

HERRAMIENTAS DE ANÁLISIS DE PROCESO EN LA PRODUCCIÓN DE ÁCIDO SULFÚRICO

PROCESS ANALYSIS TOOLS IN THE PRODUCTION OF SULFURIC ACID

Ing. Alexandra Lorenzo Jiménez¹ (0000-0001-8454-4897), Universidad de Matanzas

alexandra.lorenzo@umcc.cu

Dr. C. Yamilé Martínez Ochoa¹ (0000-0002-9779-0840)

Resumen

El objetivo del presente trabajo es abordar el proceso de obtención de ácido sulfúrico y las herramientas de simulación que permiten analizar el proceso de manera integral. Se establecen las propiedades del ácido sulfúrico, los diferentes métodos y tecnologías para llevar a cabo el proceso de producción del mismo, así como las aplicaciones de este importante compuesto de la industria química básica y los riesgos a la exposición de esta sustancia. Se realiza una revisión sobre los diferentes productos de software de simulación de procesos que se encuentran en el mercado y se propone el uso del simulador HYSYS para para la simulación de procesos de obtención de ácido sulfúrico debido a la facilidad de su uso, al potente paquete de funciones termodinámicas que posee y por la confiabilidad de los resultados que ofrece.

Palabras claves: ácido sulfúrico; análisis de procesos; procesos químicos; simulación

Summary

The objective of this work is to address the process of obtaining sulfuric acid and the simulation tools that allow analyzing the process in a comprehensive manner. The properties of sulfuric acid, the different methods and technologies to carry out the sulfuric acid production process, as well as the applications of this important compound of the basic chemical industry and the risks of exposure to this substance are established. A review of the different process simulation software available in the market is carried out, the use of the HYSYS simulator is proposed for the simulation of sulfuric acid

production processes due to its ease of use, the powerful package of thermodynamic functions it has, and the reliability of the results it offers.

Keywords: *sulfuric acid; process analysis; chemical processes; simulation*

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 (SO_2) a trióxido de azufre (SO_3) 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.

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).

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.

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 (Na₂SO₄) y cloruro de hidrógeno (HCl_(g)) a partir del cloruro de sodio (NaCl), la descomposición de sulfitos a dióxido de azufre y la descomposición de fosfatos de calcio naturales (Ca₃(PO₄)₂) hasta ácido fosfórico (H₃PO₄) y sulfato de calcio (CaSO₄).

Métodos de obtención del ácido sulfúrico

La obtención del ácido sulfúrico se realiza a partir del dióxido de azufre (SO₂), este se oxida a trióxido de azufre (SO₃) 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 pirita tiene como fin llegar a la obtención de una corriente gaseosa rica en SO_2 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)

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 polieteretercetona (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.

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 (O_3) y ultrasonidos (US) para decolorar ácido sulfúrico concentrado 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, con un grado de decoloración de 174,07%, una transparencia de 70mm y una fracción másica de 98,04%.

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 *softwares* 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).

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.

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)

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
- ASPENHYSYS

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 compró 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 especializado 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.

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 Mounaam, Harmen *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.

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. 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. De todos los productos software que existen en el mercado, se propone HYSYS para la simulación de procesos de obtención de ácido sulfúrico debido a la facilidad de su uso, al potente paquete de funciones termodinámicas que posee y por la confiabilidad de los resultados que ofrece.

Referencias bibliográficas

Al-Hassan, A. Y., y Hill, D. R. (1986). *Islamic technology; an illustrated history.*

Baquero, D. Á. (2019). Estudio comparativo de resultados de los simuladores UniSim y PRO II mediante la simulación de una Planta Desbutanizadora.

- 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.
- Boschert, S., y Rosen, R. (2016). Digital twin—the simulation aspect. En *Mechatronic futures* (pp. 59-74). Springer.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- Elvers, B. (1991). *Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry* (Vol. 17). Verlag Chemie Hoboken, NJ.
- 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*,
- Gagol, M., Cako, E., Fedorov, K., Soltani, R. D. C., Przyjazny, A., y Boczkaj, 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.
- 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.
- Gonzalez, C., y Vital, M. J. L. d. S. d. P. F. d. C. A. a. I. I., UNCuyo. (2010). *Curso Electivo: Simulación de procesos en Aspen HYSYS*.

- 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.
- King, M., Moats, M., y Davenport, W. G. (2013). *Sulfuric acid manufacture: analysis, control and optimization*. Newnes.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- Mondal, S. K., Uddin, M. R., Majumder, S., Pokhrel, J. J. C. E., y Processing. (2015). *HYSYS Simulation of Chemical Process Equipments*. 1-7.
- 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*,
- 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,
- 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.

- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- 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.
- Sippola, H., Taskinen, P. J. J. o. C., y Data, E. (2014). Thermodynamic properties of aqueous sulfuric acid. 59(8), 2389-2407.
- 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.
- Sultana, S. T., y Amin, M. R. J. J. o. C. E. (2011). Aspen-HYSYS Simulation Of Sulfuric Acid Plant. 26, 47-49.
- Thawornchaisit, U., Juthaisong, K., Parsongjeen, 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.
- 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.
- 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.
- Vega, J. M. (2018). SIMULADORES DE PROCESOS EN LA CARRERA DE INGENIERÍA QUÍMICA.

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.

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.

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.

Zapata, A. R., Benítez, L., Lezama, J., Gamarra, S., y Mattarella, L. (2015). Simulación en ASPEN PLUS-PLANTA de producción de ácido sulfúrico.