no envenenar el catalizador que suele ser arsénico u óxido de hierro, y es por esta razón por lo que resulta más caro. (King *et al.*, 2013)

La tostación de piritas tiene como fin llegar a la obtención de SO_2 gaseoso teniendo presencia de ceniza de óxido de hierro con una reacción exotérmica considerable, menciona Toubri *et al.* (2022) que los minerales de pirita se tuestan en lechos fluidizados, los gases de los tostadores pueden contener polvo, partículas no quemadas, etc. y, por lo tanto, se limpian con ciclones, filtros de mangas y precipitadores electrostáticos. La temperatura del gas limpio se lleva a la temperatura requerida para la conversión de SO_2 en SO_3 por medio de calentadores auxiliares o intercambiando calor con gases calientes (producidos después de la conversión). Se inyecta aire según sea necesario para controlar la temperatura del gas de proceso y mantener la relación SO_2/O_2 para una conversión satisfactoria.

El proceso de contacto simple se suele utilizar cuando el contenido de SO_2 en la corriente de entrada es del 6 al 10%; por lo que, en las nuevas plantas, la eficiencia de conversión es de aproximadamente el 98,5% como promedio diario y se puede mejorar al 99,1% mediante un buen diseño y el uso de un catalizador especialmente adaptado. En las plantas de absorción de conversión simple existentes, es difícil obtener una conversión superior al

98,0%; sin embargo, en algunas plantas existentes se puede lograr una eficiencia de conversión del 98,5% con una gran carga de catalizador en la última pasada y operando a la temperatura más baja posible de 410 a 415 °C. (Boucheikhchoukh *et al.*, 2020)

El proceso de contacto doble es un proceso de tres pasos que produce ácido sulfúrico y vapor a partir del aire, azufre fundido y agua. El proceso consta de tres secciones, que son la sección de preparación de la alimentación, la sección del reactor y la sección del absorbedor. (Mounaam, Chhiti, *et al.*, 2020) En la sección de preparación, la alimentación de azufre fundido se quema con aire seco en el quemador de azufre.

En Huelva, antes de la reconversión minera, se producía ácido sulfúrico exclusivamente vía tostación de pirita; después se ha sustituido toda la producción por una planta de tostación de azufre y otra de recuperación de los gases procedentes de la fundición de cobre. Aquí se han usado los dos tipos de hornos de tostación de pirita: los de pisos que fueron la primera generación y después los de lecho fluido con la doble absorción, lo cual ha repercutido en una gran mejora ambiental, tanto en la calidad del aire y efluentes líquidos, como de aspecto general de la zona al eliminarse las cenizas rojas de óxido de hierro procedentes de la tostación de la pirita que afeaban toda la zona. (Gázquez *et al.*, 2021)

1.2.3 Aplicaciones del ácido sulfúrico

Debido a su capacidad corrosiva, este compuesto químico se usa sobre todo a nivel industrial. No suele estar presente en productos domésticos, salvo en muy pequeña cantidad en algún desatascador u otro limpiador fuerte. No obstante, se puede encontrar este compuesto en diferentes elementos de uso cotidiano, aunque no sea directamente. (King *et al.*, 2013)

Los fertilizantes que contienen fosfato se elaboran principalmente con ácido sulfúrico, produciendo el ácido fosfórico, que es mucho más seguro de manipular. Otro fertilizante es el sulfato de amonio, también elaborado con ácido sulfúrico. (Sippola *et al.*, 2014)

Las baterías de los carros son capaces de producir energía gracias a la reacción química creada entre el plomo y el ácido sulfúrico. Algunas baterías recargables también pueden contener ácido sulfúrico, aunque acompañado por otros compuestos que ayudan a revertir la reacción, haciendo que la batería no se estropee y pueda volver a cargarse. (Rioyo *et al.*, 2022)

El ácido sulfúrico se usa de forma habitual para el proceso de refinación del petróleo, ya que el petróleo tal cual necesita un ácido como catalizador.

Según Demol *et al.* (2019) el horneado de ácido sulfúrico históricamente ha sido, y también es actualmente, uno de los principales procesos utilizados en la descomposición química de la estructura del mineral para liberar los elementos constituyentes, en el procesamiento de concentrados de minerales de tierras raras. Las tierras raras son fundamentales para la obtención de numerosos materiales y aplicaciones que sustentan la civilización moderna.

En el estudio realizado por Thawornchaisit *et al.* (2019), se evalúan los efectos de la concentración de ácido, la relación entre el volumen de ácido y la cantidad de lodo confirmaron que la eficiencia de la lixiviación del cobre puede alcanzar el 97,0% con valores óptimos de ácido sulfúrico.

Chaijareenont *et al.* (2018) evalúa los efectos del ácido sulfúrico en la unión entre la polietereetercetona (PEEK) y un compuesto de resina. Se sugiere que el lavado con ácido sulfúrico al 90 y 98% era la concentración óptima para mejorar la adhesión entre el PEEK y el compuesto de resina con fines odontológicos.

1.2.4 Riesgos a la exposición del ácido sulfúrico

Las principales vías de exposición son la inhalación, contacto con la piel y contacto visual. Estas pueden ocasionar dolor, enrojecimiento, quemaduras, ampollas, irritación severa de la nariz y la garganta, incluida la ceguera. Puede causar una acumulación de líquido en los pulmones que pone en peligro la vida (edema pulmonar). (King et al., 2013)

Basándose en estudios epidemiológicos, de un grupo de trabajo del Centro Internacional de Investigaciones sobre el cáncer se pudo determinar que las nieblas de ácidos inorgánicos fuertes que contienen ácido sulfúrico son carcinógenas para el ser humano, aunque el ácido sulfúrico en sí no lo sea. Los estudios acumulados indican que existe una relación entre la exposición laboral crónica a las nieblas de ácido sulfúrico y un mayor riesgo de cáncer de laringe. La exposición aguda e involuntaria a las nieblas de ácido sulfúrico puede causar daños corrosivos en los tejidos, dependiendo de la vía de exposición. La revisión de J. H. Yang et al. (2019) muestra la toxicidad y carcinogenicidad de las nieblas de ácido sulfúrico en comparación con otras nieblas de ácidos inorgánicos fuertes. También examina las rutas y la duración de la exposición (a corto plazo, prolongada y a largo plazo)

Uno de los residuos más peligrosos es el vanadio, el cual es utilizado como catalizador en la producción de ácido sulfúrico. El catalizador gastado se considera un residuo peligroso debido a la presencia de pentóxido de vanadio, que es la forma más tóxica del vanadio. Por ello, actualmente, estos residuos son incinerados. Por lo tanto, la eliminación de vanadio de los catalizadores se justifica desde el punto de vista medioambiental y económico. (Mangini et al., 2020)

Wang et al. (2022) ha utilizado por primera vez una combinación de ozono (O₃) y ultrasonidos (US) para decolorar ácido sulfúrico concentrado negro con alto contenido orgánico. Bajo las condiciones optimizadas se obtiene un producto de ácido sulfúrico que cumple los requisitos de los productos de primera clase en las normas nacionales, con un grado de decoloración de 174,07%, una transparencia de 70mm y una fracción másica de 98,04%.

1.3 Simulación de procesos químicos

La simulación es una herramienta empleada para evaluar procesos mediante la representación a través de modelos matemáticos. Permite obtener información sobre el comportamiento esperado del proceso, lo que facilita la toma de decisiones bajo condiciones de riesgo e incertidumbres. Para la resolución de estos modelos, se dispone de poderosos programas informáticos y simuladores interactivos, con entornos amigables e interfaces accesibles, que son usados ampliamente en la industria y también a nivel académico.

La importancia del uso de los software radica en que se puede simular la estructura de sistemas complejos del mundo real, con la finalidad de comprender el comportamiento del sistema o evaluar nuevas estrategias, manipulando diferentes variables, tanto de diseño como de operación, dentro de los límites impuestos por un cierto criterio o un conjunto de ellos, para el funcionamiento del sistema. (Vega, 2018)

En la actualidad el uso de los simuladores a nivel industrial y académico ocupa un papel cada vez más preponderante en el análisis de los procesos, ya sea en etapas de prefactibilidad como en la etapa operativa de los procesos. La simulación de procesos permite, principalmente, por medio de relaciones termodinámicas básicas de ingeniería, tales como equilibrio químico y de fases y balances de materia y energía, predecir el comportamiento de un proceso. A nivel comercial existe una gran variedad de simuladores

para las industrias de procesos químicos. Los simuladores más desarrollados corresponden a la industria del petróleo y gas, mientras que, para la simulación de procesos con corrientes sólidas, se presentan ciertas complicaciones que no se observan en aquellas que involucran corrientes líquidas o gaseosas. Esto se debe, fundamentalmente, a la complejidad característica de los procesos en los que intervienen especies sólidas. (Zapata *et al.*, 2015)

1.3.1 Tipos de simulación

Las herramientas de simulación pueden clasificarse según diversos criterios, según el tipo de procesos (discontinuo o continuo), si involucra el tiempo (estacionario o dinámico-incluye a los equipos discontinuos), si maneja variables estocásticas o determinísticas, variables cuantitativas o cualitativas, etc. (Scenna et al., 2015)

- **Simulación cualitativa y cuantitativa**

La simulación cualitativa tiene por objeto principalmente el estudio de las relaciones causales y las tendencias temporales cualitativas de un sistema, como así también la propagación de perturbaciones a través de un proceso dado. El valor cualitativo de una variable, a diferencia del valor numérico (cuantitativo), se refiere a su signo; ya sea absoluto, o bien con relación a un valor dado o de referencia. Por lo que en general se trabaja con valores tales como (+, -, 0). Son varios los campos de aplicación de la simulación cualitativa, como es el análisis de tendencias, supervisión y diagnóstico de fallas, análisis e interpretación de alarmas, control estadístico de procesos, etc.

La simulación cuantitativa, en cambio, es aquella que describe numéricamente el comportamiento de un proceso, a través de un modelo matemático del mismo. Para ello se procede a la resolución de los balances de materia, energía y cantidad de movimiento, junto a las ecuaciones de restricción que imponen aspectos funcionales y operacionales del sistema. La simulación cuantitativa abarca principalmente la simulación en estado estacionario y la simulación en estado dinámico.

- **Simulación estacionaria y dinámica.**

La simulación en estado estacionario implica resolver los balances de un sistema no involucrando la variable temporal, por lo que el sistema de ecuaciones debe reflejar en el modelo las variaciones de las variables de interés con las coordenadas espaciales (modelos de parámetros distribuidos). Para esto se utiliza un sistema de ecuaciones diferenciales de derivadas parciales (según el número de coordenadas espaciales consideradas). Por lo

general, en simuladores comerciales (no específicos) se utilizan modelos de parámetros concentrados.

La simulación dinámica plantea los balances en su dependencia con el tiempo, ya sea para representar el comportamiento de equipos discontinuos o bien para analizar la evolución que se manifiesta en el tránsito entre dos estados estacionarios para un equipo o una planta completa. En este caso, el modelo matemático se constituye por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias cuya variable diferencial es el tiempo, en el caso de modelos de parámetros concentrados. En caso contrario, se resuelve un sistema de ecuaciones diferenciales de derivadas parciales, abarcando tanto las coordenadas espaciales como la temporal (parámetros distribuidos).

- **Simulación determinística o estocástica.**

En el modelo determinístico las ecuaciones dependen de parámetros y variables conocidas con certeza, es decir que no existe incertidumbre ni leyes de probabilidades asociadas a las mismas.

En cambio, en un modelo estocástico existen ciertas variables sujetas a incertidumbre, que se expresan por funciones de distribución de probabilidad. En este caso, por lo tanto, también los resultados del modelo estarán asociados a una ley de probabilidad.

1.3.2 Simuladores de procesos

Los simuladores de procesos pueden dividirse en los siguientes tipos según la filosofía bajo la cual se plantea el modelo matemático que representa el proceso a simular: (Scenna *et al.*, 2015)

- Simuladores secuenciales modulares:

Se basan en módulos de simulación independientes que siguen aproximadamente la misma filosofía que las operaciones unitarias. Cada equipo: bomba, válvula, intercambiadores, etc.; son modelados a través de modelos específicos para los mismos y, además el sentido de la información coincide con el “flujo físico” en la planta. De esta forma se tiene como ventaja el hecho que cada sistema de ecuaciones se resuelve con una metodología que resulta adecuada para el mismo, y es posible analizar bajo todas las circunstancias posibles, el comportamiento del método de resolución propuesto.

- Simuladores globales u orientados a ecuaciones:

Plantea el modelo matemático que representa al proceso construyendo un gran sistema de ecuaciones algebraicas que representa a todo el conjunto o planta a simular. De esta forma el problema se traduce en resolver un gran sistema de ecuaciones algebraicas, por lo general altamente no lineales.

Este último grupo de simuladores se caracteriza por:

1. Cada equipo se representa por las ecuaciones que lo modelan. El modelo es la integración de todos los subsistemas.
2. Desaparece la distinción entre variables de proceso y parámetros operativos, por lo tanto, se simplifican los problemas de diseño.
3. Resolución simultánea del sistema de ecuaciones algebraicas (no lineales) resultante.
4. Mayor velocidad de convergencia.
5. Necesita una mejor inicialización (mejor cuanto mayor sea el problema a resolver).
6. A mayor complejidad, menor confiabilidad en los resultados y más problemas de convergencia (soluciones sin sentido físico).
7. Más difícil de usar por "no especialistas".

Las herramientas computarizadas de los simuladores globales más utilizadas en la industria son:

- Programas de resolución de ecuaciones (TK Solver, Polymath).
- Hojas de cálculo. (Excel, Lotus 1-2-3).
- Software de manipulación simbólica. (Derive, Mathematica, Maple).
- Software interactivo (Mathcad, Matlab).

1.3.3 Simuladores secuenciales modulares

Como su nombre lo indica, estos simuladores representan el proceso mediante una secuencia lógica de módulos, cada equipo que integra el proceso constituye un módulo. Las características principales de estos tipos de simuladores son:

1. Modelos individuales resueltos eficientemente.
2. Fácilmente comprendido por ingenieros "no especialistas en simulación".
3. Métodos de convergencia robustos (Sustitución Directa, Wegstein, etc).
4. La información ingresada por el usuario (relacionable con equipos o corrientes) resulta fácilmente chequeable e interpretable.

5. Los problemas de diseño (selección de parámetros) son más difíciles de resolver.
6. Se incrementa la dificultad cuando se plantea un problema de optimización (funcionan como cajas negras).
7. Poco versátiles, pero muy flexibles, muy confiables y bastante robustos.

Las herramientas computarizadas de los simuladores secuenciales modulares más utilizadas en la industria son:

- CHEMCAD
- PROII
- CHEMSEP
- CAPE OPEN to CAPE OPEN (COCO)
- ASPENPLUS
- HYSYS
- ASPEN HYSYS

CHEMCAD

Es uno de los simuladores que más se utilizan en la actualidad para simular diferentes procesos productivos, entre los cuales se encuentran la fabricación de acetaldehído, biodiesel, ácido monocloroacético, epiclorohidrina, la deshidratación del propanol, estireno y ácido acrílico. (Pérez *et al.*, 2020)

PROII

Surge ante la necesidad de poder representar con un nivel de detalles superior las operaciones y procesos unitarios de la industria de refinación de petróleo permitiendo caracterizar incluso petróleos mediante compuestos hipotéticos, a partir de un análisis de laboratorio de condensados, crudos y cortes de petróleo. (Baquero, 2019)

CHEMSEP

Es uno de los mejores simuladores para unidades de destilación. Se usa comúnmente para la destilación azeotrópica, la destilación simple y la destilación en columna. (Fahmi *et al.*, 2021)

COCO Simulator

Es uno de los simuladores de uso libre y gratuito. Funciona en estado estacionario, es gráfico y modular y permite a través de su entorno de modelación añadir nuevas

operaciones unitarias o paquetes termodinámicos. Es una gran herramienta para el diseño de procesos de la industria química, que crea una alternativa a software de tipo comercial. (Martínez-Díaz *et al.*, 2022)

Los dos simuladores comerciales de carácter general más extendidos y que dominan la mayor parte del mercado son Aspen Plus y HYSYS. En 2002 Aspen compra HYSYS uniendo fuerzas por la incorporación de nuevos módulos, dando lugar al simulador ASPEN HYSYS.

ASPEN PLUS

Aspen Plus es una de las herramientas de simulación de procesos más comunes tanto en el ámbito académico como en el industrial. La principal ventaja de Aspen Plus es su gran flexibilidad en cuanto a las diferentes configuraciones de procesos, lo que permite optimizar las diferentes condiciones operativas y determinar las limitaciones de los procesos sometidos a estas condiciones. Además, es posible diseñar una gran variedad de conceptos de procesos, incluyendo extensos intercambiadores de calor y componentes auxiliares, así como la posibilidad de vinculación con herramientas de software especializados y análisis tecno-económicos. (Mutlu *et al.*, 2020)

HYSYS

HYSYS ofrece un alto grado de flexibilidad porque existen múltiples formas de realizar tareas específicas. Esta flexibilidad combinada con un enfoque coherente y lógico de cómo se entregan estas capacidades hace de HYSYS una herramienta de simulación de procesos extremadamente versátil. (Mondal *et al.*, 2015)

La facilidad de uso de HYSYS se atribuye a los siguientes cuatro aspectos clave de su diseño:

- **Operación impulsada por eventos**

Este concepto combina el poder de la simulación interactiva con el acceso instantáneo a la información. La simulación interactiva significa que la información se procesa a medida que se suministra y los cálculos se realizan automáticamente. Además, no está restringido a la ubicación del programa donde se proporciona la información.

- **Operaciones modulares**

Las operaciones modulares se combinan con el algoritmo de solución no secuencial. No solo se procesa la información a medida que se proporciona, sino que los resultados de

cualquier cálculo se producen automáticamente en todo el diagrama de flujo, tanto hacia adelante como hacia atrás. La estructura modular de las operaciones significa que se pueden calcular en cualquier dirección, usando información en un flujo de salida para calcular las condiciones de entrada. La comprensión del proceso se obtiene en cada paso porque las operaciones se calculan automáticamente y los resultados se ven de inmediato.

- **Arquitectura de diagrama de flujo múltiple**

La arquitectura de múltiples diagramas de flujo se puede utilizar para crear cualquier cantidad de diagramas de flujo dentro de una simulación y para asociar fácilmente un paquete de fluidos con un grupo definido de operaciones unitarias.

- **Diseño orientado a objetos**

La separación de los elementos de la interfaz (cómo aparece la información) del código de ingeniería subyacente significa que la misma información aparece simultáneamente en una variedad de ubicaciones. Cada pantalla está vinculada a la misma variable de proceso por lo que, si la información cambia, se actualiza automáticamente en cada ubicación.

Además, si se especifica una variable, se muestra como una especificación en cada ubicación. Esto significa que la especificación se puede cambiar donde quiera que aparezca y no está restringido a una sola ubicación para realizar cambios.

ASPEN HYSYS

Aspen HYSYS es una herramienta de simulación de procesos muy poderosa, ha sido específicamente creada teniendo en cuenta lo siguiente: arquitectura de programa, diseño de interfaces, capacidades ingenieriles, y operación interactiva.

Este software permite simulaciones tanto en estado estacionario como en estado transitorio. Los variados componentes que comprende Aspen HYSYS® proveen un enfoque extremadamente poderoso del modelado en estado estacionario. Sus operaciones y propiedades permiten modelar una amplia gama de procesos con confianza.

Para comprender el éxito de Aspen HYSYS® no se necesita mirar más allá de su fuerte base termodinámica. Sus paquetes de propiedades llevan a la presentación de un modelo más realista.

En los últimos años, este programa ha sido ampliamente usado en la industria para: investigación, desarrollo, simulación y diseño. Aspen HYSYS® sirve como plataforma ingenieril para modelar procesos como: procesamiento de gases, instalaciones criogénicas,

procesos químicos y de refinación, etc. También ha sido utilizado en universidades en cursos introductorios y avanzados, especialmente en ingeniería química. (Gonzalez y Vital, 2010)

Todos los programas mencionados anteriormente son capaces de resolver cualquier problema de simulación en plantas químicas. De ellos el que va a ser utilizado es HYSYS, debido a que ofrece resultados confiables, se encuentra disponible en la Universidad de Matanzas, se puede operar con facilidad y ya fue estudiado en asignaturas de análisis de proceso.

1.3.4 Aplicaciones de la simulación en ácido sulfúrico

Chowdhury *et al.* (2012) de la Universidad de Ingeniería y Tecnología de Bangladesh, realizan un estudio en el que se tiene como objetivo simular y optimizar la rentabilidad anual de una planta de ácido sulfúrico al 98,4% en Aspen HYSYS 3.2. Se obtienen resultados satisfactorios en la optimización del proceso cumpliéndose con el objetivo propuesto.

Sobre este mismo campo, un año antes Sultana y Amin (2011) utilizan Aspen One V7.2 con éxito para diseñar todos los subprocesos de la planta de ácido sulfúrico en un entorno integrado.

Mounaam, Harmen, *et al.* (2020) presentan una ponencia en la que se estudia el comportamiento constante de un proceso de doble absorción de una planta industrial de ácido sulfúrico utilizando el simulador UniSim Design R451. Los resultados muestran una buena concordancia para la planta completa, con una precisión que supera el 97%. Además de los aspectos de optimización, el modelo también es útil para la capacitación de operadores, la simulación de diversos escenarios y el desarrollo de procesos de gemelos digitales.

Si *et al.* (2020) propusieron un sistema de destilación por membrana al vacío (VMD) integrado con recompresión mecánica de vapor (MVR) que concentra una solución de ácido sulfúrico. Establecieron modelos matemáticos basados en la primera y segunda leyes de la termodinámica. Los efectos de los parámetros de funcionamiento en la eficiencia exergética del sistema se investigaron mediante simulación en Matlab.

El estudio de Várnai *et al.* (2021) presenta la simulación y optimización en Matlab de la recuperación del ácido sulfúrico en estado estacionario. Su propósito era demostrar la

utilidad de la simulación de procesos en cuanto al diseño con materiales especiales utilizando métodos de eficiencia energética. La simulación de procesos se utiliza para comparar variantes tecnológicas, analizar los problemas tecnológicos que se presentan, así como para optimizar el proceso. La simulación del proceso es una herramienta adecuada para analizar la descomposición térmica del ácido sulfúrico, la presencia de ácido sulfúrico en la fracción de vapor y los costes de aplicar un tercer agente. Aquí se presentan tres modelos y una evaluación prospectiva basada en la simulación del consumo de energía y la economía. Se demuestra que el proceso de destilación azeotrópica consume una cantidad extremadamente grande de energía térmica que parece ser mayor que la consumida por la evaporación de efecto simple, mientras que la evaporación de efecto triple en el modo de contra corriente resultó ser la más eficaz desde el punto de vista térmico.

1.4 Riesgos industriales

Según Casal (2021) se han propuesto diversas definiciones del riesgo: “situación que puede conducir a una consecuencia negativa no deseada en un acontecimiento”, o bien “probabilidad de que suceda un determinado peligro potencial” (entendiendo por peligro una situación física que puede provocar daños a la vida, a los equipos o al medio), o aún, “consecuencias no deseadas de una actividad dada, en relación con la probabilidad de que ocurra”.

Es decir que el riesgo, se asocia a la probabilidad de que un peligro se convierta realmente en un accidente con unas consecuencias determinadas.

El crecimiento de la industria química y la notable evolución de la misma ha dado lugar a la proliferación de instalaciones industriales, con el consiguiente incremento de los inventarios de los productos contenidos en dichas plantas, y el aumento del transporte de estos productos por carretera o ferrocarril, tubería o por mar.

Entre los diversos aspectos negativos que todos estos cambios han implicado, ocupa un lugar importante la probabilidad de grandes accidentes con un fuerte impacto sobre personas, el medio ambiente y los bienes.

El riesgo potencial de grandes accidentes se pone de manifiesto en la década de los años ochenta por la ocurrencia de algunos casos de graves consecuencias. El año 1984, registra tres de los accidentes más graves de la historia:

- Rotura de una conducción de gasolina en Sao Pablo, Brasil; donde murieron 800 personas.
- Explosión e incendio en un parque de almacenamiento de gas licuado del petróleo (GLP) en Ciudad México, 450 personas perdieron la vida.
- Escape de isocianato de metilo con formación de una nube tóxica en una fábrica de plaguicidas en Bhopal, India; dejando más de 25000 muertos y 500000 heridos.

En el aspecto del impacto ambiental, 1986 se registra el grave episodio de la contaminación del río Rin, provocado por incendio de un almacén de productos químicos ubicado en Schweizerhalle, Suiza.(Vílchez, 2001)

1.4.1 Clasificación de riesgos

Dada la gran variedad de riesgos, se pueden clasificar en las tres categorías siguientes:

- Riesgos de categoría A: son los inevitables y aceptados, sin compensación (por ejemplo, morir fulminado por un rayo).
- Riesgos de categoría B: evitables, en principio, pero que deben considerarse inevitables si uno quiere integrarse plenamente en la sociedad moderna (por ejemplo: morir en un accidente aéreo o de automóvil).
- Riesgos de categoría C: normalmente evitables, voluntarios y con compensación (por ejemplo: practicar un deporte peligroso).

Desde el punto de vista más concreto de las actividades industriales, los riesgos pueden clasificarse en otras tres categorías:

- Riesgos convencionales: relacionados con la actividad y el equipo existentes en cualquier sector (electrocución, caídas).
- Riesgos específicos: asociados a la utilización o manipulación de productos que, por su naturaleza, pueden ocasionar daños (productos tóxicos, radioactivos).
- Riesgos mayores: relacionados con accidentes y situaciones excepcionales. Sus consecuencias pueden presentar una especial gravedad ya que la rápida expulsión de productos peligrosos o de energía podría afectar a áreas considerables (escape de gases, explosiones).

De estos tres tipos de riesgo, los dos primeros corresponden al tratamiento clásico de la seguridad e higiene en el trabajo, y por su forma de actuar son en general relativamente fáciles de prever. Por el contrario, las características especiales de los riesgos mayores los

convierten probablemente en la contingencia más temible. Actuando con una severidad a veces extrema, estos accidentes pueden tener una característica muy importante: la de ultrapasar los límites de la instalación e incidir sobre la población externa y sobre el medio ambiente.

Son estas características de los riesgos mayores las que han contribuido esencialmente a conferir a la industria química una imagen de peligrosidad y han desarrollado un cierto sentimiento de rechazo en la sociedad. (Casal, 2021)

1.4.2 Métodos cualitativos de análisis de riesgos

Estos métodos, frecuentemente son preliminares y sirven de soporte estructural para los estudios semicuantitativos o cuantitativos.

- Análisis ¿Qué pasa si...? (QPS)

Objetivo: Detectar y analizar de forma cualitativa las desviaciones del proceso y sus variables, respecto de su comportamiento normal previsto, dando lugar a sucesos indeseables. (Campos, 2018; Novoa y Barrera, 2015)

- Análisis de modos de fallos y sus efectos (AMFE)

Objetivo: Establecer los fallos posibles en todos y cada uno de los elementos, equipos (de proceso y de control) en una planta, en los modos de detección de los fallos, sus causas y consecuencias y definir, medidas de protección para los fallos que sean más significativos. (Campos, 2018)

Este método se aplica también para identificar las desviaciones que pueden afectar la calidad de los productos o servicios. (Scarpatti, 2014)

- Análisis funcional de operabilidad (AFO/HAZOP, siglas en español e inglés)

Objetivo: Detectar riesgos, sus orígenes y consecuencias, para establecer las medidas preventivas mediante análisis cualitativo pero sistemático y escrupuloso, considerando la esencia del proceso que son las desviaciones de sus variables y condiciones operacionales. (K. V. A. Rodríguez *et al.*, 2021)

- Análisis cualitativo mediante árboles de fallos (AAF)

Objetivo: Analizar cualitativamente eventos o sucesos de fallo en sistemas complejos mediante su descomposición inductiva en otros escalonadamente más sencillos, hasta llegar a sucesos básicos que pueden considerarse como causas iniciadoras (Calderón, 2016; López *et al.*, 2018; J. V. Rodríguez *et al.*, 2021)

El método se utiliza también en los análisis de seguridad laboral para determinar las causas de accidentes de trabajo. (Rodríguez *et al.*, 2009)

- Análisis cualitativo mediante arboles de sucesos o eventos (AAS)

Objetivo: Analizar cualitativamente eventos o sucesos de fallo en sistemas complejos, partiendo de sus causas iniciadoras (J. V. Rodríguez *et al.*, 2021)

1.4.3 Métodos cuantitativos para el análisis de riesgos

Son métodos detallados que se inician en el origen de los fallos o averías y que consideran las relaciones causa-efecto de forma estructural, secuencial y cuantitativa, así como las relaciones entre las mismas (confluencia o concurrencia). Los más utilizados son los análisis cuantitativos mediante árboles de fallos, árboles de sucesos y análisis de causas y consecuencias.

- Análisis cuantitativo mediante árboles de fallos (ACAF)

Objetivo: Analizar cuantitativamente los eventos o sucesos de fallo en sistemas complejos estimando deductivamente (desde los sucesos básicos al suceso capital) las probabilidades de acontecimiento. (Barrios *et al.*, 2019)

- Método Bow-Tie para el análisis de riesgos

El método Bow-tie toma el nombre por la similitud del diagrama que se elabora para el análisis, con una corbata de lazo/moño o corbatín. Es una manera esquemática de describir y evaluar la ruta de un riesgo, desde las amenazas o causas iniciadoras hasta las consecuencias o impactos finales. Resulta una combinación de dos técnicas diferentes: un árbol de fallos (lado izquierdo) analizando las causas de un accidente o evento tope y un árbol de sucesos o eventos (lado derecho) analizando las consecuencias. Sin embargo, el enfoque del Bow-tie está en las barreras existentes entre las causas y el riesgo (medios y medidas de control preventivo) y las barreras existentes entre riesgo y consecuencias (medios y medidas de mitigación), indicadas mediante rectángulos o barras en posición vertical (Anexo1). (Ormelia, 2016)

- Matrices de riesgo

Constituyen un método simple de categorización del riesgo a partir del análisis combinado de la probabilidad de ocurrencia del evento indeseado y las consecuencias de sus efectos.

Las matrices se construyen en dos ejes, donde un eje representa el incremento de las consecuencias y el otro el incremento de la probabilidad de ocurrencia. El grado de

urgencia o criticidad se establece interceptando ambos ejes. Aunque no es un método que permite cuantificar el riesgo con precisión, en muchos casos es suficiente para establecer prioridades sin ser necesario la realización de un análisis cuantitativo de riesgo (Camejo *et al.*, 2019; Nicolás y Madrid, 2019)

En el anexo 2 se muestra una matriz de riesgo clásica con cuatro niveles de probabilidad de ocurrencia del accidente, o sea que se presente el escenario de riesgo y cuatro niveles de consecuencias.

1.4.4 ALOHA

La probabilidad de accidentes es una base importante para la gestión de riesgos, y cómo determinar la probabilidad de accidentes es un proceso complejo. Una forma eficaz para esto son los programas informáticos, ALOHA (*Areal Locations of Hazardous Atmospheres*) es uno de los modelos ampliamente aceptados para simular la dispersión atmosférica de gases peligrosos y estudios como Dadkani *et al.* (2021), R. Yang *et al.* (2019), Bhattacharya y Ganesh Kumar (2015), Inanloo y Tansel (2015), y utilizan ALOHA con éxito para fines de evaluación de riesgos. (Orozco *et al.*, 2019)

ALOHA es una aplicación de software independiente desarrollada para los sistemas operativos Windows y Macintosh. Es desarrollado y cuenta con el apoyo de la División de Respuesta a Emergencias (ERD), una división dentro de la Administración Nacional Oceánica y Atmosférica (NOAA) en colaboración con la Oficina de Manejo de Emergencias de la Agencia de Protección Ambiental (EPA).

Su objetivo principal es proporcionar al personal de respuestas a emergencias y estimaciones de la extensión espacial de algunos peligros comunes asociados con los derrames de productos químicos. En la respuesta a derrames, ALOHA proporciona estimaciones de la extensión espacial de algunos de los peligros asociados con la liberación accidental a corto plazo de sustancias químicas volátiles e inflamables. También se ocupa específicamente de los peligros para la salud humana asociados con la inhalación de vapores químicos tóxicos, la radiación térmica de los incendios químicos y los efectos de la onda de presión de las explosiones de nubes de vapor. (Jones *et al.*, 2013)

Dado que ALOHA se limita a las sustancias químicas que se transportan por el aire, incluye modelos para evaluar la velocidad a la que una sustancia química se libera de la contención y se vaporiza. Estos modelos de “fuerza de la fuente” pueden ser componentes críticos en el

proceso de evaluación de peligros. ALOHA vincula los modelos de “fuerza de la fuente” con un modelo de dispersión para estimar la extensión espacial de las nubes tóxicas, los vapores inflamables y las nubes de vapor explosivo. (Davis *et al.*, 2021)

1.4.5 Estudios sobre análisis y evaluación de riesgos.

En los últimos 60 años, ha existido un incremento sostenido en cuanto a instalaciones industriales y de servicios que procesan, producen, transportan y almacenan volúmenes elevados de sustancias y compuestos químicos muy peligrosos. Estos, debido a su elevada reactividad química, inflamabilidad o toxicidad, conducen a riesgos que representan los peligros de posibles accidentes mayores.

Según Camejo *et al.* (2019) y J. V. Rodríguez *et al.* (2021) se entiende por “accidente mayor” cualquier suceso tal como: escape de gases, derrame de líquidos tóxicos y/o inflamables, incendio o explosión, que sea consecuencia del desarrollo incontrolado (por fallas o averías) de una actividad o proceso industrial que suponga una situación de riesgo grave, inmediata o diferida para las personas, el medio ambiente y los bienes en el interior o exterior de la instalación, en el que estén implicadas una o más sustancias peligrosas.

Los estudios para el análisis y evaluación de riesgos de procesos con peligro de accidente mayor, constituyen una valiosa herramienta científico-técnica, aplicables tanto en las etapas de diseño y proyecto, como en las de construcción, explotación y mantenimiento.

En Cuba, la realización y actualización de estos estudios, basados en la evaluación de la seguridad en instalaciones con peligro de accidente mayor, están regulados por el Decreto Ley 309/2013. “De la Seguridad Química” y su reglamento, contenido en la Resolución 148/2013. “Reglamento sobre la gestión de los riesgos a la seguridad de procesos en instalaciones industriales con peligro mayor” del Ministerio de Ciencia, Tecnología y Medio Ambiente, así como por la Directiva No.1 “del Presidente del Consejo de Defensa Nacional para la Reducción de Riesgos de Desastres”. (González, 2018)

En la zona industrial de la ciudad de Matanzas diversos investigadores han realizado estudios de análisis y evaluación de riesgos con resultados satisfactorios, entre ellos se encuentra Santana *et al.* (2020) que realiza un estudio en la División Territorial de Comercialización de Combustibles de Matanzas (DTCCM) con el objetivo de determinar el riesgo individual por efecto dominó de accidentes tóxicos, incendios y explosiones que se pueden presentar en un área de procesamiento de hidrocarburos. Para ello desarrolla

técnicas como las redes Bayesiana y Petri para determinar la probabilidad conjunta del efecto dominó a diferentes niveles y los daños causados por toxicidad, respectivamente. También la Empresa cubana de tecnología y medioambiente GAMMA en abril de 2013 efectúa un informe de seguridad y riesgos tecnológicos en la empresa productora de ácido sulfúrico UEB Rayonitro con el objetivo identificar los principales peligros asociados al proceso de producción, almacenamiento y trasiego del ácido sulfúrico. En este informe se utilizaron técnicas de análisis de riesgos como Bow-Tie y ¿Qué pasa si...? Además del software ALOHA para la determinación de la magnitud de la descarga y para la estimación de las consecuencias. Como resultado de la revisión de seguridad se identifican los principales escenarios de accidentes en esta instalación, los cuales son: fuga y explosión de azufre en polvo, incendio de azufre líquido, fuga de SO_2 , fuga de SO_3 y derrame de ácido sulfúrico.

Conclusiones parciales

1. La producción de ácido sulfúrico por doble contacto consiste: primero, en quemar azufre para formar dióxido de azufre; segundo, combinar el dióxido de azufre con oxígeno para formar trióxido de azufre y tercero, combinar el trióxido de azufre con ácido sulfúrico diluido para formar una solución que contenga aproximadamente 98% de ácido sulfúrico.
2. El ácido sulfúrico es uno de los compuestos químicos que más se produce en el mundo ya que se emplea en la obtención de fertilizantes, para la síntesis de otros ácidos y sulfatos, en la industria petroquímica y para la obtención de detergentes y medicamentos, entre otros usos.
3. Se selecciona HYSYS como el simulador a utilizar por la facilidad de su uso, el paquete de funciones termodinámicas que posee y por la confiabilidad de los resultados que ofrece.
4. Se selecciona el software ALOHA para estimar la peligrosidad de ocurrencia del escenario de accidente nube tóxica de vapor de SO_2 y SO_3 debido a los modelos que ofrece para simular con éxito la dispersión atmosférica de gases peligrosos.

CAPITULO II: Materiales y Métodos

El ácido sulfúrico es uno de los químicos industriales más importantes y se utiliza en casi todas las industrias. Se plantea que su uso es un índice que muestra el desarrollo técnico de una nación. La principal función de la UEB Rayonitro es precisamente la obtención de dicho suministro. En este capítulo se muestra la descripción y caracterización de este proceso, además de una explicación detallada de la metodología a seguir para la obtención del modelo de simulación que representa dicha planta.

2.1 Descripción tecnológica del proceso

La producción de ácido sulfúrico en la UEB Rayonitro se basa en el método simple contacto-simple absorción. El azufre llega a la planta generalmente en estado sólido y se almacena en un área abierta con una capacidad para 3000 toneladas. Para el proceso es necesario el azufre en estado líquido por lo que se vierte en el tacho de fusión con capacidad para 150 toneladas. El azufre se funde con la ayuda de serpentines de vapor en la primera sección del tacho. Luego se bombea hasta la segunda sección que por ser laberíntica, favorece que durante el recorrido del azufre se sedimente hasta el 98% de sus impurezas y alcance la temperatura requerida de 120 - 150°C para llegar al horno donde ocurre la combustión. Para la combustión se utiliza el aire seco proveniente de la torre de secado, el cual se impulsa por un soplador y llega al horno con una temperatura aproximada de 50°C, donde se produce una reacción altamente exotérmica y se obtiene como producto una mezcla de gases ($\text{SO}_2 + \text{O}_2 + \text{N}_2$) en un rango de temperatura entre 600 - 620°C, donde el dióxido de azufre (SO_2) es el componente de interés. Al salir del horno, los gases pasan a través de la caldera, la cual tiene dos funciones, reducir la temperatura de los gases, y la producción de vapor saturado que se utiliza en el tacho.

Luego de salir de la caldera, los gases pasan a través de los filtros de gas, los cuales están instalados en paralelo y trabajan a la vez. Estos son filtros mecánicos que utilizan piedra de cuarzo como material filtrante y tienen la función de impedir que llegue a la primera masa del convertidor cualquiera impureza que pudiera venir incorporada en el flujo de gas. Los gases provenientes de los filtros llegan al convertidor, en el interior del cual se encuentran

cuatro masas de pentóxido de vanadio colocadas horizontalmente una debajo de la otra y aisladas entre sí, que actúan como catalizador de la reacción de oxidación por la que el SO_2 se convierte en SO_3 . La temperatura óptima de entrada de los gases a la primera masa de convertidor es de 410 - 440°C. El proceso de conversión genera gran cantidad de calor por lo que se debe evitar que supere los 600°C a la salida de las mismas, para lograr la mayor eficiencia y estabilidad del proceso, para esto se utilizan dos intercambiadores de calor de tubo y coraza que están situados en la parte exterior del convertidor, a los cuales se le hace circular aire húmedo atmosférico procedente de otro soplador. El gas al pasar por la primera masa se extrae y se envía al primer intercambiador, circulando entre los tubos, después que se enfría se incorpora a la segunda masa y a la salida de la misma se extrae nuevamente y se envía al segundo intercambiador para continuar el proceso de enfriamiento. Los gases de salida del segundo intercambiador se reincorporan a la tercera masa del convertidor. El aire a la salida de la tercera masa y antes de entrar en la cuarta, se enfría el gas con aire seco a 50°C procedente de la torre de secado, el cual pasa a través del bypass que se encuentra a la entrada del horno. Los gases salen del convertidor con temperatura aproximada de 440°C y pasan a través de las dos torres enfriadoras de SO_3 , donde se transfiere parte del calor de los gases de salida al aire húmedo atmosférico procedente del segundo soplador, con lo cual los gases logran disminuir su temperatura hasta 140 - 160°C.

Al salir de las torres enfriadoras, el gas con alto contenido de SO_3 llega a la torre de absorción por la parte inferior. A la torre de absorción se le suministra ácido desde los tanques de procesos, a una temperatura de 70 - 75°C. El ácido absorbe el SO_3 y enriquece su concentración hasta 98,3% para luego descender por gravedad hacia los tanques de procesos norte y sur. Los gases de cola del proceso salen de la torre de absorción hacia la chimenea, desde la cual son expulsados a la atmósfera. El ácido contenido en los tanques de procesos mantiene una concentración promedio de 98 - 98,5%. Ambos tanques logran igualar la concentración por estar comunicados entre sí mediante una tubería. Al salir de los tanques, el ácido pasa a través de un intercambiador de calor de cascada denominado enfriador de ácido, al cual se le hace llegar el agua desde un tanque cercano. Este enfriador es necesario, ya que el ácido contenido en los tanques va elevando su temperatura como resultado de las reacciones exotérmicas que se produce al recibir el agua suavizada para

mantener la concentración, por la formación en la torre de absorción y por la reacción del ácido con el aire húmedo en la torre de secado. A la salida de los tanques, parte del ácido se bombea a la torre de secado, que al igual que la torre de absorción, es un recipiente cilíndrico vertical con anillos cerámicos de espirales (*rasching*) en su interior. La torre de secado tiene dos objetivos fundamentales, el secado del aire atmosférico que se utiliza en el horno y la dilución del ácido de recirculación que pasa a los tanques de procesos y posteriormente se bombea a la torre de absorción. El aire húmedo atmosférico se impulsa hacia la torre de secado por una sopladora penetrando desde abajo a contracorriente del ácido. Como resultado, se obtienen el aire seco que reduce la posibilidad de corrosión que causa el gas húmedo en los conductos de la planta; el cual sale por la parte superior del convertidor, y ácido debilitado de concentración 97,5 - 98% que baja por gravedad a los tanques de procesos. La otra parte del ácido enfriado que no es bombeado a la torre de secado pasa de forma regulada y constante hacia los tanques de almacenamiento, los cuales tienen una capacidad de 100 m³ (184 toneladas) cada uno.

En el anexo 3 se muestra el diagrama de flujo del proceso.

2.1. Metodologías para la obtención y validación del modelo de simulación

La base fundamental en la simulación la constituye el diagrama de flujo del proceso, por otro lado, los parámetros de diseño de los equipos y los parámetros operacionales del proceso constituyen el complemento en la conformación del modelo. Para realizar este trabajo se aplica la estrategia general para la simulación digital, la que se divide en tres pasos. (Viera *et al.*, 1988)

- Obtención del modelo de simulación.
- Validación del modelo a través del ajuste del caso base.
- Análisis de sensibilidad del modelo.

2.2.1 Obtención del modelo de simulación

Para obtener un modelo de simulación se deben seguir los siguientes pasos:

1. Construcción del diagrama de flujo de información.
2. Definir el orden de cálculo.
3. Definir los módulos e implementar el simulador.

A continuación, se realiza una explicación más detallada de estos tres aspectos tan fundamentales en la obtención de un modelo de simulación.

Construcción del Diagrama de Flujo de Información (DFI):

La elaboración de un diagrama de flujo de información no es más que un diagrama donde los flujos de masa o energía del proceso son equivalentes a flujos de información (valores numéricos de las variables de las corrientes y parámetros necesarios para definir los módulos), y los equipos del proceso equivalentes a modificaciones de la información que fluye entre ellos. (Himmeblau, 2002)

Los diagramas de flujo se transforman en diagramas de flujo de información (DFI) para la simulación del proceso, teniendo en cuenta la cantidad de módulos que representa a una operación o proceso.

- La información fluye de un módulo a otro a través de las corrientes de materia.
- La confección del diagrama de flujo de información se realiza fácilmente siguiendo de cerca el diagrama de flujo del proceso.
- Para la construcción del DFI se tienen en cuenta todos los equipos y operaciones que intervienen (por ejemplo, las operaciones de mezclado y separación de corrientes).
- Un equipo puede ser simulado por uno o varios módulos.
- Varios equipos pueden ser simulados con un solo módulo.

Determinación del orden de cálculo de los módulos:

Para determinar el orden en que deben ser calculados los diferentes módulos del sistema, utilizando el enfoque secuencial, se utiliza el método de Steward. (Scenna *et al.*, 2015)

El objetivo de este paso es seleccionar el módulo donde se debe comenzar la simulación. Se debe empezar por la unidad que tenga las corrientes de entradas definidas y que permita el cálculo de los restantes módulos de forma consecutiva.

La determinación de la secuencia de cálculo está en dependencia de la presencia o no de corrientes de recirculación en el diagrama de flujo de información.

En el caso del DFI de la planta de ácido sulfúrico no se encuentran corrientes de recirculación. Se puede comenzar a simular por el orden que aparece en la descripción del proceso.

Definir los módulos a utilizar y la información requerida para el cálculo.

1. Selección del modelo termodinámico.

Para comenzar a trabajar con el simulador es necesario seleccionar el modelo termodinámico por el cual será calculado el paquete de propiedades de cada corriente. La

definición de la termodinámica se realiza según el Árbol de decisión de Carlson (1996) que se muestra en el anexo 4.

Se seleccionan las ecuaciones de estado de Peng Robinson modificado (PRSV) como base para estimar las propiedades físicas de cada una de las corrientes del modelo

2. Introducir los componentes al paquete de fluido:

Se escogen simultáneamente de la biblioteca del simulador todos los componentes que se muestran en la siguiente tabla.

Tabla 2.1 Componentes que intervienen en el proceso.

Componentes	Formula Química
Ácido sulfúrico	H ₂ SO ₄
Agua	H ₂ O
Azufre	S ₈
Dióxido de azufre	SO ₂
Nitrógeno	N ₂
Oxígeno	O ₂
Trióxido de azufre	SO ₃

3. Definir el paquete de reacciones:

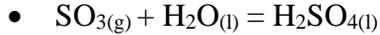
Se crean las reacciones (AddRxn) que tienen lugar en el proceso. Es necesario definir inicialmente el tipo de reacción de acuerdo a la información que se disponga o al objetivo de la investigación. Para el caso que se estudia se selecciona conversión, pues se pretende estudiar el comportamiento del reactor y se cuenta además con la información de la conversión de las reacciones.

La información que se requiere en este tipo de reacciones es: estequiometría de la reacción (con signo negativo los reactantes y con signo positivo los productos), el reactivo limitante, la fase en la que ocurre la reacción y el valor de la conversión.

Este paso se repite para todas las reacciones que se crean dentro de un paquete de reacción (Reaction Set).

Las reacciones que tienen lugar en el proceso son:

- $S_{(l)} + O_{2(g)} = SO_{2(g)}$
- $SO_{2(g)} + \frac{1}{2} O_{2(g)} = SO_{3(g)}$



4. Definir los módulos del simulador que corresponden a cada módulo del DFI.

Para la simulación, el proceso se puede representar como una colección de módulos en los que las ecuaciones (y otra información) que representan cada subsistema o equipo se reúnen y codifican de modo que el módulo pueda usarse aislado del resto del diagrama de flujo y por tanto pueda pasarse de un diagrama de flujo a otro o usarse más de una vez en un mismo diagrama. Un módulo es un modelo de un elemento individual del diagrama de flujo. Cada módulo contiene parámetros de diseño, relaciones de balance de materia y de energía, las velocidades de flujo de los componentes y las temperaturas, presiones y condiciones de fase de cada corriente que entra en el equipo físico representado por el módulo o que sale de él. Desde luego, las interconexiones establecidas para los módulos deben ser tales que sea posible transferir de un módulo a otro la información respecto a las corrientes, composiciones, velocidades de flujo, coeficientes, etcétera.

- Tee (Divisor)
- Conversion reactor (Reactor de conversión)
- Cooler (Enfriador)
- Absorber (Absorbedor)

Módulo TEE

Esta operación de división separa una corriente de alimentación en múltiples corrientes de producto con las mismas condiciones y composición que la corriente de entrada, y se usa para simular T en tuberías y tubos múltiples. El único parámetro requerido para su simulación es la fracción de separación o los flujos de cada corriente de salida.

Este módulo se utiliza para dividir la corriente de aire seco proveniente de la torre de secado en dos corrientes, de la cual el 70% es para el aire de combustión del horno y el 30% se dirige a la cuarta masa del convertidor.

Módulo CONVERSION REACTOR

Este módulo simula un recipiente donde ocurren reacciones químicas. Cada reacción ocurre hasta que la conversión especificada se alcanza o hasta que un reactante limitante es consumido.

Los parámetros necesarios para su cálculo son:

- Paquete de reacciones químicas creadas anteriormente, especificando la conversión.

- Caída de presión en el equipo.
- Temperatura de la reacción (se define por la corriente de alimentación).

Se utilizan cinco módulos de reactores, uno corresponde al horno y los otros cuatro representan las cuatro camas del convertidor.

En la práctica, el azufre sólido es la materia prima de entrada al proceso, que en consecuencia se funde en un fundidor de azufre (tacho), pero en HYSYS, no existe tal operación unitaria. Por este motivo se descarta el tacho como equipo en el modelo de simulación y se alimenta una corriente de azufre líquido directamente como materia prima al horno.

En el proceso se utiliza un convertidor de cuatro masas en serie para convertir el dióxido de azufre en trióxido de azufre. Para la simulación de este equipo se utilizan cuatro reactores en serie.

Módulo COOLER

Los módulos **cooler** son intercambiadores de calor de un solo paso. La corriente de entrada se enfría (o calienta) hasta las condiciones de salida requeridas y la corriente de energía proporciona la diferencia de entalpía entre las dos corrientes. Estos módulos son muy útiles cuando solo interesa conocerse cuánta energía se necesita para enfriar o calentar una corriente de proceso con una utilidad, desconociendo las condiciones de dicha utilidad.

El módulo **cooler** usa las ecuaciones básicas; la diferencia fundamental es el signo convencional para el flujo de energía. Si se especifica el flujo de energía absoluto de la utilidad, el simulador de procesos lo aplicará como sigue:

- Para un **cooler**, la entalpía o el flujo de calor de la corriente de energía será sustraído de la corriente de entrada.

Se utilizan cuatro módulos de enfriadores, los cuales se organizan de la siguiente manera:

- Uno que hace función de caldera para enfriar los gases a la salida del horno.
- Dos entre las masas 1 y 2; 2 y 3 respectivamente.
- Uno que hace función de torre de enfriamiento de SO_3 antes de entrar a la torre de absorción.

Módulo ABSORBER

El módulo **absorber** no es más que una columna de platos perforados donde se realiza la absorción del trióxido de azufre en ácido sulfúrico. En función de la información recibida,

el módulo calcula la presión, la temperatura en cada etapa y los flujos correspondiente a la torre. Los cálculos se basan en los balances de materiales y energía dentro de una torre de platos:

$$N_A = k_y (y_{AG} - y_{Ai}) = k_x (x_{Ai} - x_{AL})$$

Donde:

N_A : Flujo molar de A en función de los coeficientes de transferencia de masa para cada fase.

k_y y k_x : Coeficientes de transferencia de masa para cada fase.

y_{AG} y x_{AL} : Composición para cada fase.

y_{Ai} y x_{Ai} : Composición en la interfase.

Luego en función de los coeficientes globales de la transferencia de masa queda como:

$$N_A = K_y (y_{AG} - y^*_A)$$

Donde:

K_y : Coeficiente global de la transferencia de masa.

y^*_A : Composición en el equilibrio.

Se utilizan dos módulos absorber para simular la torre de absorción y la torre de secado.

La torre de absorción es una columna rellena de anillos *Rasching* de ½ de pulgada de diámetro, donde ocurre la reacción química de absorción del SO_3 para formar H_2SO_4 . HYSYS por defecto tiene programada una torre de platos, por lo que es necesario introducir la utilidad *Tray Sizing* para convertirla en una torre rellena.

La torre de secado es una columna de platos donde solamente ocurre la transferencia de agua de la corriente de aire húmedo a la corriente de ácido, para lograr el secado del aire.

2.2.2 Validación del modelo de simulación

Para la validación del modelo de simulación es necesario realizar el ajuste del modelo al caso base.

Para realizar el ajuste del modelo se divide la planta en tres etapas, la primera etapa correspondiente a la obtención de dióxido de azufre, la segunda etapa correspondiente a la obtención de trióxido de azufre y la tercera etapa correspondiente a la obtención de ácido sulfúrico. Teniendo en cuenta lo anterior se definen tres puntos o corrientes para realizar el estudio:

Punto 1: Corriente de salida de la etapa de obtención de dióxido de azufre (salida del horno)

Punto 2: Corriente de salida de la etapa de obtención de trióxido de azufre (salida del convertidor)

Punto 3: Corriente de salida de la etapa de obtención de ácido sulfúrico (salida de la torre de absorción)

A partir de estos resultados, se realiza un análisis comparativo de las variables: temperatura, flujo y composición del componente de interés en cada una de las corrientes antes mencionadas.

Como criterio de comparación se toma el error relativo menor que 10% entre los resultados de la simulación y las condiciones de diseño. Esto permitirá definir la confiabilidad del modelo para predecir y estudiar la operación de la planta.

La expresión para calcular el error relativo es la siguiente:

$$E_{rel} = \frac{X_{diseño} - X_{calculada}}{X_{diseño}}$$

Donde:

$X_{diseño}$: Valor de cada variable analizada para las condiciones de diseño.

$X_{calculada}$: Valor de cada variable obtenida a través del modelo de simulación.

2.2.3 Análisis de sensibilidad del modelo.

Se realiza un análisis de sensibilidad con el objetivo de conocer la sensibilidad de respuesta del modelo a los cambios de los parámetros que conforman el mismo. (Cutlip y Shacham, 1999)

Para realizar el análisis de sensibilidad los parámetros se varían dentro del intervalo de interés, observándose la respuesta del modelo y a partir de esto se obtiene información acerca de la representación que realiza el mismo del fenómeno real y/o sobre la interacción de los factores en el sistema.

Para realizar el análisis de sensibilidad del modelo, se realizan los siguientes análisis donde se propone estudiar los siguientes casos:

- Estudiar cómo influye un incremento del flujo de la corriente de azufre líquido en la composición másica de SO₂ de la corriente de salida del horno. Se propone variar el flujo de entrada en un rango de 200 a 1000 kg/h con un paso de 100.

- Estudiar cómo influye un incremento del flujo de la corriente de aire seco en la temperatura de la corriente de salida del horno. Se propone variar el flujo de entrada en un rango de 5000 a 15000 kg/h con un paso de 1000.
- Estudiar cómo influye un incremento del flujo de la corriente de aire seco en la composición másica de SO₂ de la corriente de salida del horno. Se propone variar el flujo de entrada en un rango de 5000 a 15000 kg/h con un paso de 1000.
- Estudiar cómo influye un incremento del flujo de la corriente de ácido sulfúrico de almacenamiento en la composición másica del ácido sulfúrico fuerte que sale de la torre de absorción. Se propone variar el flujo de entrada en un rango de 20000 a 200000 kg/h con un paso de 10000.

2.3 Evaluación del proceso de combustión de azufre en el horno

Según (King *et al.*, 2013) la composición y la temperatura del gas producto de la quema de azufre se controlan ajustando en el horno la relación aire seco de entrada/azufre de entrada (AS/S). Para estudiar la relación entre estas variables se plantean los siguientes casos de estudio:

Caso de estudio 1: Influencia de la relación AS/S en la temperatura del gas a la salida del horno.

Caso de estudio 2: Influencia de la relación AS/S en el porcentaje (%) en volumen de O₂ y SO₂ del gas a la salida del horno.

El gas de alimentación al convertidor debe entrar en los lechos del catalizador a la temperatura de fusión (activación) o por encima de ella. De lo contrario, el gas se enfría y solidifica (desactivación) el catalizador, evitando la oxidación del SO₂.

El rango de temperatura debe variar entre 400 y 600 °C para favorecer la oxidación del dióxido de azufre. A 400 °C se acelera la reacción, temperatura a la cual el pentóxido de vanadio se funde y forma una capa fundida sobre los poros del sustrato. A 600 °C se vuelve inactivo cuando la fase fundida reacciona con el sustrato y bloquea los poros.

Para el proceso objeto de estudio se disminuye el flujo de entrada de azufre líquido para variar la relación AS/S a la entrada del horno con el objetivo de verificar el comportamiento de estas variables en el rango de temperaturas que propone la bibliografía.

A partir de los resultados del estudio del horno se puede conocer la composición de dióxido y trióxido de azufre en las diferentes corrientes del proceso para la evaluación de los

posibles escenarios de accidentes utilizando el software ALOHA tal como se muestra en el siguiente epígrafe.

2.4 Evaluación del alcance de los escenarios de accidentes

Areal Locations of Hazardous Atmospheres (ALOHA) es un software reconocido por el Ministerio de Ciencia, Tecnología y Medio Ambiente de Cuba (CITMA) como un buen simulador de escenarios de accidentes químicos y cuenta con alto prestigio internacional para la planificación y entrenamiento ante situaciones de emergencia.

El programa ALOHA emplea en sus cálculos dos modelos de dispersión: un modelo Gaussiano para gases ligeros que ascienden rápidamente, y el modelo de Degadis para gases densos que se dispersan a ras de suelo. Estos modelos predicen la velocidad de emisión de vapores químicos que escapan a la atmósfera desde tuberías rotas, fugas de tanques, charcos de líquidos tóxicos en evaporación o directamente desde cualquier otra fuente de emisión. Por lo que es capaz de estimar cómo una nube de gas peligrosa podría dispersarse en la atmósfera después de una descarga química accidental.

Contiene una base de datos con información sobre las propiedades físicas de unos 1000 productos químicos peligrosos. Sus cálculos representan un balance entre exactitud y velocidad, puesto que se ha diseñado para que puedan usarlo los responsables de los servicios de emergencia.

En esta investigación se estudia el escenario de accidente: formación y dispersión de una nube tóxica de óxidos de azufre (SO_2 y SO_3). Los equipos que se tienen en cuenta para la simulación son el horno y el convertidor, debido a que en ellos se encuentran las mayores concentraciones de estos compuestos. Estos accidentes se simulan para los valores extremos del intervalo de temperatura que recomienda la bibliografía para el buen funcionamiento del convertidor. Mediante sigue la siguiente metodología se realiza la simulación:

Existen siete pasos básicos e imprescindibles en la simulación con ALOHA que son:

1. Indicar la ciudad, fecha y hora del accidente:

Se toma como lugar de referencia la empresa objeto de estudio, UEB Rayonitro de la ciudad de Matanzas, especificando las coordenadas de latitud y longitud. El día 11 de noviembre de 2022 a las 13:41 horas.

2. Seleccionar el producto químico liberado:

Se selecciona el dióxido de azufre y trióxido de azufre como productos químicos a analizar.

3. Introducir las condiciones meteorológicas:

Se selecciona vientos del este a una velocidad de 4,30 m/s y 10 metros de altura con una temperatura de 25°C.

Se selecciona clima claro (cielo despejado) con una humedad relativa de 75%.

4. Describir la descarga del producto químico.

Se introduce el flujo que se maneja del compuesto objeto de estudio.

5. Seleccionar la fuente de emisión.

ALOHA permite modelar escapes químicos de cuatro tipos y fuentes de emisión:

- Emisiones directas a la atmósfera.
- Charcos o piscinas de compuestos químicos en evaporación.
- Tanques
- Tuberías de gases.

Se selecciona para el estudio emisiones directas a la atmósfera.

6. Mostrar en un gráfico las zonas de peligrosidad.

Se dibujan zonas de riesgo que representan el área en cuyo interior la concentración a nivel del suelo de un gas contaminante excederá del Nivel de Preocupación (LOC: *Level of concern*) seleccionado por el usuario, después de iniciarse la descarga accidental.

En el mapa de la zona de riesgo, las líneas de trazos representan la incertidumbre en la dirección del viento, y las líneas continuas alrededor de la zona sombreada representan las líneas de confianza de la dirección del viento.

El nivel de preocupación (LOC) se define como el valor umbral a partir del cual se considera que los seres vivos y bienes materiales dentro de dicha zona se encuentren en peligro. Ese peligro puede ser de varios tipos: toxicidad, inflamabilidad o riesgo de incendio, radiación térmica emitida por un incendio y sobrepresión de una nube de vapor que puede causar una explosión.

7. Determinar los niveles de riesgo en una ubicación específica.

Si se eligen tres niveles de preocupación, ALOHA muestra las zonas de preocupación en tres colores: rojo, naranja y amarillo. La zona roja representa el área de mayor peligro, y las zonas naranjas y amarillas las áreas de menor peligro respectivamente.

ALOHA utiliza Niveles de Referencia de Exposición Aguda (AEGL) como los LOC predeterminados; aunque también da la opción de Pautas de Planificación de Respuesta de Emergencia (ERPG). En esta investigación se emplea ERPG.

Cuando se modela un escenario de dispersión de una nube tóxica, ALOHA sugiere tres valores de distancias por defecto basados en fuentes ampliamente aceptadas. El programa utiliza estos valores umbrales para crear las siguientes zonas de riesgo.

Para el dióxido de azufre:

- Rojo: 25 ppm = ERPG-3
- Naranja: 3 ppm = ERPG-2
- Amarillo: 0.3 ppm = ERPG-1

Para el trióxido de azufre:

- Rojo: 120 mg/m³= ERPG-3
- Naranja: 10 mg/m³= ERPG-2
- Amarillo: 2 mg/m³= ERPG-1

Conclusiones parciales

1. Para la validación del modelo de simulación se propone utilizar las corrientes de salida de cada etapa del proceso de producción de ácido sulfúrico como puntos de referencia para el ajuste del caso base.
2. Se realizan análisis de sensibilidad variando las corrientes de entrada al proceso para comprobar la respuesta del mismo ante los cambios.
3. La variación del flujo de azufre permite modificar la relación aire seco/azufre (AS/S) a la entrada del horno para estudiar el comportamiento de las variables temperatura, y composición de O₂ y SO₂ del gas producto de la combustión.
4. El software ALOHA permite evaluar los escenarios de accidentes de nube tóxica de SO₂ y SO₃ para las diferentes condiciones de temperaturas del gas a la salida del horno.

CAPITULO III: Análisis de Resultados

En este capítulo se presentan los resultados que se obtiene al aplicar las metodologías para la obtención y validación del modelo y a su vez el análisis de sensibilidad del modelo obtenido de la planta de producción de ácido sulfúrico.

3.1. Modelo de simulación de la planta de producción de ácido sulfúrico

La obtención del modelo de la planta de producción de ácido sulfúrico se realiza según las metodologías desarrolladas en el Capítulo II, epígrafe 2.2.

El desarrollo de los restantes módulos que conforman el modelo de simulación se realiza de acorde a la categoría de la operación unitaria que representan.

En la figura 3.1 se muestra el diagrama de flujo de información que se obtiene.

En este modelo se comienza a simular por el modulo que representa la torre de secado a partir de la información que se tiene de la corriente de aire húmedo y de la corriente de ácido sulfúrico proveniente de los tanques de proceso. Estos tanques no son incorporados a la simulación por ser tanques dinámicos con enfriamiento que no se acoplan a la simulación estacionaria que se realiza en esta investigación.

De la corriente de aire seco que sale de la torre de secado se utiliza el 70% del flujo para la combustión en el horno; y el 30% se inyecta a la cuarta masa del convertidor para elevar la conversión en esta.

El siguiente equipo que se simula es el horno de combustión de azufre líquido para la obtención de dióxido de azufre en la corriente de salida, esta corriente pasa por una caldera de recuperación de vapor para reducir la temperatura del gas hasta la temperatura adecuada para la entrada a la primera masa del convertidor. En este equipo ocurre la oxidación del dióxido de azufre para obtener trióxido de azufre. Se simula como cuatro reactores que representan cada una de las camas, donde se fija la conversión de estas. Entre las masas 1-2, 2-3 y a la salida de la cuarta, se ubican intercambiadores de calor para reducir la temperatura del gas. El último equipo que se simula es la torre de absorción, donde ocurre la absorción del trióxido de azufre en el agua contenida en la corriente de ácido sulfúrico que viene de los tanques de procesos. De la torre de absorción salen dos corrientes: los gases de cola que se emiten a la atmósfera y ácido sulfúrico fuerte.

En el anexo 5 se muestra la caracterización de las diferentes corrientes que conforman el proceso obtenidas a través del modelo de simulación.

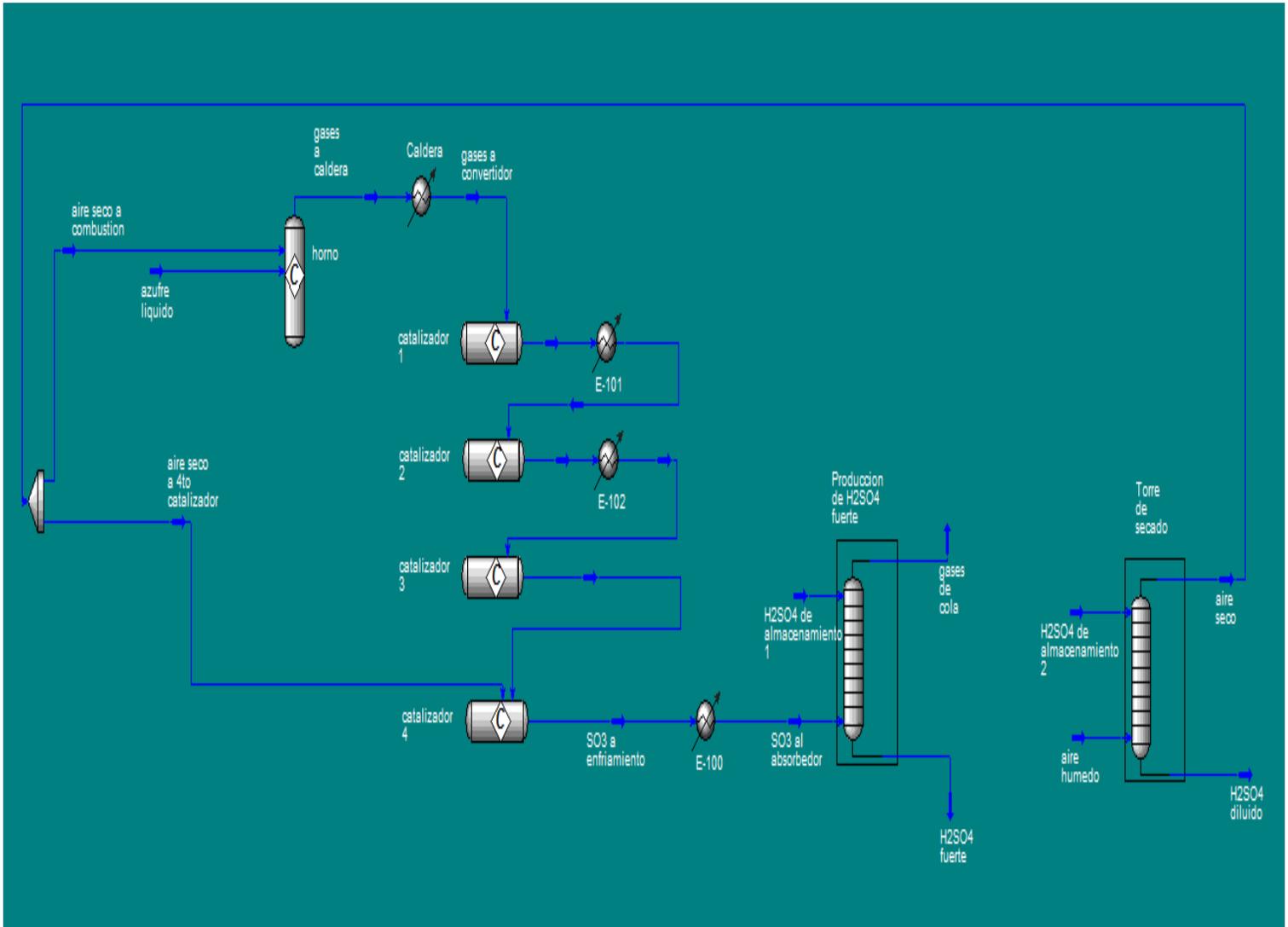


Figura 3.1 Diagrama de Flujo de Información de la planta de producción de ácido sulfúrico.

3.2 Validación del modelo de simulación a través del ajuste del caso base

Con la información de los balances de materia y energía se pueden analizar y comparar las condiciones de diseño y las obtenidas en la simulación. Se determina el error que se comete al estudiar el sistema con el modelo diseñado. Lo que permite definir la precisión del modelo para predecir y estudiar la operación del proceso.

En la Tabla 3.1 se muestran los resultados del ajuste del modelo correspondiente a la primera etapa de obtención del dióxido de azufre, donde se realiza un análisis de diferentes parámetros de operación en la corriente de salida de esta etapa (Punto 1).

Tabla 3.1 Análisis comparativo entre los parámetros operacionales y los parámetros obtenidos por el modelo en el Punto 1

Corriente de salida del horno			
VARIABLES	HYSYS	Parámetros operacionales	Error (%)
Flujo de gas (kg/h)	6596,22	6508,69	1,34
Temperatura (°C)	640,00	748,75	14,52
Composición másica del dióxido de azufre (%)	16,5539	16,8000	1,46

En la Tabla 3.1 se aprecia que los errores que se cometen al simular no superan el valor de 2% en el caso del flujo de gas y la composición másica del dióxido de azufre comparado con las condiciones de operación. En el caso de la temperatura, el error es ligeramente superior al 10% lo cual no afecta el ajuste general del modelo, porque esta corriente después de ser enfriada en la caldera entra al convertidor a un valor de temperatura que se encuentra en el rango establecido por la bibliografía que oscila entre 400 - 600°C para el buen funcionamiento de la oxidación catalítica del dióxido de azufre en el convertidor. Se sugiere que para la continuidad de la investigación se perfile el ajuste de esta variable.

En la Tabla 3.2 se muestran los resultados del ajuste del modelo correspondiente a la segunda etapa del proceso, que corresponde a la obtención de trióxido de azufre, donde se realiza un análisis de diferentes parámetros de operación en la corriente de salida del convertidor (Punto 2).

Tabla 3.2. Análisis comparativo entre los parámetros operacionales y los parámetros obtenidos por el modelo en el Punto 2

Corriente de salida del convertidor			
VARIABLES	HYSYS	Parámetros operacionales	Error (%)
Flujo de gas (kg/h)	9188,90	9970,40	7,84
Temperatura (°C)	362,14	359,00	0,87
Composición másica del trióxido de azufre (%)	14,6281	13,5000	8,36

En la Tabla 3.2 se aprecia que los errores que se cometen al simular el convertidor no superan el valor de 10% comparado con las condiciones de operación, lo cual demuestra que el modelo representa adecuadamente la etapa de obtención de trióxido de azufre.

En la Tabla 3.3 se muestra los resultados del ajuste del modelo correspondiente a la tercera etapa de obtención de ácido sulfúrico, donde se realiza un análisis de diferentes parámetros de operación en la corriente de salida de la torre de absorción (Punto 3).

Tabla 3.3. Análisis comparativo entre los parámetros operacionales y los parámetros obtenidos por el modelo (Punto 3)

Corriente de salida de la torre de absorción			
Variables	HYSYS	Parámetros operacionales	Error (%)
Flujo de líquido (kg/h)	129148,42	129437,42	0,22
Temperatura (°C)	79,54	81,00	1,81
Composición másica del ácido sulfúrico (%)	98,7771	98,5500	0,23

En la Tabla 3.3 se aprecia que los errores que se cometen al simular no superan el valor de un 2 % comparado con las condiciones de operación, el cual se encuentra por debajo del valor de 10 % permisible. Esto demuestra que el modelo representa adecuadamente la etapa de obtención de ácido sulfúrico.

Se puede decir que el modelo de simulación obtenido se ajusta al caso base debido a que en la mayoría de las variables se obtienen valores de errores por debajo del 10 % para las tres etapas en las que se subdivide el proceso.

3.3 Análisis de sensibilidad del modelo de simulación de la planta de producción de ácido sulfúrico

Una vez que se comprueba el ajuste del modelo al caso base se realiza el análisis de sensibilidad del modelo para comprobar la respuesta del mismo ante los cambios que se producen, para esto se realizan cuatro estudios.

Estudio 1: Relación entre el flujo de azufre líquido alimentado al horno y la composición másica de dióxido de azufre (SO₂) de la corriente de salida del horno.

Composicion SO2 vs Flujo de azufre

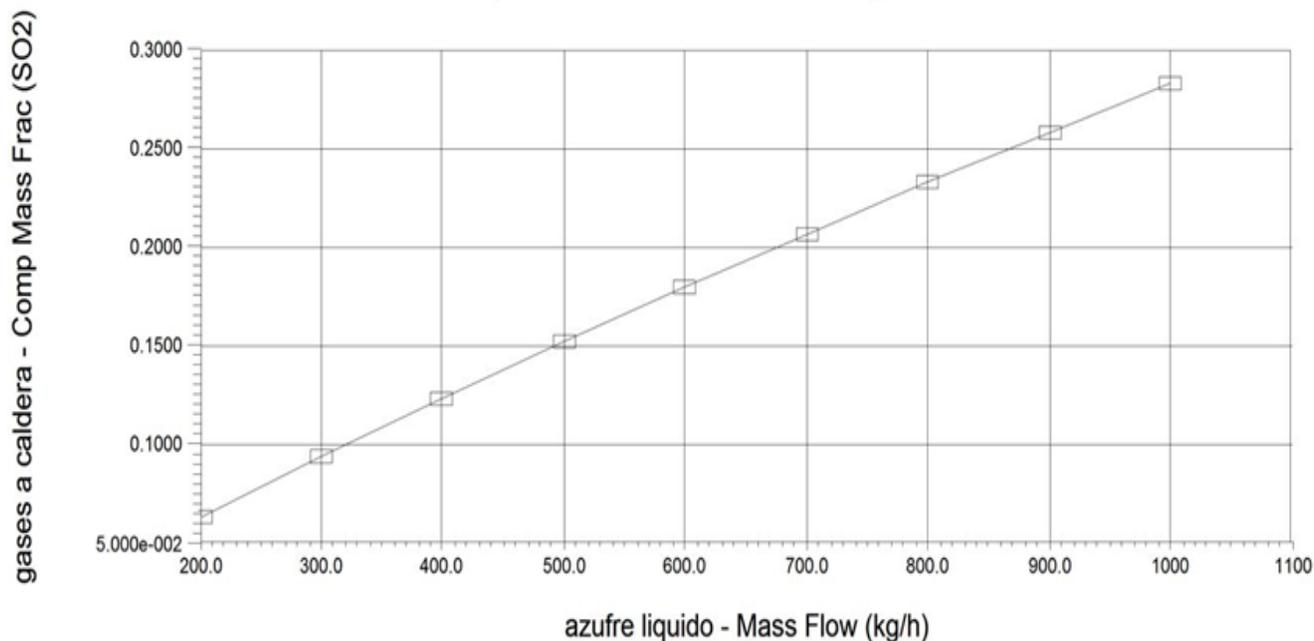


Figura 3.2 Comportamiento de la composición másica de dióxido de azufre ante un cambio en el flujo de alimentación de azufre.

En la figura 3.2 se puede apreciar que a medida que aumenta el flujo de azufre líquido aumenta la composición de dióxido de azufre a la salida del horno. Este comportamiento es el esperado porque el azufre es la sustancia limitante en esta reacción, al aumentar este flujo con el oxígeno presente en exceso se favorece la formación de mayor cantidad de dióxido de azufre.

Estudio 2: Relación entre el flujo de aire seco alimentado al horno y temperatura de la corriente de salida del horno.

Como se observa en la figura 3.3 al aumentar el flujo de aire seco que entra al horno disminuye la temperatura del gas de salida. Esto se debe a que el flujo de aire es mucho mayor que el flujo de azufre de entrada, a la vez que su temperatura es menor, como consecuencia el aire en exceso absorbe el calor de combustión del azufre.

T gases salida horno vs Flujo AS

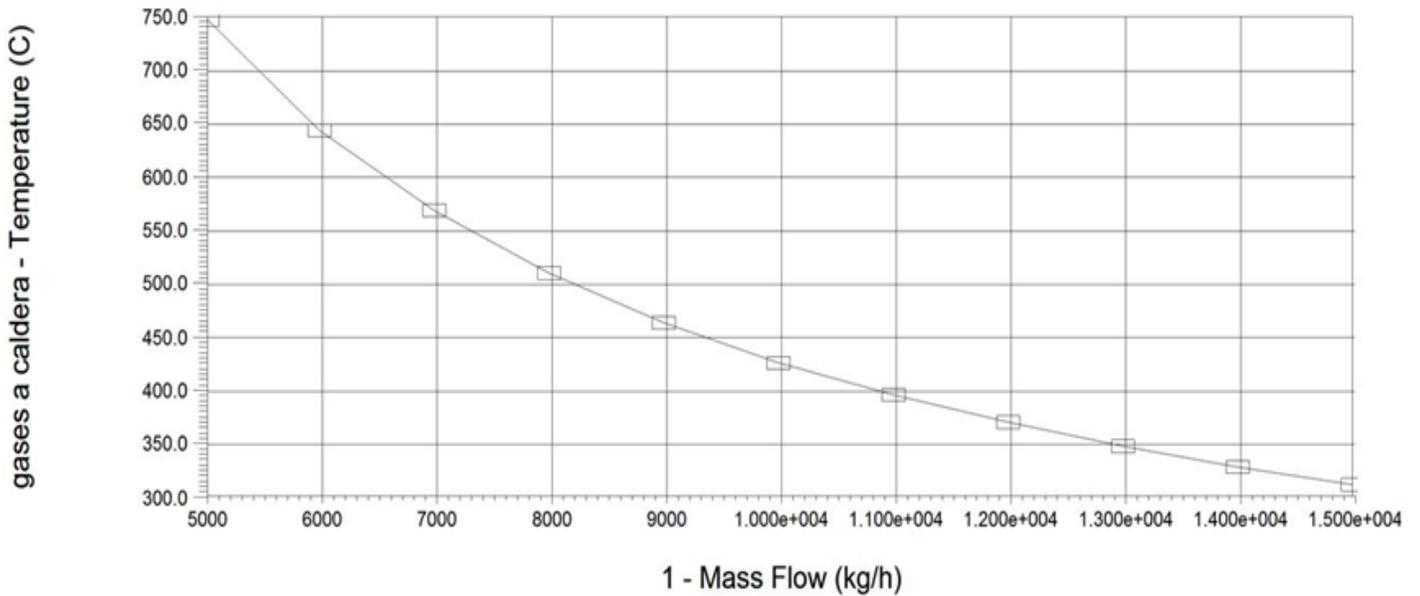


Figura 3.3 Comportamiento de la temperatura de los gases a la salida del horno ante un cambio en el flujo de alimentación de aire seco.

Estudio 3: Relación entre el flujo de aire seco alimentado al horno y la composición másica de dióxido de azufre (SO_2) de la corriente de salida del horno.

Composicion SO2 vs Flujo AS

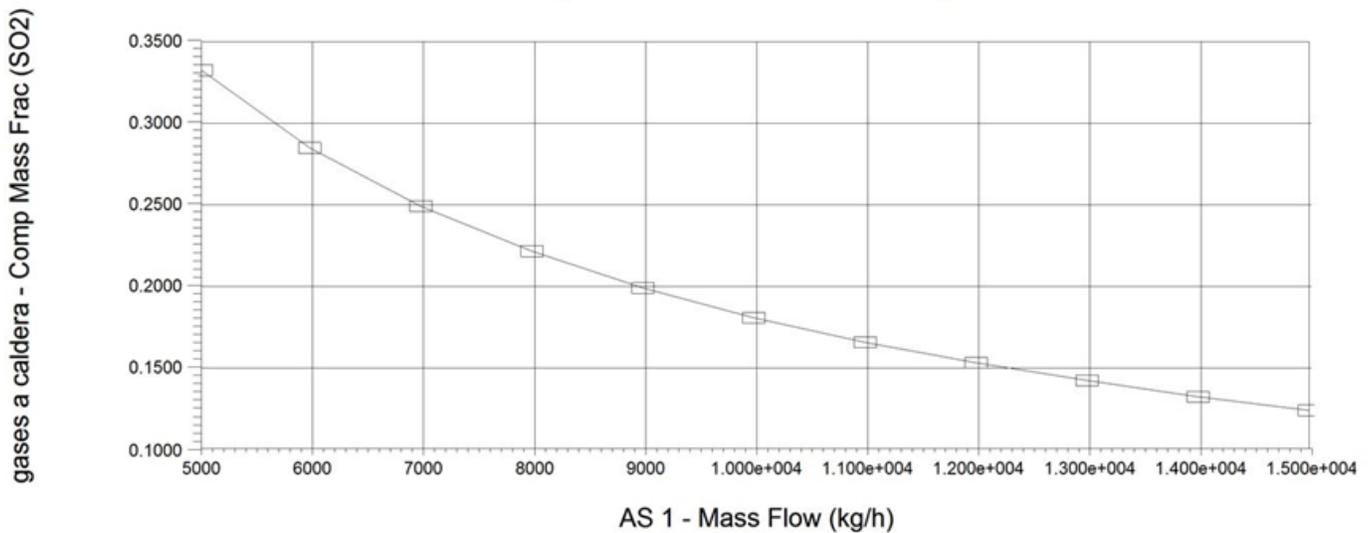


Figura 3.4 Comportamiento de la composición másica de dióxido de azufre ante un cambio en el flujo de alimentación de aire seco.

Como se muestra en la figura 3.4 al aumentar el flujo de aire que entra al horno disminuye la composición másica de dióxido de azufre en el gas de salida. El aumento de aire conlleva al aumento del flujo de oxígeno al proceso. La relación estequiométrica de oxígeno y dióxido de azufre en la ecuación de combustión del azufre es 1:1 lo cual implica que el consumo de 1 kmol de O_2 produce 1 kmol de SO_2 . Para que la relación entre estos dos compuestos se mantenga igual a 1 necesariamente al aumentar la cantidad de uno de ellos debe disminuir la del otro. Por tanto, en la figura se evidencia el comportamiento adecuado entre estas variables.

Estudio 4: Relación entre flujo de la corriente de ácido sulfúrico de almacenamiento y la composición másica del ácido sulfúrico fuerte que sale de la torre de absorción.

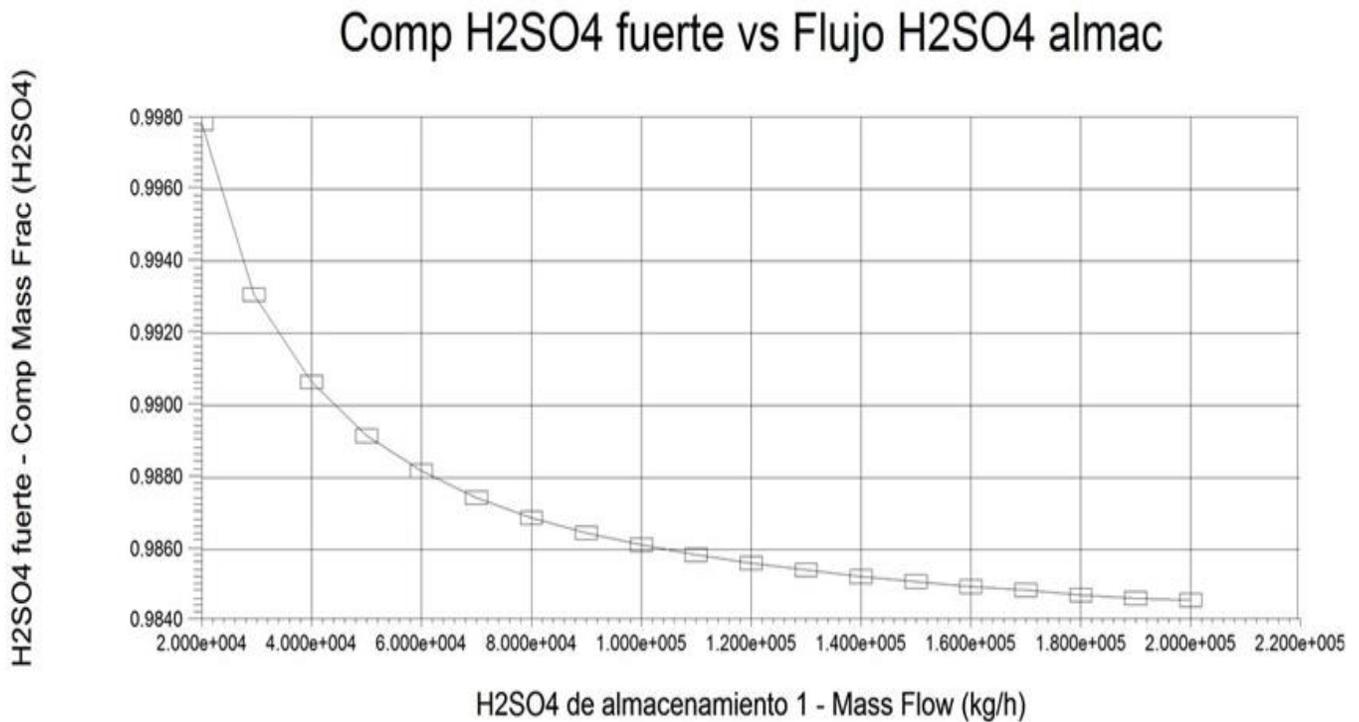


Figura 3.5 Comportamiento de la composición másica del ácido sulfúrico fuerte que sale de la torre de absorción ante un cambio en flujo de la corriente de ácido sulfúrico de almacenamiento.

En la figura 3.5 se muestra como a medida que aumenta el flujo de ácido sulfúrico de almacenamiento disminuye la composición del ácido sulfúrico fuerte que sale de la torre de absorción. Esto se debe a que en este equipo lo que ocurre es la absorción del SO_3 en el agua contenida en el ácido sulfúrico de almacenamiento, si el flujo de SO_3 que es la

sustancia que se transfiere se mantiene constante y el de ácido que es la sustancia disolvente aumenta trae como consecuencia la dilución del ácido producto final y por tanto se obtiene un ácido débil, de baja concentración.

A modo de conclusión se puede decir que el modelo de simulación que se obtiene representa adecuadamente la planta de producción de ácido sulfúrico objeto de estudio debido a que la validación se realiza de forma correcta pues los errores cometidos entre las variables de operación y las variables de simulación no superan el 10% y los análisis de sensibilidad realizados responden de manera esperada y acertada ante los cambios que se producen.

3.4 Evaluación del proceso de combustión de azufre en el horno

Dentro de los equipos principales en el proceso de producción de ácido sulfúrico se encuentra el horno de combustión cuya función es convertir el azufre en dióxido de azufre como primera etapa en la formación del ácido, de ahí la importancia de estudiar el funcionamiento de este equipo, para lo cual se evalúan dos casos de estudios y sus resultados se muestran a continuación:

Caso de estudio 1: Influencia de la relación aire seco de entrada/azufre de entrada (AS/S) en la temperatura del gas a la salida del horno. Manteniendo fijo el flujo de aire seco de entrada al horno y disminuyendo el flujo de azufre de entrada al horno.

Como se observa en la figura 3.7 la temperatura de los gases de salida disminuye a medida que aumenta la relación AS/S. Esto se debe a que el exceso de aire en el gas de salida absorbe el calor de oxidación del azufre, y aumenta con una proporción creciente de AS/S. La disminución de la relación AS/S de la quema de azufre aumenta la temperatura del gas del producto. Si esto se lleva demasiado lejos (es decir, para aumentar el % de SO₂ en el gas), se puede dañar la caldera o el horno de combustión de azufre. (King *et al.*, 2013)

En el proceso objeto de estudio la relación AS/S tiene un valor de 11,06. A través del modelo de regresión ajustado para la curva exponencial que se muestra en la figura 3.7 se puede determinar que la temperatura de operación del horno es de 650,81°C, que comparada con la temperatura de la corriente a la salida del horno obtenida por HYSYS (640°C, valor que se puede observar en el anexo 5) posee un error relativo de 1,68%.

De igual manera puede estimarse a partir del modelo de regresión el valor de la relación AS/S que se obtendría si el horno operara a una temperatura de 400°C. El valor que se obtiene para esta relación es igual a 20, el cual se corrobora por la figura 3.7.

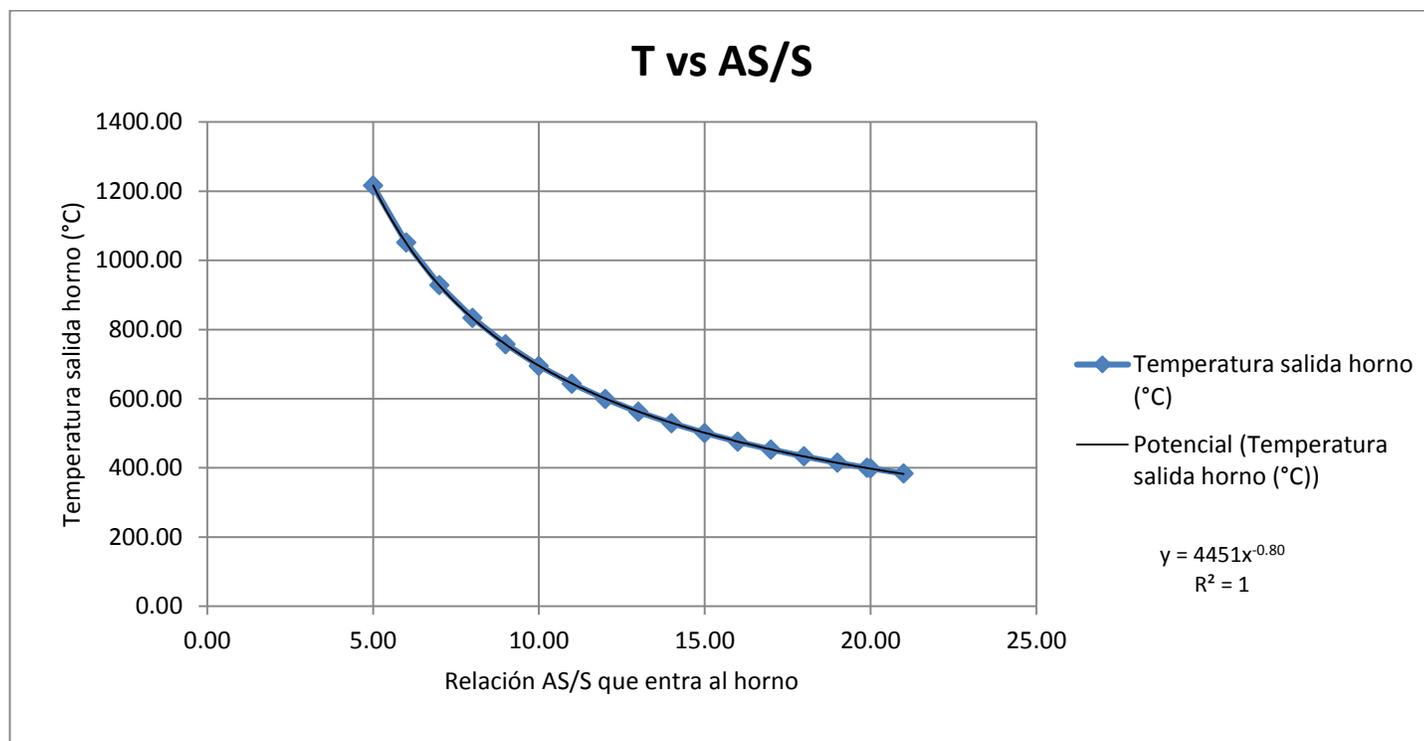


Figura 3.7 Comportamiento de la temperatura del gas a la salida del horno ante la influencia de la relación AS/S que entra al horno.

Caso de estudio 2: Influencia de la relación aire seco de entrada/azufre de entrada (AS/S) en el porcentaje (%) en volumen de O₂ y SO₂ del gas a la salida del horno. Manteniendo fijo el flujo de aire seco de entrada al horno y disminuyendo el flujo de azufre de entrada al horno.

Según (King *et al.*, 2013) el gas que sale del horno para propiciar una oxidación catalítica más eficiente debe contener 12% en volumen de SO₂, 9% en volumen de O₂ y 79% en volumen de N₂. Para obtener estas composiciones se recomienda una relación de O₂/SO₂ de % en volumen de al menos 0,75–1.

Si se disminuye la relación AS/S aumenta el % en volumen de SO₂ esto trae como consecuencia un gas enriquecido en SO₂ y por tanto la reducción del volumen de gas que debe soplar a través de la planta por tonelada de producto, que a su vez reduce la energía de soplado y los requisitos de tamaño de equipo lo que minimiza el costo de capital.

Desafortunadamente, la disminución de la relación AS/S también disminuye la relación O_2/SO_2 del gas porque son directamente proporcionales, esto reduce potencialmente la eficiencia de oxidación del SO_2 catalítico.

Como se puede observar en la figura 3.8 mientras se aumenta la relación AS/S aumenta la concentración de O_2 y disminuye la de SO_2 . Para el proceso en estudio el % en volumen de SO_2 es 10,74%, de O_2 es 10,16% y de N_2 es 77,79%. Con estos valores se obtiene una relación de O_2/SO_2 de 0,945 cercana al límite superior de este intervalo, pero se encuentra dentro del rango establecido y favorece la oxidación catalítica del SO_2 .

A partir de la figura 3.8 también puede determinarse el punto de operación de la planta el cual coincide con el punto de intersección entre las curvas que muestran la composición de O_2 y SO_2 .

Para una temperatura de $400^\circ C$ en la figura 3.7 se determinó que la relación AS/S es igual a 20, con este valor se puede determinar en la figura 3.8 que la composición de O_2 y SO_2 es 0,1333 y 0,061 respectivamente.

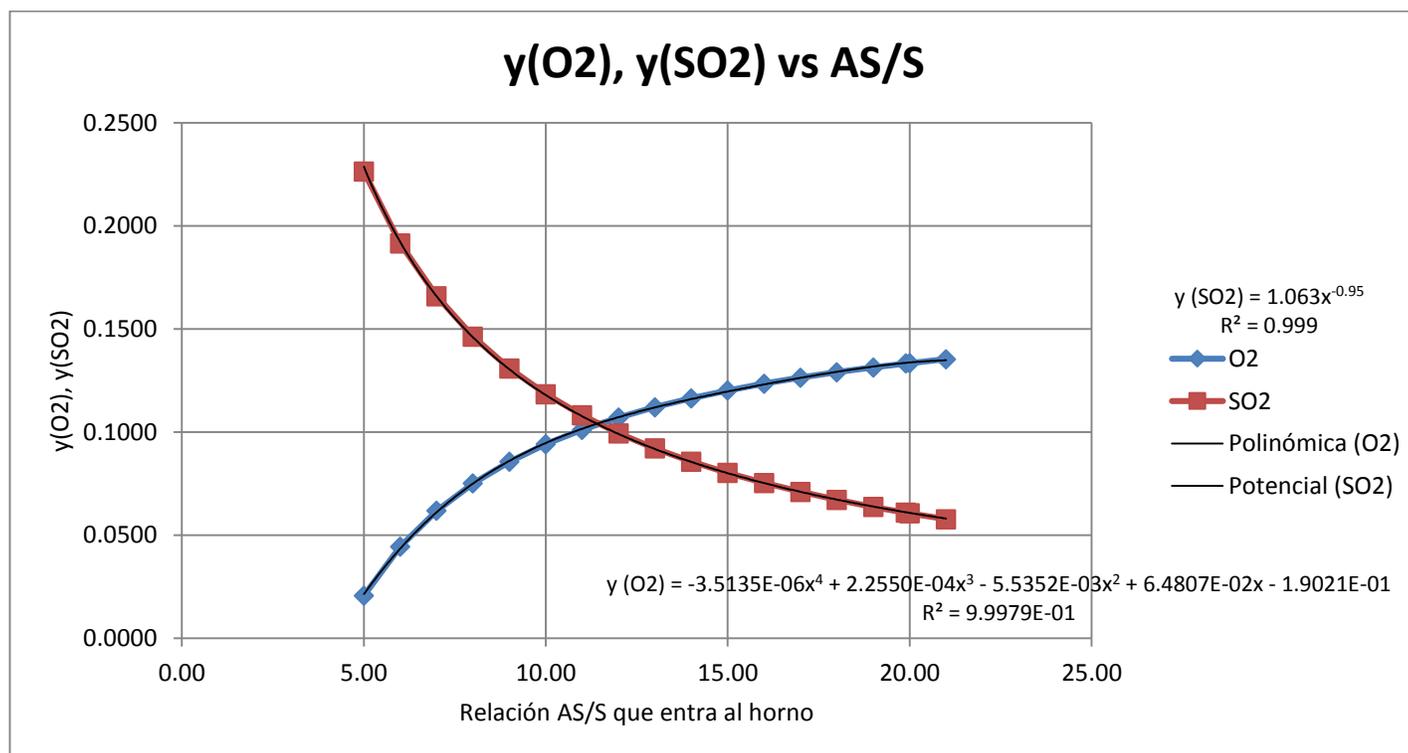


Figura 3.8 Comportamiento del porcentaje (%) en volumen de O_2 y SO_2 del gas a la salida del horno ante la influencia de la relación AS/S que entra al horno.

Los resultados de la evaluación del proceso de combustión de azufre en el horno se resumen en la siguiente tabla.

Tabla 3.4 Resultados que se obtienen en la evaluación del proceso de combustión de azufre en el horno.

Flujo de azufre (kg/h)	Relación AS/S	Temperatura (°C)	% en volumen de O₂ (%)	% en volumen de SO₂ (%)
546,80	11,06	640	10,16	10,74
304,01	20,00	400	13,33	6,10

Se puede concluir que al aumentar la relación AS/S de entrada:

- aumenta la concentración de O₂ del gas producto
- disminuye la concentración de SO₂ del gas producto
- disminuye la temperatura del gas producto

3.5 Evaluación del alcance de los escenarios de accidentes

Las simulaciones en el software ALOHA, se realizan con el objetivo de obtener los diferentes valores de alcance y concentración que tiene el accidente nube tóxica de vapor a través del radio de acción.

La evaluación de los escenarios de accidente se realiza en el sistema horno-caldera y convertidor. El sistema horno-caldera opera además de agua y vapor, con gases donde predomina el dióxido de azufre, el convertidor con trióxido de azufre que se produce. En dependencia de las sustancias que están presentes, las condiciones de operación y las características tecnológicas de los equipos, serán los posibles escenarios de accidentes que se pueden efectuar.

Para la realización de las corridas en ALOHA se tuvo en cuenta las variables meteorológicas según Orozco *et al.* (2019), la dirección del viento es Este que es la de mayor frecuencia y mayor velocidad en la zona donde se ubica la UEB Rayonitro como se puede observar en el anexo 6.

3.5.1. Escenario nube tóxica de vapor de SO₂ para el sistema horno-caldera.

Uno de los escenarios de accidentes que representa un gran peligro para la vida humana y el medio ambiente lo constituye la formación y propagación de una nube tóxica, pues además del alcance que puede llegar a tener, sus efectos pueden ser severos para la vida humana y el medio ambiente. (Gai *et al.*, 2018)

En ALOHA se simulan los dos escenarios que se muestran en la tabla 3.4 para los extremos de temperatura de funcionamiento del convertidor.

La propagación que puede llegar a tener la formación de una nube tóxica de dióxido de azufre, además de la correspondencia entre su concentración, y la distancia se muestra en la figura 3.9a y 3.9b, respectivamente.

El eje X indica la distancia a la fuente y el eje Y el ancho de la nube. Las líneas negras muestran el área probablemente afectada teniendo en cuenta las estadísticas de variación.

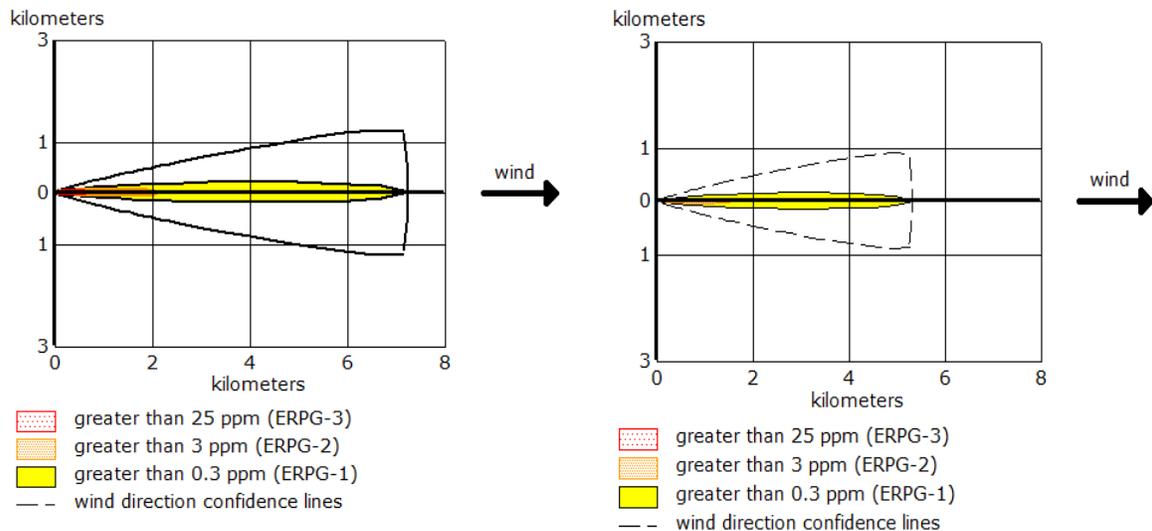


Figura 3.9a Escenario de accidente nube toxica de SO₂ para una temperatura de 640°C.

Figura 3.9b Escenario de accidente nube toxica de SO₂ para una temperatura de 400°C.

Las figuras evidencian el gran alcance que puede tener la ocurrencia de una nube tóxica de vapor en el sistema horno-caldera.

En la figura 3.9a la zona roja de preocupación se extiende 0,68 km, en esta franja se tienen valores mayores 25 ppm, lo que implica el nivel de preocupación ERPG-3 donde a este nivel las personas pueden estar expuestas hasta 1 hora sin experimentar o desarrollar efectos potencialmente mortales para la salud. La franja naranja con valores de 3 ppm que equivale a ERPG-2 llega hasta 2,1 km, lo que puede provocar efectos o síntomas irreversibles adversos para la salud, mientras que la amarilla que permite una concentración superior a 0.3 ppm (ERPG-1) alcanza una distancia mayor de 7 km, provocando efectos leves o transitorios en las personas sin percibir un olor claramente definido.

Mientras, en la figura 3.9b las emisiones de la nube toxica son menores por lo que la extensión de esta también es menor, abarcando 5,3 km. En este caso el mayor peligro se encuentra en una zona más reducida de solo 0,5 km.

Estos resultados se superponen en un mapa de la zona de estudio que incluye la ciudad de Matanzas para establecer el alcance de la nube tóxica, pronosticar los niveles de exposición en el área afectada y elaborar los planes de contingencia para la población afectada.

En la figura 3.10a y 3.10b se muestran las emisiones estimadas anteriormente sobre el mapa de la zona.

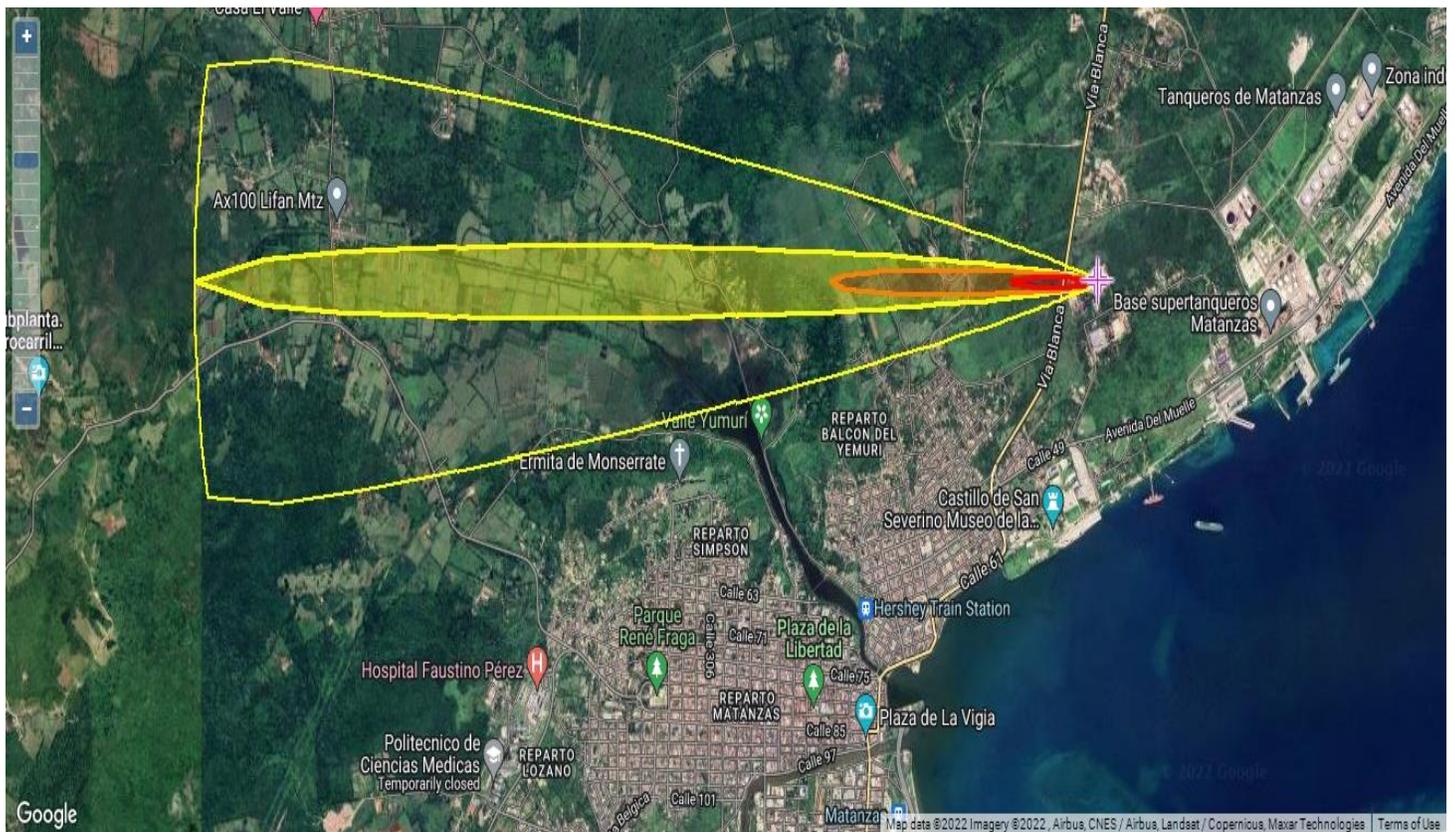


Figura 3.10a Escenario de accidente nube toxica de SO₂ para una temperatura de 640°C.

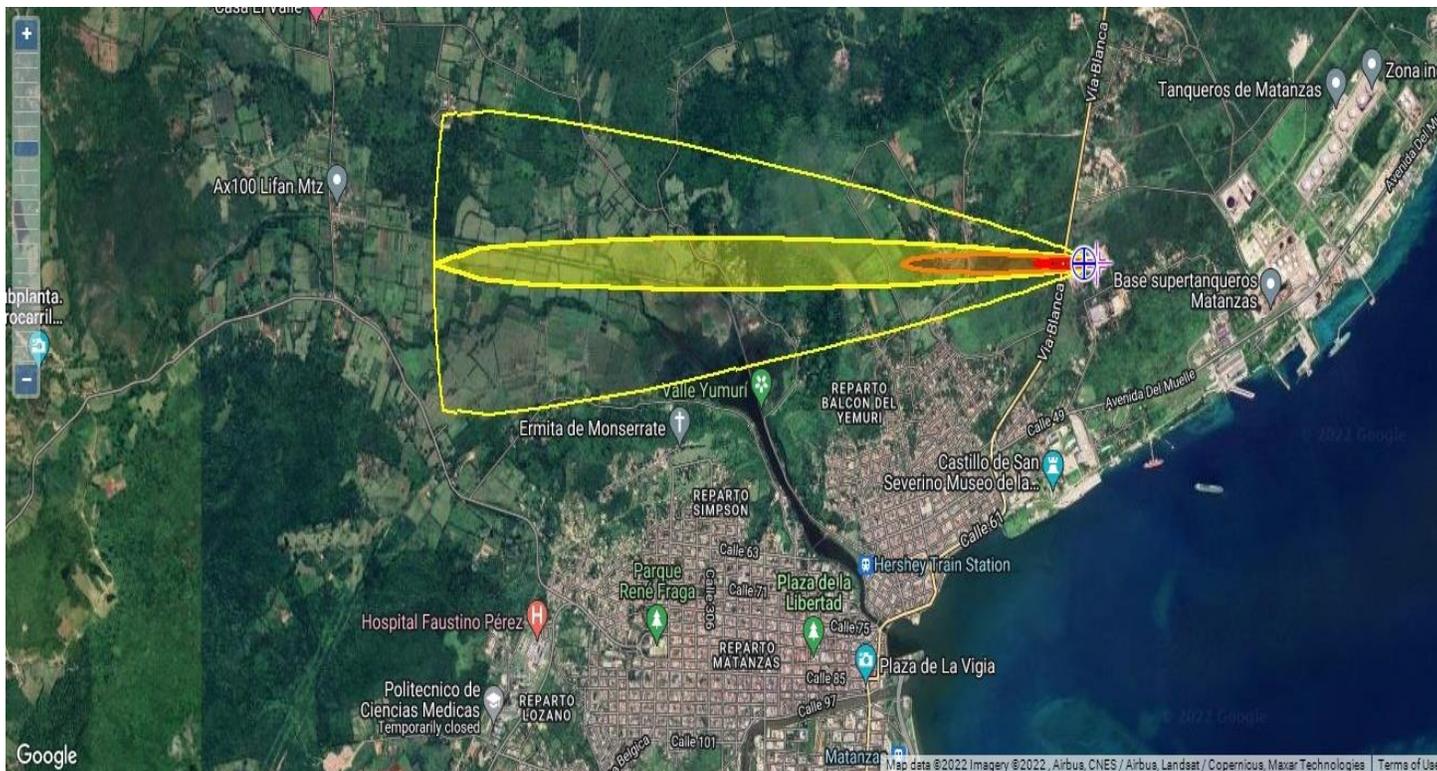


Figura 3.10b Escenario de accidente nube toxica de SO₂ para una temperatura de 400°C.

En las imágenes se puede observar que en ambos casos la nube tóxica se dirige hacia la zona del Valle de Yumurí no afectando la zona urbana, específicamente los barrios Versailles y Dubrocq que son los más cercanos a la empresa. Sin embargo, es necesario tomar precauciones en la zona del Valle de Yumurí por la existencia de pequeños asentamientos poblacionales.

3.5.2. Escenario nube tóxica de vapor de SO₃ para el convertidor.

En la figura 3.11a se puede observar que la zona roja de preocupación se extiende 0,54 km con una concentración mayor de 120 mg/m³ (36,7 ppm), la zona naranja con valores de 10 mg/m³ (3,1 ppm) llega hasta 2,1 km mientras que la zona amarilla se extiende 4,9 km con concentraciones mayores de 2 mg/m³ (0,6 ppm)

En la figura 3.11b la dispersión de la nube es menor llegando hasta 3,6 km la zona amarilla. El límite de mayor preocupación se extiende 0,41 km.

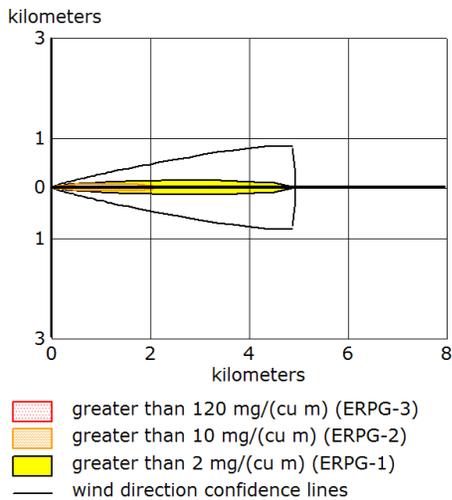


Figura 3.11a Escenario de accidente nube toxica de SO_3 para una temperatura de 640°C .

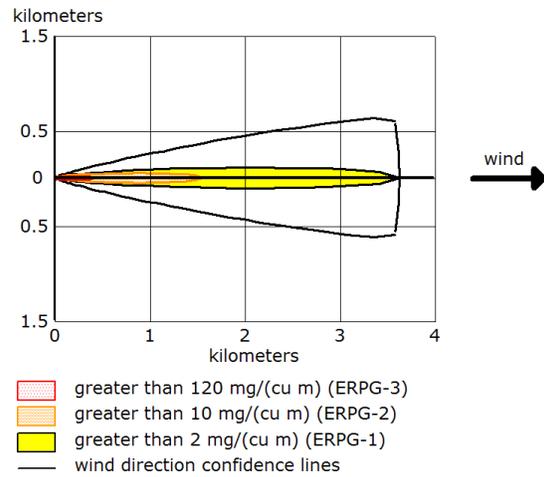


Figura 3.11b Escenario de accidente nube toxica de SO_3 para una temperatura de 400°C .

En la figura 3.12a y 3.12b se muestran las emisiones para el trióxido de azufre estimadas anteriormente sobre el mapa de la zona.

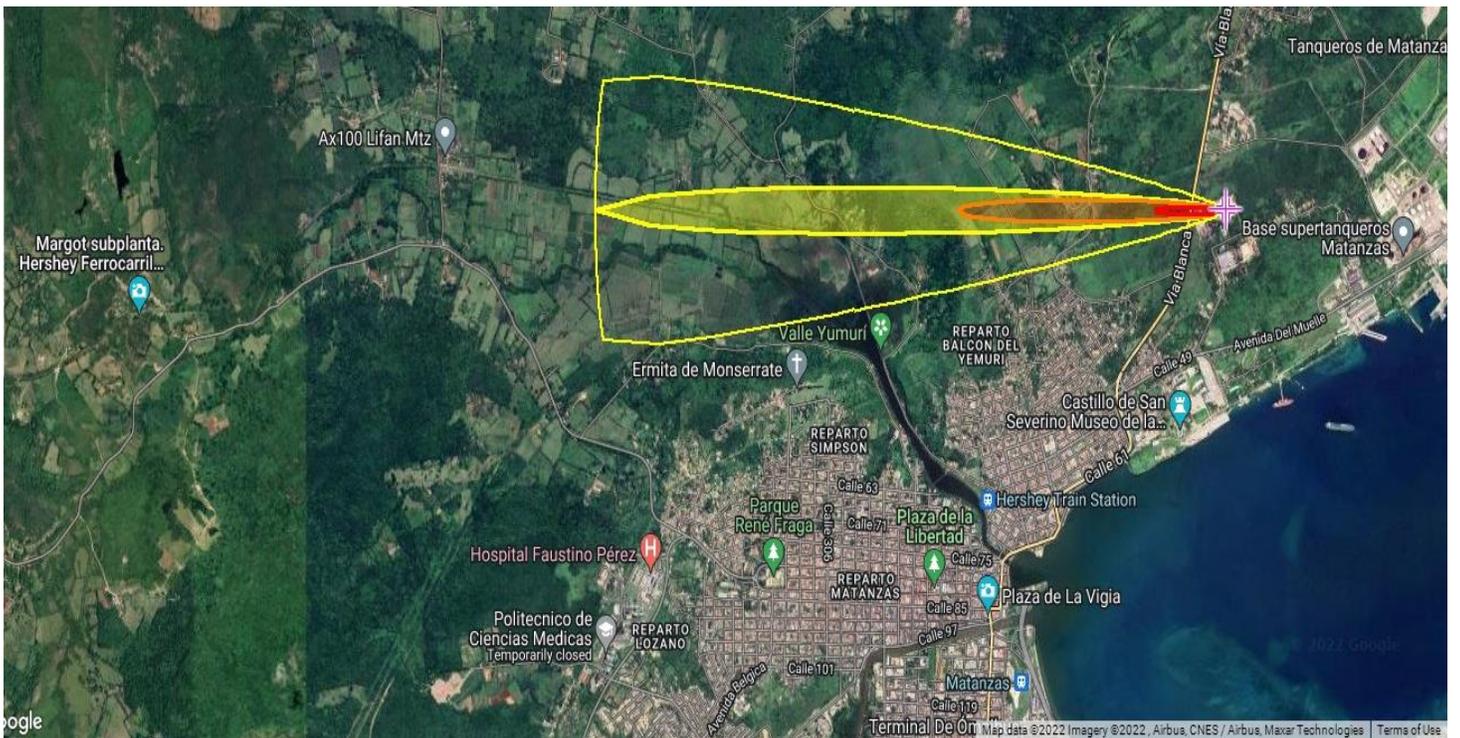


Figura 3.12a Escenario de accidente nube toxica de SO_3 para una temperatura de 640°C

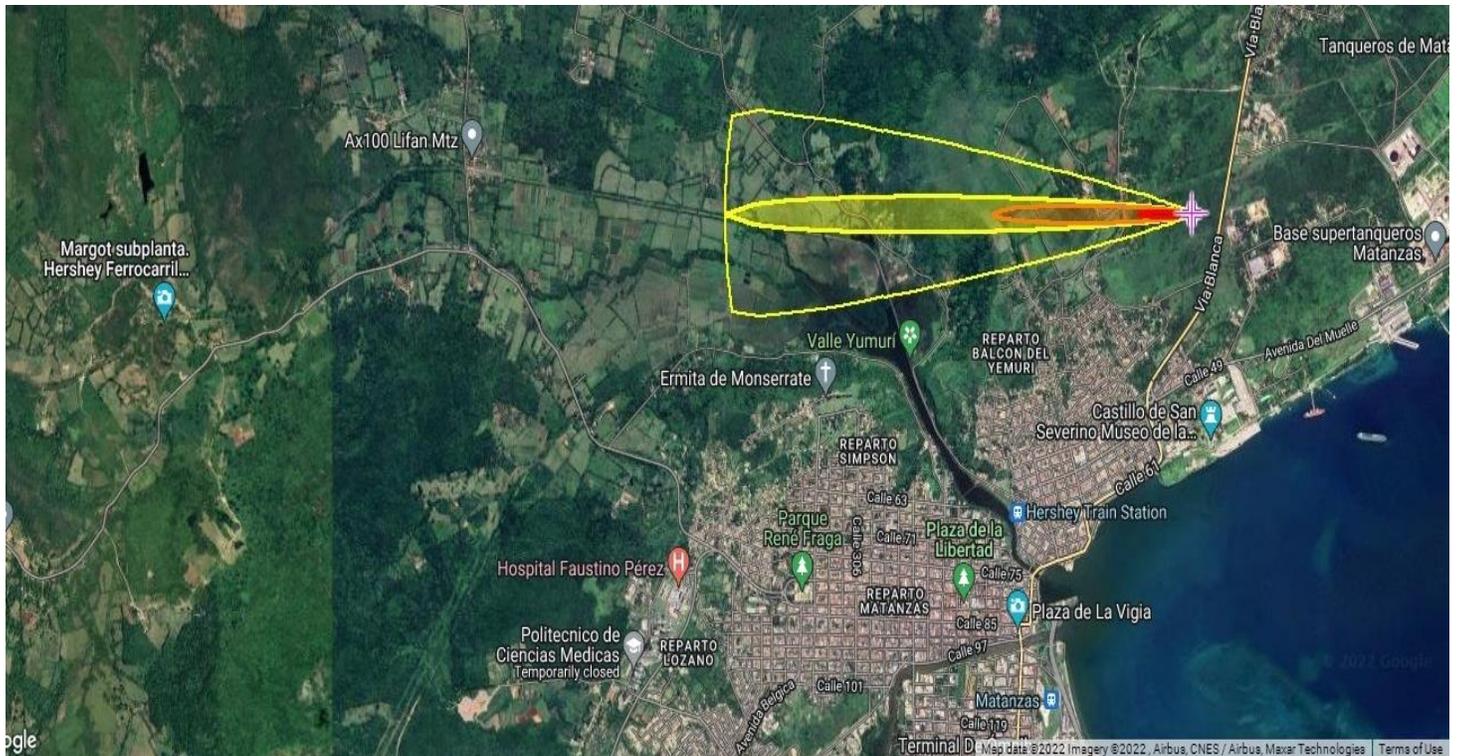


Figura 3.12b Escenario de accidente nube toxica de SO_3 para una temperatura de 400°C

De igual manera, la nube toxica de trióxido de azufre se dirige hacia el Valle de Yumurí sin afectaciones a las zonas urbanas de la ciudad de Matanzas.

Es válido aclarar que, aunque las emisiones de trióxido de azufre son menores en comparación con las de dióxido de azufre, se encuentran más concentradas lo que puede provocar mayores consecuencias para la salud de las personas y animales afectados, y para el medio ambiente.

3.6 Consecuencias de las nubes toxicas de óxidos de azufre

Los efectos por contacto o inhalación del trióxido de azufre pueden ser severos y muy perjudiciales para la salud. Estos pueden ser desde quemaduras en la piel y los ojos hasta problemas respiratorios. La inhalación del SO_3 puede provocar edema pulmonar. El umbral promedio de olor es de 0,1 ppm lo que significa que por debajo de esta concentración los efectos del gas no son perceptibles. Para mayores concentraciones los síntomas pueden ser:

- 0,125 – 0.50 ppm: irritación leve de las vías respiratorias.
- 1,5 – 2,5 ppm: olor desagradable y dificultad para respirar.
- 10 – 20 ppm: obstrucción de las vías respiratorias, imposibilidad para respirar.

En cuanto al dióxido de azufre los informes de casos humanos después de su inhalación han descrito ardor en la nariz y la garganta, opresión en el pecho, disnea y obstrucciones graves de las vías respiratorias. Algunos de estos síntomas pueden revertirse parcialmente dos años después de la exposición. Otros síntomas informados son bronquitis, desprendimiento de la mucosa de las vías respiratorias grandes y pequeñas junto con edema alveolar hemorrágico. La hiperactividad bronquial y la fibrosis pulmonar pueden desarrollarse después de una sola exposición a una concentración muy alta de SO₂. (Wigenstam et al., 2016)

Las emisiones de dióxido de azufre constituyen un peligro para el medio ambiente, aún más que el trióxido de azufre. Este compuesto cuando se pone en contacto con la humedad de la atmósfera puede convertirse en ácido sulfúrico y sulfuroso y ocasionar lluvias ácidas.

Según Talaquer et al. (2022) estas lluvias ácidas provocan:

- Acidificación de las aguas terrestres lo que trae como consecuencia que no se pueda beber de estas aguas ni alimentarse de los peces y otros animales que habitan en ellas.
- Daños importantes en la vegetación ya que los vegetales se enferman y contraen plagas por tanto hay menos vegetación, menos hábitat y alimento para animales y personas.
- Se daña y deteriora la superficie de materiales, debido al efecto corrosivo que tiene sobre materiales como la madera, la piedra y el plástico
- Aumento del efecto invernadero.

Conclusiones parciales

1. El modelo de simulación que se obtiene se ajusta al caso base con errores que no superan el 10% en variables como flujo, temperatura y composición en las diferentes etapas del proceso de producción de ácido sulfúrico.
2. El modelo de simulación responde adecuadamente ante cambios en las corrientes de entrada al proceso.
3. En la evaluación del proceso de combustión de azufre en el horno se comprueba que aumentando la relación aire seco de entrada/azufre de entrada (AS/S) aumenta la concentración de O₂, disminuye la concentración de SO₂ y disminuye la temperatura del gas producto.

4. En la evaluación del accidente nube tóxica de SO_2 se comprueba que la nube se dirige hacia la zona del Valle de Yumurí y que su extensión varía en dependencia de los extremos de temperatura, alcanzando una distancia máxima de 7 km para 640°C y de 5,3 km para 400°C .
5. La nube tóxica de SO_3 se comporta de igual manera que la de SO_2 en cuanto a trayectoria y la relación con la temperatura, pero en cuanto a extensión la nube de SO_3 alcanza menores valores.

CONCLUSIONES

1. Se realiza la estimación de los escenarios de accidentes: nube tóxica de SO_2 y SO_3 a partir de la evaluación de parámetros de operación del horno, por lo cual se valida la hipótesis.
2. Se valida el modelo de simulación que se obtiene con errores que no superan el 10% y comprobando que el mismo responde de manera acertada ante los cambios que se producen.
3. En la evaluación del horno se comprueba que variando la relación aire seco de entrada/azufre de entrada (AS/S) se puede controlar la composición de O_2 y SO_2 y la temperatura del gas a la salida del horno.
4. En la evaluación de los accidentes nube tóxica de SO_2 y SO_3 se demuestra que la extensión de la nube para la temperatura de 640°C es mayor que para la temperatura de 400°C y que en ambos casos se dirige hacia la zona del Valle de Yumurí, alcanzando una distancia máxima de 7 km y 4,9 km respectivamente.

RECOMENDACIONES

1. Continuar la investigación para incluir el análisis de otros posibles escenarios de accidentes mayores y la evaluación de las emisiones a la atmósfera a partir de la corriente gases de cola.

BIBLIOGRAFÍA

1. Al-Hassan, A. Y., y Hill, D. R. (1986). Islamic technology; an illustrated history.
2. Baquero, D. Á. (2019). Estudio comparativo de resultados de los simuladores UniSim y PRO II mediante la simulación de una Planta Desbutanizadora.
3. Barrios, T. O., Córdova Mendoza, P., Córdova Barrios, I. C., García Espinoza, A. J., García Espinoza, C., y Rodríguez Álvarez, R. (2019). Análisis Cuantitativo de Riesgos de la Unidad de Destilación Primaria de Nafta–Diesel de la Planta de Fraccionamiento de Líquidos de Gas Natural de Pisco-Perú.
4. Battsengel, A., Batnasan, A., Narankhuu, A., Haga, K., Watanabe, Y., y Shibayama, A. J. H. (2018). Recovery of light and heavy rare earth elements from apatite ore using sulphuric acid leaching, solvent extraction and precipitation. *179*, 100-109.
5. Bhattacharya, R., y Ganesh Kumar, V. J. I. J. o. C. R. (2015). Consequence analysis for simulation of hazardous chemicals release using ALOHA software. *8(4)*, 2038-2046.
6. Boschert, S., y Rosen, R. (2016). Digital twin—the simulation aspect. En *Mechatronic futures* (pp. 59-74). Springer.
7. Boucheikhchoukh, A., Thibault, J., y Fauteux-Lefebvre, C. J. T. C. J. o. C. E. (2020). Catalyst design using artificial intelligence: SO₂ to SO₃ case study. *98(9)*, 2016-2031.
8. Boyd, D. A. J. A. C. I. E. (2016). Sulfur and its role in modern materials science. *55(50)*, 15486-15502.
9. Calderón, A. J. R. d. h. p. c. e. k. a.-d.-a.-d.-f. (2016). Análisis de árbol de falla.
10. Camejo, J., Sibila, A., y Hernández, A. (2019). Evaluación preliminar de la seguridad en la operación de una instalación frigorífica. III Simposio Sobre Riesgo de Desastres y Riego Climático. XII Convención Internacional Sobre Medio Ambiente y Desarrollo. La Habana. Cuba. ISBN,
11. Campos, M. A. R. (2018). Evaluación de las metodologías y la situación actual de la prevención de riesgos ambientales y de la seguridad en la industria.

12. Carlson, E. C. J. C. e. p. (1996). Don't gamble with physical properties for simulations. *92*(10), 35-46.
13. Chaijareenont, P., Prakhamsai, S., Silthampitag, P., Takahashi, H., y Arksornnukit, M. J. D. m. j. (2018). Effects of different sulfuric acid etching concentrations on PEEK surface bonding to resin composite. *37*(3), 385-392.
14. Cheremisinoff, N. P., y Rosenfeld, P. F. (2009). *Handbook of Pollution Prevention and Cleaner Production Vol. 1: Best Practices in the Petroleum Industry*. William Andrew.
15. Chowdhury, N. B., Hasan, Z., y Biplob, A. J. J. o. S. (2012). HYSYS simulation of a sulfuric acid plant and optimization approach of annual profit. *2*(4), 179-182.
16. Cutlip, M. B., y Shacham, M. (1999). *Problem solving in chemical engineering with numerical methods*. Prentice Hall PTR.
17. Dadkani, P., Noorzai, E., Ghanbari, A., y Gharib, A. J. H. (2021). Risk analysis of gas leakage in gas pressure reduction station and its consequences: A case study for Zahedan. *7*(5), e06911.
18. Davis, A., Thrift-Viveros, D., y Baker, C. M. S. (2021). NOAA Scientific Support for a Natural Gas Pipeline Release During Hurricane Harvey Flooding in the Neches River Beaumont, Texas. International Oil Spill Conference,
19. Demol, J., Ho, E., Soldenhoff, K., y Senanayake, G. J. H. (2019). The sulfuric acid bake and leach route for processing of rare earth ores and concentrates: A review. *188*, 123-139.
20. Elvers, B. (1991). *Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry* (Vol. 17). Verlag Chemie Hoboken, NJ.
21. Fahmi, A. B., Sugiharto, A., y Fatoni, R. (2021). Optimization Condition Operation of Distillation to produce 2-EHA using ChemSep Version 8.23. *Journal of Physics: Conference Series*,
22. Gałol, M., Cako, E., Fedorov, K., Soltani, R. D. C., Przyjazny, A., y Boczka, G. J. J. o. M. L. (2020). Hydrodynamic cavitation based advanced oxidation processes: Studies on specific effects of inorganic acids on the degradation effectiveness of organic pollutants. *307*, 113002.

23. Gai, W.-m., Du, Y., y Deng, Y.-f. J. S. s. (2018). Regional evacuation modeling for toxic-cloud releases and its application in strategy assessment of evacuation warning. *109*, 256-269.
24. Gázquez, M. J., Contreras, M., Pérez-Moreno, S. M., Guerrero, J. L., Casas-Ruiz, M., y Bolívar, J. P. J. M. (2021). A Review of the Commercial Uses of Sulphate Minerals from the Titanium Dioxide Pigment Industry: The Case of Huelva (Spain). *11(6)*, 575.
25. Gonzalez, C., y Vital, M. J. L. d. S. d. P. F. d. C. A. a. l. I., UNCuyo. (2010). Curso Electivo: Simulación de procesos en Aspen HYSYS.
26. González, D. C. (2018). Perspectivas del marco legal ambiental en Cuba. *Gestión ambiental y desarrollo sustentable: Experiencias comparadas*,
27. Günther, R., Schöneberger, J. C., Arellano-Garcia, H., Thielert, H., y Wozny, G. (2012). Design and modeling of a new periodical-steady state process for the oxidation of sulfur dioxide in the context of an emission free sulfuric acid plant. En *Computer Aided Chemical Engineering* (Vol. 31, pp. 1677-1681). Elsevier.
28. Inanloo, B., y Tansel, B. J. J. o. e. m. (2015). Explosion impacts during transport of hazardous cargo: GIS-based characterization of overpressure impacts and delineation of flammable zones for ammonia. *156*, 1-9.
29. Jones, R., Lehr, W., Simecek-Beatty, D., y Reynolds, M. (2013). ALOHA®(Areal Locations of Hazardous Atmospheres) 5.4. 4: Technical Documentation.
30. King, M., Moats, M., y Davenport, W. G. (2013). *Sulfuric acid manufacture: analysis, control and optimization*. Newnes.
31. Kiss, A. A., Bildea, C. S., y Grievink, J. J. C. E. J. (2010). Dynamic modeling and process optimization of an industrial sulfuric acid plant. *158(2)*, 241-249.
32. Lee, J., Cameron, I., Hassall, M. J. P. s., y protection, e. (2019). Improving process safety: What roles for Digitalization and Industry 4.0? , *132*, 325-339.
33. López, G. A., Alonso, I., Mazaira, Z., y Ricardo, H. J. R. E. (2018). Árbol de fallo como herramienta para la mejora de procesos. Estudio de caso cementera XPZ. *39(06)*.

34. Mangini, L. F. K., Valt, R. B. G., de Santana Ponte, M. J. J., de Araújo Ponte, H. J. S., y Technology, P. (2020). Vanadium removal from spent catalyst used in the manufacture of sulfuric acid by electrical potential application. *246*, 116854.
35. Martínez-Díaz, J., Martínez-Castro, V., y Castilla-Caballero, D. R. J. R. I.-N. (2022). Uso de simulador “COCO” para el diseño de plantas químicas. Caso de estudio: Planta de producción de Ciclohexano. *1(1)*, 66-84.
36. Meyer, B. J. C. R. (1976). Elemental sulfur. *76(3)*, 367-388.
37. Mondal, S. K., Uddin, M. R., Majumder, S., Pokhrel, J. J. C. E., y Processing. (2015). HYSYS Simulation of Chemical Process Equipments. 1-7.
38. Mounaam, A., Chhiti, Y., Souissi, A., Salouhi, M., Harmen, Y., y Khouakhi, M. E. (2020). Simulation and Optimization of an Industrial Sulfuric Acid Plant with Contact Process Using Python-Unisim Design. International Conference on Simulation and Modeling Methodologies, Technologies and Applications,
39. Mounaam, A., Harmen, Y., Chhiti, Y., Souissi, A., Salouhi, M., y El Khouakhi, M. (2020). UniSim-Design Simulation and Analysis of a Sulphuric Acid Manufacturing Plant with Double Absorption Process. SIMULTECH,
40. Mutlu, Ö. Ç., Zeng, T. J. C. E., y Technology. (2020). Challenges and opportunities of modeling biomass gasification in Aspen Plus: A review. *43(9)*, 1674-1689.
41. Nicolás, R. M., y Madrid, J. S. J. P. y. g. d. r. (2019). Matriz de riesgos.¿ En qué consiste, cómo se construye, cómo se gestiona? , 6857.
42. Novoa, H. A., y Barrera, C. R. J. P. e. I. (2015). Metodologías para el análisis de riesgos en los sgsi. *9*, 73-86.
43. Oni, A. O., Fadare, D. A., Sharma, S., y Rangaiah, G. P. (2018). Multi-objective optimisation of a double contact double absorption sulphuric acid plant for cleaner operation. *Journal of Cleaner Production, 181*, 652-662.
44. Ormelia, C. J. R. d. h. w. c. u. e. d. B. t. C. p. (2016). Introducción al Bow-tie para análisis de riesgos.[Archivo PDF].
45. Orozco, J., Van Caneghem, J., Hens, L., González, L., Lugo, R., Díaz, S., y Pedroso, I. J. J. o. c. p. (2019). Assessment of an ammonia incident in the industrial area of Matanzas. *222*, 934-941.

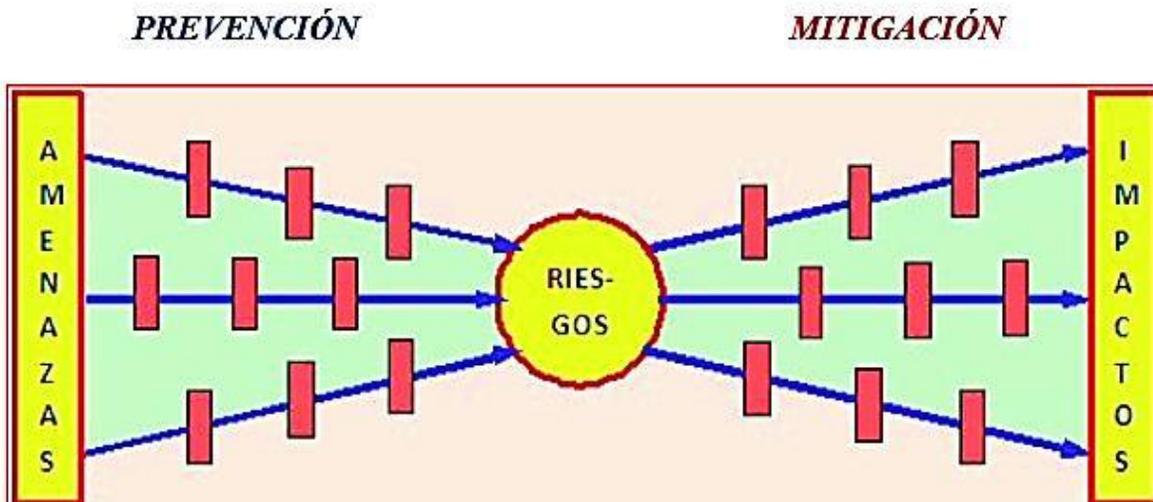
46. Pérez, A. S., Ranero, E. G., Pérez, E. S., y Liaño, N. A. J. R. d. C. y. T. (2020). Simulación del proceso de producción del eumeno mediante el simulador ChemCAD®. (33), 1-10.
47. Rioyo, J., Tuset, S., Grau, R. J. M. P., y Review, E. M. (2022). Lithium extraction from spodumene by the traditional sulfuric acid process: A review. *43*(1), 97-106.
48. Rodríguez, I., Torrens, O., Leyva, L., Pérez, A., Jáuregui, D., y Marsán, J. J. E. F. V. (2009). Seguridad y Salud en el Trabajo.
49. Rodríguez, J. V., Giniebra, J. J. C., y Valdés, A. C. J. R. C. C. Q. (2021). Métodos de estudio más utilizados para la evaluación de riesgos de accidentes mayores en la industria química. Una revisión. *52*(2), 138-165.
50. Rodríguez, K. V. A., Reyes, S. S., y González, M. T. C. (2021). Uso de la metodología HAZOP para el análisis de riesgo en estaciones de almacenamiento de combustibles de aviación. Artículos del Congreso Internacional de Investigación Academia Journals Celaya 2021 (10 al 12 de noviembre de,
51. Santana, J. A. D., Miranda, A. G., Orozco, J. L., Arana, Y. C., Lantigua, D. F., y Febles, J. S. J. I. J. o. P. T. (2020). How to Determine Individual Risk Due to Toxic, Fire, and Explosion Accidents in a Hydrocarbon Processing Area? , *7*, 60-73.
52. Scarpatti, F. J. R. d. h. w. a. e. I. F. S. A. A. C. A. l. d. M. d. F. y. s. E. (2014). AMFE Modo de Fallo y sus Efectos.[Archivo PDF].
53. Scenna, N. J., Aguirre, P. A., Benz, S. J., Chiotti, O. J., Espinosa, H. J., Ferrero, M. B., Montagna, J. M., Mussati, M. C., Pérez, G. A., y Rodríguez, J. (2015). Modelado, simulación y optimización de procesos químicos.
54. Si, Z., Han, D., Gu, J., Song, Y., y Liu, Y. J. A. T. E. (2020). Exergy analysis of a vacuum membrane distillation system integrated with mechanical vapor recompression for sulfuric acid waste treatment. *178*, 115516.
55. Sippola, H., Taskinen, P. J. J. o. C., y Data, E. (2014). Thermodynamic properties of aqueous sulfuric acid. *59*(8), 2389-2407.
56. Sørensen, P. A., Møllerhøj, M., y Christensen, K. A. J. C. E. J. (2015). New dynamic models for simulation of industrial SO₂ oxidation reactors and wet gas sulfuric acid plants. *278*, 421-429.

57. Sultana, S. T., y Amin, M. R. J. J. o. C. E. (2011). Aspen-HYSYS Simulation Of Sulfuric Acid Plant. *26*, 47-49.
58. Tabatabai, M. J. M. o. S. A. P. C., y Properties, M. (1983). Sulfur. *9*, 501-538.
59. Thawornchaisit, U., Juthaisong, K., Parsongeen, K., Phoengchan, P. J. J. o. M. C., y Management, W. (2019). Optimizing acid leaching of copper from the wastewater treatment sludge of a printed circuit board industry using factorial experimental design. *21(6)*, 1291-1299.
60. Toubri, Y., Plante, B., Demers, I., y Fillion, M. J. J. o. C. P. (2022). Probing cleaner production opportunities of the Lac Tio pyrite-enriched tailings generated to alleviate sulfur dioxide emissions. *357*, 132027.
61. Várnai, K., Petri, L., y Nagy, L. J. P. P. C. E. (2021). Prospective Evaluation of Spent Sulfuric Acid Recovery by Process Simulation. *65(2)*, 243-250.
62. Vega, J. M. (2018). SIMULADORES DE PROCESOS EN LA CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA.
63. Viera, R., López, S., y Levi, M. J. E. P. y. E., La Habana. (1988). Modelación matemática para ingenieros químicos.
64. Vílchez, J. J. T., Informes y Proyectos, SL Barcelona. (2001). Análisis de riesgos ambientales y aplicación al diseño de instalaciones industriales.
65. Wang, T., Le, T., Hu, J., Ravindra, A. V., Xv, H., Zhang, L., Wang, S., y Yin, S. J. U. S. (2022). Ultrasonic-assisted ozone degradation of organic pollutants in industrial sulfuric acid. 106043.
66. Wigenstam, E., Elfsmark, L., Bucht, A., y Jonasson, S. J. T. (2016). Inhaled sulfur dioxide causes pulmonary and systemic inflammation leading to fibrotic respiratory disease in a rat model of chemical-induced lung injury. *368*, 28-36.
67. Yan, C., Yin, R., Lu, Y., Dada, L., Yang, D., Fu, Y., Kontkanen, J., Deng, C., Garmash, O., y Ruan, J. J. G. R. L. (2021). The Synergistic Role of Sulfuric Acid, Bases, and Oxidized Organics Governing New-Particle Formation in Beijing. *48(7)*, e2020GL091944.
68. Yang, J. H., Koedrith, P., Kang, D. S., Kee, N. K., Jung, J.-H., Lee, C. M., Ahn, Y.-S., y Seo, Y. R. J. J. o. C. P. (2019). A putative adverse outcome pathway relevant

to carcinogenicity induced by sulfuric acid in strong inorganic acid mists. 24(3), 139.

69. Yang, R., Gai, K., Yang, F., Zhang, G., Sun, N., Feng, B., y Zhu, X. (2019). Simulation analysis of propylene storage tank leakage based on ALOHA software. IOP Conference Series: Earth and Environmental Science,
70. Zapata, A. R., Benítez, L., Lezama, J., Gamarra, S., y Mattarella, L. (2015). SIMULACIÓN EN ASPEN PLUS-PLANTA DE PRODUCCIÓN DE ÁCIDO SULFÚRICO.

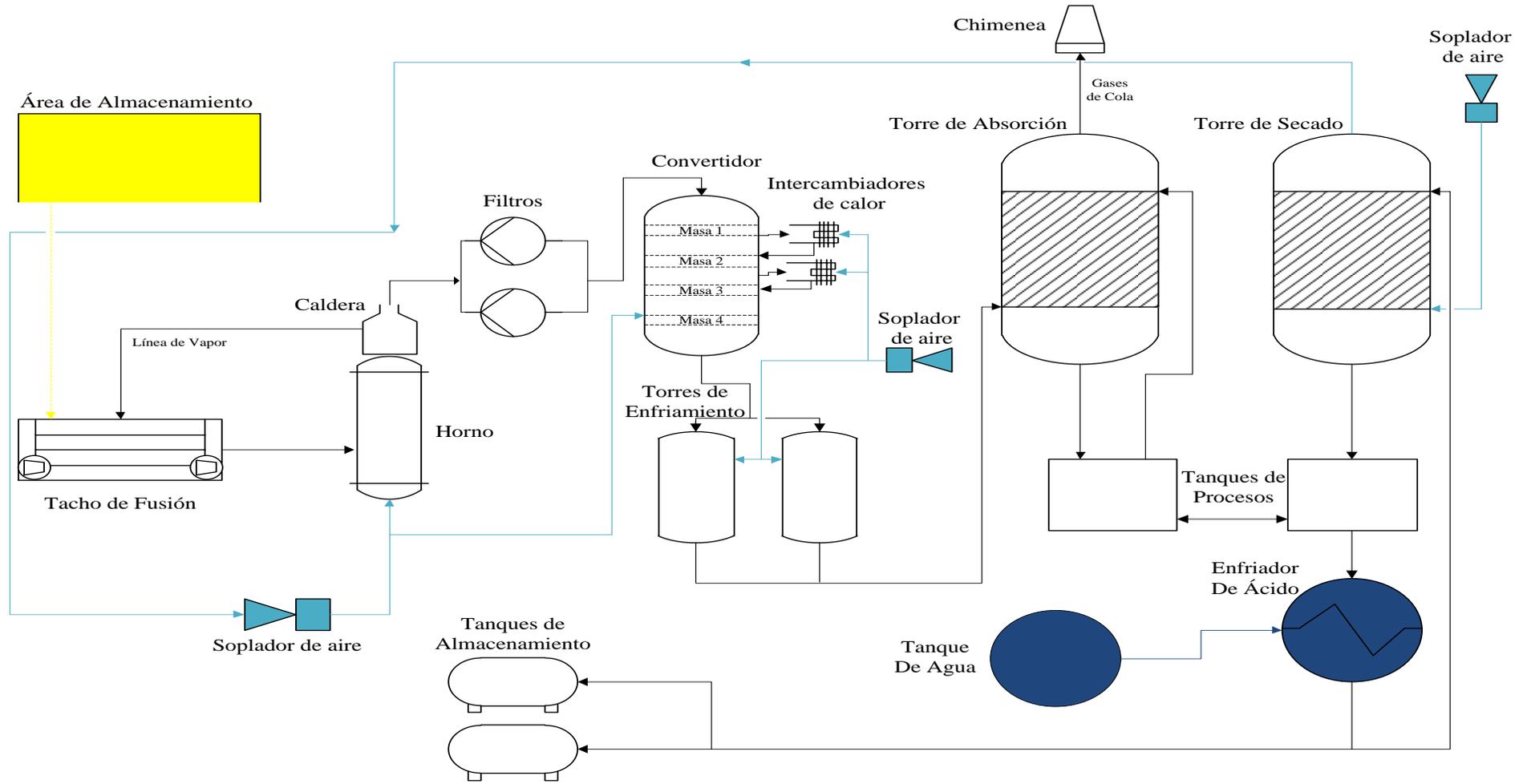
Anexo 1: Método Bow-Tie para el análisis de riesgos.



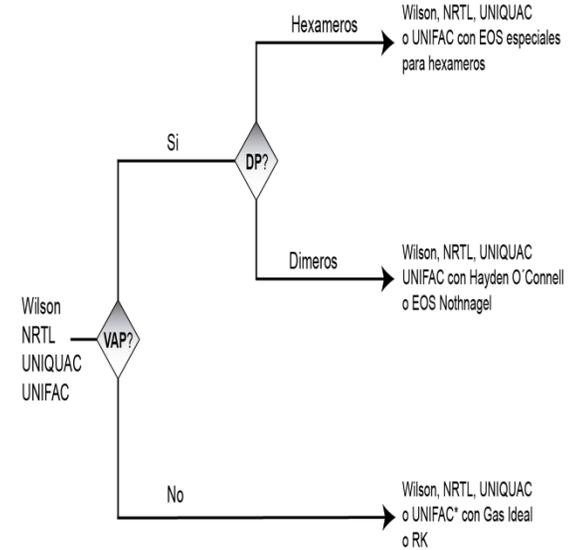
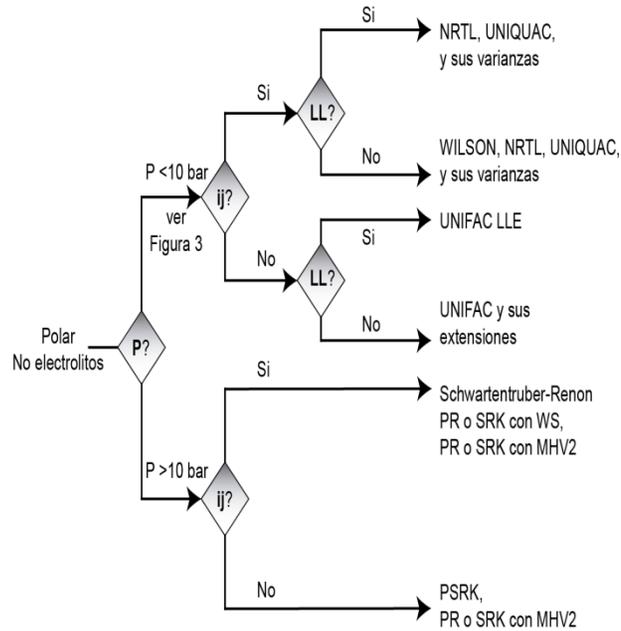
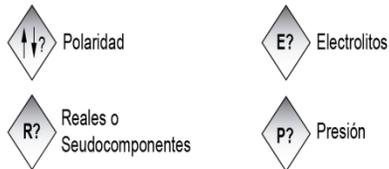
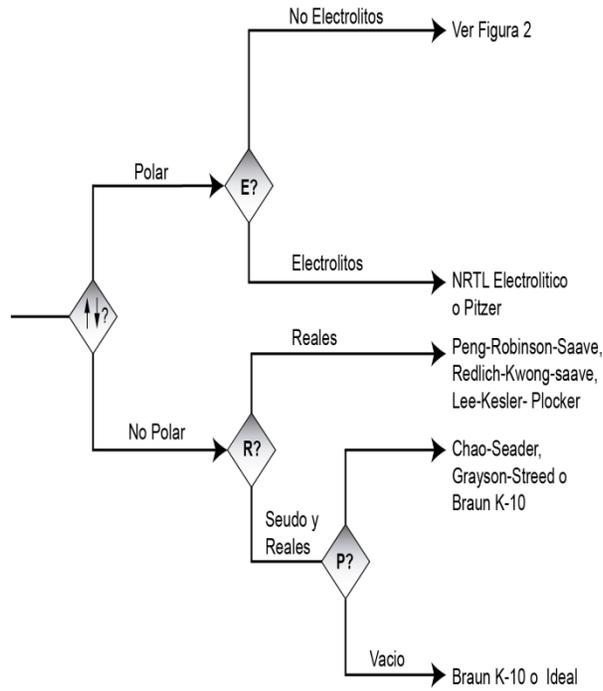
Anexo 2: Matriz de riesgo.

Probabilidad del escenario de riesgo	Frecuente	II	I	I	I
	Periódica	III	II	I	I
	Ocasional	III	III	II	I
	Remota	III	III	III	II
		Baja	Moderada	Alta	Catastrófica
		Magnitud de las Consecuencias			

Anexo 3: Diagrama de flujo del proceso de producción de ácido sulfúrico.



Anexo 4: Árbol de decisión de Carlson.



*UNIFAC y sus extensiones

Anexo 5: Caracterización de las corrientes que conforman el proceso de producción de ácido sulfúrico, obtenidas a través del modelo de simulación en HYSYS.

9	Streams					
10						
11	Name	aire seco a combust	gases a caldera	azufre liquido	3	gases a convertidor
12	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	1.0000
13	Temperature (C)	67.95	640.0	140.0 *	640.0	415.0 *
14	Pressure (kPa)	101.1	101.1	200.0 *	101.1	180.0 *
15	Molar Flow (kgmole/h)	211.7	211.7	17.04	0.0000	211.7
16	Mass Flow (kg/h)	6050	6596	546.5 *	0.0000	6596
17	Liquid Volume Flow (m3/h)	6.979	7.282	0.3019	0.0000	7.282
18	Heat Flow (kW)	-278.8	-585.8	-307.1	0.0000	-1033
19	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-4741	-9963	-6.486e+004	-9963	-1.757e+004
20	Name	gas a enfriamiento	q	gas a 2da etapa	gas a enfriamiento 2	we
21	Vapour Fraction	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	0.0000
22	Temperature (C)	566.8	566.8	430.0 *	471.7	471.7
23	Pressure (kPa)	180.0	180.0	160.0	160.0	160.0
24	Molar Flow (kgmole/h)	206.1	0.0000	206.1	204.6	0.0000
25	Mass Flow (kg/h)	6596	0.0000	6596	6596	0.0000
26	Liquid Volume Flow (m3/h)	7.089	0.0000	7.089	7.036	0.0000
27	Heat Flow (kW)	-1033	0.0000	-1306	-1306	0.0000
28	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-1.804e+004	-1.804e+004	-2.281e+004	-2.298e+004	-2.298e+004
29	Name	gas a 3ra etapa	gas a enfriamiento 3	er	gas	SO3 a enfriamiento
30	Vapour Fraction	1.0000	1.0000	0.0000	---	1.0000
31	Temperature (C)	440.0 *	456.8	456.8	---	362.1
32	Pressure (kPa)	130.0 *	130.0	130.0	---	101.1
33	Molar Flow (kgmole/h)	204.6	204.0	0.0000	---	294.0
34	Mass Flow (kg/h)	6596	6596	0.0000	---	9189
35	Liquid Volume Flow (m3/h)	7.036	7.015	0.0000	---	9.981
36	Heat Flow (kW)	-1369	-1369	0.0000	---	-1488
37	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-2.409e+004	-2.416e+004	-2.416e+004	---	-1.823e+004
38	Name	SO3 al absorbedor	H2SO4 de almacena	gases de cola	H2SO4 fuerte	H2SO4 de almacena
39	Vapour Fraction	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000
40	Temperature (C)	200.0 *	70.00 *	70.00	79.54	60.00 *
41	Pressure (kPa)	91.10	110.0 *	110.0	110.0	110.0 *
42	Molar Flow (kgmole/h)	294.0	1405	276.7	1405	1370
43	Mass Flow (kg/h)	9189	1.281e+005 *	7836	1.295e+005	1.250e+005 *
44	Liquid Volume Flow (m3/h)	9.981	70.22	9.257	70.81	68.50
45	Heat Flow (kW)	-1924	-3.411e+005	-390.5	-3.431e+005	-3.339e+005
46	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-2.356e+004	-8.742e+005	-5081	-8.790e+005	-8.773e+005
47	Name	aire seco a 4to catal	a	aire humedo	aire seco	H2SO4 diluido
48	Vapour Fraction	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	0.0000
49	Temperature (C)	67.95	362.1	32.00 *	67.95	75.63
50	Pressure (kPa)	101.1	101.1	101.3 *	101.1	110.0
51	Molar Flow (kgmole/h)	90.72	0.0000	308.3	302.4	1376
52	Mass Flow (kg/h)	2593	0.0000	8750 *	8643	1.251e+005
53	Liquid Volume Flow (m3/h)	2.991	0.0000	10.08	9.970	68.61
54	Heat Flow (kW)	-119.5	0.0000	-885.6	-398.2	-3.326e+005
55	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-4741	-1.823e+004	-1.034e+004	-4741	-8.701e+005
56	Name	e1	e2	e3	e4	e5
57	Vapour Fraction	---	---	---	---	---
58	Temperature (C)	---	---	---	---	---
59	Pressure (kPa)	---	---	---	---	---
60	Molar Flow (kgmole/h)	---	---	---	---	---
61	Mass Flow (kg/h)	---	---	---	---	---
62	Liquid Volume Flow (m3/h)	---	---	---	---	---
63	Heat Flow (kW)	447.2	273.0	62.95	---	---
64	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	---	---	---	---	---

9	Streams (continued)					
10						
11	Name	E7	e12	H2SO4 al 98,5% @	SO3 al absorbedor @	gases de cola @CO
12	Vapour Fraction	---	---	0.0000	1.0000	1.0000
13	Temperature (C)	---	---	70.00	200.0	70.00
14	Pressure (kPa)	---	---	110.0	91.10	110.0
15	Molar Flow (kgmole/h)	---	---	1405	294.0	276.7
16	Mass Flow (kg/h)	---	---	1.281e+005	9189	7836
17	Liquid Volume Flow (m3/h)	---	---	70.22	9.981	9.257
18	Heat Flow (kW)	---	435.3	-3.411e+005	-1924	-390.5
19	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	---	---	-8.742e+005	-2.356e+004	-5081
20	Name	H2SO4 fuerte @CO	aire seco 2 @COL2	aire seco 1 @COL2	H2SO4 diluido @CC	H2SO4 a almacenar
21	Vapour Fraction	0.0000	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000
22	Temperature (C)	79.54	32.00	67.95	75.63	60.00
23	Pressure (kPa)	110.0	101.3	101.1	110.0	110.0
24	Molar Flow (kgmole/h)	1405	308.3	302.4	1376	1370
25	Mass Flow (kg/h)	1.295e+005	8750	8643	1.251e+005	1.250e+005
26	Liquid Volume Flow (m3/h)	70.81	10.08	9.970	68.61	68.50
27	Heat Flow (kW)	-3.431e+005	-885.6	-398.2	-3.326e+005	-3.339e+005
28	Molar Enthalpy (kJ/kgmole)	-8.790e+005	-1.034e+004	-4741	-8.701e+005	-8.773e+005
29	Unit Ops					
30						
31	Operation Name	Operation Type	Feeds	Products	Ignored	Calc. Level
32	horno	Conversion Reactor	aire seco a combustion	3	No	500.0 *
33			azufre liquido	gases a caldera		
34	catalizador 1	Conversion Reactor	gases a convertidor	q	No	500.0 *
35			gas a enfriamiento			
36	catalizador 2	Conversion Reactor	gas a 2da etapa	we	No	500.0 *
37			gas a enfriamiento 2			
38	catalizador 3	Conversion Reactor	gas a 3ra etapa	er	No	500.0 *
39			gas a enfriamiento 3			
40	catalizador 4	Conversion Reactor	gas a enfriamiento 3	a	No	500.0 *
41			aire seco a 4to catalizador	SO3 a enfriamiento		
42	Caldera	Cooler	gases a caldera	gases a convertidor	No	500.0 *
43			e1			
44	E-101	Cooler	gas a enfriamiento	gas a 2da etapa	No	500.0 *
45			e2			
46	E-102	Cooler	gas a enfriamiento 2	gas a 3ra etapa	No	500.0 *
47			e3			
48	E-100	Cooler	SO3 a enfriamiento	SO3 al absorbedor	No	500.0 *
49			e12			
50	TEE-101	Tee	aire seco	aire seco a combustion	No	500.0 *
51			aire seco a 4to catalizador			
52	Produccion de H2SO4 fuer	Absorber	H2SO4 de almacenamiento	H2SO4 fuerte	No	2500 *
53			SO3 al absorbedor	gases de cola		
54	Torre de secado	Absorber	H2SO4 de almacenamiento	H2SO4 diluido	No	2500 *
55			aire humedo	aire seco		

Anexo 6: Velocidad y distribución de la dirección del viento en la zona de la UEB Rayonitro.

