

APLICACIÓN DE UN SIMULADOR COMERCIAL EN LAS ASIGNATURAS DE
PROCESOS EN EL PROGRAMA DE QUÍMICA INDUSTRIAL

TRABAJO DE INVESTIGACIÓN FORMATIVA

LUÍS MIGUEL CARDONA GARCÍA
1093226740

MARIA CAMILA BARRETO CORREA
1015419866

DIRECTOR
ING. MELVIN AROLD DURÁN RINCÓN

UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA DE PEREIRA
FACULTAD DE TECNOLOGÍAS
QUÍMICA INDUSTRIAL
2017

Contenido

Introducción.....	1
Historia de la simulación	3
Aspen-Hysys	5
Consideraciones generales	6
1. Balance de Materia y Energía	9
Balance sin reacción química.....	9
Producto de mezcla	9
Fraccionamiento de mezcla	13
Balance de materia en un absorbedor	16
Balance con reacción química.....	20
Balance de materia con una única reacción	20
Balance de materia con reacciones secuenciales.....	25
Balance de energía	30
Balance de energía con reacción química	30
Balance de energía en un intercambiador de calor	34
2. Fluidos y Sólidos	37
Hidrodinámica.....	37
Sistema hidrodinámico con bomba	41
3. Transferencia de Calor	46
Cálculo de flujos y temperaturas en intercambiadores de calor	46
Diseño de un intercambiador de calor.....	51
4. Transferencia de Masas	59
Destilación	59
Humidificación.....	73
Extracción líquido-líquido	78
5. Instrumentación y Control de Procesos	82
Sintonización de controladores.....	82
Control de temperatura frente a una perturbación	90
Conclusiones y Recomendaciones.....	96
Bibliografía.....	97

Introducción

Es indudable la importancia adquirida por las nuevas tecnologías de la información y comunicaciones (TIC) en todos los órdenes de la sociedad y, en particular, en el ámbito de la Educación Superior donde han introducido nuevas formas de trabajo, relación e, incluso, cambios en los métodos pedagógicos con los que se superan los métodos tradicionales de difusión de la documentación por parte del profesor [1].

Las herramientas interactivas constituyen un elemento muy potente que permite reflejar la componente visual subyacente al control automático bajo la abstracción de conceptos matemáticos, así como estimular la intuición de los estudiantes. De esta forma un alumno puede trabajar sobre un problema de forma gráfica y observar como el cambio en un determinado elemento se ve reflejado de forma inmediata en el resto, como si estuviera ante el proceso real. [2].

Hoy en día, la enseñanza moderna no puede ser entendida sin el uso del ordenador, esto se hace aún más evidente cuando se desarrollan estudios técnicos. Las computadoras permiten, en el campo ingenieril, la resolución de cálculos complejos con rapidez y habilidad, de manera que las empresas dedicadas al diseño en ingeniería (aeronáutico, automovilístico, químico-industrial) han adoptado, para su trabajo diario, programas de diseño asistido por ordenador y de simulación. La Universidad no debe ser ajena a este fenómeno, por lo que el uso de esos recursos informáticos debe ser ofrecido al alumnado al tiempo que se estudian los fundamentos teóricos de las técnicas de cálculo. Así, los simuladores logran una aplicación práctica inmediata de dichos conocimientos [3].

En los últimos tiempos se reconoce que el estudio sistemático y complejo de las operaciones básicas y de los procesos químico-industriales con una proyección profesional, no puede afrontarse eficazmente sin la utilización de herramientas computacionales adecuadas. De hecho, se ha desarrollado el concepto de aprendizaje a través de los simuladores [4] y la Simulación de Procesos, como materia de enseñanza, se ha generalizado en las carreras de Ingeniería Química y otras relacionadas en muchas universidades de todo el mundo.

Los simuladores de proceso están ganando un espacio en la docencia universitaria a nivel internacional pues permiten, por un lado, abordar el estudio de procesos complejos a un coste asumible de tiempo y esfuerzo y, por otro, dotan a los alumnos de experiencia en una herramienta que es ampliamente utilizada en la actividad profesional relacionada con la química. Este fenómeno es de tal alcance que ya se habla de un cambio en el paradigma de realizar los cálculos en la actividad docente de las carreras afines a la química [5].

El empleo de simuladores comerciales, como Aspen-Hysys, se ha llevado a cabo fundamentalmente en cursos avanzados de diseño industrial, obviando su aplicación en asignaturas introductorias a las operaciones básicas de los procesos químicos donde el

carácter intuitivo de los entornos gráficos de estos programas y su gran potencia de cálculo (que evita al estudiante los tediosos desarrollos numéricos, permitiéndole concentrarse en aspectos conceptuales) podría aumentar su motivación por la materia [6].

En sus estudios Ferro et al. [7], ha señalado los beneficios del uso de los simuladores de proceso en la docencia universitaria de Ingeniería Química. Por ejemplo, se ha argumentado que los simuladores permiten al estudiante comprender procesos e instalaciones complejas, que son difícilmente comprensibles aún mediante el contacto directo con la instalación. También, se insisten en el hecho de que el uso de los simuladores de procesos soporta, refuerza y estimula la independencia de los estudiantes. Además, se considera que los simuladores ofrecen el beneficio adicional de permitir a los estudiantes experimentar la titularidad de los resultados de un estudio complejo, lo que les compromete con el trabajo y fomenta su motivación.

Sin la utilización de simuladores de procesos es prácticamente imposible que los estudiantes puedan resolver problemas con verdadero interés práctico (y en correspondencia con carácter formativo) como parte de su trabajo individual fuera del aula. En las condiciones de un proceso docente centrado en el estudiante y con tareas de una complejidad adecuada para su formación profesional, prescindir de los simuladores de proceso en el trabajo docente de las asignaturas del área de química, exigiría la presencia constante de los profesores para guiar el trabajo del estudiante en tareas de cálculo que poco tienen que ver con la verdadera esencia del aprendizaje en química, limitaría el planteamiento de problemas a aquellos más sencillos donde no se analiza la operación desde la perspectiva del desarrollo industrial y, consumiría unas cantidades de tiempo inadmisibles en el contexto curricular existente [7].

El software comercial Aspen-Hysys, como en general todos los programas de simulación de procesos, presentan una serie de ventajas para la enseñanza: permiten la reproducción económica de procesos costosos; facilitan la comprensión de operaciones en un entorno similar al real; simplifican los cálculos numéricos; permiten el desarrollo de aspectos más conceptuales; posibilitan la verificación cualitativa y cuantitativa de hipótesis; y refuerzan el aprendizaje autónomo. Sin embargo, los simuladores comerciales disponibles en Química no están orientados específicamente para el aprendizaje y no incorporan modelos psicopedagógicos que tengan como centro de atención al estudiante [8].

Por tal razón, se pretende realizar la adaptación de ejercicios prácticos como estrategia didáctica en las asignaturas de procesos del programa de Química Industrial de la Universidad Tecnológica de Pereira para su posterior realización mediante el empleo del software Aspen-Hysys que servirá como herramienta para facilitar el aprendizaje y fortalecer la comprensión de los principios teóricos dictados en las asignaturas.

Historia de la Simulación

La historia de la simulación se puede remontar a la década de 1950 donde se inician las primeras aplicaciones de la programación lineal a la industria petroquímica en la creación de modelos que simulan la mezcla de gasolinas y de aceites. Los primeros programas fueron escritos inicialmente para grandes ordenadores VAX, IBM, etc. y gradualmente para ordenadores personales tipo IBM-PC o compatibles, reduciéndose su precio [9].

Posteriormente, a partir del uso masivo de la computadora digital, y de la revolución que implica la informática en todos los campos de la ingeniería, se evolucionó lentamente de la simulación analógica a la digital, habiendo prácticamente desaparecido la simulación digital en muchas aplicaciones [10].

Con la aparición de los microprocesadores a partir de la década de los setenta, cuya consecuencia inmediata resultó ser la masificación de las computadoras, al introducirse comercialmente en los ochenta las computadoras personales (PC's), se produce una revolución "informática", en el sentido de tener acceso prácticamente a bajo costo; tanto los profesionales como los estudiantes y docentes, a una computadora relativamente eficiente, hecho que anteriormente solo estaba permitido a pocas personas con acceso a centros de cómputos, cuyo costo de mantenimiento era elevado. En la actualidad los sistemas multimedia, las supercomputadoras y las "autopistas informáticas" representan el avance logrado [11].

Como consecuencia de estos sucesos, se comienza a cubrir la brecha entre los métodos pre-computadora y los algoritmos numéricos programados aplicados a la ingeniería química. En el año 1974 aparece el primer simulador de procesos químicos, el FLOWTRAN [11].

Existe actualmente una gran variedad de simuladores de procesos comerciales, de las cuales son poderosas herramientas de cálculo en procesos industriales, con enormes bases de datos y un fuerte respaldo de bibliotecas para cálculos de equipos y bibliotecas de modelos para cálculos termodinámicos, que le dan al simulador la ventaja de una gran versatilidad [10].

Algunos de estos simuladores de procesos de propósitos generales son: Aspen Plus (de Aspen Technology, Inc), SimSci PRO/II (de Schneider Electric Software, LLC), Aspen-Hysys (de Aspen Technology, Inc), Chemcad (de Chemstations, USA), etc. Aspen Plus, SimSci PRO/II y Chemcad son simuladores de procesos en estado estable. Aspen-Hysys es útil para realizar simulaciones en estado estable y proceso dinámico [12]. Hysys fue concebida y creada primero por la compañía canadiense Hypotech, fundada por investigadores de la universidad de Calgary. En

mayo del año 2002, AspenTech adquiere Hypotech, incluyendo Hysys, que a partir de entonces se llamó Aspen-Hysys.

Un aspecto muy importante en los simuladores de procesos es la disponibilidad de propiedades termodinámicas y de transporte de las corrientes del proceso, estas propiedades son fundamentales para efectuar los balances de materia y energía al grado de que, si tenemos buenos datos o buenas correlaciones para las propiedades, entonces los resultados de la simulación serán altamente confiables [11]. Además, se debe tener en cuenta que los simuladores modernos permiten la selección de los modelos de propiedades termodinámicas adecuados para la naturaleza de los componentes químicos, estado de agregación y condiciones de operación [12]. Las corrientes del proceso pueden ser:

1. Gases a baja y alta presión.
2. Soluciones líquidas con componentes no polares, polares y electrolitos a baja y alta presión.
3. Sólidos en suspensión o finamente divididos.

Como visión general los simuladores de procesos están hechos para facilitar las labores que en la ingeniería de procesos resultan ser tediosas, y frecuentemente presentan error humano. Estas herramientas van de la mano con los avances tecnológicos del mundo actual, siempre estando a la vanguardia en todos los campos de la ingeniería.

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 interfase, 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 [13].

Consideraciones generales

Para llevar a cabo la resolución de cualquier ejercicio o simulación en Aspen-Hysys es necesario seguir un algoritmo que de manera general se repetirá en todos los casos. Dicho algoritmo se muestra a continuación:

1. Empezar un nuevo caso en Aspen-Hysys:

Una vez abierto el programa, hacer clic en el icono  **New...** Este se encuentra situado al lado izquierdo de la pantalla. Por defecto Aspen-Hysys se sitúa en la pestaña **Component list**.

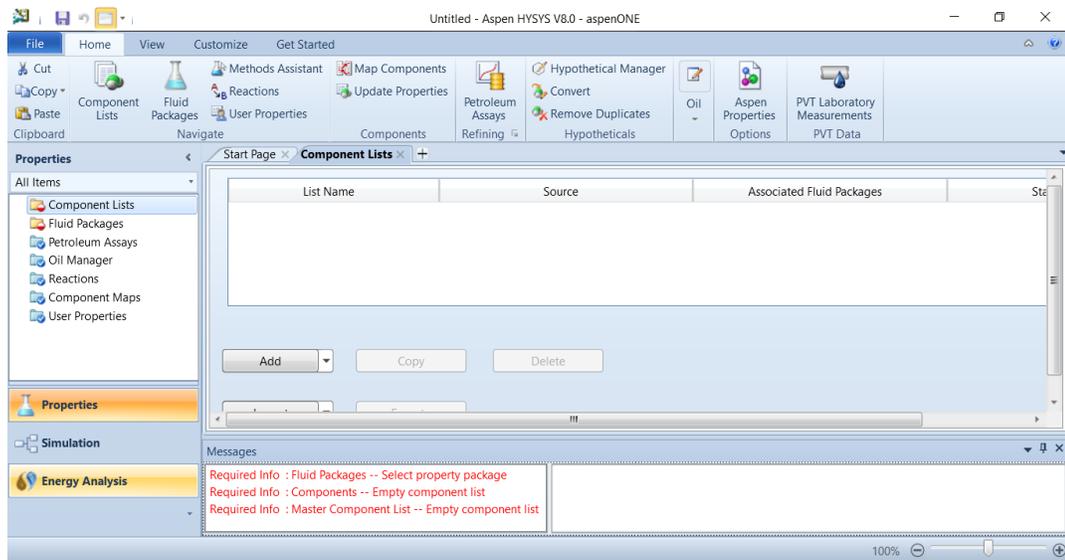
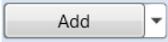


Figura A. Pestaña de lista de componentes.

2. Adición de Componentes:

- Hacer clic en el botón 
- Se buscan los componentes en la barra de búsqueda

- presiona clic en el botón 
- Repetir los pasos anteriores para cada componente a adicionar.

3. Selección del paquete termodinámico:

- Hacer clic en  Fluid Packages
- Seleccionar 

Se desplegará la lista de los diferentes paquetes termodinámicos dentro de Aspen-Hysys, seleccionar uno haciendo clic sobre este.

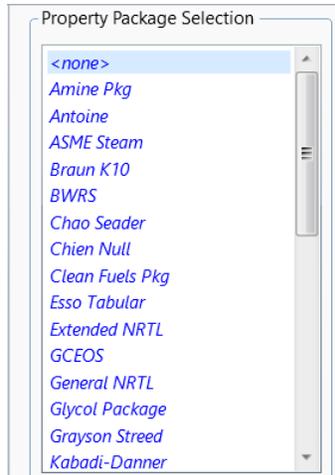


Figura B. Lista de paquetes termodinámicos Aspen-Hysys.

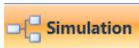
- c. Si no se tiene conocimiento de cual paquete termodinámico se va a emplear, Aspen-Hysys cuenta con la herramienta **Methods Assistance** que a través de una serie de preguntas acerca de los componentes adicionados, seleccionará el o los paquetes termodinámicos más adecuados.
- d. Para entrar en la herramienta se presiona clic en el icono  Methods Assistant se desplegará la ventana del asistente de paquete termodinámico.



Figura C. Asistente de paquete termodinámico.

Allí se siguen las instrucciones y el asistente mostrará las opciones más adecuadas para el tipo de componentes seleccionados.

4. Entorno de simulación:

Hacer clic en a  continuación, se desplegará la ventana **Model Palette** donde se pueden seleccionar todas las operaciones unitarias necesarias para la simulación.

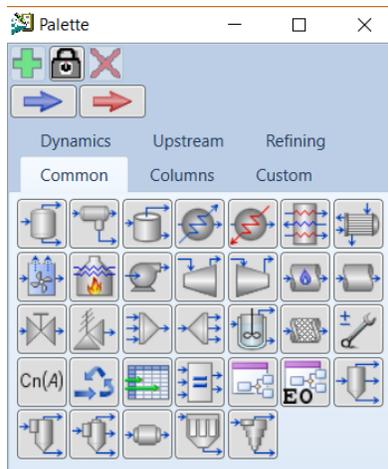


Figura D. Ventana Model Palette.

Esta ventana también puede ser mostrada presionando F4 o dirigiéndose a la pestaña **View** y seleccionando **Model Palette**.

5. Corrientes de materia y propiedades:

- Para añadir las corrientes de materia se selecciona el icono 
- Las corrientes de materia están definidas una vez se ingresan los valores de temperatura, presión, flujo y composición.
- Para insertar dichas propiedades, hacer clic en la corriente de materia, se desplegará esta ventana:

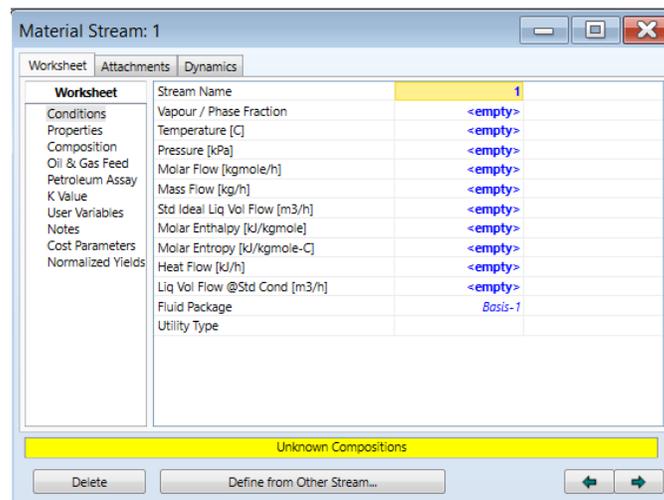


Figura C. Corriente de materia Aspen-Hysys

- En la pestaña **Conditions** se pueden insertar los valores de temperatura, presión y flujo. En la pestaña **Composition** se insertan los valores de composición que pueden ser ingresados como fracción másica o molar, flujos másicos o molares y flujos volumétricos evitando los cálculos para convertir de una unidad a otra.

1

Balance de Materia y Energía

Balance sin reacción química

Producto de Mezcla:

Dos mezclas etanol-agua se encuentran en dos matraces separados. La primera mezcla contiene 35% en peso de etanol, y la segunda contiene 75% en peso del mismo. Si se combinan 350 g de la primera mezcla con 200 g de la segunda, ¿cuál es la masa y la composición del producto? Suponga condiciones estándar para temperatura y presión [14].



Solución:

Balance total de masa:

$$350g + 200g = M$$

$$550g = M$$

Balance parcial de masa para Etanol:

$$0,35(350g) + 0,75(200g) = x550g$$

$$x = 0,4955$$

Solución en Aspen-Hysys:

1. **Componentes:** Etanol, agua.
2. **Paquete termodinámico:** Antoine
3. Añadir tres corrientes de materia con las siguientes propiedades:

Conditions			
Stream Name	Corriente 1	Corriente 2	Corriente 3
Temperature	25°C	25°C	25°C
Pressure	1 atm	1 atm	1 atm
Mass Flow	350 g/h	200 g/h	
Composition (Mass Fraction)			
Etanol	0,35	0,75	
Agua	0,65	0,25	

Tabla 1.1. Propiedades de corriente de materia, balance de materia sin reacción.

Operación Unitaria:

1. En este caso se utilizará la herramienta **Balance** de la ventana **Model palette**, para esto se selecciona el icono  y se presiona clic en la ventana de trabajo para añadirla.

Esto es lo que se tiene hasta ahora:

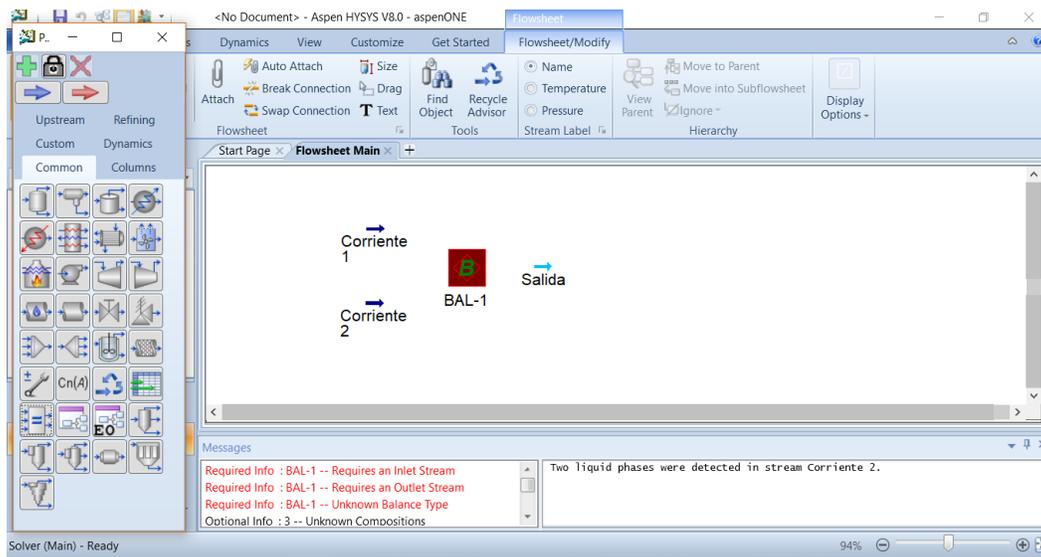


Figura 1.1. Diagrama de procesos Aspen-Hysys.

Conexión de la herramienta Balance con las corrientes.

1. Hacer doble clic en la herramienta **BAL-1**.

- En **Inlet Streams** se seleccionan las corrientes 1 y 2, y en **Outlet Streams** se selecciona la corriente Salida.

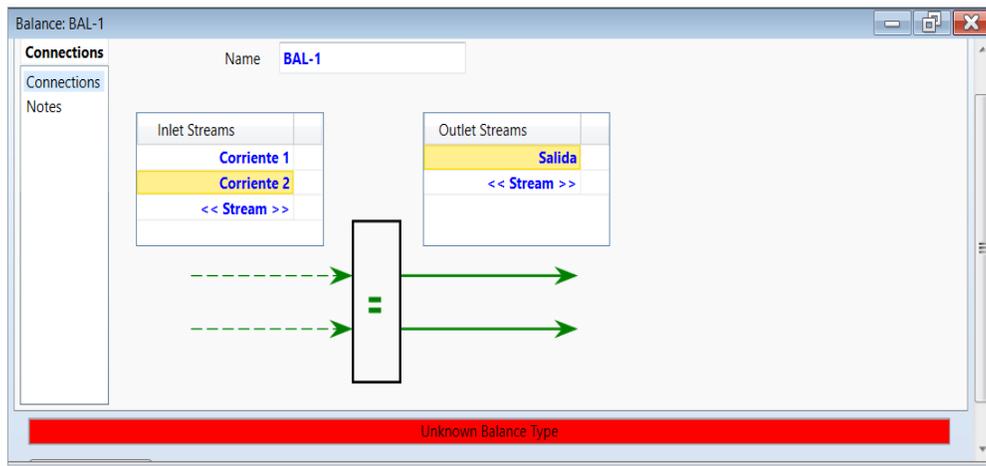


Figura 1.2. Conexión de corrientes de materia Aspen-Hysys

- Luego de esto, se debe seleccionar el tipo de balance a realizar. Para ello, se dirige a la pestaña **Parameters** y se selecciona el tipo de balance **General**. Una vez la barra inferior se encuentra en color verde con aviso de ok, se procede a revisar el resultado del ejercicio.

Resultado:

- Hacer doble clic sobre la corriente **Salida**, allí podremos observar la primera respuesta que es el flujo másico de esta corriente

Worksheet	Stream Name	Salida	Liquid Phase	Aqueous Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0.0000	0.2776	0.7224
Properties	Temperature [C]	25.00	25.00	25.00
Composition	Pressure [kPa]	101.3	101.3	101.3
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	2.132e-002	5.919e-003	1.540e-002
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	0.5500	0.2726	0.2774
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	6.204e-004	3.424e-004	2.780e-004
User Variables	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2.832e+005	-2.788e+005	-2.849e+005
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	2.879	-6.696	6.559
Cost Parameters	Heat Flow [kJ/h]	-6038	-1650	-4387
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	6.200e-004	3.421e-004	2.778e-004
	Fluid Package	Basis-1		
	Utility Type			

Figura 1.3. Flujo másico en corriente de salida

- Para ver las composiciones en fracción másica se selecciona **Composition**, luego se hace clic en **Basis** y se selecciona **Mass Fraction**.

The screenshot shows a software window titled "Material Stream: Salida" with a "Worksheet" tab selected. The main area displays a table with the following data:

	Mass Fractions	Liquid Phase	Aqueous Phase
Ethanol	0.4955	0.9997	0.0000
H2O	0.5045	0.0003	1.0000

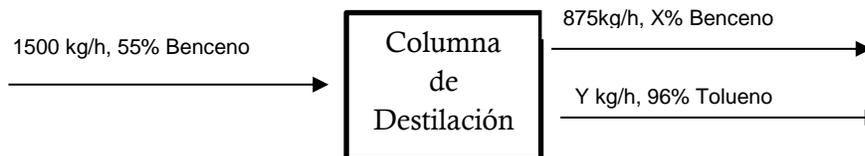
Below the table, a "Total" label is followed by a text box containing the value "1.00000".

Figura 1.4. Fracción másica en corriente de salida.

Se observa que el resultado obtenido a partir de la simulación es exactamente igual al calculado por métodos tradicionales.

Fraccionamiento de mezcla:

1500 kg/h de una mezcla de benceno y tolueno que contiene 55% en masa de benceno se separan, por destilación, en dos fracciones. La velocidad de flujo másico en la parte superior es de 875 kg/h. Se desea que el producto de fondo tenga un 96% en masa de tolueno. ¿Cuál debe ser el flujo másico en la corriente de fondo y la fracción de benceno en la parte superior para lograr este propósito?



Solución:

Balance total de masa:

$$1500kg = 875kg + y$$

$$y = 625 Kg$$

Balance parcial de masa para Benceno:

$$1500Kg(0,55) = 875kg(x) + (0,04)625kg$$

$$x = 0,91$$

Solución en Aspen-Hysys:

1. **Componentes:** Benceno, tolueno.
2. **Paquete termodinámico:** Antoine.
3. Añadir tres corrientes de materia con las siguientes propiedades:

Conditions			
Stream Name	Corriente 1	Parte superior	Fondos
Temperature	80°C	25°C	25°C
Pressure	1 atm	1 atm	1 atm
Mass Flow	1500 kg/h	875 kg/h	
Composition (Mass Fraction)			
Benceno	0,55		0,04
Tolueno	0,45		0,96

Tabla 1.2. Propiedades de corrientes de materia, balance sin reacción química.

Operación Unitaria:

1. Seleccionar la herramienta **Balance** de la ventana **Model Palette**.
2. Conectar la herramienta **Balance** a las corrientes, presionando doble clic en la herramienta **BAL-1**. En **Inlet Streams** se selecciona **Corrientes 1**, y en **Outlet Streams** se seleccionan las corriente **Parte Superior** y **Fondos**.

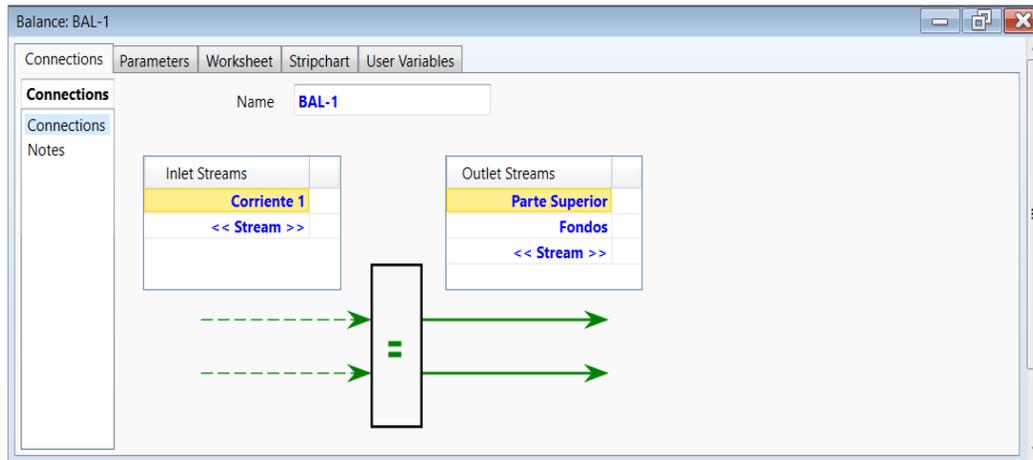


Figura 1.5. Conexión de corrientes de materia.

3. Dirigirse a la pestaña **Parameters** y se selecciona el tipo de balance **Component Mole Flow**. Una vez la barra inferior se encuentra en color verde con aviso de ok, se procede a revisar el resultado del ejercicio.

Resultado:

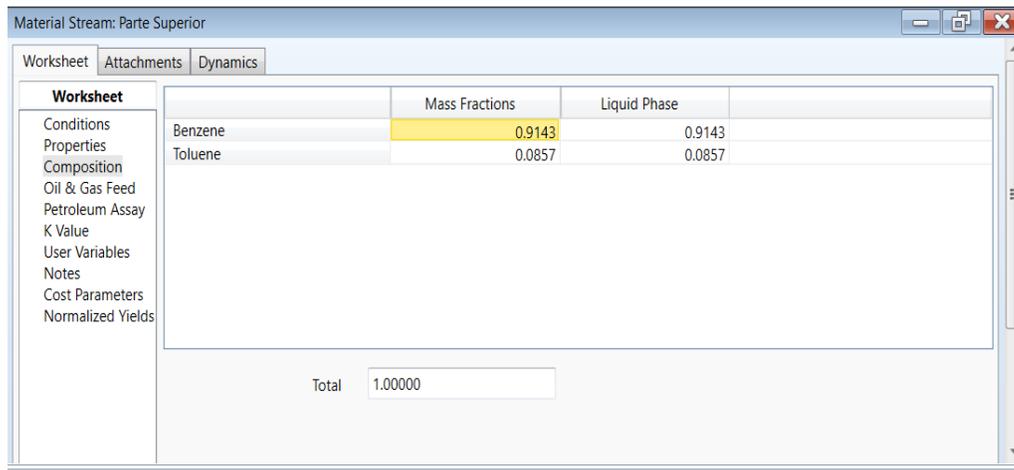
1. Hacer doble clic en la corriente **Fondos** allí se puede observar el resultado del flujo másico en esta corriente.

The screenshot shows the 'Material Stream: Fondos' window with the following data:

Worksheet	Stream Name	Fondos	Liquid Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0.0000	1.0000
Properties	Temperature [C]	25.00	25.00
Composition	Pressure [kPa]	101.3	101.3
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	6.832	6.832
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	625.0	625.0
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0.7180	0.7180
User Variables	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	1.371e+004	1.371e+004
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-110.7	-110.7
Cost Parameters	Heat Flow [kJ/h]	9.366e+004	9.366e+004
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	0.7150	0.7150
	Fluid Package	Basis-1	
	Utility Type		

Figura 1.6. Flujo másico en la corriente Fondos.

2. Hacer doble clic en la corriente **Parte Superior**, a continuación, seleccionamos **Composition**, luego se hace clic en **Basis** y finalmente se selecciona **Mass Fraction**.



The screenshot shows the 'Material Stream: Parte Superior' window in Aspen-Hysys. The 'Worksheet' tab is active, and the 'Composition' section is selected. The 'Mass Fractions' column is highlighted, showing values for Benzene (0.9143) and Toluene (0.0857). The 'Liquid Phase' column shows values of 0.9143 for Benzene and 0.0857 for Toluene. The total mass fraction is 1.00000.

	Mass Fractions	Liquid Phase
Benzene	0.9143	0.9143
Toluene	0.0857	0.0857

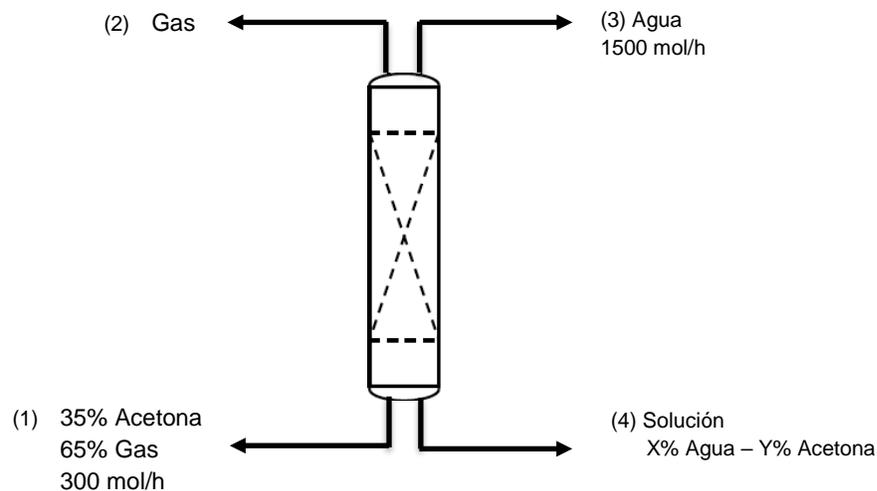
Total: 1.00000

Figura 1.7. Fracciones másicas en corriente parte superior.

Los resultados arrojados por Aspen-Hysys coinciden con los obtenidos a mano, se destaca que el simulador calcula las fracciones con cuatro cifras decimales lo que proporciona un resultado más preciso.

Balance de Materia en un absorbedor:

Puede recuperarse acetona de un gas portador, disolviéndola en una corriente de agua pura en una unidad llamada absorbedor. En el diagrama de flujo de la figura, 300 mol/h de una corriente con 35% de acetona se tratan con 1500 mol/h de una corriente de agua pura, lo que produce un gas de descarga libre de acetona y una solución de acetona en agua. Supóngase que el gas portador no se disuelve en agua. Calcule todas las variables de corrientes desconocidas.



Solución:

Balance global de materia:

$$300 \text{ mol} + 1500 \text{ mol} = M_2 + M_4$$

$$1800 \text{ mol} = M_2 + M_4$$

Balance parcial de masa para Aire:

$$300 \text{ mol}(0,65) = M_2$$

$$M_2 = 195 \text{ mol}$$

$$M_4 = 1800 \text{ mol} - M_2$$

$$M_4 = 1800 \text{ mol} - 195 \text{ mol}$$

$$M_4 = 1605 \text{ mol}$$

Balance parcial de masa para Agua:

$$1500 \text{ mol} = (x)1605 \text{ mol}$$

$$x = 0,93$$

$$y = 1 - 0,93$$

$$y = 0,07$$

Solución en Hysys:

1. **Componentes:** Agua, acetona y nitrógeno.
2. **Paquete termodinámico:** Antoine.
3. Insertar cuatro corrientes de materia con las siguientes propiedades:

	Conditions			
Stream Name	(1) Acetona-Gas	(2) Gas	(3) Agua	(4) Acetona-Agua
Temperature	25°C	25°C	25°C	25°C
Pressure	1 atm	1 atm	1 atm	1 atm
Molar Flow	300 mol/h		1500 mol/h	
	Composition (Mole Fraction)			
Aire	0,65	1,0	0,0	
Acetona	0,35	0,0	0,0	
Agua	0,0	0,0	1,0	

Tabla 1.3. Propiedades de corrientes de materia balance sin reacción

Operación Unitaria:

1. Insertar la herramienta Balance. Hacer doble clic sobre esta.
2. En la pestaña **Connections** se pueden ingresar las corrientes de entrada (**Inlet Stream**) que en este caso son (1) y (3). Así mismo las corrientes de salida (2) y (4) se seleccionan en **Outlet Stream**.
3. En la pestaña **Parameters** se selecciona el tipo de balance **Component Mole Flow**.
4. Se sabe que en la corriente de salida (4) no hay aire, sin embargo, no se puede especificar una fracción de 0,0 en esta corriente. Este problema se soluciona implementando la herramienta **Adjust**:

- Seleccionar el icono  y colocar la operación en el diagrama.
- Hacer doble clic sobre esta. Se abrirá esta ventana:

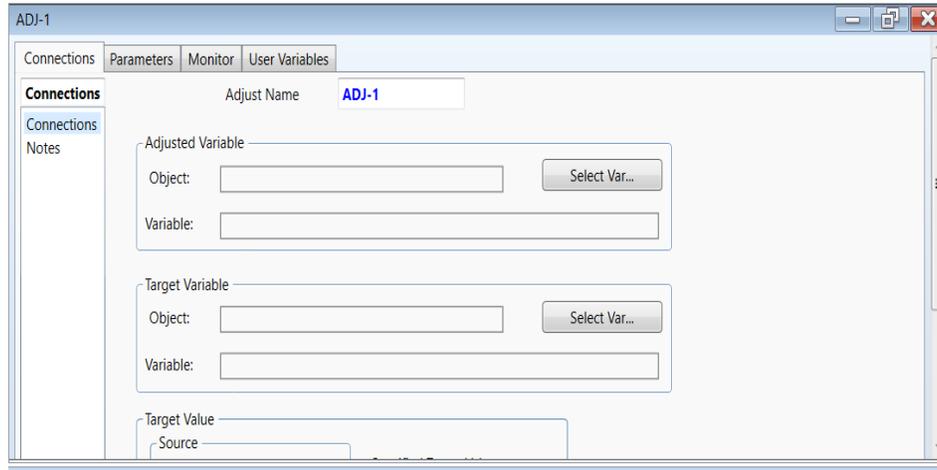


Figura 1.8. Herramienta Adjust.

- Se seleccionará la variable a ajustar (**Adjusted Variable**) en este caso **Aire**, para ellos se oprime clic en **Select Var...**
- Seleccionar la corriente **(2) Gas**, luego la variable a ajustar **Molar Flow**, finalmente **OK**.

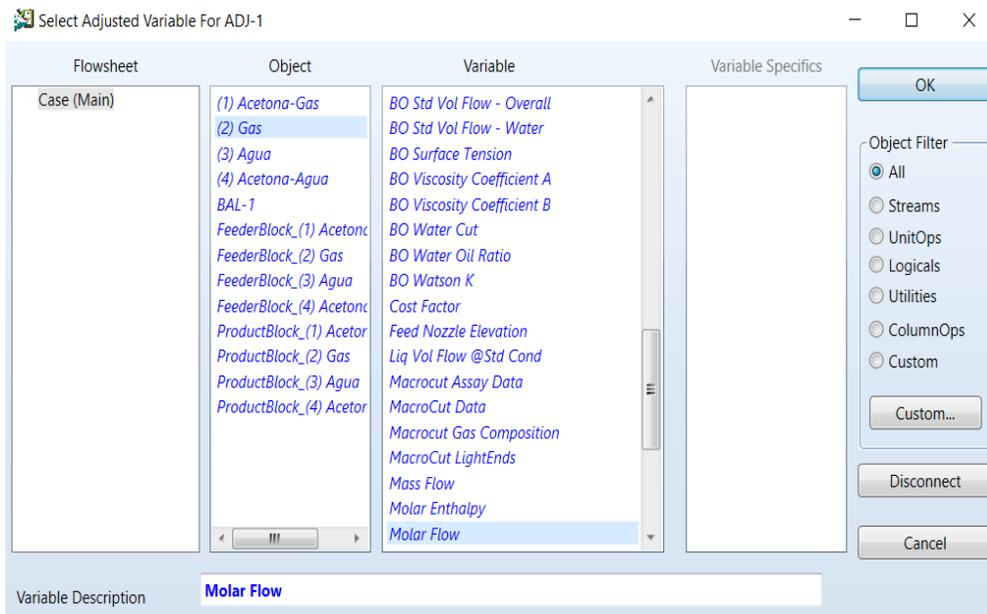


Figura 1.9. Parámetros herramienta Adjust.

- Se repite este procedimiento con la variable objetivo (**Target Variable**).
- En este caso será la corriente (4) Acetona-Agua, la variable **Master Comp Mole Fraction** y el componente **Air**.
- Pasar a la pestaña **Parameters** y especificar las características de iteración:

Method	Secant
Tolerance	1e-6
Step Size	10gmol/h
Maximum Iterations	1000

- Aun así, no se resolverá el sistema, se tiene que dar un valor al flujo de aire que comience la iteración. Cerrar la ventana y abrir la corriente (2) Gas, especificar un flujo de 100 gmol/h. Rápidamente se observa cómo se ajusta al valor de 195 gmol/h. Esto quiere decir que el ajustador está activo y el sistema resuelto.

Resultados:

Una forma sencilla de observar los resultados es hacer clic derecho sobre el diagrama de procesos, en la ventana desplegada seleccionar **Add Workbook Table**. Seleccionar el tipo de tabla, en este caso **Compositions** y **Material Streams**.

Compositions					
		(1) Acetona-Gas	(2) Gas	(3) Agua	(4) Acetona-Agua
Comp Mole Frac (Air)		0,6500	1,0000	0,0000	0,0000
Comp Mole Frac (Acetone)		0,3500	0,0000	0,0000	0,0654
Comp Mole Frac (H2O)		0,0000	0,0000	1,0000	0,9346

Material Streams					
		(1) Acetona-Gas	(2) Gas	(3) Agua	(4) Acetona-Agua
Vapour Fraction		0,9339	1,0000	0,0000	0,0000
Temperature	C	25,00	25,00	25,00	25,00
Pressure	kPa	101,3	101,3	101,3	101,3
Molar Flow	kgmole/h	0,3000	0,1950	1,500	1,605
Mass Flow	kg/h	11,74	5,645	27,02	33,12
Liquid Volume Flow	m3/h	1,414e-002	6,418e-003	2,708e-002	3,480e-002
Heat Flow	kJ/h	-2,350e+004	-1,268	-4,274e+005	-4,536e+005

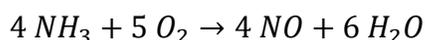
Figura 1.10. Tabla de resultados de las corrientes de materia.

Enfocándose en los valores del flujo molar de las corrientes de materia 2 y 4 así como las composiciones de la corriente 4, se puede notar que los resultados coinciden perfectamente con los calculados a mano.

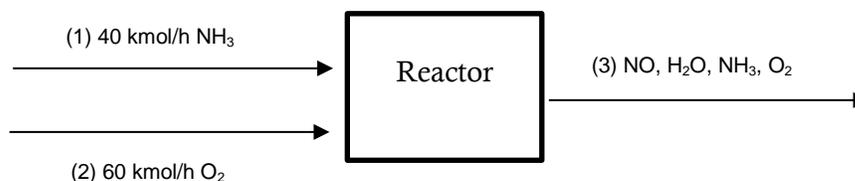
Balance con Reacción Química:

Balance de materia con una única reacción:

Los procesos modernos para producir HNO_3 (ácido nítrico) utilizan un primer paso que consiste en la reacción de NH_3 (amoníaco) con oxígeno sobre un catalizador de platino para producir óxido nítrico:



Si se obtiene una conversión del 90% de NH_3 con una alimentación de 40 kmol/h de NH_3 y 60 kmol/h de O_2 . Calcule el flujo de salida del reactor, así como las fracciones de cada componente en esta corriente.



Solución:

Moles de NH_3 que reaccionan:

$$n_{\text{NH}_3} = 0,9(40 \text{ kmol})$$

$$n_{\text{NH}_3} = 36 \text{ kmol}$$

Balance parcial de masa para NH_3 :

$$\text{Entrada} + \text{Producción} = \text{Salida} + \text{Consumo}$$

$$40 \text{ kmol} = n_{3\text{NH}_3} + 36 \text{ kmol}$$

$$n_{3\text{NH}_3} = 4 \text{ kmol}$$

Balance parcial de masa para O_2 :

$$60 \text{ kmol} = n_{3\text{O}_2} + \left(36 \text{ kmol NH}_3 \times \frac{5 \text{ kmol O}_2}{4 \text{ kmol NH}_3} \right)$$

$$n_{3\text{O}_2} = 15 \text{ kmol}$$

Balance parcial de masa para NO:

$$\left(36 \text{ kmol } NH_3 \times \frac{4 \text{ kmol } NO}{4 \text{ kmol } NH_3} \right) = n_{3NO}$$
$$n_{3NO} = 36 \text{ kmol}$$

Balance parcial de masa para H₂O:

$$\left(36 \text{ kmol } NH_3 \times \frac{6 \text{ kmol } H_2O}{4 \text{ kmol } NH_3} \right) = n_{3H_2O}$$
$$n_{3H_2O} = 54 \text{ kmol}$$

$$n_3 = n_{3NH_3} + n_{3O_2} + n_{3NO} + n_{3H_2O}$$
$$n_3 = 4 \text{ kmol} + 15 \text{ kmol} + 36 \text{ kmol} + 54 \text{ kmol}$$
$$n_3 = 109 \text{ kmol}$$

Fracción de NH₃ en (3):

$$x_{NH_3} = \frac{4 \text{ kmol}}{109 \text{ kmol}}$$
$$x_{NH_3} = 0,0367$$

Fracción de O₂ en (3):

$$x_{O_2} = \frac{15 \text{ kmol}}{109 \text{ kmol}}$$
$$x_{O_2} = 0,1376$$

Fracción de NO en (3):

$$x_{NO} = \frac{36 \text{ kmol}}{109 \text{ kmol}}$$
$$x_{NO} = 0,3303$$

Fracción de H₂O en (3):

$$x_{H_2O} = \frac{54 \text{ kmol}}{109 \text{ kmol}}$$
$$x_{H_2O} = 0,4954$$

Solución en Aspen-Hysys:

1. **Componentes:** NH₃, O₂, NO y H₂O.
2. **Paquete Termodinámico:** Peng Robinson.

Reacción química:

Se debe tener en cuenta que la ecuación química debe estar previamente balanceada para llevar a cabo la simulación.

1. Seleccionar la pestaña **Reactions**.
2. Hacer clic en **Add**.
3. En la parte inferior de la ventana, hacer clic en **Add Reaction**.
4. Seleccionar **Conversion** y nuevamente **Add Reaction**.

Esto es lo que se tiene hasta ahora:

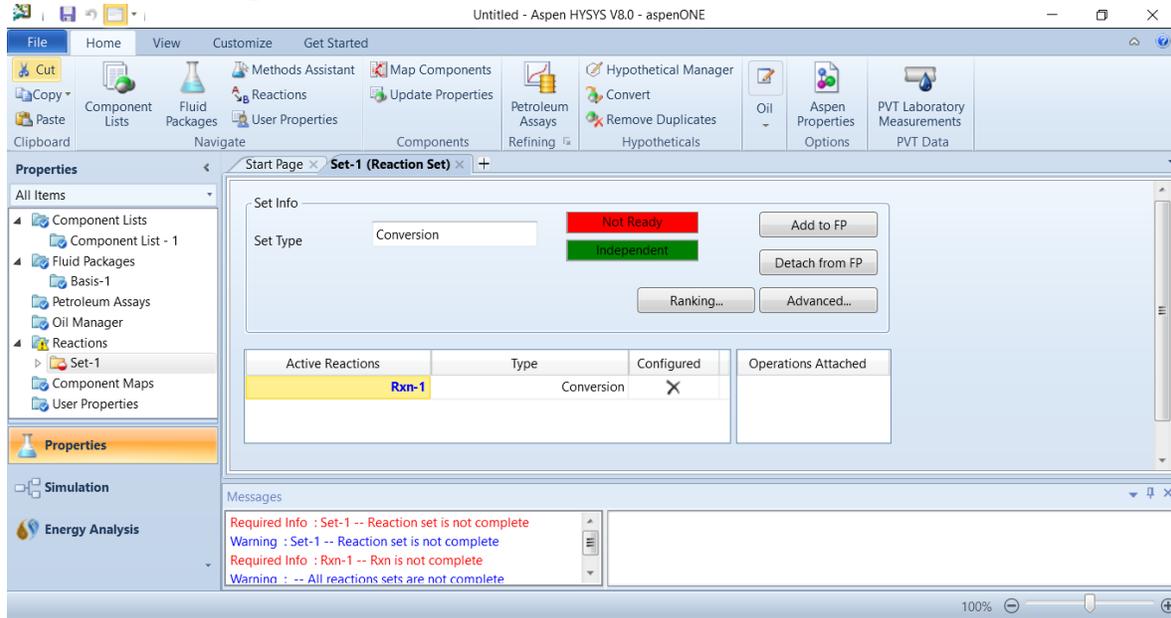


Figura 1.11. Ventana de reacciones.

5. Hacer doble clic en **Rxn-1**. Se desplegará esta ventana:

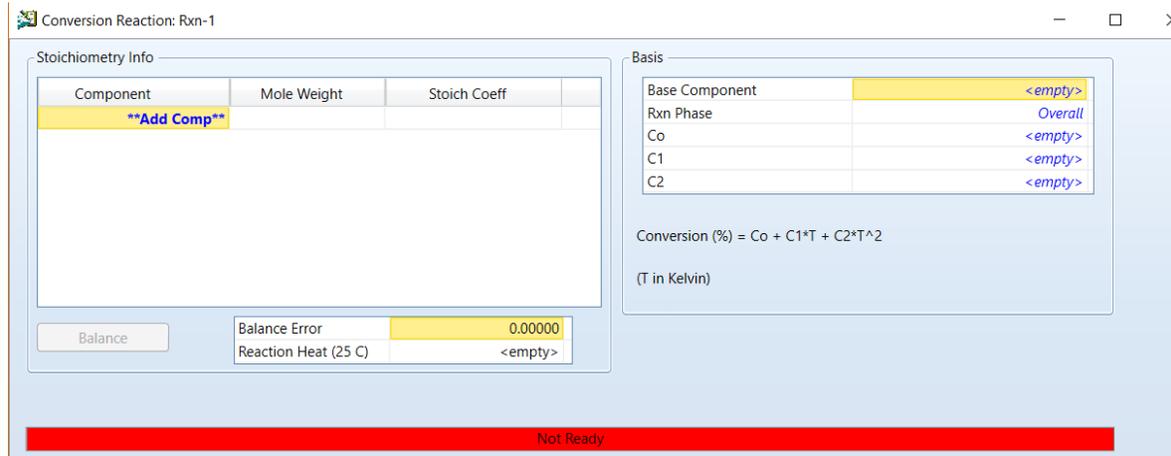


Figura 1.12. Adición de reacciones.

6. Hacer clic en ****Add Comp**** y seleccionar los componentes de la reacción.

- En **Stoich Coeff** se ingresan los coeficientes estequiométricos de la reacción, teniendo en cuenta que para los reactivos se debe ingresar un signo menos, seguido del coeficiente debido a que estos componentes son consumidos.
- En la sección **Basis**, se inserta el porcentaje de conversión de la reacción en la casilla **Co**, en este caso 90%. La barra de aviso ahora debería de estar en verde y OK.

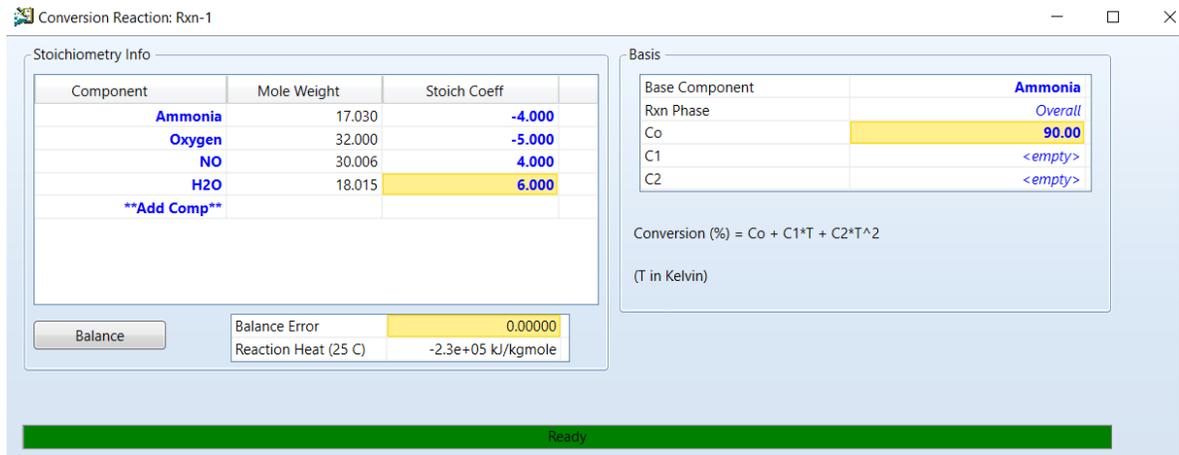


Figura 1.13. Adición de reacciones y porcentaje de conversión.

- Cerrar esta ventana, dar clic en **Add to FP**
- En la ventana que se despliega dar clic en **Add Set to Fluid Package**

Simulación:

- De la ventana **Model Palette**, adicionar al diagrama de procesos la unidad **Conversion Reactor** presionando el icono  que se encuentra en la sección **Columns**.
- Adicionar tres corrientes de materia y añadir las siguientes propiedades:

Conditions			
Stream Name	(1) Amoniaco	(2) Oxigeno	(3) Salida
Temperature	25°C	25°C	
Pressure	1 atm	1 atm	1 atm
Molar Flow	40 kmol/h	60 kmol/h	
Composition (Mole Fraction)			
NH ₃	1	0,0	
O ₂	0,0	1,0	
NO	0,0	0,0	
H ₂ O	0,0	0,0	

Tabla 1.4 Corrientes de materia en balance de materia con reacción química.

Operación Unitaria:

1. Hacer doble clic sobre la herramienta **CRV-100**
2. En la pestaña **Connections** se insertan las corrientes de entrada (**Inlets**) de **Amoniaco** y **Oxígeno**, en **Vapour Outlet** se selecciona la corriente **Salida**. En **Liquid Outlet** escribir “Salida Liquido”, aunque el producto de la reacción es netamente gaseoso, para llevar a cabo la simulación es necesario introducir una corriente de líquido.
3. En la pestaña **Reactions**, dirigirse a **Reaction Set** y seleccionar **Set-1**.

Resultados:

Hacer clic derecho sobre el diagrama de procesos, en la ventana desplegada seleccionar **Add Workbook Table**. Seleccionar el tipo de tabla, en este caso **Compositions** y **Material Streams**.

Compositions					
	(1) Amoniaco	(2) Oxigeno	(3) Salida	Salida Liquido	
Comp Mole Frac (Ammonia)	1,0000	0,0000	0,0367	0,0367	
Comp Mole Frac (Oxygen)	0,0000	1,0000	0,1376	0,1376	
Comp Mole Frac (NO)	0,0000	0,0000	0,3303	0,3303	
Comp Mole Frac (H2O)	0,0000	0,0000	0,4954	0,4954	

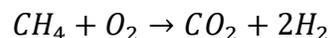
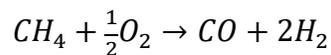
Material Streams					
		(1) Amoniaco	(2) Oxigeno	(3) Salida	Salida Liquido
Vapour Fraction		1,0000	1,0000	1,0000	0,0000
Temperature	C	25,00	25,00	1871	1871
Pressure	kPa	101,3	101,3	101,3	101,3
Molar Flow	kgmole/h	40,00	60,00	109,0	0,0000
Mass Flow	kg/h	681,2	1920	2601	0,0000
Liquid Volume Flow	m3/h	1,106	1,688	16,65	0,0000
Heat Flow	kJ/h	-1,831e+006	-572,6	-1,831e+006	-0,0000

Figura 1.14. Resultados balance de materia con reacción química.

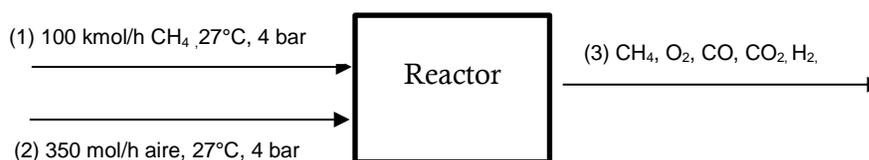
Analizando los resultados seleccionados en los recuadros rojos, se puede decir que coinciden a la perfección con los calculados a mano.

Balance de materia con reacciones secuenciales:

La conversión de combustibles en hidrógeno puede llevarse a cabo mediante la oxidación parcial. El método de oxidación parcial se basa en la reacción del combustible, por ejemplo, metano con aire, para producir óxidos de carbono e hidrógeno.



Si se alimentan 100 kmol/h de metano a 27°C y 4 bar en un reactor con 350 kmol/h de aire a las mismas condiciones. Cuáles son los flujos molares de los productos de salida, teniendo en cuenta que la reacción de producción de monóxido de carbono tiene una conversión de 40%, mientras que la reacción de producción de dióxido de carbono tiene una conversión de 60%.



Solución:

$$n_{CH_4,rxn\ 1} = 100\ kmol \times 0,4$$

$$n_{CH_4,rxn\ 1} = 40\ kmol$$

$$n_{CH_4,sin\ reaccionar} = 100\ kmol - 40\ kmol$$

$$n_{CH_4,sin\ reaccionar} = 60\ kmol$$

$$n_{CH_4,rxn\ 2} = 60\ kmol \times 0,6$$

$$n_{CH_4,rxn\ 2} = 36\ kmol$$

Balance parcial de masa de CH₄:

$$Entrada + Producción = Salida + Consumo$$

$$100\ kmol = 40\ kmol + 36\ kmol + n_{3,CH_4}$$

$$n_{3,CH_4} = 24\ kmol$$

Balance parcial de masa de CO:

$$\left(40 \text{ kmolCH}_4 \times \frac{1 \text{ kmolCO}}{1 \text{ kmolCH}_4}\right) = n_{3,CO}$$
$$n_{3,CO} = 40 \text{ kmol}$$

Balance parcial de masa O₂:

- O₂ consumido en la reacción 1:

$$40 \text{ kmolCH}_4 \times \frac{0,5 \text{ kmolO}_2}{1 \text{ kmolCH}_4} = 20 \text{ kmol}$$

- O₂ consumido en la reacción 2:

$$36 \text{ kmolCH}_4 \times \frac{1 \text{ kmolO}_2}{1 \text{ kmolCH}_4} = 36 \text{ kmol}$$

$$350 \text{ kmol} \times 0,21 = 20 \text{ kmol} + 36 \text{ kmol} + n_{3,O_2}$$

$$n_{3,O_2} = 17,5 \text{ kmol}$$

Balance parcial de masa de H₂:

- H₂ producido en la reacción 1:

$$40 \text{ kmolCH}_4 \times \frac{2 \text{ kmolO}_2}{1 \text{ kmolCH}_4} = 80 \text{ kmol}$$

- H₂ producido en la reacción 2:

$$36 \text{ kmolCH}_4 \times \frac{2 \text{ kmolO}_2}{1 \text{ kmolCH}_4} = 72 \text{ kmol}$$

$$80 \text{ kmol} + 72 \text{ kmol} = n_{3,H_2}$$

$$n_{3,H_2} = 152 \text{ kmol}$$

Balance parcial de masa de CO₂:

$$36 \text{ kmolCH}_4 \times \frac{1 \text{ kmolO}_2}{1 \text{ kmolCH}_4} = n_{3,CO_2}$$

$$n_{3,CO_2} = 36 \text{ kmol}$$

Balance parcial de masa de N₂:

$$350 \text{ kmol} \times 0,79 = n_{3,N_2}$$

$$n_{3,N_2} = 276,5 \text{ kmol}$$

Solución en Aspen-Hysys:

1. **Componentes:** CH₄, O₂, CO, CO₂, H₂, N₂.
3. **Paquete Termodinámico:** Peng-Robinson.

Reacción química:

Se debe tener en cuenta que la ecuación química debe estar previamente balanceada para llevar a cabo la simulación.

1. Seleccionar la pestaña **Reactions**.
2. Hacer clic en **Add**.
3. En la parte inferior de la ventana, hacer clic en **Add Reaction**.
4. Seleccionar **Conversion** y nuevamente **Add Reaction**. Realizar este paso una segunda vez para hacer la adición de otra reacción. Esto es lo que se tiene hasta ahora:

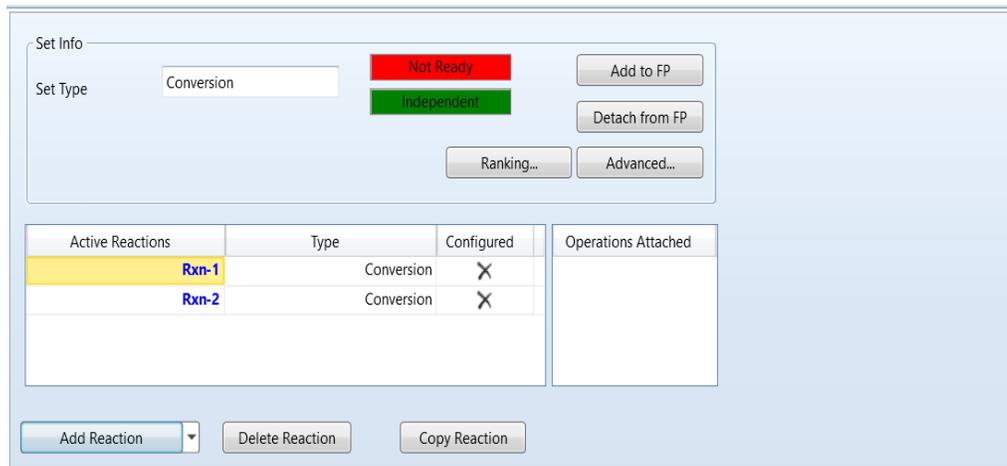


Figura 1.15. Adición de dos reacciones.

5. Hacer doble clic en **Rxn-1**.
6. Hacer clic en ****Add Comp**** y seleccionar los componentes de la reacción.
7. En **Stoich Coeff** se ingresan los coeficientes estequiométricos de la reacción, teniendo en cuenta que para los reactivos se debe ingresar un signo menos, seguido del coeficiente debido a que estos componentes son consumidos.
8. En la sección **Basis**, se inserta el porcentaje de conversión de la reacción en la casilla **Co**, en este caso 40%. La barra de aviso ahora debería de estar en verde y OK. Cerrar la ventana.
9. Hacer doble clic en **Rxn-2**
10. Ingresar los componentes de reacción, los coeficientes y el porcentaje de conversión para la segunda reacción. Cerrar ventana.
11. Hacer clic en **Add to FP**

12. En la ventana que se despliega dar clic en **Add Set to Fluid Package**. Hasta ahora esto es lo que se tiene:

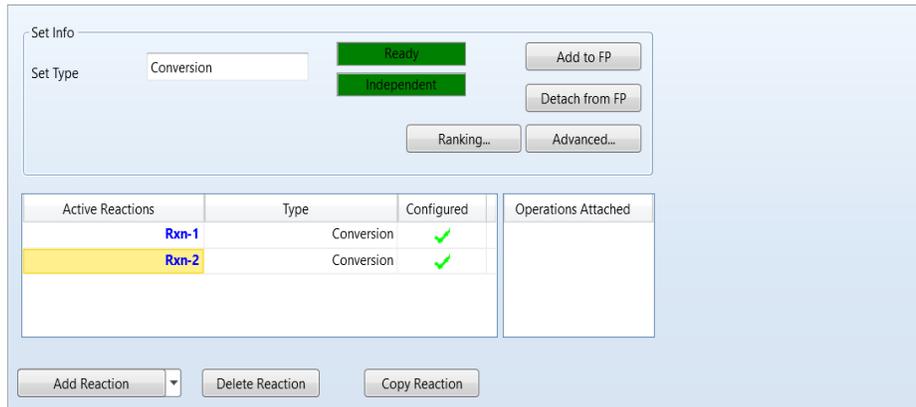


Figura 1.16. Ventana de reacciones con parámetros establecidos.

13. Hacer doble clic en Ranking e insertar la información como se muestra a continuación:

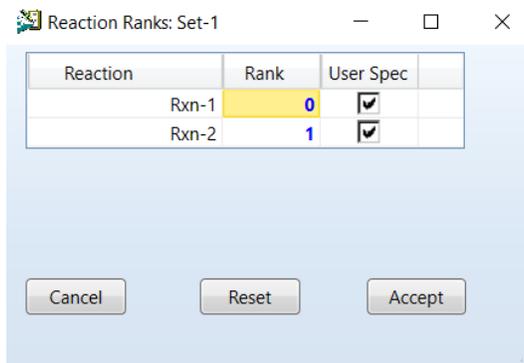


Figura 1.17. Selección de reacciones secuenciales.

Esto se hace con el fin de hacer las reacciones secuenciales, la primera reacción en ocurrir será la de menor valor en este caso 0, la siguiente será la de valor 1.

Simulación:

1. De la ventana **Model Palette**, adicionar al diagrama de procesos la unidad **Conversion Reactor**.
2. Adicionar tres corrientes de materia y añadir las siguientes propiedades:

Conditions			
Stream Name	(1) Metano	(2) Aire	(3) Salida
Temperature	27°C	27°C	
Pressure	4 bar	4 bar	
Molar Flow	100 kmol/h	350 kmol/h	

Composition (Mole Fraction)		
CH ₄	1	0,0
O ₂	0,0	0,21
CO	0,0	0,0
CO ₂	0,0	0,0
N ₂	0,0	0,79
H ₂	0,0	0,0

Tabla 1.5. Propiedades de corrientes de materia en balance con reacciones químicas simultaneas.

Operación Unitaria:

- Hacer doble clic sobre la herramienta **CRV-100**
- En la pestaña **Connections** se insertan las corrientes de entrada (**Inlets**) de **Metano** y **Aire**, en **Vapour Outlet** se selecciona la corriente **Salida**. En **Liquid Outlet** escribir “Salida Liquido”, aunque el producto de la reacción es netamente gaseoso, para llevar a cabo la simulación es necesario introducir una corriente de líquido.
- En la pestaña **Reactions**, dirigirse a **Reaction Set** y seleccionar **Set-1**.

Resultados:

- Hacer doble clic en la corriente **Salida**.
- Dirigirse a la pestaña **Composition**.
- Hacer clic en **Basis...** y seleccionar **Mole Flows**. Allí se podrán observar los flujos molares de todos los componentes en esta corriente.

	Molar Flows	Vapour Phase	Liquid Phase
Methane	24.0000	24.0000	0.0000
Hydrogen	152.0000	152.0000	0.0000
Nitrogen	276.5000	276.5000	0.0000
Oxygen	17.5000	17.5000	0.0000
CO ₂	36.0000	36.0000	0.0000
CO	40.0000	40.0000	0.0000

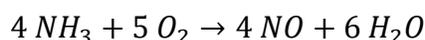
Total 546.00000 kgmole/h

Figura 1.18. Resultados balance con reacciones químicas simultaneas.

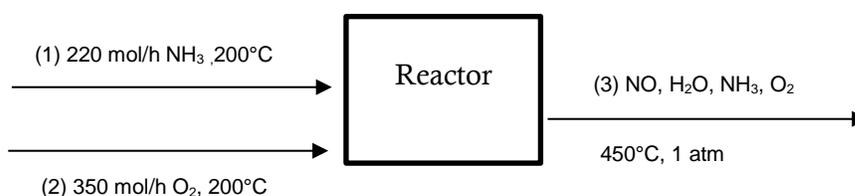
Una vez más se puede apreciar que cada uno de los flujos molares calculados por el simulador son exactamente iguales a los calculados a partir de métodos tradicionales.

Balance de energía con reacción química:

Considere la oxidación del amoníaco:



Un reactor se alimenta con 220 moles/h de NH_3 y 350 mol/h de O_2 a 200°C , en donde el amoníaco se consume totalmente. El flujo de producto sale como gas a 450°C . Calcule el calor transferido hacia o desde el reactor suponiendo que el proceso se efectúa, aproximadamente a 1 atm.



Solución:

Balance parcial de masa de NO:

$$220 \text{ mol NH}_3 \times \frac{1 \text{ mol NO}}{1 \text{ mol NH}_3} = n_{3, \text{NO}}$$
$$n_{3, \text{NO}} = 220 \text{ mol}$$

Balance parcial de masa de H₂O:

$$220 \text{ mol NH}_3 \times \frac{6 \text{ mol H}_2\text{O}}{4 \text{ mol NH}_3} = n_{3, \text{H}_2\text{O}}$$
$$n_{3, \text{H}_2\text{O}} = 330 \text{ mol}$$

Balance parcial de masa de O₂:

$$n_{3, \text{O}_2} = n_{1, \text{O}_2} - n_{\text{O}_2 \text{ reaccionan}}$$
$$n_{3, \text{O}_2} = 350 \text{ mol} - \left(220 \text{ mol NH}_3 \times \frac{5 \text{ mol O}_2}{4 \text{ mol NH}_3} \right)$$
$$n_{3, \text{O}_2} = 75 \text{ mol}$$

Balance de Energía:

$$Q = \Delta H_R = \Delta H^\circ_R + \sum \Delta H_{salida} - \sum \Delta H_{entrada}$$

$$\Delta H^\circ_R = \sum \Delta H^\circ_{f,productos} - \sum \Delta H^\circ_{f,reactivos}$$

$$\Delta H^\circ_R = \left[\left(220 \text{ mol NO} \times 90,37 \frac{\text{KJ}}{\text{mol NO}} \right) + \left(330 \text{ mol H}_2\text{O} \times -241,83 \frac{\text{KJ}}{\text{mol H}_2\text{O}} \right) \right] - \left[220 \text{ mol NH}_3 \times -46,19 \frac{\text{KJ}}{\text{mol NH}_3} \right]$$

$$\Delta H^\circ_R = \frac{-49760,7 \text{ kJ}}{220 \times 10^{-3} \text{ kmol NH}_3}$$

$$\Delta H^\circ_R = -2,3 \times 10^5 \frac{\text{KJ}}{\text{kmol}}$$

$$\Sigma \Delta H_{salida} = \left(m_{NO} \int_{25+273}^{450+273} C_{pNO} dt \right) + \left(m_{H_2O} \int_{25+273}^{450+273} C_{pH_2O} dt \right) + \left(m_{O_2} \int_{25+273}^{450+273} C_{pO_2} dt \right)$$

En este caso los Cp están en función de la temperatura y están dados por la siguiente expresión:

$$Cp = a + bT + cT^2 + dT^3$$

Los valores de los coeficientes para cada componente se resumen a continuación:

Componente	a	b	c	d
NH ₃	27,568	2,5630x10 ⁻²	0,99072x10 ⁻⁵	-6,6009x10 ⁻⁹
H ₂ O	32,24	0,1923X10 ⁻²	1,055x10 ⁻⁵	-3,595x10 ⁻⁹
O ₂	25,48	1,520x10 ⁻²	-0,7155x10 ⁻⁵	1,312x10 ⁻⁹
NO	29,34	-0,09395x10 ⁻²	0,9747x10 ⁻⁵	-4,187x10 ⁻⁹

Tabla 1.6. Capacidades caloríficas en función de la temperatura [15].

$$\Sigma \Delta H_{salida} = 8880,2523 \text{ kJ}$$

$$\Sigma \Delta H_{entrada} = \left(m_{H_2O} \int_{25+273}^{200+273} C_{pNH_3} dt \right) + \left(m_{O_2} \int_{25+273}^{200+273} C_{pO_2} dt \right)$$

$$\Sigma \Delta H_{entrada} = 3342,0470 \text{ kJ}$$

$$Q = -49760,7kJ + 8880,2523 kJ - 3342,0470 kJ$$

$$Q = -44222,4947 kJ$$

$$Q = -4,422 \times 10^4 kJ$$

Solución en Aspen-Hysys:

1. **Componentes:** NH₃, O₂, NO, H₂O.
2. **Paquete Termodinámico:** Peng-Robinson.

Reacción química:

1. Seleccionar la pestaña **Reactions**.
2. Hacer clic en **Add**.
3. En la parte inferior de la ventana, hacer clic en **Add Reaction**.
4. Seleccionar **Conversion** y nuevamente **Add Reaction**.
5. Hacer doble clic en **Rxn-1**.
6. Hacer clic en ****Add Comp**** y seleccionar los componentes de la reacción.
7. En **Stoich Coeff** se ingresan los coeficientes estequiométricos de la reacción, teniendo en cuenta que para los reactivos se debe ingresar un signo menos, seguido del coeficiente debido a que estos componentes son consumidos.
8. En la sección **Basis**, se inserta el porcentaje de conversión de la reacción en la casilla **Co**, en este caso 100%. La barra de aviso ahora debería de estar en verde y OK. Cerrar la ventana.
9. Hacer clic en **Add to FP**
10. En la ventana que se despliega dar clic en **Add Set to Fluid Package**.

Simulación:

1. De la ventana **Model Palette**, adicionar al diagrama de procesos la unidad **Conversion Reactor**.
2. Adicionar tres corrientes de materia y añadir las siguientes propiedades:

Conditions			
Stream Name	Amoniaco	Oxígeno	Salida vapor
Temperature	200°C	200°C	450°C
Pressure	1 atm	1 atm	1 atm
Molar Flow	220 mol/h	350 mol/h	
Composition (Mole Fraction)			
NH₃	1	0,0	
O₂	0,0	1,0	
NO	0,0	0,0	
H₂O	0,0	0,0	

Tabla 1.7. Propiedades corrientes de materia en balance de energía con reacción química.

Operación Unitaria:

1. Hacer doble clic sobre la herramienta **CRV-100**
2. En la pestaña **Connections** se insertan las corrientes de entrada (**Inlets**) de **Amoniaco** y **Oxígeno**, en **Vapour Outlet** se selecciona la corriente **Salida**. En **Liquid Outlet** escribir “Salida Liquido”, aunque el producto de la reacción es netamente gaseoso, para llevar a cabo la simulación es necesario introducir una corriente de líquido. En **Energy** escribir “Q”, de esto dependerá que la herramienta realice los cálculos de energía.
3. En la pestaña **Reactions**, dirigirse a **Reaction Set** y seleccionar **Set-1**. En este punto, la barra de notificación debería estar en verde y Ok así como las corrientes deberían tener un color azul oscuro indicando que el proceso ha sido resuelto.

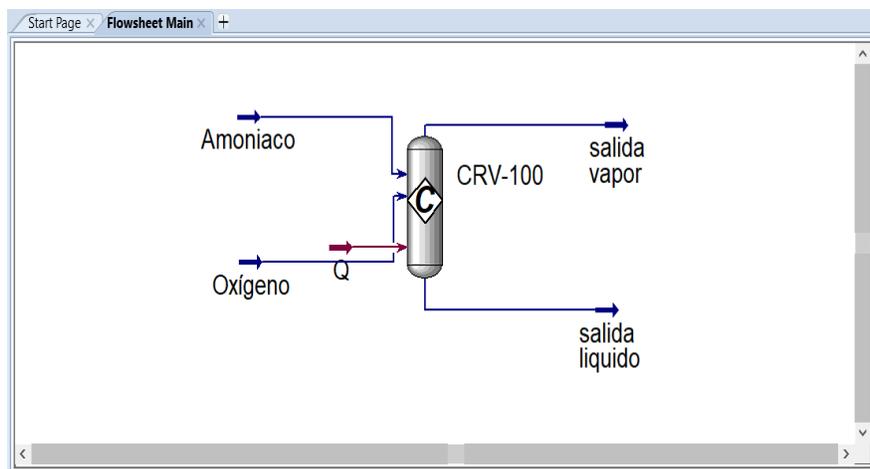


Figura 1.18. Diagrama del proceso de reacción.

Resultados:

Hacer clic derecho sobre el diagrama de procesos, en la ventana desplegada seleccionar **Add Workbook Table**. Seleccionar el tipo de tabla, en este caso **Energy Streams**.

Energy Streams		
		Q
Heat Flow	kJ/h	-4,398e+004

Como se puede apreciar el valor no es totalmente exacto al encontrado por métodos convencionales, esto se debe a las propiedades termodinámicas que adquieren los componentes con la selección del paquete termodinámico Peng Robinson.

Balance de energía en un intercambiador de calor:

Un intercambiador de calor se utiliza para enfriar aire caliente con agua fría. El aire caliente entra por el lado del tubo del intercambiador de calor con un flujo másico de 0,035 kg/s y 227°C para enfriarse a 127°C. El agua de enfriamiento en el lado de la coraza fluye a razón de 0,055 kg/s a una temperatura de 20°C. Determine la temperatura de salida del agua.



Solución:

Balance de energía:

$$Q_{\text{aire}} = Q_{\text{H}_2\text{O}}$$

$$m_{\text{aire}} C_{p_{\text{aire}}} \Delta T_{\text{aire}} = m_{\text{agua}} C_{p_{\text{agua}}} \Delta T_{\text{agua}}$$

Calculo del flujo de calor del aire:

$$Q_{\text{aire}} = m_{\text{aire}} C_{p_{\text{aire}}} \Delta T_{\text{aire}}$$

Para el valor del Cp del aire se debe realizar el promedio de estos a las temperaturas de entrada (C_p a 227°C=1,029 kJ/kg°C) y salida (C_p a 127°C=1,013 kJ/kg°C) [15].

$$C_{p_{\text{aire}}} = \frac{(1,013 + 1,029) \frac{\text{kJ}}{\text{kg}^\circ\text{C}}}{2}$$

$$C_{p_{\text{aire}}} = 1,021 \frac{\text{kJ}}{\text{kg}^\circ\text{C}}$$

$$Q_{\text{aire}} = \left(0,035 \frac{\text{kg}}{\text{s}}\right) \left(1,021 \frac{\text{kJ}}{\text{kg}^\circ\text{C}}\right) (500 - 400)^\circ\text{C}$$

$$Q_{\text{aire}} = 3,5735 \text{ kJ/s}$$

Calculo del ΔT_{agua} :

$$Q_{\text{aire}} = m_{\text{agua}} C_{p_{\text{agua}}} \Delta T_{\text{agua}}$$

$$\Delta T_{agua} = \frac{Q_{aire}}{m_{agua} C p_{agua}}$$

$$\Delta T_{agua} = \frac{3,5735 \frac{kJ}{s}}{\left(0,055 \frac{kg}{s}\right) \left(4,138 \frac{kJ}{kg \cdot ^\circ C}\right)}$$

$$\Delta T_{agua} = 15,53^\circ C$$

Calculo de la temperatura de salida del agua:

$$\Delta T_{agua} = T_4 - T_3$$

$$T_4 = \Delta T_{agua} + T_3$$

$$T_4 = 15,53^\circ C + 20^\circ C$$

$$T_4 = 35,53^\circ C$$

Solución en Aspen-Hysys:

1. **Componentes:** Aire, agua
2. **Paquete Termodinámico:** Peng-Robinson.

Simulación

1. Insertar al diagrama de procesos un intercambiador de calor con el icono  que se encuentra en **Model Palette** en la sección **Common**.
2. Añadir cuatro corrientes de materia con las siguientes características:

Conditions				
Stream Name	Aire Caliente	Aire Frio	Agua Fría	Agua Caliente
Temperature	227°C	200°C	20°C	
Pressure	1 atm	1 atm	1 atm	1 atm
Mass Flow	0,035 kg/s	0,035 kg/s	0,055 kg/s	0,055 kg/s
Composition (Mass Fraction)				
Aire	1	1	0,0	0,0
H₂O	0,0	0,0	1	1

Tabla 1.8. Propiedades corrientes de materia en balance de energía en intercambiador de calor.

Conexión de las corrientes de materia:

1. Hacer doble clic sobre la herramienta **E-100**.
2. Se debe distinguir entre dos tipos de entradas y salidas en un intercambiador de calor, la que fluye por los tubos y la que fluye por la coraza. En este caso el aire

fluye por el tubo, por tanto, en **Tube Side Inlet** se selecciona la corriente **Aire Caliente** y en **Tube Side Outlet**. Así mismo dado que el agua fluye por la coraza, en **Shell Side Inlet** se selecciona la corriente **Agua Fría** y en **Shell Side Outlet** se selecciona la corriente **Agua Caliente**.

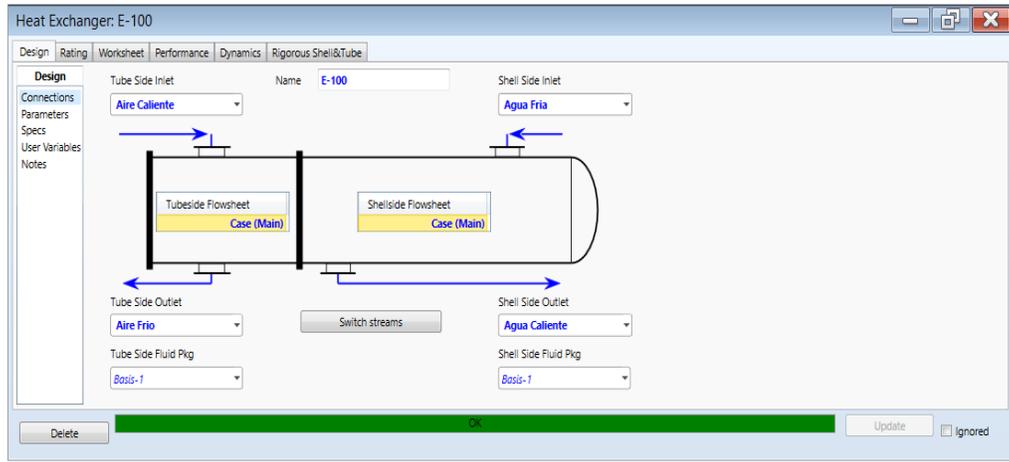


Figura 1.19. Conexión de corrientes de materia en un intercambiador de calor.

Resultados

Una vez se hayan seleccionado las corrientes, Aspen-Hysys calcula automáticamente la temperatura del agua. Para observar el resultado hay que dirigirse a la corriente **Agua Caliente** y en la ventana **Conditions** se puede apreciar el resultado.

Worksheet	Stream Name	Agua Caliente	Aqueous Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0.0000	1.0000
Properties	Temperature [C]	35.07	35.07
Composition	Pressure [kPa]	101.3	101.3
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	10.99	10.99
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	198.0	198.0
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0.1984	0.1984
User Variables	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2.854e+005	-2.854e+005
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	56.28	56.28
Cost Parameters	Heat Flow [kJ/h]	-3.137e+006	-3.137e+006
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	0.1951	0.1951
	Fluid Package	Basis-1	
	Utility Type		

Figura 1.20. Temperatura en corriente Agua caliente.

La temperatura determinada a partir de la simulación varía levemente con respecto a la encontrada por realización manual, esto debido a las propiedades termodinámicas del fluido empleado.

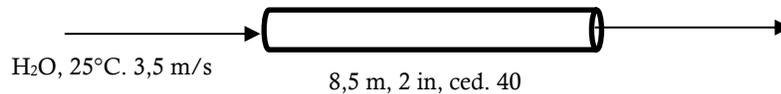
2

Fluidos y Sólidos

Hidrodinámica:

Agua a 25°C fluye a través de una tubería lisa horizontal de 8,5 m a razón de 3,5 m/s. La densidad del agua es 1000 kg/m³ y la viscosidad es de 0,001 kg/m s. La tubería es de cédula 40 y posee un diámetro nominal de 2 in (5,32 cm de diámetro interno). La presión del agua a la entrada es de 1,2 atm. Calcular:

- La caída de presión en el sistema.
- Cuál sería la caída de presión si se la tubería fuera de 9 m?



Solución:

Parte a:

Calculo del número de Reynolds:

$$Re = \frac{\rho V D}{\mu} = \frac{\left(1000 \frac{kg}{m^3}\right) \left(3,5 \frac{m}{s}\right) (0,0532m)}{0,001 kg/m s} = 1,862 \times 10^5$$

Sabiendo que el número de Reynolds es superior a 40000, el flujo es turbulento. La porosidad de la tubería lisa se calcula así:

$$\varepsilon/D = \frac{0}{0,04 m} = 0$$

El factor de fricción f , puede ser determinado mediante la siguiente expresión:

$$f = \frac{0,25}{\left[\log \left(\left(\frac{\varepsilon}{3,7D} \right) + \left(\frac{5,74}{Re^{0,9}} \right) \right) \right]^2} = \frac{0,25}{\left[\log \left(\left(\frac{0}{3,7D} \right) + \left(\frac{5,74}{(1,862 \times 10^5)^{0,9}} \right) \right) \right]^2} = 0,0158$$

Una vez calculada el factor de fricción f , la caída de presión está dada por la expresión:

$$\Delta P_L = f \frac{L}{D} \rho \frac{V^2}{2}$$

$$\Delta P_L = (0,0158) \frac{8,5 \text{ m}}{0,0532 \text{ m}} \frac{(1000 \text{ kg/m}^3)(3,5 \text{ m/s})^2}{2} \left(\frac{1 \text{ kN}}{1000 \text{ kg} \cdot \text{m/s}} \right) \left(\frac{1 \text{ kPa}}{1 \text{ kN/m}^2} \right)$$

$$\Delta P_L = 15,46 \text{ KPa}$$

Solución en Aspen-Hysys:

1. **Componentes:** Agua.
2. **Paquete Termodinámico:** ASME STEAM.
3. Adicionar una corriente de materia y nombrarla como **Entrada**.
4. Especificar el flujo volumétrico Q , basándose en la velocidad de 3,5 m/s y el diámetro interno de la tubería de 0,0532 m.

$$Q = A_c \times V = \frac{\pi(0,0532 \text{ m})^2}{4} \times \frac{3,5 \text{ m}}{\text{s}} \left(\frac{3600 \text{ s}}{1 \text{ h}} \right) = 28,008 \text{ m}^3/\text{h}$$

Ingresar los siguientes valores a la corriente:

Conditions	
Stream Name	Entrada
Temperature	25°C
Pressure	1,2 atm
Std Ideal Liq Vol Flow	28 m ³ /h
Composition (Mole Fraction)	
Agua	1

Tabla 2.1. Propiedades corriente de agua.

Simulación:

1. Adicionar la herramienta **Pipe Segment** haciendo doble clic en el icono  y arrastrarlo al diagrama de procesos. Hacer doble clic sobre esta herramienta.
2. En la pestaña **Rating**, hacer clic en **Select segment**. En la casilla **Length** se ingresa el valor de 8,5 m y en **Material** se selecciona **Smooth**.
3. Hacer clic en **Viem segment** e ingresar los valores como se muestra en la figura:

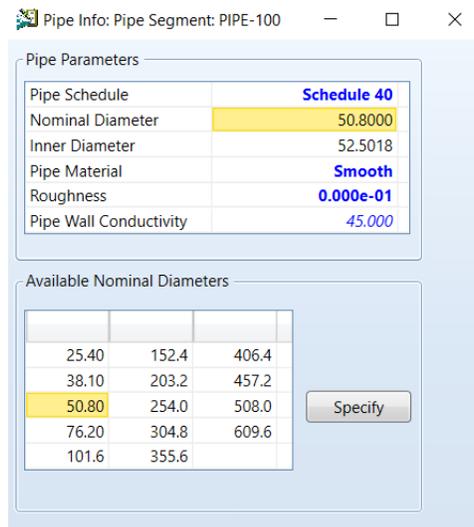


Figura 2.1 Parámetros de la tubería.

4. Dirigirse nuevamente a la pestaña **Connections**, en **Inlet** seleccionar la corriente **Entrada** y en **Outlet** ingresar una corriente con el nombre **Salida**. Así mismo, se requiere una corriente de energía para llevar a cabo el proceso, para eso en **Energy** se ingresa una corriente con el nombre **Q**.
5. Hacer doble clic en esta corriente **Salida** e ingresar la temperatura de 25°C para que se lleve a cabo un proceso isotérmico. En este punto la barra de notificación debería de estar en verde y ok.

Resultados:

Hacer clic derecho en la tubería, seleccionar **Show Table**. Hacer doble clic sobre la tabla y en la ventana emergente hacer clic en **Add Variable**, seleccionar **Pressure Drop**. Hacer clic en **Ok**.

PIPE-100		
Feed Pressure	121,6	kPa
Product Pressure	105,5	kPa
Pressure Drop	16,05	kPa

Figura 2.2 Resultado de la caída de presión en el sistema.

Parte b.

Si el diámetro de la tubería es de 9 m, se tiene que recalcular la caída de presión, sin embargo, los valores del número de Reynolds y la constante de fricción f permanecen constantes:

$$P_L = f \frac{L}{D} \rho \frac{V^2}{2}$$

$$\Delta P_L = (0,0158) \frac{9 \text{ m}}{0,0532 \text{ m}} \frac{(1000 \text{ kg/m}^3)(3,5 \text{ m/s})^2}{2} \left(\frac{1 \text{ kN}}{1000 \text{ kg} \cdot \text{m/s}} \right) \left(\frac{1 \text{ kPa}}{1 \text{ kN/m}^2} \right)$$

$$\Delta P_L = 16,37 \text{ KPa}$$

En Aspen-Hysys modificar este parámetro se hace de manera simple:

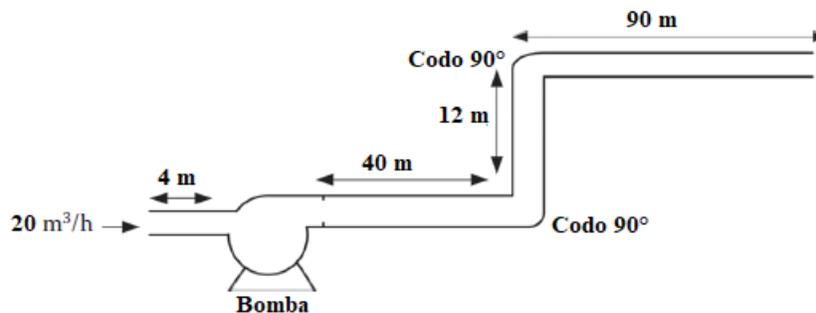
1. Dirigirse a la pestaña **Rating** en la herramienta **PIPE-100**
2. Introducir el nuevo valor de longitud 9 m en la casilla **Length**
3. Dirigirse de nuevo a la pestaña **Parameters** y observar el resultado de la caída de presión en este caso 16,99 kPa.

Sistema hidrodinámico con bomba:

Agua a 20 ° C se bombea desde un tanque de alimentación a una presión de 4,7 atm hasta un tanque de almacenamiento elevado de 12 m de altura a una velocidad de 20 m³/h. Todas las tuberías son tuberías comerciales de acero de 4 pulgadas cédula 4. La bomba tiene una eficiencia del 70%. Calcular la potencia necesaria para que la bomba pueda superar la pérdida de presión en la tubería.

Datos:

$\rho = 998 \text{ kg/m}^3$, $\mu = 1,0 \times 10^{-3} \text{ kg/ms}$, diámetro interno para tubería de 4 in. cédula 40 es ID=0,1023 m, área transversal de la tubería A = $8,22 \times 10^{-3} \text{ m}^2$.



Solución:

Ecuación de energía:

$$\frac{P_1}{\rho} + gz_1 + \frac{V_1^2}{2} = \frac{P_2}{\rho} + gz_2 + \frac{V_2^2}{2} + W_s + \Sigma F$$

Calculo del número de Reynolds:

$$Re = \frac{\rho V D}{\mu} = \frac{(998 \text{ kg/m}^3) \left(\frac{5,556 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s}}{8,22 \times 10^{-3} \text{ m}^2} \right) \left(4 \text{ in} \times \frac{0,0254 \text{ m}}{1 \text{ in}} \right)}{1 \times 10^{-3} \text{ kg/ms}} = 6,85 \times 10^4$$

Sabiendo que el número de Reynolds es superior a 40000, el flujo es turbulento. Es necesario realizar el cálculo del factor de fricción para ello se emplea el valor de la rugosidad de $4,57 \times 10^{-5} \text{ m}$ [16].

El factor de fricción f , puede ser determinado mediante la siguiente expresión:

$$f = \frac{0,25}{\left[\log \left(\left(\frac{\varepsilon}{3,7D} \right) + \left(\frac{5,74}{Re^{0,9}} \right) \right) \right]^2} = \frac{0,25}{\left[\log \left(\left(\frac{4,57 \times 10^{-5} m}{3,7(0,1016 m)} \right) + \left(\frac{5,74}{(6,85 \times 10^4)^{0,9}} \right) \right) \right]^2}$$

$$f = 0,0213$$

Las pérdidas por fricción:

$$\Sigma F = f \frac{L V^2}{D} + \frac{V^2}{2} (K_c + 2K_e + K_{ex})$$

Pérdida por contracción en la salida del tanque de alimentación, $A_2/A_1=0$, si $A_1 \gg A_2=0$

$$K_c = 0,55 \left(1 - \frac{A_2}{A_1} \right) = 0,55(1 - 0) = 0,55$$

Pérdida por expansión en la entrada del tanque de almacenamiento:

$$K_{ex} = \left(1 - \frac{A_1}{A_2} \right)^2 = (1 - 0) = 1,0$$

Sumatoria de pérdidas por fricción:

$$\Sigma F = 0,0213 \frac{146 m}{0,1023 m} \frac{(0,6759 m/s)^2}{2} + \frac{(0,6759 m/s)^2}{2} (0,55 + 2(0,75) + 1)$$

$$\Sigma F = 7,64 m^2/s^2$$

Ecuación de energía:

$$0 = \frac{P_2 - P_1}{\rho} + g(Z_2 - Z_1) + \frac{V_2^2 - V_1^2}{2} + W_s + \Sigma F$$

$$0 = 0 + 9,8 m/s^2 (12 - 0) + 0 + W_s + 7,64 m^2/s^2$$

$$W_s = -125 m^2/s^2$$

Potencia de la bomba:

$$W_s = -\eta W_p$$

$$-125 = -0,70 W_p$$

$$W_p = 178 \text{ m}^2/\text{s}^2$$

La potencia en kW se deberá calcular multiplicando por el flujo másico:

$$W = mW_p$$

$$W = (5,556 \times 10^{-3} \text{ m}^3/\text{s})(998 \text{ kg}/\text{m}^3)(178 \text{ m}^2/\text{s}^2) \left(\frac{1 \text{ kJ}}{1000 \text{ kgm}^2/\text{s}^2} \right)$$

$$W = 0,99 \text{ kW}$$

$$W = 1,32 \text{ hp}$$

Solución en Aspen-Hysys:

1. **Componentes:** Agua.
2. **Paquete Termodinámico:** ASME Steam.
3. Crear una corriente de materia con las siguientes propiedades:

Conditions	
Stream Name	1
Temperature	20°C
Pressure	4,7 atm
Std Ideal Liq Vol Flow	20 m ³ /h
Composition (Mole Fraction)	
Agua	1

Tabla 2.2 Propiedades de la corriente 1.

1. Adicionar la herramienta **Pipe segment** al diagrama de procesos. Hacer doble clic sobre la herramienta.
2. Dirigirse a **Rating**. Hacer clic en **Append Segment**, y luego adicionar las tuberías y accesorios como se muestra a continuación:

Length - Elevation Profile			
Segment	1	2	
Fitting/Pipe	Coupling/Union	<i>Pipe</i>	
Length/Equivalent Length	0.1921	4.000	
Elevation Change	<i>0.0000</i>	<i>0.0000</i>	
Outer Diameter	<i><empty></i>	114.3	
Inner Diameter	102.3	102.3	
Material	<i>Mild Steel</i>	<i>Mild Steel</i>	
Roughness	<i>4.572e-005</i>	<i>4.572e-005</i>	
Pipe Wall Conductivity	<i>45.00</i>	<i>45.00</i>	
Increments	1	5	
FittingNo	1	<i><empty></i>	

Figura 2.3 Propiedades de accesorios en el sistema.

- Hacer clic en **Design**, en **Inlet** seleccionar la corriente **1** y en **Outlet** ingresar una corriente llamada **2** y luego en **Parameters**. Insertar 0 en la casilla **duty**, debido a que no interesan las pérdidas térmicas.
- Insertar la herramienta **Pump** de la ventana **Model Palette**, haciendo clic en el ícono  y arrastrarlo al diagrama de procesos.
- Hacer doble clic sobre la herramienta **P-100** e insertar los valores como se muestra en la figura:

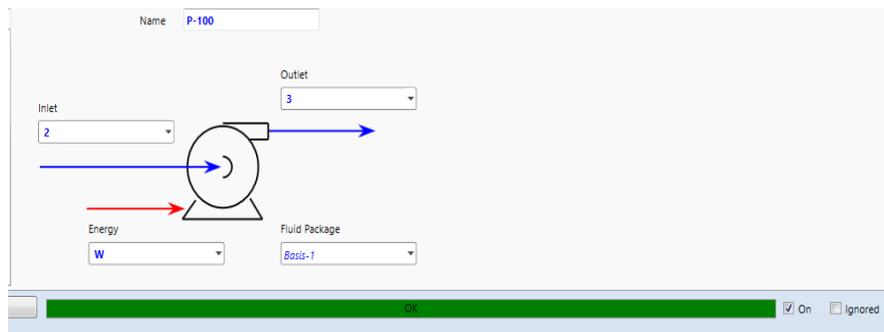


Figura 2.4 Conexión de corrientes de materia en la bomba.

Adicionalmente en la pestaña **Parameters** especificar la eficiencia de la bomba, en este caso es de 70%.

- Adicionar una segunda tubería (**Pipe segment**)
- Repetir los pasos del numeral 3 y luego adicionar las tuberías y accesorios como se muestran a continuación:

Length - Elevation Profile	1	2	3	4	5	6
Segment						
Fitting/Pipe	Pipe	Elbow: 90 Std	Pipe	Elbow: 90 Std	Pipe	Coupling/Union
Length/Equivalent Length	40.00	2.345	12.00	2.345	90.00	0.1921
Elevation Change	0.0000	0.0000	12.00	0.0000	0.0000	0.0000
Outer Diameter	114.3	<empty>	114.3	<empty>	114.3	<empty>
Inner Diameter	102.3	102.3	102.3	102.3	102.3	102.3
Material	Mild Steel	Mild Steel	Mild Steel	Mild Steel	Mild Steel	Mild Steel
Roughness	4.572e-005	4.572e-005	4.572e-005	4.572e-005	4.572e-005	4.572e-005
Pipe Wall Conductivity	45.00	45.00	45.00	45.00	45.00	45.00
Increments	5	1	5	1	5	1
FittingNo	<empty>	1	<empty>	1	<empty>	1

Buttons: Append Segment, Insert Segment, View Segment..., Delete Segment, Clone Segment, Clear Profile

Figura 2.5. Propiedades de accesorios en el sistema.

- Repetir los pasos del numeral 4, en este caso **Inlet** se llama 3 y **Outlet** 4.
- Finalmente especificar en la corriente 4, la temperatura de 20°C y una presión de 4,7 atm, con esto el ejercicio se da por finalizado.

Resultados:

Dirigirse a la herramienta **P-100** y en la pestaña **Parameters** se podrá observar el valor de la potencia.

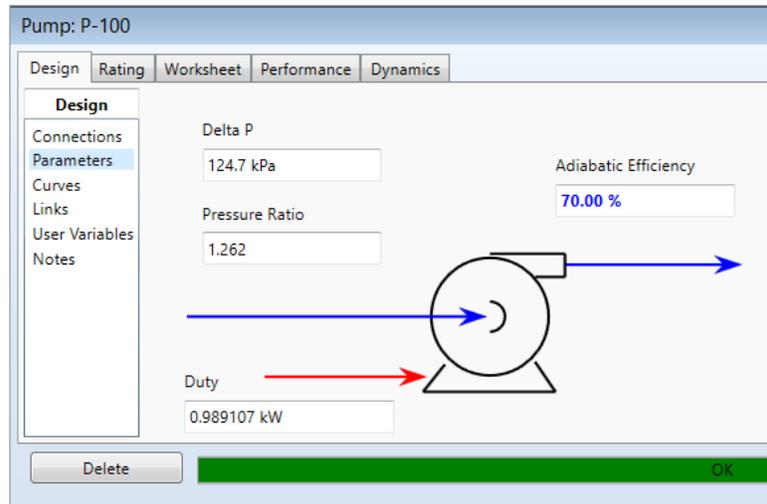


Figura 2.6 Resultado potencia de la bomba.

El valor de potencia entregado por la simulación (0,989107 kW) es mucho más preciso que el calculado a mano (0,99 kW), es aquí donde se aprecia la clara ventaja que entrega Aspen-Hysys a la hora de realizar cálculos precisos.

3

Transferencia de Calor

Cálculo de flujos y temperaturas en intercambiadores de calor:

Agua caliente a 230°C y 980 psig es usada para calentar una corriente de agua en un intercambiador de calor. La temperatura de entrada y la presión de la corriente de agua fría es de 20°C y 110 psig respectivamente. La temperatura de salida de las corrientes de agua fría y caliente son 130°C y 200°C, respectivamente. Si el flujo de la corriente de agua caliente es de 110 kg/h:

- Determine el flujo de la corriente de agua fría que pasa por el intercambiador.
- Si el proceso se acelera y se deben calentar 45 kg/h de agua, cual es la nueva temperatura de salida teniendo en cuenta que entra a las mismas condiciones (20°C y 110 psig)?

Datos:

$$C_{p_{\text{agua},230^{\circ}\text{C}}}=4,65 \text{ kJ/kg}^{\circ}\text{C}$$

$$C_{p_{\text{agua},200^{\circ}\text{C}}}=4,45 \text{ kJ/kg}^{\circ}\text{C}$$

$$C_{p_{\text{agua},130^{\circ}\text{C}}}=4,26 \text{ kJ/kg}^{\circ}\text{C}$$

$$C_{p_{\text{agua},20^{\circ}\text{C}}}=4,18 \text{ kJ/kg}^{\circ}\text{C}$$



Solución

a. Balance de Energía:

$$Q_h = Q_c$$
$$m_h C_{p,h} \Delta T_h = m_c C_{p,c} \Delta T_c$$

Debido a que existe una diferencia de temperatura entre la entrada y salida del intercambiador es necesario realizar un promedio entre los Cp a cada temperatura:

$$C_{p_{h,prom}} = \frac{C_{p,230^\circ C} + C_{p,200^\circ C}}{2}$$

$$C_{p_{h,prom}} = \frac{(4,65 + 4,45) \text{ kJ/kg}^\circ\text{C}}{2}$$
$$C_{p_{h,prom}} = 4,55 \text{ kJ/kg}^\circ\text{C}$$

$$Q_h = (110 \text{ kg})(4,55 \text{ kJ/kg}^\circ\text{C})(230 - 200)^\circ\text{C}$$

$$Q_h = 15015 \text{ kJ}$$

Nuevamente se debe hacer el promedio de Cp para las temperaturas de entrada y salida del agua a calentar:

Despejando m_c de la ecuación:

$$C_{p_{h,prom}} = \frac{C_{p,130^\circ C} + C_{p,20^\circ C}}{2}$$

$$C_{p_{h,prom}} = \frac{(4,26 + 4,18) \text{ kJ/kg}^\circ\text{C}}{2}$$

$$C_{p_{h,prom}} = 4,22 \text{ kJ/kg}^\circ\text{C}$$

$$Q_h = m_c C_{p,c} \Delta T_c$$

$$m_c = \frac{Q_h}{C_{p,c} \Delta T_c} = \frac{15015 \text{ kJ}}{(4,22 \text{ kJ/kg}^\circ\text{C})(130 - 20)^\circ\text{C}}$$

$$m_c = 32,35 \text{ kg}$$

b. Dado que el flujo másico de agua ha cambiado, se debe recalculer la temperatura de salida así:

$$Q_h = 15015 \text{ kJ}$$

Calculo del ΔT_{agua} :

$$Q_h = m_c C p_c \Delta T_c$$

$$\Delta T_c = \frac{Q_h}{m_c C p_c}$$

$$\Delta T_{\text{agua}} = \frac{15015 \text{ kJ/h}}{(45 \text{ Kg/h})(4,18 \text{ kJ/kg}^\circ\text{C})}$$

$$\Delta T_{\text{agua}} = 79,82 \text{ }^\circ\text{C}$$

Calculo de la temperatura de salida del agua:

$$\Delta T_c = T_4 - T_3$$

$$T_4 = \Delta T_c + T_3$$

$$T_4 = 79,82^\circ\text{C} + 20^\circ\text{C}$$

$$T_4 = 99,82^\circ\text{C}$$

Solución en Aspen-Hysys:

Parte a:

1. **Componentes:** Agua
2. **Paquete termodinámico:** ASTM Stream

Simulación:

1. Seleccionar el icono  de la ventana **Model Palette** e insertarlo en el diagrama de procesos. Hacer doble clic sobre este.
2. Insertar la información como se muestra a continuación:

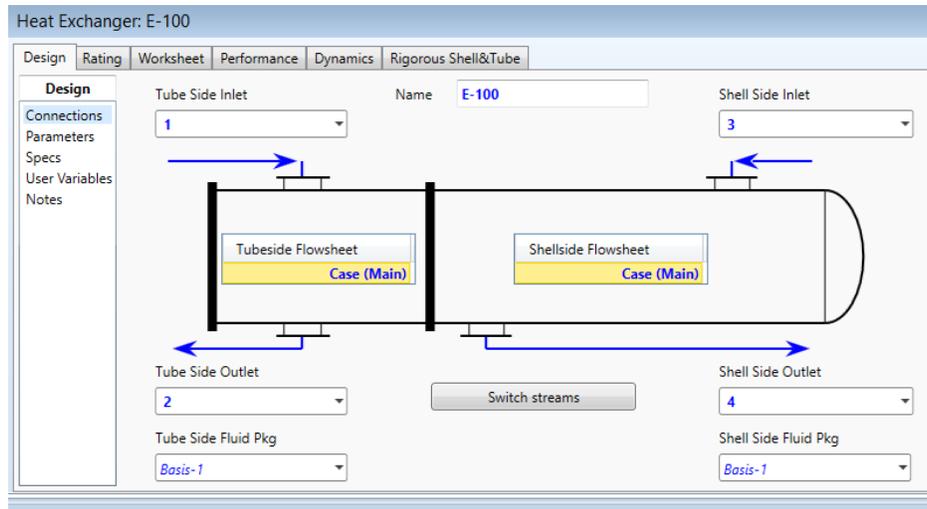


Figura 3.1. Conexiones de corrientes de materia en intercambiador de calor.

3. Dirigirse a la pestaña **Worksheet** e ingresar los datos de las corrientes de materia:
4. Ingresar las propiedades conocidas de cada corriente de materia:

Conditions				
Stream Name	1	2	3	4
Temperature	230°C	200°C	20°C	130°C
Pressure	980 psig	980 psig	110 psig	110 psig
Mass Flow	110 kg/h	110 kg/h		
Composition (Mass Fraction)				
H₂O	1	1	1	1

Tabla 3.1. Propiedades conocidas de las corrientes de materia.

Resultados:

Hacer clic derecho sobre el diagrama de procesos, en la ventana desplegada seleccionar **Add Workbook Table**. Seleccionar el tipo de tabla, en este caso **Material Streams**.

Material Streams					
		1	2	3	4
Vapour Fraction		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Temperature	C	230,0	200,0	20,00	130,0
Pressure	kPa	6858	6858	859,7	859,7
Molar Flow	kgmole/h	6,106	6,106	1,804	1,804
Mass Flow	kg/h	110,0	110,0	32,50	32,50
Liquid Volume Flow	m3/h	0,1102	0,1102	3,257e-002	3,257e-002
Heat Flow	kJ/h	-1,643e+006	-1,658e+006	-5,149e+005	-4,998e+005

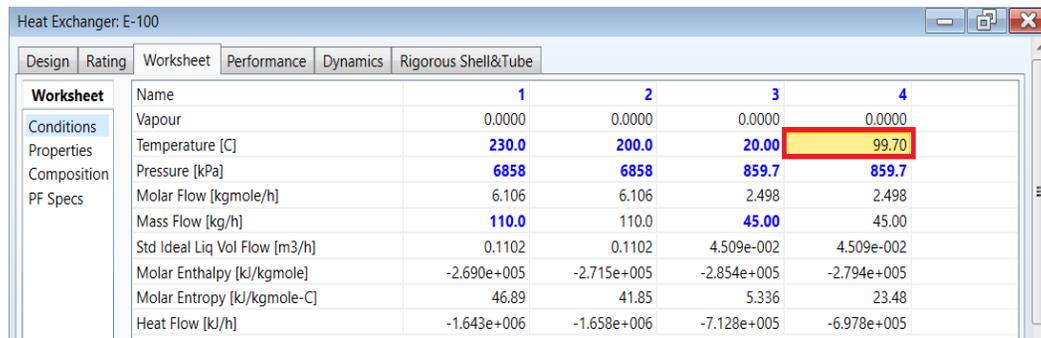
Figura 3.2. Resultado flujo másico en las corrientes 3 y 4.

Parte b:

1. Hacer doble clic en la herramienta **E-100**, dirigirse a la pestaña **Worksheet**.
2. Eliminar el dato de temperatura en la corriente **4** (130°C).
3. En la corriente **3**, insertar el valor del nuevo flujo másico (45 kg/h).

Resultados

Directamente en la ventana **Worksheet** se podrá visualizar el resultado de la temperatura de la corriente **4**.



	1	2	3	4
Name				
Vapour	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Temperature [C]	230.0	200.0	20.00	99.70
Pressure [kPa]	6858	6858	859.7	859.7
Molar Flow [kgmole/h]	6.106	6.106	2.498	2.498
Mass Flow [kg/h]	110.0	110.0	45.00	45.00
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0.1102	0.1102	4.509e-002	4.509e-002
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2.690e+005	-2.715e+005	-2.854e+005	-2.794e+005
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	46.89	41.85	5.336	23.48
Heat Flow [kJ/h]	-1.643e+006	-1.658e+006	-7.128e+005	-6.978e+005

Figura 3.3. Resultado temperatura en la corriente 4.

Ambas respuestas calculadas a partir de métodos convencionales son muy similares a las entregadas por Aspen-Hysys, sin embargo el simulador entrega una respuesta más confiable debido a que posee las propiedades termodinámicas en estado real de los componentes.

Diseño de un intercambiador de calor:

Diseñar un intercambiador de calor de 1 paso por la coraza y 4 pasos por los tubos para enfriar 50000 lb/h de una solución de dietanolamina (0,2 fracción másica de dietanolamina/ 0,8 de agua) desde 144°F a 113°F usando agua a 77°F calentada hasta 100°F. Asuma una resistencia por incrustación en el los tubos de $R_{fi}=0,004 \text{ ft}_2 \text{ h } ^\circ\text{F}/\text{Btu}$, ignorando la resistencia por incrustación en la coraza [17].



Datos:

Parámetros	Tubos, Mezcla DEA/Agua (128,5°F)	Coraza, Agua (88,5°F)
P (lb/ft ³)	59,76	59,87
C _p (Btu/lb °F)	0,92	1,0
μ (cP)	0,75	0,77
K (Btu/h ft °F)	0,30	0,36

Tabla 3.2. Propiedades físicas a temperatura promedio.

Solución:

El calor requerido Q_{req} :

$$Q_{req} = m_h C_{p_h} (T_{h,entrada} - T_{h,salida}) = m_c C_{p_c} (T_{c,salida} - T_{c,entrada})$$

$$Q_{req} = (50000 \text{ lb/h})(0,92 \text{ Btu/lb}^\circ\text{F})(144 - 113)^\circ\text{F} = 1,426 \times 10^6 \frac{\text{Btu}}{\text{h}}$$

El flujo másico de la corriente de agua:

$$Q_{req} = m_c C_{p_c} (T_{c,salida} - T_{c,entrada})$$

$$m_c = \frac{Q_{req}}{C_{p_c} (T_{c,salida} - T_{c,entrada})} = \frac{1,426 \times 10^6 \text{ Btu/h}}{(1 \text{ Btu/lb}^\circ\text{F})(100 - 77)^\circ\text{F}} = 62000 \frac{\text{lb}}{\text{h}}$$

Asumiendo un valor apropiado para el coeficiente global de transferencia de calor (U), según Ghasem [17], este valor debe estar entre 140 a 200 Btu/ft² h °F para soluciones entre agua y aminas.

Asumir $U_i=150$ Btu/ ft² h °F

Calculo de la temperatura media logarítmica:

$$\Delta T_{LM} = \frac{(T_1 - t_2) - (T_2 - t_1)}{\ln \left[\frac{(T_1 - t_2)}{(T_2 - t_1)} \right]} = \frac{(144 - 100) - (113 - 77)}{\ln \left[\frac{144 - 100}{113 - 77} \right]} = 40 \text{ } ^\circ F$$

El rango de temperatura entre el fluido caliente y frio R ,

$$R = \frac{(T_1 - T_2)}{(t_2 - t_1)} = \frac{144 - 113}{100 - 77} = 1,35$$

El rango de temperatura del fluido frio a la máxima diferencia de temperatura S ,

$$S = \frac{(t_2 - t_1)}{(T_1 - t_1)} = \frac{100 - 77}{144 - 77} = 0,343$$

El factor de configuración F ,

$$F = \frac{\sqrt{R^2 + 1} \ln\{1 - S/1 - RS\}}{(R - 1) \ln[2 - S(R + 1 - \sqrt{R^2 + 1})/2 - S(R + 1 + \sqrt{R^2 + 1})]}$$

Sustituyendo los valores en la ecuación, el valor de $F=0,93$

El área de transferencia de calor interna A_i ,

$$A_i = \frac{Q}{U_i F \Delta T_{LM}} = \frac{1,426 \times 10^6 \text{ Btu/h}}{(150 \text{ Btu/ft}^2 \text{ h}^\circ F)(0,93)(40^\circ F)} = 255 \text{ ft}^2$$

La velocidad dentro de los tubos se podría sumir manteniendo un flujo turbulento, un valor apropiado está entre 3 a 10 ft/s, esto hace que la velocidad dentro de los tubos sea de $U_i=5$ ft/s. El área transversal total por paso, A_{ci} ,

$$A_{ci} = \frac{m}{\rho_i \mu_i} = \frac{50000 \text{ lb/h}}{(59,76 \text{ lb/ft}^3)(5 \text{ ft/s})(3600 \text{ s/h})} = 0,0465 \text{ ft}^2$$

Seleccionando una longitud de tubo de 14 ft, con un diámetro $\frac{3}{4}$, 11 BWG, (diámetro interno=0,482 in). El número de tubos por paso N_t ,

$$N_t = \frac{A_{ci}}{\pi D_i^2/4} = \frac{0,0465 \text{ ft}^2}{\pi(0,482 \text{ in})^2/4} \times \frac{144 \text{ in}^2}{\text{ft}^2} = 36,68 \frac{\text{tubos}}{\text{paso}} \approx 37 \frac{\text{tubos}}{\text{paso}}$$

El área de transferencia de calor por tubo A_t ,

$$A_t = \pi D_i L = \pi(0,482 \text{ in}) \frac{\text{ft}}{12 \text{ in}} \times 14 \text{ ft} = 1,75 \frac{\text{ft}^2}{\text{tubo}}$$

El número de pasos por los tubos:

$$N_p = \frac{A_i}{A_t N_t} = \frac{255 \text{ ft}^2}{(1,75 \text{ ft}^2/\text{tubo})(37 \text{ tubos/paso})} = 3,94 \text{ pasos} \approx 4 \text{ pasos}$$

Teniendo este valor $N_p=4$, es necesario recalcular el área de transferencia de calor interna A_i ,

$$A_i = N_p N_t (\pi D_i) L = 4 \times 37 \times \pi \times \frac{0,482}{12} \times 14 = 262 \text{ ft}^2$$

El valor real del coeficiente global de transferencia de calor, teniendo en cuenta el área de transferencia de calor interna recalculada,

$$U_i = \frac{1,426 \times 10^6 \text{ Btu/h}}{(262 \text{ ft}^2)(0,93)(40^\circ\text{F})} = 146 \frac{\text{Btu}}{\text{ft}^2 \text{ h}^\circ\text{F}}$$

El diámetro hidráulico efectivo D_e ,

$$D_e = \frac{4(P_t^2 - \pi D_o^2/4)}{\pi D_o} = \frac{4(1^2 - \pi(0,75)^2/4)}{\pi(0,75)} = 0,948 \text{ in}$$

Según Ghasem [17], para un intercambiador de cuatro pasos por los tubos y 148 tubos el diámetro interno de la coraza $D_s=17 \frac{1}{4}$ in. Teniendo en cuenta que el rango de espacio entre los discos de soporte es $b=10$ in, y el espacio=0,25 in, el área transversal entre los discos de soporte y el eje de la coraza, A_{cf} ,

$$A_{cf} = \frac{D_s}{P_t} \times \text{espacio} \times b$$

$$A_{cf} = \frac{17,25 \text{ in}}{1 \text{ in}} \times \left(0,25 \text{ in} \frac{1 \text{ ft}}{12 \text{ in}}\right) \times \left(10 \text{ in} \frac{1 \text{ ft}}{12 \text{ in}}\right) = 0,30 \text{ ft}^2$$

La velocidad másica a través de la coraza G_o ,

$$G_o = \frac{m_o}{A_{cf}} = \frac{62000 \text{ lb/h}}{0,30 \text{ ft}^2} = 207,026 \frac{\text{lb}}{\text{ft}^2 \text{h}}$$

El número de Reynolds en el lado de la coraza N_{Reo}

$$N_{Reo} = \frac{D_e G_o}{\mu_o} = \frac{0,948 \text{ in} (1 \text{ ft}/12 \text{ in}) 207,026 \text{ lb}/\text{ft}^2 \text{h}}{0,77 \text{ cP} (1 \text{ lb}/\text{ft s}) (3600 \text{ s/h}) / 1488 \text{ cP}} = 8779$$

El número de Prandtl en el lado de la coraza N_{Pro} ,

$$N_{Pro} = \frac{C_{Po} \mu_o}{k_o} = \frac{(1 \text{ Btu}/\text{lb}^\circ \text{F}) (0,77 \text{ cP} (1 \text{ lb}/\text{ft s}) (3600 \text{ s/h}) / 1488 \text{ cP})}{0,36 \text{ Btu}/\text{ft}^2 \text{h}^\circ \text{F}} = 5,2$$

Despreciando el cambio de la viscosidad, se tiene que

$$N_{Uo} = \frac{h_o D_e}{k_o} = 0,36 N_{Reo}^{0,55} N_{Pro}^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\mu}{\mu_w}\right)^{0,14}$$

$$N_{Uo} = \frac{h_o D_e}{k_o} = 0,36 (8779)^{0,55} (5,2)^{\frac{1}{3}} (1)^{0,14} = 92$$

El coeficiente de transferencia de calor de lado de la coraza h_o ,

$$h_o = N_{Uo} \frac{k_o}{D_e} = 92 \frac{(0,36 \text{ Btu}/\text{ft}^2 \text{h}^\circ \text{F})}{0,948 \text{ in} (1 \text{ ft}/12 \text{ in})} = 419 \frac{\text{Btu}}{\text{ft}^2 \text{h}^\circ \text{F}}$$

De manera similar, se calcula el coeficiente de transferencia de calor para los tubos usando la ecuación que propone Ghasem [17]:

$$N_{Ui} = \frac{h_i D_i}{k_i} = 0,027 N_{Rei}^{0,8} N_{Pri}^{\frac{1}{3}} \left(\frac{\mu_i}{\mu_w}\right)^{0,14}$$

El número de Reynolds en el lado de los tubos N_{Rei}

$$N_{Reo} = \frac{D_i \rho_i u_i}{\mu_i} = \frac{0,482 \text{ in}(1 \text{ ft}/12 \text{ in})(59,76 \text{ lb}/\text{ft}^3)(5 \text{ ft}/\text{s})}{0,75 \text{ cP}(1 \text{ lb}/\text{ft s})/1488 \text{ cP}} = 23812$$

El número de Prandtl en el lado de los tubos N_{Pri}

$$N_{Pri} = \frac{C_{Pi} \mu_i}{k_i} = \frac{(0,92 \text{ Btu}/\text{lb}^\circ\text{F})(0,75 \text{ cP}(1 \text{ lb}/\text{ft s})(3600 \text{ s}/\text{h})/1488 \text{ cP})}{0,30 \text{ Btu}/\text{ft}^2 \text{ h}^\circ\text{F}} = 5,56$$

Sustituyendo los valores en la ecuación:

$$N_{Ui} = \frac{h_i D_i}{k_i} = 0,027(23812)^{0,8}(5,56)^{1/3} (1)^{0,14} = 152$$

El coeficiente de transferencia de calor del lado de los tubos h_i

$$h_i = N_{Ui} \frac{k_i}{D_i} = 152 \frac{0,3 \text{ Btu}/\text{ft h}^\circ\text{F}}{0,482 \text{ in}(1 \text{ ft}/12 \text{ in})} = 1133 \frac{\text{Btu}}{\text{ft}^2 \text{ h}^\circ\text{F}}$$

El coeficiente global de transferencia de calor basado en el área interna U_i

$$\frac{1}{U_i} = \frac{D_i}{D_o h_o} + \frac{D_i \Delta x}{D_{LM} k_w} + \frac{1}{h_i} + R_{fi} + \left(\frac{D_i}{D_o}\right) R_{fo}$$

El grosor del tubo Δx ,

$$\Delta x = \frac{D_o - D_i}{2} = \frac{0,75 - 0,482}{2} = 0,134 \text{ in}$$

El diámetro medio logarítmico D_{LM} ,

$$D_{LM} = \frac{D_o - D_i}{\ln(D_o/D_i)} = \frac{0,75 - 0,482}{\ln(0,75/0,482)} = 0,606 \text{ in}$$

La conductividad térmica del acero carbono es 30 Btu/h ft °F. El coeficiente global de transferencia de calor basado en las especificaciones de diseño:

$$\frac{1}{U_i} = \frac{0,482 \text{ in}}{(0,75 \text{ in})(419 \text{ Btu}/ft^2h^\circ F)} + \frac{0,482 \text{ in}(0,134 \text{ in})(1 \text{ ft}/12 \text{ in})}{0,606 \text{ in}(30 \text{ Btu}/h \text{ ft}^\circ F)} + \frac{1}{1133 \text{ Btu}/ft^2h^\circ F} + 0,004 \text{ ft}^2h^\circ F/\text{Btu}$$

$$U_i = 149 \frac{\text{Btu}}{\text{ft}^2h^\circ F}$$

Por lo tanto,

$$U_o = U_i \frac{D_i}{D_o} = 149 \text{ Btu}/ft^2h^\circ F \left(\frac{0,482}{0,75} \right) = 95,6 \frac{\text{Btu}}{\text{ft}^2h^\circ F}$$

El coeficiente global de transferencia de calor calculado basado en el área interior del tubo ($U_i = 149 \text{ Btu}/h \text{ ft}^2 \text{ }^\circ F$), es cercano al supuesto valor de diseño ($U_i = 146 \text{ Btu}/h \text{ ft}^2 \text{ }^\circ F$), por lo tanto, las especificaciones del intercambiador diseñado son satisfactorias. Si el coeficiente de transferencia de calor calculado basado en las especificaciones del intercambiador es menor que el valor inicialmente asumido, entonces el calor proporcionado por el intercambiador diseñado es menor que el calor requerido. El coeficiente estimado de transferencia de calor basado en las características de diseño del intercambiador debe estar cerca del valor de diseño supuesto; la forma más simple es calcular el coeficiente de transferencia de calor del lado de la coraza (h_o), basado en el valor corregido supuesto ($U_i = 146 \text{ Btu}/h \text{ ft}^2 \text{ }^\circ F$),

$$h_o = \frac{1}{D_o/D_i [1/U_i - 1/h_i - (D_i \Delta x / D_{LM} k) - R_{fi}]}$$

$$h_o = \frac{1}{(0,75/0,482)[(1/146) - (1/1133) - 2,96 \times 10^{-4} - 0,004]} = 385 \frac{\text{Btu}}{\text{ft}^2h^\circ F}$$

	Coraza	Tubos
Componentes	Agua (100%)	DEA/Agua (0,2/0,8)
Flujo Másico (lb/h)	100000	50000
Temperatura ($^\circ F$)	77/100	144/113
Presión (bar)	1,0	1,0
Pasos	1	4
Diámetro interno coraza	17¼	
Tubos: D/D _i /P _t (in)		0,75/0,482/1

Configuración de Tubos		Cuadrado
Longitud (ft)		14
Número total de Tubos		148
Factor de Incrustación (ft ² h°F/Btu)		0,004
LMTD	40	
Factor <i>F</i>	0,93	
<i>U</i> _o (Btu/ h ft ² °F)	95,6	
Flujo de Calor (Btu/h)	1426000	

Tabla 3.3. Especificaciones de diseño del intercambiador de calor.

Solución en Aspen-Hysys:

1. **Componentes:** Agua, dietanolamina.
2. **Paquete termodinámico:** NRTL.
3. De la ventana **Modele Palette** insertar la herramienta **Heat Exchanger** al diagrama de procesos. Hacer doble clic sobre esta.
4. Las corrientes e materia son:

Tube Side Inlet:	1	Shell Side Inlet:	3
Tube Side Outlet	2	Shell Side Outlet:	4
5. En la pestaña **Worksheet** se añaden las propiedades de cada corriente de materia:

Stream Name	Conditions			
	Tubos		Coraza	
	(1)	(2)	(3)	(4)
Temperature	144°F	113°F	77°F	100°F
Pressure	1 bar	1 bar	1 bar	1 bar
Mass Flow	50000 lb/h	50000 lb/h		
Composition (Mass Fraction)				
DEA	0,2	0,2	0,0	0,0
Agua	0,8	0,8	1	1

Tabla 3.3. Propiedades corrientes de materia en intercambiador de calor.

1. En la pestaña **Design**, en la sección **Parameters**, se selecciona **Simple steady state rating** en **Heat Exchanger Model**.
2. Dirigirse a la pestaña **Rating** e ingresar la siguiente información en las celdas:

Overall

Tube passes per Shell	4
Number of Shell passes	1

Shell

Shell diameter	17,25 in
Number of tubes per Shell	148
Tube pitch	1 in
Tube layout	Square (90 degrees)
Baffle cut	25%
Baffle spacing	11,75 in

Tube

OD	0,75 in
ID	0,482 in
Tube Length	14 ft
Tube Fouling	0,004 Btu/h ft ² °F

Resultados:

1. Hacer clic derecho sobre la herramienta **E-100**, seleccionar **Show Table**, allí se pueden seleccionar las variables que se desean ver.
2. Hacer clic derecho en el diagrama de procesos, seleccionar **Add Workbook Table**, y seleccionar **Material Streams**. Estas son algunas de las variables que se pueden observar junto a los flujos máxicos de las corrientes.

E-100					
Duty		1,395e+006	Btu/hr		
Ft Factor		0,9200			
Overall U		93,51	Btu/hr-ft ² -F		
UA		3,804e+004	Btu/F-hr		
Tube thickness		0,1340	in		

Material Streams					
		1	2	3	4
Vapour Fraction		0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
Temperature	F	144,0	113,0	77,00	100,0
Pressure	psia	14,50	14,50	14,50	14,50
Molar Flow	lbmole/hr	2315	2315	3334	3334
Mass Flow	lb/hr	5,000e+004	5,000e+004	6,005e+004	6,005e+004
Liquid Volume Flow	barrel/day	3370	3370	4120	4120
Heat Flow	Btu/hr	-2,893e+008	-2,907e+008	-4,083e+008	-4,069e+008

Figura 3.4. Resultados especificaciones de diseño del intercambiador de calor.

Es indudable la suma de cálculos matemáticos que implica este tipo de diseño. De forma simple Aspen-Hysys puede calcular todos estos parámetros de manera precisa como se aprecia en los resultados calculados a mano y los obtenidos por la simulación.

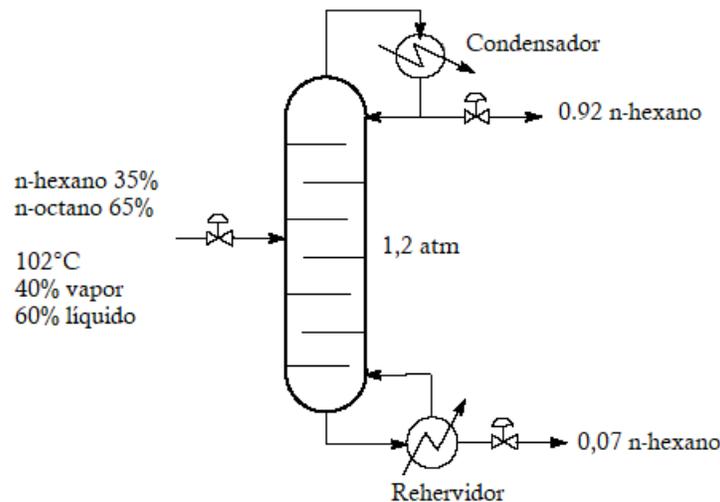
4

Transferencia de Masas

Destilación

Una mezcla hexano-octano de composición 35% de octano se somete a una destilación continua (1,2 atm) para obtener un destilado de composición 0.92 fracción molar y un producto de fondo de composición 0.07 fracción molar de hexano. Si la alimentación entra a 102°C, con un 15,95% de vapor y la relación de reflujo es 80% mayor a la mínima, calcule:

- Cantidades de destilado y residuo.
- Número de platos ideales y plato de alimentación.
- Calor en el rehervidor.



Solución

Para el cálculo de los puntos de ebullición de los componentes a presión de 1,2 atm, se utiliza la ecuación de Antoine y sus respectivas constantes [18]:

Componente	A	B	C
n-hexano	6,88555	1175,817	224,867
n-octano	6,91874	1351,756	209,100

Tabla 4.1 Constantes de Antoine para n-hexano y n-octano.

De la ecuación de Antoine,

$$\log_{10}P^* = A - \frac{B}{C + T}$$

Donde p^* está en mmHg, T en °C. Se despeja la temperatura y se obtienen los valores de los puntos de ebullición:

$$T = \frac{B}{A - \log_{10}P^*} - C$$

$$T_{eb,hexano} = \frac{1175,817}{6,88555 - \log_{10}\left(1,2 \text{ atm} \frac{760 \text{ mmHg}}{1 \text{ atm}}\right)} - 224,867 = 74,66 \text{ } ^\circ\text{C}$$

$$T_{eb,octano} = \frac{1351,756}{6,91874 - \log_{10}\left(1,2 \text{ atm} \frac{760 \text{ mmHg}}{1 \text{ atm}}\right)} - 209,1 = 132,36 \text{ } ^\circ\text{C}$$

La tabla de datos de equilibrio se calcula a partir de las ecuaciones:

$$x_A = \frac{P - P_B^\circ}{P_A^\circ - P_B^\circ} \quad ; \quad y_A = \frac{x_A P_A^\circ}{P}$$

T(°C)	P_A° (mmHg)	P_B° (mmHg)	x_A	y_A
74,66	912	-	1	1
80,43	1081,84	177,81	0,81	0,96
86,2	1275,27	219,37	0,66	0,92
91,97	1494,31	268,47	0,52	0,86
97,74	1741,07	326,08	0,41	0,79
103,51	2017,71	393,23	0,32	0,71
109,28	2326,42	470,99	0,24	0,61
115,05	2669,44	560,51	0,17	0,49
120,82	3049,00	663,00	0,10	0,35
126,59	3467,37	779,73	0,05	0,19
132,36	-	912	0	0

Tabla 4.2. Tabla de datos de equilibrio.

El diagrama de fases:

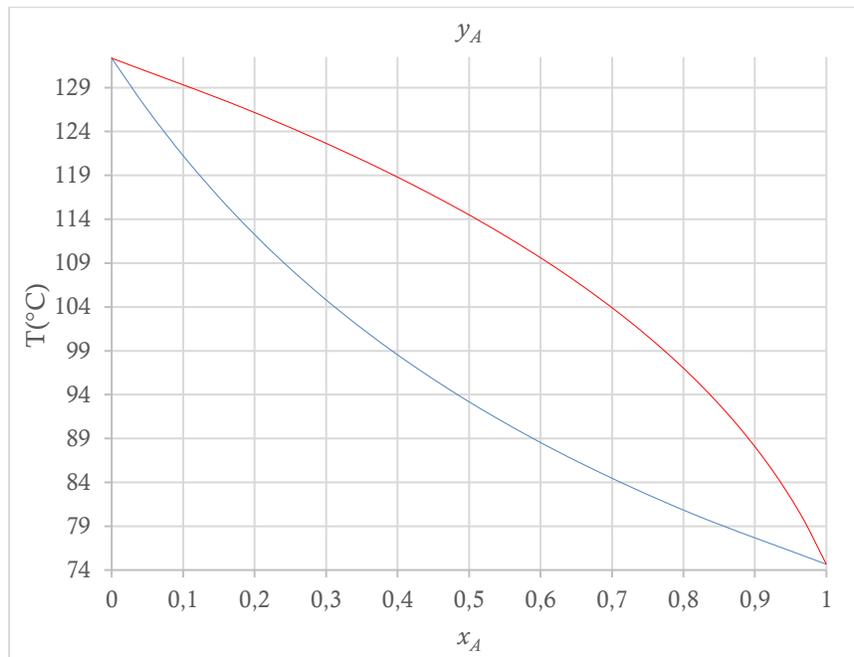


Figura 4.1. Diagrama de fases n-hexano, n-octano.

La curva de equilibrio líquido-vapor:

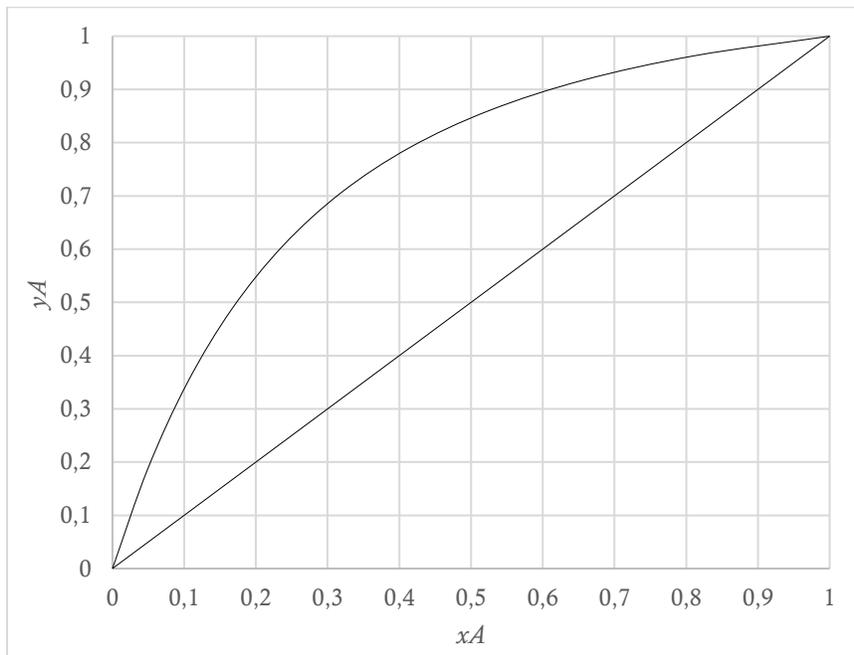


Figura 4.2. Curva de equilibrio líquido-vapor de n-hexano, n-octano.

Parte A:

A=n-hexano; B=n-octano.

$$\frac{1}{M} = \frac{w_A}{M_A} + \frac{w_B}{M_B} = \frac{0,35}{86,17 \text{ g/mol}} + \frac{0,65}{114,22 \text{ g/mol}}$$

$$M = 102,5377 \text{ g/mol}$$

$$w_A = \frac{x_A M_A}{M}$$

Despejando la fracción molar x_A ,

$$x_A = \frac{M w_A}{M_A} = \frac{(102,5377 \text{ g/mol})(0,35)}{86,17 \text{ g/mol}} = 0,4165$$

$$x_B = 1 - 0,4165 = 0,5835$$

Balance molar global:

$$\begin{aligned} F &= D + W \\ 100 \text{ kmol} &= D + W \end{aligned} \quad (1)$$

Donde F =alimentación, D =destilado, W =residuo.

Balance molar por componentes:

$$\begin{aligned} F x_F &= D x_D + W x_w \\ (100 \text{ kmol})(0,4165) &= 0,92D + 0,07W \\ 41,65 \text{ kmol} &= 0,92D + 0,07W \end{aligned} \quad (2)$$

Resolviendo el sistema de ecuaciones (1) y (2):

$$\begin{aligned} D &= 40,7647 \text{ kmol} \\ W &= 59,2353 \text{ kmol} \end{aligned}$$

Parte B:

Las moles de líquido saturado en el alimento $n_{liq,F}$,

$$n_{liq,F} = 100 \text{ kmol}(1 - 0,1595) = 84,05 \text{ kmol}$$

La fracción líquida que entra con el alimento q ,

$$q = \frac{n_{liq,F}}{n_F} = \frac{84,05 \text{ kmol}}{100 \text{ kmol}} = 0,8405$$

La línea de alimentación (en rojo):

$$y = \frac{q}{q-1}x - \frac{x_F}{q-1}$$

$$y = \frac{0,8405}{0,8405-1}x - \frac{0,4165}{0,8405-1}$$

$$y = 2,6113 - 5,2696x$$

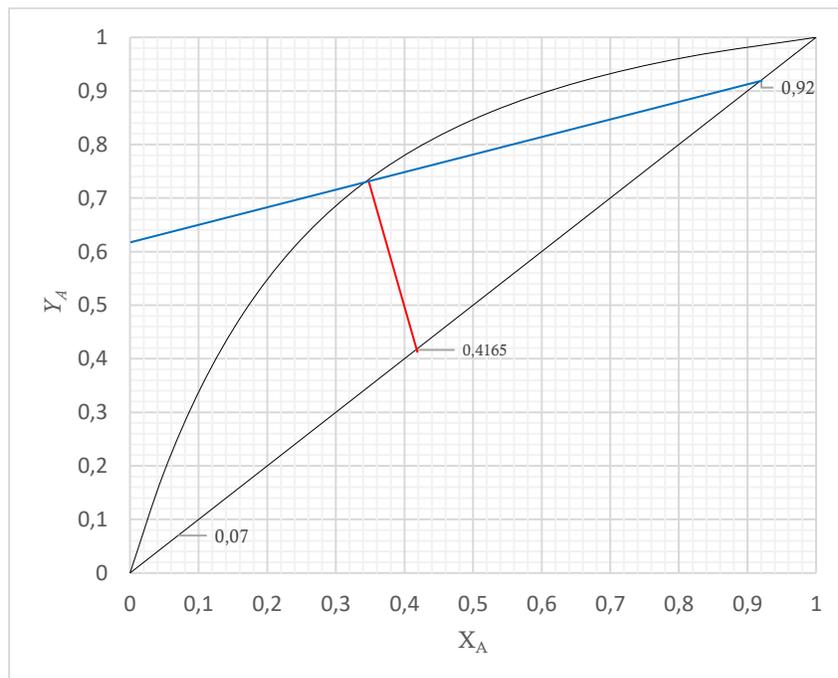


Figura 4.3. Líneas de alimentación y reflujo mínimo.

De la línea de reflujo mínimo (en azul):

$$y = \frac{R_{min}}{R_{min} + 1}x + \frac{x_D}{R_{min} + 1}$$

$$0,6180 = \frac{x_D}{R_{min} + 1}$$

$$R_{min} = 0,4887$$

$$R = 1,8(0,4887) = 0,8796$$

La línea de enriquecimiento:

$$y = \frac{R}{R + 1}x + \frac{x_D}{R + 1}$$

$$y = \frac{0,8796}{0,8796 + 1}x + \frac{0,92}{0,8796 + 1}$$

$$y = 0,4680x + 0,4895$$

Conocida la línea de enriquecimiento (en azul) y su intercepto con la línea de alimento (en rojo), se puede trazar la línea de empobrecimiento (en verde). Así mismo, se pueden calcular el número de platos ideales:

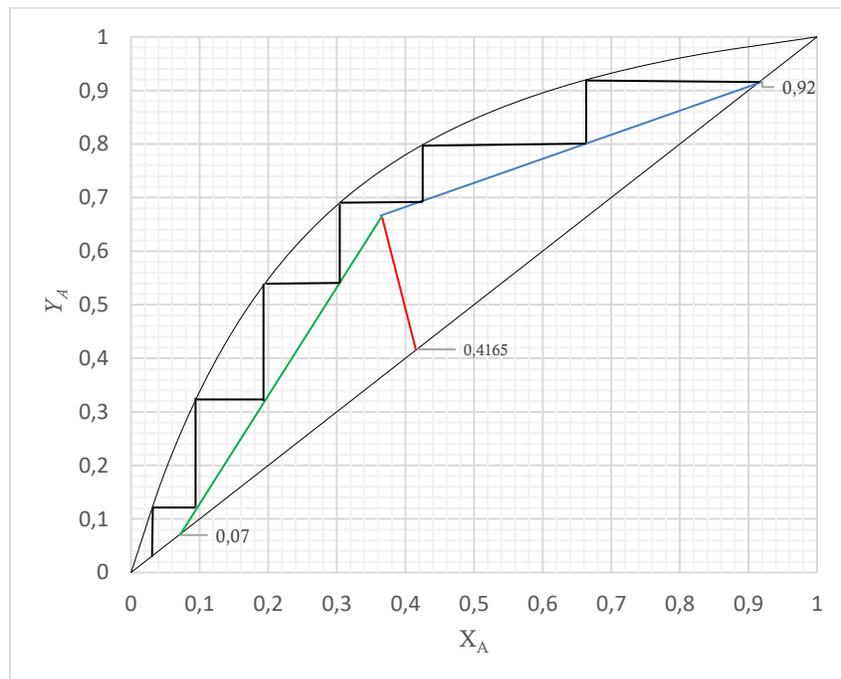


Figura 4.4. Cálculo de platos ideales.

Gráficamente se puede observar que el número de platos ideales es 6, y el plato de alimentación es el número 3.

Parte C:

Se debe tener pleno conocimiento de todas las fracciones y temperaturas en las diferentes corrientes del proceso. Para ello, se utiliza el diagrama de fases y la curva de equilibrio. Los cálculos y la tabla que resume todas estas propiedades se muestran a continuación:

$$n_{vapor,A,F} = 15,95 \text{ kmol}(0,724) = 11,5478 \text{ kmol}$$

$$n_{vapor,B,F} = 15,95 \text{ kmol}(1 - 0,724) = 4,4022 \text{ kmol}$$

$$n_{líquido,A,F} = 84,05 \text{ kmol}(0,358) = 30,0899 \text{ kmol}$$

$$n_{líquido,B,F} = 84,05 \text{ kmol}(1 - 0,358) = 53,9601 \text{ kmol}$$

En la zona de enriquecimiento:

$$R = \frac{L_o}{D}$$

$$L_o = RD = 0,8796(40,7647 \text{ kmol})$$

$$L_o = 35,8566 \text{ kmol}$$

$$V = L + D$$

$$V = 35,8566 \text{ kmol} + 40,7647 \text{ kmol}$$

$$V = 76,6213 \text{ kmol}$$

$$n_{A,v} = 76,6213 \text{ kmol}(0,92) = 70,4916 \text{ kmol}$$

$$n_{B,v} = 76,6213 \text{ kmol}(1 - 0,92) = 6,1297 \text{ kmol}$$

$$n_{A,D} = 40,7647 \text{ kmol}(0,92) = 37,5035 \text{ kmol}$$

$$n_{A,D} = 40,7647 \text{ kmol}(1 - 0,92) = 3,2612 \text{ kmol}$$

$$n_{A,L_o} = 35,8566 \text{ kmol}(0,92) = 32,9881 \text{ kmol}$$

$$n_{B,L_o} = 35,8566 \text{ kmol}(1 - 0,92) = 2,8685 \text{ kmol}$$

En la zona de empobrecimiento:

$$n_{A,W} = 59,2353 \text{ kmol}(0,07) = 4,1465 \text{ kmol}$$

$$n_{B,W} = 59,2353 \text{ kmol}(1 - 0,07) = 55,0888 \text{ kmol}$$

Corriente	kmol	Temperatura(°C)
Alimento		
$n_{vapor,A}$	11,5478	102
$n_{vapor,B}$	4,4022	
$n_{liquido,A}$	30,0899	
$n_{liquido,B}$	53,9601	
Condensador		
$n_{A,v}$	70,4916	85
$n_{B,v}$	6,1297	
$n_{A,D}$	37,5035	77,4
$n_{B,D}$	3,2612	
$n_{A,Lo}$	32,9881	77,4
$n_{B,Lo}$	2,8685	
Fondos		
$n_{A,W}$	4,1465	125
$n_{B,W}$	55,0888	

Tabla 4.3. Propiedades de las corrientes de materia.

Propiedades de los componentes:

Capacidades caloríficas en función de la temperatura:

$$C_p = a + bT + cT^2 + dT^3 + eT^4 = J/mol(^{\circ}C \text{ o } K)$$

n-hexano [18]	T	a	b	c	d	e
Líquida	K	31,421	$0,97606 \times 10^{-2}$	$-235,37 \times 10^{-5}$	$3092,7 \times 10^{-9}$	
Vapor	°C	137,44	$40,85 \times 10^{-2}$	$-23,92 \times 10^{-5}$	$57,66 \times 10^{-9}$	
n-octano [19]						
Líquida	K	38,2405	1,14275	$-2,1303 \times 10^{-3}$	$2,39204 \times 10^{-6}$	
Vapor	K	51,7608	$2,9555 \times 10^{-1}$	$9,66806 \times 10^{-4}$	$-1,62822 \times 10^{-6}$	$7,68379 \times 10^{-10}$

Tabla 4.4. Capacidades caloríficas del n-hexano y n-octano en función de la temperatura.

Entalpías de vaporización:

Compuesto	kJ/mol
n-hexano [18]	28,85
n-octano [19]	34,94

Tabla 4.5. Entalpías de vaporización del n-hexano y n-octano.

Calor que entra con el vapor, Q_V :

$$Q_V = Q_{V,A} + Q_{V,B}$$

$$Q_{V,A} = n_{A,V} \left[\int_{Tb,A}^{TV} C_{p_{V,A}} + \Delta H_{v,A} + \int_{25^{\circ}C}^{Tb,A} C_{p_{L,A}} \right]$$

$$Q_{V,A} = 70,4916 \times 10^3 \text{ mol} \left[1758,63 \frac{J}{\text{mol}} + 28,85 \times \frac{10^3 J}{\text{mol}} - 5294,94 \frac{J}{\text{mol}} \right]$$

$$Q_{V,A} = 1784402,51 \text{ kJ}$$

$$Q_{V,B} = n_{B,V} \left[\int_{Tb,B}^{TV} C_{p_{V,B}} + \Delta H_{v,B} + \int_{25^{\circ}C}^{Tb,B} C_{p_{L,B}} \right]$$

$$Q_{V,B} = 6,1297 \times 10^3 \text{ mol} \left[-10950,34 \frac{J}{\text{mol}} + 34,94 \times 10^3 \frac{J}{\text{mol}} + 30184,39 \frac{J}{\text{mol}} \right]$$

$$Q_{V,B} = 332070,67 \text{ kJ}$$

$$Q_V = 1784402,51 \text{ kJ} + 332070,67 \text{ kJ} = 2116473,18 \text{ kJ}$$

Calor que sale con el destilado, Q_D :

$$Q_D = Q_{D,A} + Q_{D,B}$$

$$Q_{D,A} = n_{A,D} \int_{25^{\circ}C}^{TD} C_{p_{L,A}}$$

$$Q_{D,A} = 37,5035 \times 10^3 \text{ mol} \left(-5625,06 \frac{J}{\text{mol}} \right) = -210959,44 \text{ kJ}$$

$$Q_{D,B} = n_{B,D} \int_{25^{\circ}C}^{TD} C_{p_{L,B}}$$

$$Q_{D,B} = 3,2612 \times 10^3 \text{ mol} \left(13961,74 \frac{J}{\text{mol}} \right) = 45532,02 \text{ kJ}$$

$$Q_D = -210959,44 \text{ kJ} + 45532,02 \text{ kJ} = -165427,42 \text{ kJ}$$

Calor que se retorna con el reflujo, Q_{Lo} :

$$Q_{Lo} = Q_{Lo,A} + Q_{Lo,B}$$

$$Q_{Lo,A} = n_{A,Lo} \int_{25^{\circ}C}^{TD} C_{pL,A}$$

$$Q_{Lo,A} = 32,9881 \times 10^3 \text{ mol} \left(-5625,06 \frac{J}{\text{mol}} \right) = -185560,04 \text{ kJ}$$

$$Q_{Lo,B} = n_{B,D} \int_{25^{\circ}C}^{TD} C_{pL,B}$$

$$Q_{Lo,B} = 2,8685 \times 10^3 \text{ mol} \left(13961,74 \frac{J}{\text{mol}} \right) = 40049,25 \text{ kJ}$$

$$Q_{Lo} = -185560,04 \text{ kJ} + 40049,25 \text{ kJ} = -145510,79 \text{ kJ}$$

Calor en el condensador Q_C :

$$Q_C = Q_V - Q_D - Q_{Lo}$$

$$Q_C = 2116473,18 \text{ kJ} - (-165427,42 \text{ kJ}) - (-145510,79 \text{ kJ})$$

$$Q_C = 2427411,39 \text{ kJ}$$

Calor que sale con la corriente de fondos Q_W :

$$Q_W = Q_{W,A} + Q_{W,B}$$

$$Q_{W,A} = n_{A,W} \int_{25^{\circ}C}^{TW} C_{pL,A}$$

$$Q_{W,A} = 4,1465 \times 10^3 \text{ mol} \left(-11923,08 \frac{J}{\text{mol}} \right) = -49439,05 \text{ kJ}$$

$$Q_{W,B} = n_{B,W} \int_{25^{\circ}C}^{TW} C_{pL,B}$$

$$Q_{W,B} = 55,0888 \times 10^3 \text{ mol} \left(27912,63 \frac{\text{J}}{\text{mol}} \right) = 1537673,51 \text{ kJ}$$

$$Q_W = -49439,05 \text{ kJ} + 1537673,51 \text{ kJ} = 1488234,46 \text{ kJ}$$

Calor que entra con el alimento Q_F :

$$Q_F = Q_{\text{vapor},F} + Q_{\text{líquido},F}$$

$$Q_{\text{vapor},F} = Q_{\text{vapor},A,F} + Q_{\text{vapor},B,F}$$

$$Q_{\text{vapor},A,F} = n_{\text{vapor},A,F} \left[\int_{Tb,A}^{TF} C_{pV,A} + \Delta H_{v,A} + \int_{25^\circ\text{C}}^{Tb,A} C_{pL,A} \right]$$

$$Q_{\text{vapor},A,F} = 11,5478 \times 10^3 \text{ mol} \left[4693,79 \frac{\text{J}}{\text{mol}} + 28,85 \times \frac{10^3 \text{ J}}{\text{mol}} - 5294,94 \frac{\text{J}}{\text{mol}} \right]$$

$$Q_{\text{vapor},A,F} = 326212,07 \text{ kJ}$$

$$Q_{\text{vapor},B,F} = n_{\text{vapor},B,F} \left[\int_{Tb,B}^{TF} C_{pV,B} + \Delta H_{v,B} + \int_{25^\circ\text{C}}^{Tb,B} C_{pL,B} \right]$$

$$Q_{\text{vapor},B,F} = 4402,2 \text{ mol} \left[-7147,08 \frac{\text{J}}{\text{mol}} + 34,94 \times 10^3 \frac{\text{J}}{\text{mol}} + 30184,39 \frac{\text{J}}{\text{mol}} \right]$$

$$Q_{\text{vapor},B,F} = 255227,69 \text{ kJ}$$

$$Q_{\text{vapor},F} = 326212,07 \text{ kJ} + 255227,69 \text{ kJ} = 581439,76 \text{ kJ}$$

$$Q_{\text{líquido},F} = Q_{\text{líquido},A,F} + Q_{\text{líquido},B,F}$$

$$Q_{\text{liquido},A,F} = n_{\text{liquido},A,F} \int_{25^{\circ}\text{C}}^{TF} C_{pL,A}$$

$$Q_{\text{liquido},A,F} = 30,0899 \times 10^3 \text{ mol} \left(-8752,39 \frac{\text{J}}{\text{mol}} \right) = -263358,54 \text{ kJ}$$

$$Q_{\text{liquido},B,F} = n_{\text{liquido},B,F} \int_{25^{\circ}\text{C}}^{TF} C_{pL,B}$$

$$Q_{\text{liquido},B,F} = 53,9601 \times 10^3 \text{ mol} \left(21014,81 \frac{\text{J}}{\text{mol}} \right) = 1133961,26 \text{ kJ}$$

$$Q_{\text{liquido},F} = -263358,54 \text{ kJ} + 1133961,26 \text{ kJ} = 870602,72 \text{ kJ}$$

$$Q_F = 581439,76 \text{ kJ} + 870602,72 \text{ kJ} = 1452042,48 \text{ kJ}$$

Calor en el rehervidor Q_R :

$$Q_R = Q_C + Q_D + Q_W - Q_F$$

$$Q_R = 2427411,39 \text{ kJ} - 165427,42 \text{ kJ} + 1488234,46 \text{ kJ} - 1452042,48 \text{ kJ}$$

$$Q_R = 2298175,95 \text{ kJ}$$

Solución en Aspen-Hysys:

1. **Componentes:** n-hexano, n-octano.
2. **Paquete Termodinámico:** Peng Robinson.
3. Insertar una corriente de materia con las siguientes propiedades:

Conditions	
Stream Name	Alimentación
Temperature	102°C
Pressure	1,2 atm
Mass Flow	100 kmol/h
Composition (Mass Fraction)	
n-hexano	0,35
n-octano	0,65

Tabla 4.5. Propiedades de la corriente alimentación.

Operación Unitaria:

1. De la ventana **Model Palette**, en la sección **Columns**, insertar la herramienta **Short Cut Distillation** haciendo clic sobre el icono  y arrastrarlo al diagrama de procesos.
2. Hacer doble clic sobre la herramienta **T-100**, en el apartado **Connections** insertar los siguientes valores como se muestra en la figura:

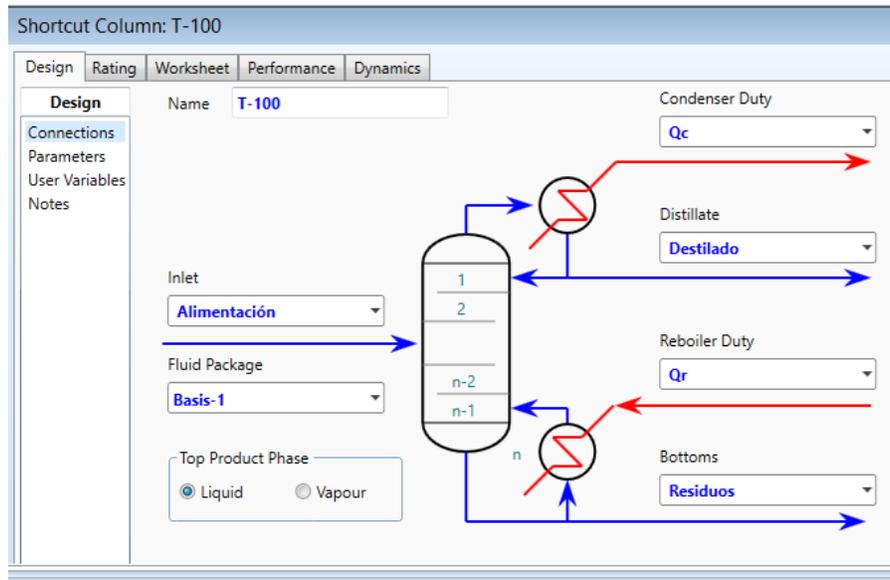


Figura 4.5. Conexión de las corrientes de materia en columna de destilación.

3. Dirigirse al apartado **Parameters** e insertar los valores como se muestra a continuación:

Component	Mole Fraction
Light Key in Bottoms	n-Hexane 0.0700
Heavy Key in Distillate	n-Octane 0.0800

Pressures	Value
Condenser Pressure	121.590 kPa
Reboiler Pressure	121.590 kPa

Reflux Ratios	Value
External Reflux Ratio	0.979
Minimum Reflux Ratio	0.529

Figura 4.6. Parámetros de diseño en columna de destilación.

Resultados

Dirigirse a la pestaña **Performance**, en esta se aprecian todos los valores obtenidos del proceso:

Shortcut Column: T-100	
Design Rating Worksheet Performance Dynamics	
Trays	
Minimum Number of Trays	3.230
Actual Number of Trays	6.520
Optimal Feed Stage	3.409
Temperatures	
Condenser [C]	77.37
Reboiler [C]	124.9
Flows	
Rectify Vapour [kgmole/h]	80.670
Rectify Liquid [kgmole/h]	39.907
Stripping Vapour [kgmole/h]	64.723
Stripping Liquid [kgmole/h]	123.960
Condenser Duty [kJ/h]	-2472961.812
Reboiler Duty [kJ/h]	2167784.048

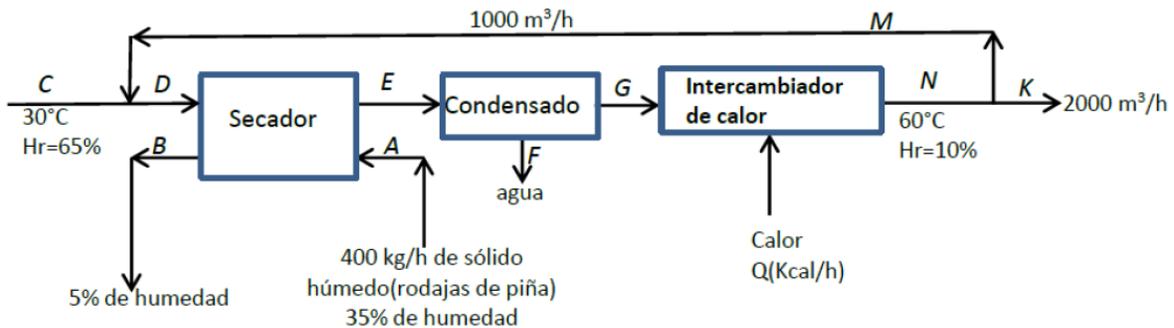
Figura 4.7. Resultados número de platos y corrientes de energía.

El número de platos calculado manualmente coincide con el resultado entregado por Aspen-Hysys. El valor de los calores Q_C y Q_R son muy semejantes. Las propiedades termodinámicas incluidas en Aspen-Hysys hacen que los valores de energía obtenidos tengan mas confiabilidad.

Humidificación:

Se utiliza aire a condiciones de 30°C y $H_r = 65\%$ para secar 400 kg/h de sacarosa. La sacarosa pasa de tener una humedad del 35% en peso a contener solo el 5% de humedad. El proceso cuenta con un condensador donde se deshumidifica el aire que sale del secador. Del condensador, el aire sale completamente saturado. Del condensador, el aire pasa a un intercambiador de calor donde se recalienta, obteniendo una temperatura de 60°C y una $H_r = 10\%$, de este aire húmedo se recicla $1000\text{ m}^3/\text{h}$ en la corriente M y en la otra parte ($2000\text{ m}^3/\text{h}$) sale del sistema hacia los extractores por la corriente K. Calcular:

- Kg/h de agua condensada.
- La masa de aire que entra al condensador E.
- Calor suministrado en el intercambiador (kJ/h).
- Masa de aire húmedo que debe entrar en la corriente C.



Solución:

$$kg_B = kg \text{ aire seco}$$

En la corriente A:

$$(H_2O)_A = 400 \text{ kg}(0,35) = 140 \text{ kg}$$

$$\text{sólido seco} = 400 \text{ kg}(0,65) = 260 \text{ kg}$$

En la corriente B:

$$(H_2O)_B = 260 \text{ kg ss} \times \frac{100 \text{ kg B}}{95 \text{ kg ss}} \times \frac{5 \text{ kg } H_2O}{100 \text{ kg B}} = 13,6842 \text{ kg}$$

$$B = \text{sólido seco} + (H_2O)_B$$

$$B = 260 \text{ kg} + 13,6842 \text{ kg} = 273,6842 \text{ kg}$$

Se calcula el volumen específico V_H en la corriente N , para posteriormente hallar la masa de aire seco y agua en las corrientes M y K :

Según la carta psicrométrica a 1 atm de presión total [15], la humedad absoluta ha del aire a las condiciones de N es de $ha=0,012$.

$$V_{HN} = \left(\frac{1}{28,97} + \frac{ha}{18,02} \right) \frac{RT}{P} = \left(\frac{1}{28,97} + \frac{0,012}{18,02} \right) \frac{(8,314 \text{ J/molK}) (333,15 \text{ K})}{1011,325 \text{ kPa}}$$

$$V_{HN} = 0,9618 \text{ m}^3/\text{kg}_B$$

En la corriente K :

$$\text{kg}_{BK} = 2000 \text{ m}^3 \times \frac{\text{kg}_B}{0,9618 \text{ m}^3} = 2079,4344 \text{ kg}$$

$$(H_2O)_K = \text{kg}_{BK} \cdot ha_N = 2079,4344 \text{ kg} \times 0,012 = 24,9532 \text{ kg}$$

$$K = \text{kg}_{BK} + (H_2O)_K = 2079,4344 \text{ kg} + 24,9532 \text{ kg} = 2104,3876 \text{ kg}$$

En la corriente M :

$$\text{kg}_{BM} = 1000 \text{ m}^3 \times \frac{\text{kg}_B}{0,9618 \text{ m}^3} = 1039,7172 \text{ kg}$$

$$(H_2O)_M = \text{kg}_{BM} \cdot ha_N = 1039,7172 \text{ kg} \times 0,012 = 12,4766 \text{ kg}$$

$$M = \text{kg}_{BM} + (H_2O)_M = 1039,7172 \text{ kg} + 12,4766 \text{ kg} = 1052,1938 \text{ kg}$$

En la corriente C :

Según la carta psicrométrica a 1 atm de presión total [15], la humedad absoluta ha del aire a las condiciones de C es de $ha=0,012$.

Balance parcial de aire seco en todo el sistema:

$$\text{kg}_{BC} = \text{kg}_K$$

$$\text{kg}_{BC} = 2079,4344 \text{ kg}$$

$$(H_2O)_C = \text{kg}_{BC} \cdot ha_C = 2079,4344 \text{ kg} \times 0,017 = 35,3504 \text{ kg}$$

$$C = (H_2O)_C + \text{kg}_{BC} = 35,3504 \text{ kg} + 2079,4344 \text{ kg} = \mathbf{2114,7848 \text{ kg}}$$

Balance parcial de agua en todo el sistema:

$$(H_2O)_C + (H_2O)_A = (H_2O)_B + (H_2O)_F + (H_2O)_K$$
$$35,3504 \text{ kg} + 140 \text{ kg} = 13,6842 \text{ kg} + (H_2O)_F + 24,9532 \text{ kg}$$
$$(H_2O)_F = \mathbf{136,7130 \text{ kg}}$$

Balance de masa en el condensador:

$$E = F + G$$

Considerando que $G=N$:

$$N = K + M = 2104,3876 \text{ kg} + 1052,1938 \text{ kg} = 3156,5814 \text{ kg}$$

$$E = 136,7130 \text{ kg} + 3156,5814 \text{ kg} = \mathbf{3293,2944 \text{ kg}}$$

Balance de masa en el secador:

$$D + A = E + B$$
$$D = E + B - A = 3293,2944 \text{ kg} + 273,6842 \text{ kg} - 400 \text{ kg}$$
$$D = 3166,9786 \text{ kg}$$

En la corriente D :

$$kg_{B_D} = kg_{B_C} + kg_{B_M} = 3159,1516 \text{ kg}$$
$$(H_2O)_D = D - kg_{B_D} = 3166,9786 \text{ kg} - 3159,1516 \text{ kg} = 7,8270 \text{ kg}$$

Cálculo de Q :

Según la carta psicrométrica a 1 atm de presión total [15], la temperatura de saturación del aire a las condiciones de salida del condensador ($ha=0,012$) es de 17°C .

La entalpía en G :

$$H_G = (1,005 + 188ha)T + 2501,4ha$$
$$H_G = (1,005 + 188(0,012)) \cdot 17 + 2501,4(0,012) = 47,4853 \text{ kJ/kg}_B$$

La entalpía en N :

$$H_N = (1,005 + 188(0,012)) \cdot 60 + 2501,4(0,012) = 91,6704 \text{ kJ/kg}_B$$

Balance de energía en el intercambiador de calor:

$$Q + Q_G = Q_N$$

$$Q = Q_N - Q_G = kg_{B_N} \cdot H_N - kg_{B_N} \cdot H_G$$

$$Q = kg_{B_N}(H_N - H_G) = 3119,1516 \text{ kg}(91,6704 - 47,4853) \text{ kH/kg}$$

$$Q = 137820,0254 \text{ kJ}$$

Solución en Aspen-Hysys:

1. **Componentes:** Agua, aire
2. Debido a que la sacarosa no se encuentra en la base de datos de Aspen-Hysys, se debe ingresar como un componente hipotético [20], para ello, en la pestaña **Component List -1**, en la sección **Select** se selecciona **Hypothetical Solid**. Luego, hacer clic en **New Solid**. Ingresar el nombre sacarosa, el peso molecular de 342,3 y la densidad de 1590 kg/m³. Finalmente hacer clic en **Add**.
3. **Paquete termodinámico:** Peng Robinson.
4. De la ventana **Model Palette** seleccionar cinco herramientas de balance y las respectivas corrientes de materia para realizar el diagrama mostrado a continuación en el diagrama de procesos:

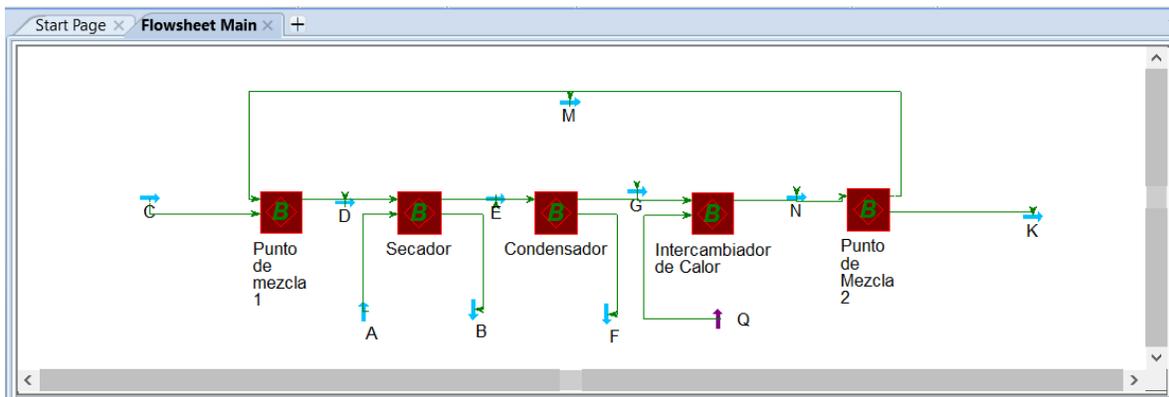


Figura 4.8. Diagrama del proceso a simular.

5. Modificar las propiedades de las corrientes de materia según la siguiente tabla:

La presión para todas las corrientes será de 1 atm.

Corriente	T(°C)	Flujo Másico (kg/h)		
		Aire	Agua	Sacarosa
A	20	0	140	260
B	20	0	13,6842	260
C	30	-	-	-
D	-	3159,1516	7,8270	0
E	-	-	-	-

Extracción Líquido-Líquido:

300 kg/h de una solución de acetona-agua de composición 33 % en masa de acetona se somete a una extracción en contracorriente para reducir su concentración hasta 4%. La extracción se lleva a cabo con una solución de 94% en metil-isobutil-cetona (MIBK) y 6% de acetona. Calcular la composición del extracto final y el número de etapas necesarias para la extracción cuando la cantidad de disolvente empleado es 350 kg/h.

Solución:

A= agua.

B= MIBK.

C= acetona.

1. Se realiza la gráfica de equilibrio con los datos mostrados a continuación:

Fase Pesada			Fase Liviana		
Agua	Acetona	MIBK	Agua	Acetona	MIBK
2,0	2,0	96,0	97,0	1,0	2,0
2,5	6,0	91,5	95,0	3,0	2,0
3,0	10,0	87,0	91,0	6,0	3,0
3,5	16,0	80,5	88,0	9,0	3,0
4,0	20,0	76,0	83,0	13,0	4,0
4,5	25,0	70,5	79,0	17,0	4,0
5,0	30,0	65,0	74,5	20,0	5,5
7,0	36,0	57,0	68,0	26,0	6,0
9,0	40,0	51,0	62,0	30,0	8,8
14,0	48,0	38,0	49,0	40,0	11,0
33,0	49,0	18,0	33,0	49,0	18,0

Tabla 4.7. Tabla de datos de equilibrio Acetona-Agua-MIBK.

2. Ubicar los puntos F , S y R_n , correspondientes a las concentraciones de acetona en el alimento, solvente y la concentración final a la que se quiere llegar.
3. Trazar una línea entre F y S (azul), se aplica la ley de la palanca para hallar el punto de mezcla M :

$$\frac{F}{S} = \frac{X_{C,M} - X_{C,F}}{X_{C,F} - X_{C,M}}$$

$$X_{C,M} = \frac{FX_{C,F} + SX_{C,S}}{F + S} = \frac{(300 \text{ kg/h} \times 0,33) + (350 \text{ kg/h} \times 0,06)}{(300 + 350) \text{ kg/h}} = 0,18$$

4. Ubicar el punto $M=0,18$.
5. Trazar una línea entre Rn y M (azul) y prolongarla hasta cortar la curva binoidal este será el extracto final $E1$ cuyas composiciones son:

Acetona	0,24
Agua	0,04
MIBK	0,72

6. Trazar una línea entre F y $E1$ (rojo) y prolongarla fuera del diagrama de fases.
7. Trazar una línea entre Rn y S (rojo) y prolongarla hasta interceptar la línea anteriormente trazada, este será el punto P . Esto es lo que se tiene hasta ahora.

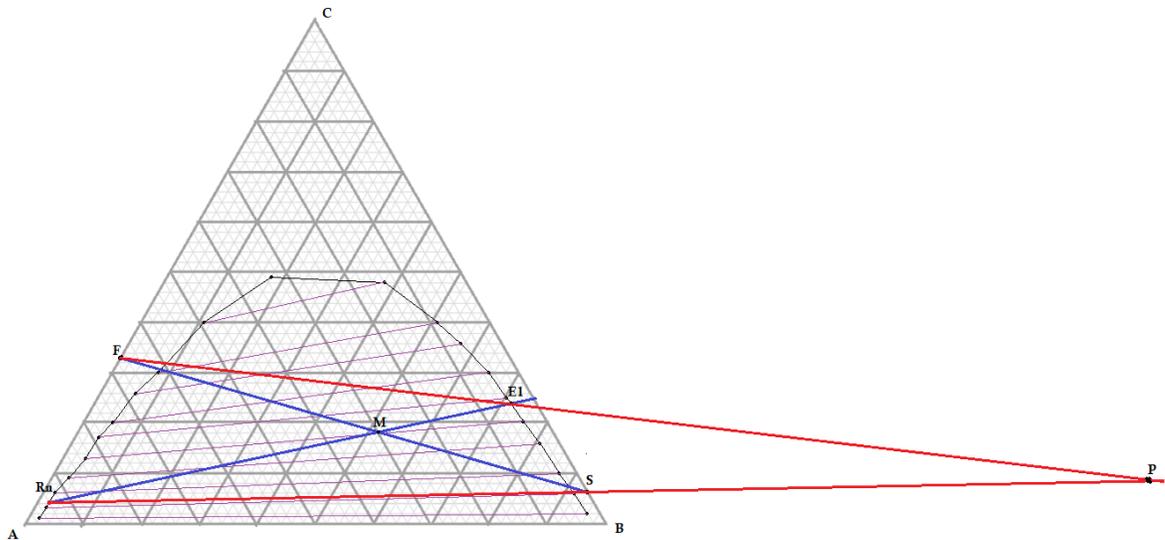


Figura 4.10. Gráfica de equilibrio y ubicación de los puntos P y $E1$.

8. Trazar una línea de reparto que pase por $E1$ (verde) y prolongarla hasta cortar la curva, este será $R1$ para esto, tomar como referencia las líneas de reparto de color violeta.
9. Trazar una línea desde $R1$ hasta P (rojo), el punto en el que se corta con la curva binoidal será $E2$.
10. Seguir el procedimiento descrito en 8 y 9 hasta cubrir el punto Rn :

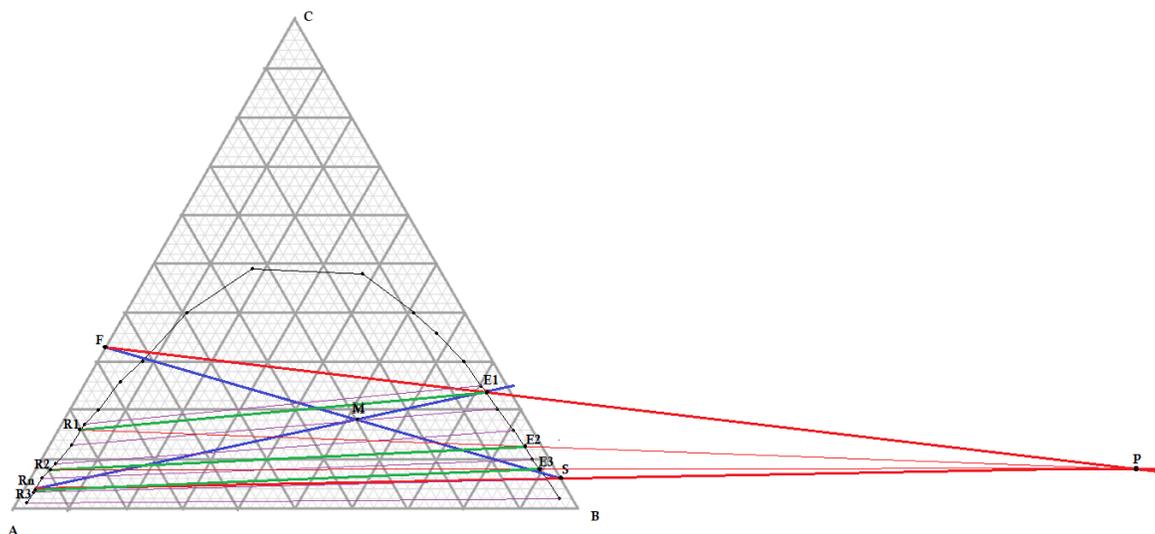


Figura 4.11. Cálculo de etapas necesarias para llegar a 4% de acetona.

Se necesitaron tres etapas para cubrir el punto R_n , estas se visualizan con las rectas $E1-R1$, $E2-R2$ y $E3-R3$ trazadas en color verde.

Solución en Aspen-Hysys:

1. **Componentes:** Acetona, agua, MIBK.
2. **Paquete termodinámico:** NTRL.
3. Dirigirse a la pestaña **Binary Coeffs** dentro de la selección del paquete termodinámico. En la sección **Coeffs Estimation**, seleccionar **UNIFAC LLE** y hacer clic en **Unknowns Only**.
4. Insertar dos corrientes de materia con las siguientes propiedades:

Conditions		
Stream Name	F	S
Temperature	25°C	25°C
Pressure	1 atm	1 atm
Mass Flow	300 kg/h	350 kg/h
Composition (Mass Fraction)		
acetona	0,33	0,06
agua	0,67	0,0
MIBK	0,0	0,94

Tabla 4.8. Propiedades de las corrientes de materia.

5. Seleccionar una columna de extracción líquido-líquido  que se encuentra en la sección **Columns** de la ventana **Model Palette**.
6. Hacer doble clic en la columna de extracción e insertar la información como se muestra a continuación:

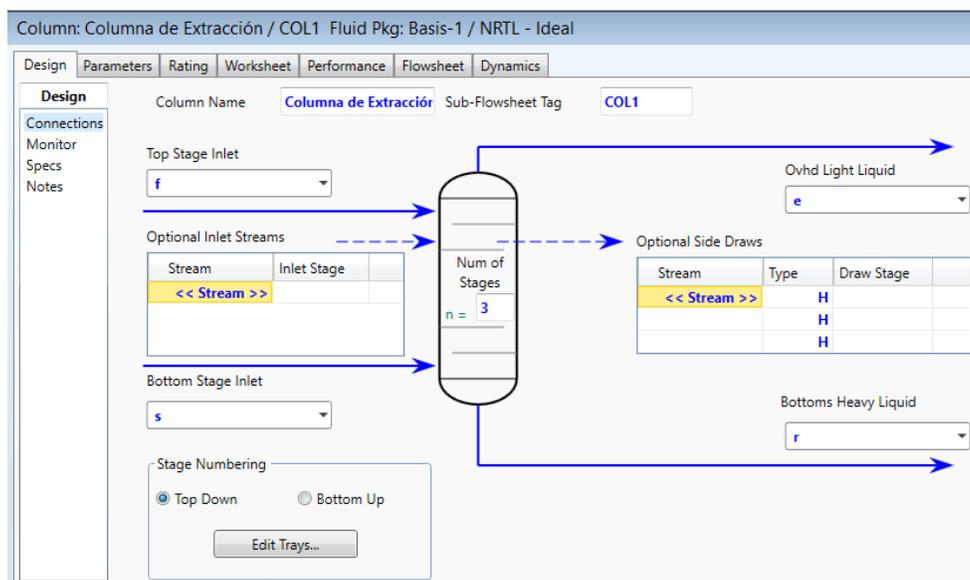


Figura 4.12. Conexión de corrientes de materia en columna de extracción.

En Aspen-Hysys se debe ingresar el número de etapas para que el software calcule las composiciones de extracto y refinado, por tal motivo se ingresa un número de tres etapas en la sección **Num of Stages**.

7. Hacer clic en **Next**, insertar una presión de 1 atm en la columna y hacer clic en **Done**. Hacer clic en **Run**.

Resultados:

Dirigirse a la corriente **E** y observar la composición en fracción másica de los componentes.

	Mass Fractions	Liquid P
M-i-B-Ketone	0.7256	
H2O	0.0184	
Acetone	0.2560	

Figura 4.13. Composiciones del extracto final *E1*.

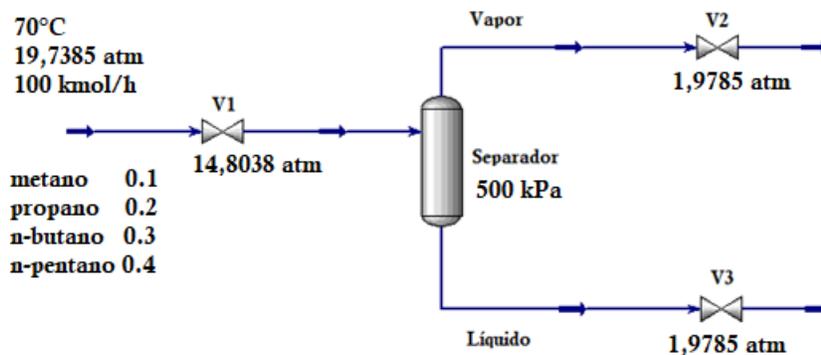
A pesar de que el método gráfico convencional no es tan preciso, puede verse que los valores calculados por Aspen-Hysys tiene gran similitud.

5

Instrumentación y Control de Procesos

Sintonización de controladores:

Se desea realizar la separación de 120 kmol/h una mezcla de hidrocarburos compuesta de etano, propano, i-butano y n-butano cuyas fracciones molares son 0.2/0.3/0.1/0.4 respectivamente. La mezcla está a 70°C y 25 bar de presión. Se pretende establecer un controlador de flujo en la alimentación, un controlador de presión en la salida de vapor y un controlador de nivel en la salida de líquido.



Solución:

Simulación en estado estacionario:

1. **Componentes:** etano, propano, n-butano, i-butano.
2. **Paquete termodinámico:** Peng Robinson.
3. Adicionar una corriente de materia con las siguientes propiedades:

Conditions	
Stream Name	Mezcla
Temperature	70°C
Pressure	19,7385 atm
Molar Flow	100 kmol/h

Composition	
metano	0,1
propano	0,2
n-butano	0,3
n-pentano	0,4

Tabla 5.1. Propiedades de la corriente Mezcla.

- Adicionar un separador presionando en el icono  que se encuentra en la sección **Common** de la ventana **Model Palette**.
- Hacer doble clic sobre el separador, en la sección **Connections** se insertan las entradas y salidas del separador:

Inlet: 1
Vapour Outlet: 2
Liquid Outlet: 3

Pasar a la sección **Parameters** e insertar un volumen de 2 m³. Cerrar ventana.

- Adicionar tres válvulas de control presionando el icono  que se encuentra en la sección **Common** de la ventana **Model Palette**.
- Insertar las siguientes propiedades en las válvulas de control:

Name	V1	V2	V3
Inlet	Mezcla	2	3
Outlet	1	4	5
Delta P	14,8038 atm	1,9785 atm	1,9785 atm

Tabla 5.2. Propiedades de las válvulas.

- En la pestaña **Dynamics** de cada válvula, hacer clic en **Size valve** para que se calcule el valor de la conductancia.

Modo dinámico:

- Hacer clic en el menú **Dynamics** de la barra de herramientas de Aspen-Hysys, después hacer clic en el icono **Dynamics Mode**  Se abrirá una ventana emergente, hacer clic en **Si**.
- Se abrirá una ventana de cambios para el modo dinámico, hacer clic en **Make Changes** y luego en **Finish**. Cerrar ventana.
- Nuevamente hacer clic en **Dynamics Mode** y hacer clic en **Si**. Esto con el fin de confirmar la entrada al modo dinámico de Aspen-Hysys.

Control de alimentación:

1. Seleccionar un controlador PID de la ventana **Model Palette** presionando el icono  que se encuentra en la sección **Dynamics**.
2. Hacer doble clic sobre el controlador, se nombrará como “Control Alimentación”.
3. Seleccionar **Select PV** para seleccionar la variable controlada en este caso el flujo molar, para esto en la ventana desplegada seleccionar **Mezcla** en la sección **Object** y en la sección **Variable** seleccionar **Molar Flow**. Finalmente hacer clic en **OK**.

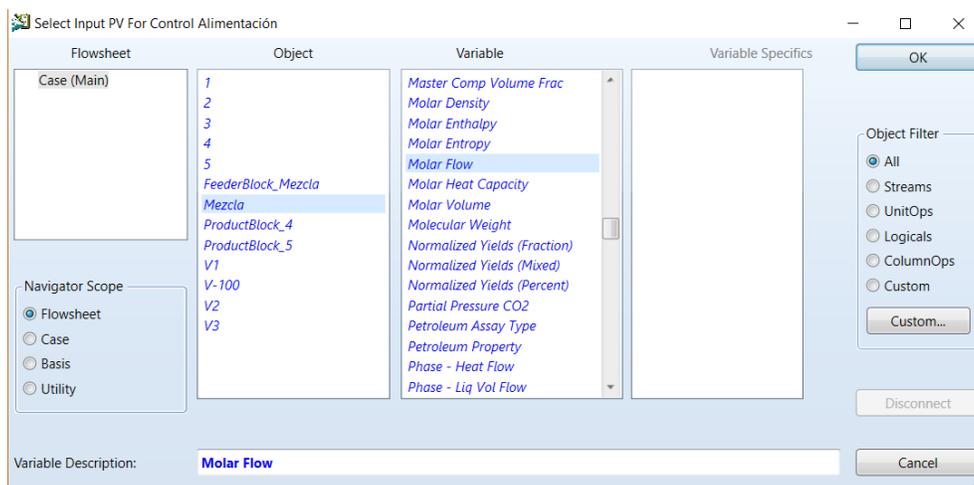


Figura 5.1. Variable a controlar.

Seleccionar la variable manipulada, haciendo clic en **Select OP**, en la ventana desplegada seleccionar **V1** en la sección **Object** y en la sección **Variable**, seleccionar **Actuator Desired Position**. Finalmente hacer clic en **OK**.

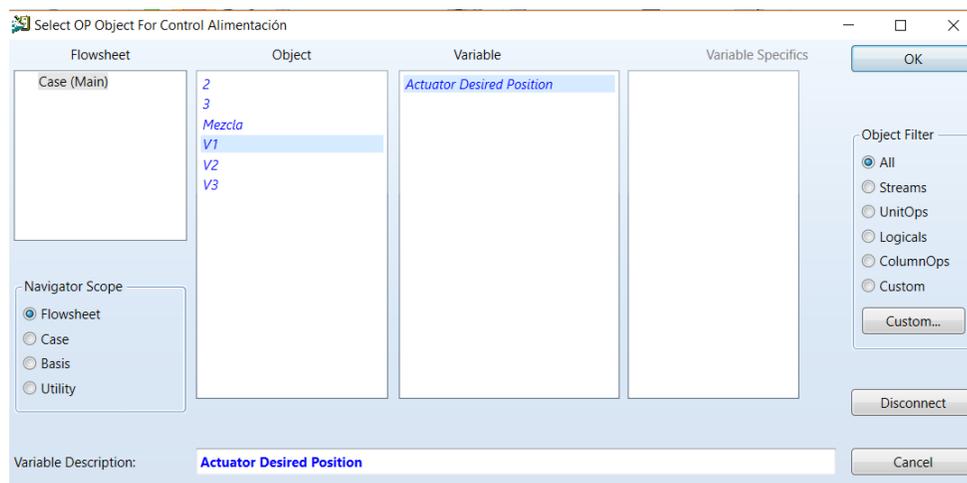


Figura 5.2. Variable manipulada.

4. En la pestaña **Parameters** seleccionar la acción **Reverse**. La acción es reversa debido a que un aumento en el flujo implica una disminución en la apertura de la válvula.
5. Fijar un set point **SP** de 100 kmol/h. Esto se logra ingresando los valores mínimos y máximos para la variable de proceso (PV). En la sección **Range** ingresar un valor mínimo de 90 kmol/h y un máximo de 110 kmol/h.
6. Dirigirse a la pestaña **Autotuner**, en la sección **Autotuner Parameters** seleccionar el control proporcional-integral **PI**. Presionar **Start Autotuner**.
7. Presionar el icono **Run**  para iniciar el modo dinámico y observar los valores calculados de Kc y Ti.
8. Ingresar los valores calculados al controlador haciendo clic en **Accept** en la sección **Autotuner Results** en la pestaña **Autotuner**.
9. Cambiar a modo automático seleccionando **Auto** en la casilla **Mode** de la sección **Operational Parameters**.

Si se desea ver gráficamente como cambian las variables con respecto al tiempo es necesario instalar registradores gráficos:

1. En la pestaña **Stripchart** del controlador, seleccionar **SP, PV, OP Only** en la casilla **Variable Set**. Hacer clic en **Create Scripchart** y luego presionar **Display** en la ventana que aparece.

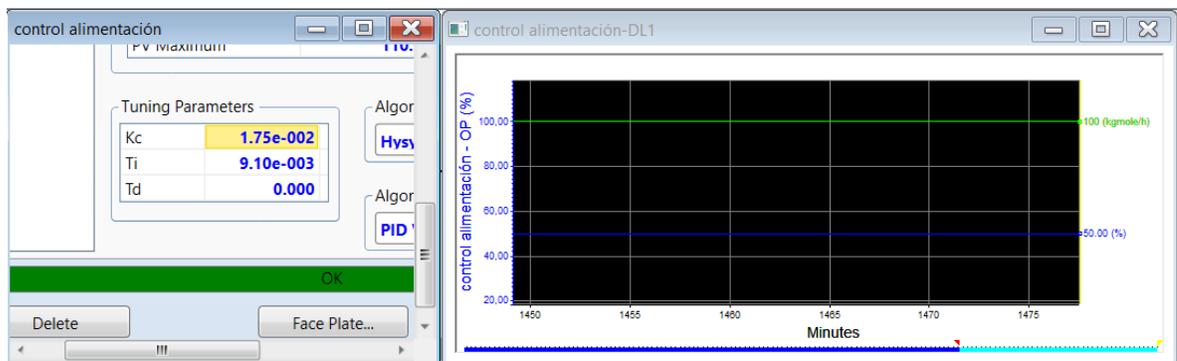


Figura 5.3. Controlador de alimentación sintonizado.

Se puede apreciar que con los valores calculados por el autotuner el sistema se encuentra perfectamente sintonizado, pues el PV coincide con el SP de 100 kmol/h. Sin embargo, si se modifica el valor de alguna constante se puede apreciar el cambio en la sintonía del controlador.

Como ejemplo en este caso, se han cambiado los valores de las acciones integral y derivativa del controlador. Se puede observar como el PV se eleva a un valor de 111,4 kmol/h alejándose del SP de 100 kmol/h, esta acción también se ve reflejada en la apertura de la válvula OP que para este caso pasó de un 50% a un 37,2%.

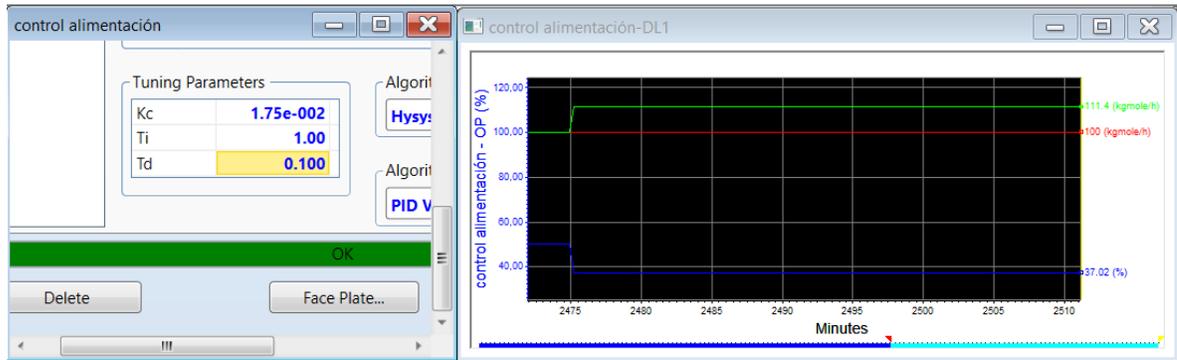


Figura 5.4. Controlador de alimentación fuera de control.

Control de nivel:

1. Hacer doble clic sobre el separador. Dirigirse a la pestaña **Dynamics**, seleccionar **Add/Configure Level Controller**. Con esta acción se ha añadido un controlador PID con todas sus propiedades especificadas para su sintonización proporcional-integral, incluyendo SP. Realizar el autotuner del controlador y dar clic en **Accept** para añadir estos valores calculados.

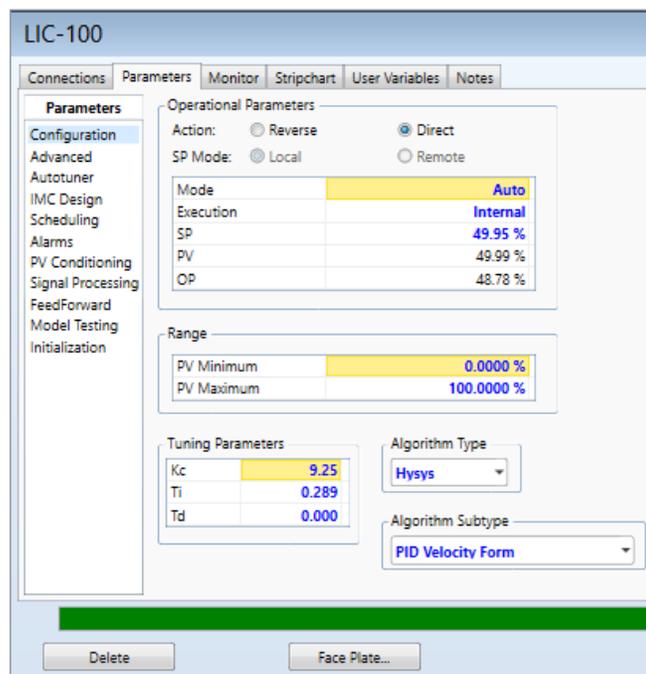


Figura 5.5. Parámetros del controlador de nivel.

Se puede apreciar el estado de las variables con respecto al tiempo añadiendo un registrador gráfico, siguiendo el mismo procedimiento que realizó para el control de nivel:

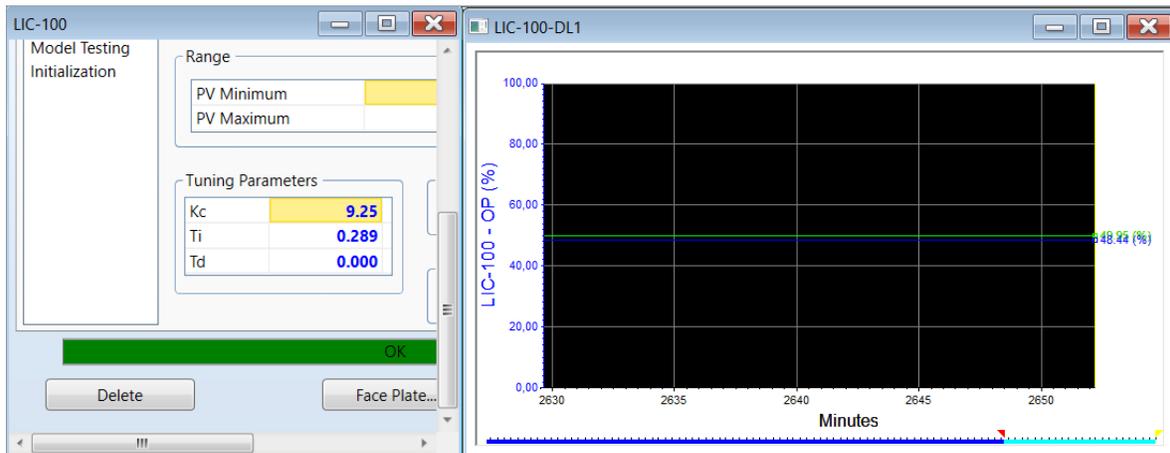


Figura 5.6. Controlador de nivel sintonizado.

En este caso se puede observar que, al suprimir la acción integral del controlador, el sistema sufre un cambio drástico estando fuera de control.



Figura 5.7. Controlador de nivel fuera de control.

Control de presión:

1. Instalar un controlador PID con las siguientes propiedades:

Nombre	Control Presión
Variable controlada	Presión
Variable a manipular	Flujo de corriente a través de la válvula V2

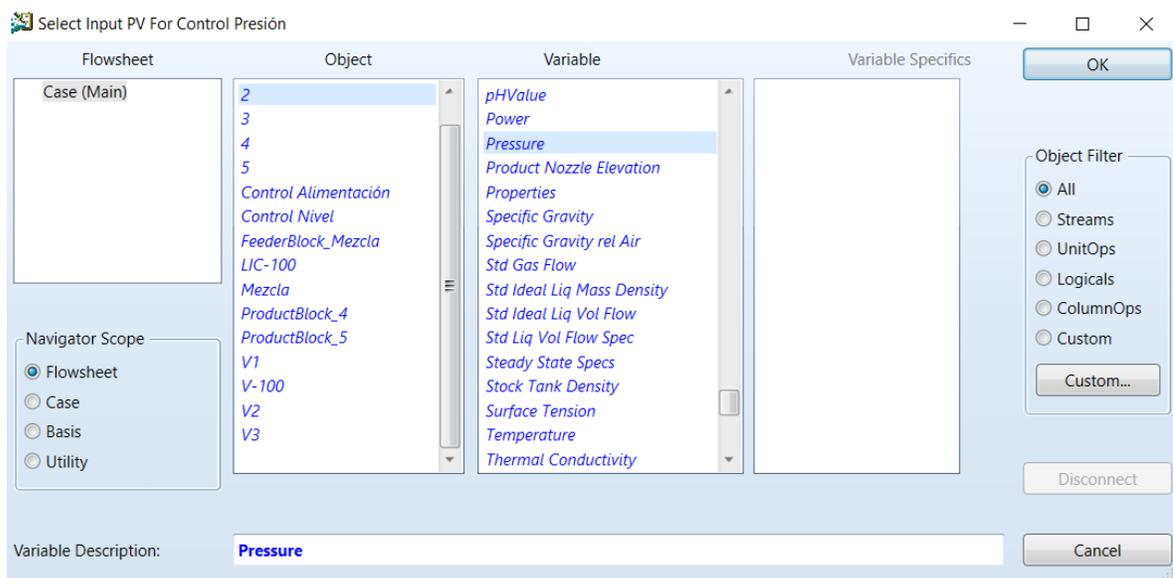


Figura 5.8. Variable controlada.

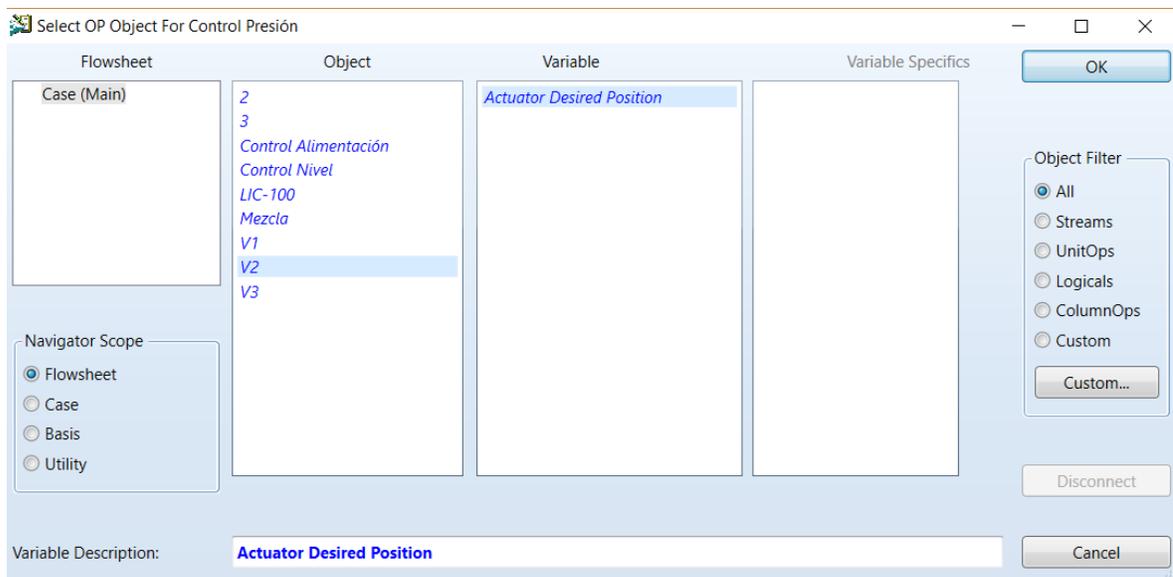


Figura 5.9. Variable a manipular.

2. En la pestaña **Parameters** seleccionar la acción **Direct**. La acción es directa debido a que un aumento de presión en la corriente implica un aumento en la apertura de la válvula para mantener una presión constante en el tanque.
3. En la sección **Range** insertar el PV mínimo 4000 kPa, y el PV máximo de 6000 kPa para ajustar el set point ST a 5000 kPa.
4. Realizar el autotuner de igual forma como se realizó con el control de alimentación y nivel.

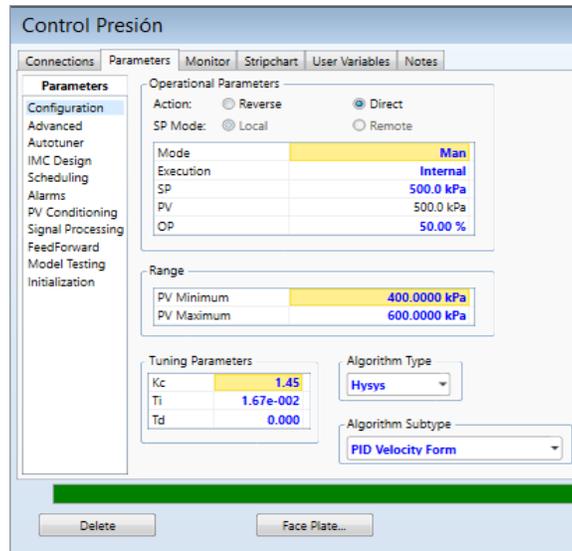


Figura 5.10. Parámetros control de presión.

- Añadir un registrador gráfico siguiendo el mismo procedimiento que en los controladores de alimentación y nivel.

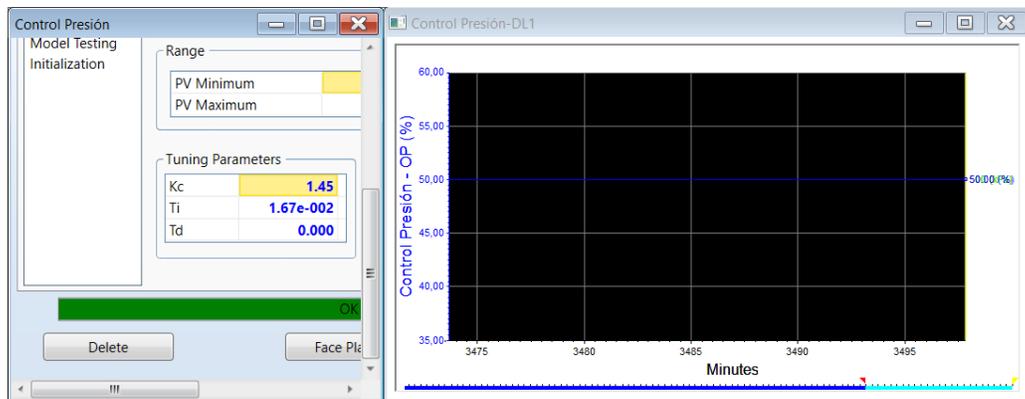


Figura 5.11. Controlador de presión sintonizado.

- Modificar el valor de las constantes para apreciar el cambio con respecto al tiempo.

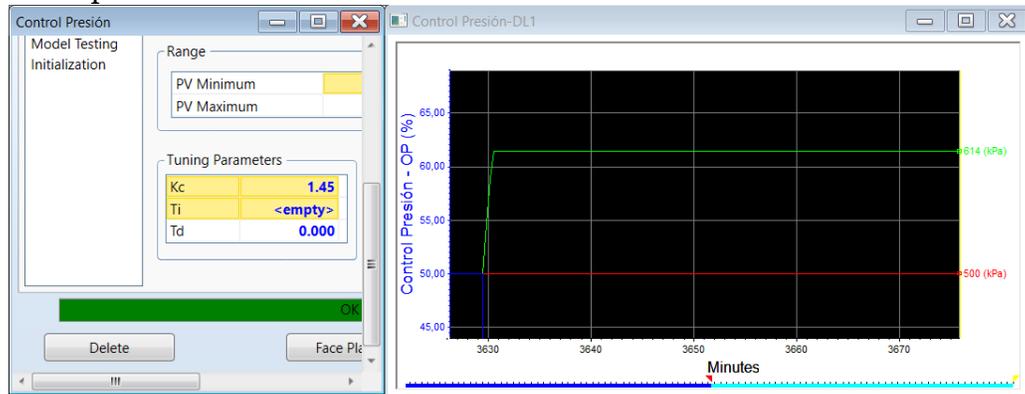
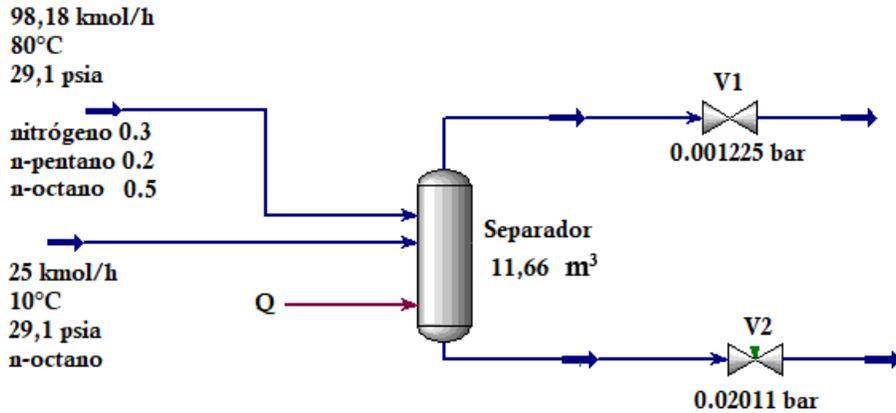


Figura 5.12. Controlador de presión fuera de control.

Control de temperatura frente a una perturbación:

Se desea separar nitrógeno N_2 de una mezcla de hidrocarburos compuesta por n-pentano y n-octano, los cuales están en una proporción de 0.3/0.2/0.5 en fracción molar respectivamente. Al sistema de separación entran 98.18 kmol/h de mezcla a una temperatura de 80°C y una presión de 29,1 psia, y una corriente de 25 kmol/h de n-octano a 10°C a la misma presión. Se pretende establecer un control de temperatura, que permita mantener constante la temperatura del líquido.



Solución en Aspen-Hysys:

1. **Componentes:** nitrógeno, n-pentano, n-octano.
2. **Paquete termodinámico:** Peng Robinson.
3. Adicionar dos corrientes de materia con las siguientes propiedades:

Conditions		
Stream Name	Mezcla	Perturbación
Temperature	80°C	10°C
Pressure	29,1 psia	29,1 psia
Molar Flow	98.18 kmol/h	25 kmol/h
Composition (Mole Fraction)		
nitrógeno	0,3	0,0
n-octano	0,5	1,0
n-pentano	0,2	0,0

Tabla 5.3. Propiedades de las corrientes de materia en control de temperatura.

4. Adicionar una corriente de energía y nombrarla Q. Hacer doble clic sobre esta corriente. Dirigirse a la pestaña **Dynamics** y hacer clic en **Utility Valve**. Establecer los valores mínimo (o kJ/h) y máximo (1×10^7 kJ/h) de energía. En la pestaña **Stream** insertar un flujo de calor de $8,3 \times 10^5$ esto se hace con el fin de que el sistema se resuelva, una vez se entre al modo dinámico se observará como este valor cambia.
5. Adicionar un separador.
6. Hacer doble clic sobre el separador, en la sección **Connections** se insertan las entradas y salidas del separador:

Inlet: Alimentación, Perturbación, Q.
Vapour Outlet: Vapor
Liquid Outlet: Líquido

Pasar a la sección **Parameters** e insertar un volumen de $11,33 \text{ m}^3$ y una capacidad del 60%. Cerrar ventana.

7. Adicionar dos válvulas de control. Insertar las siguientes propiedades en las válvulas de control:

Name	V1	V2
Inlet	Vapor	Líquido
Outlet	1	2
Delta P	0,001225 bar	0,02011

Tabla 5.4. Propiedades de las válvulas.

9. En la pestaña **Dynamics** de cada válvula, hacer clic en **Size valve** para que se calcule el valor de la conductancia.
10. Entrar en el modo dinámico de Aspen-Hysys.

Control de nivel:

1. Hacer doble clic sobre el separador. Dirigirse a la pestaña **Dynamics**, seleccionar **Add/Configure Level Controller**. Con esta acción se ha añadido un controlador PID con todas sus propiedades especificadas para su sintonización proporcional-integral, incluyendo SP. Realizar el autotuner del controlador y dar clic en **Accept** para añadir estos valores calculados.

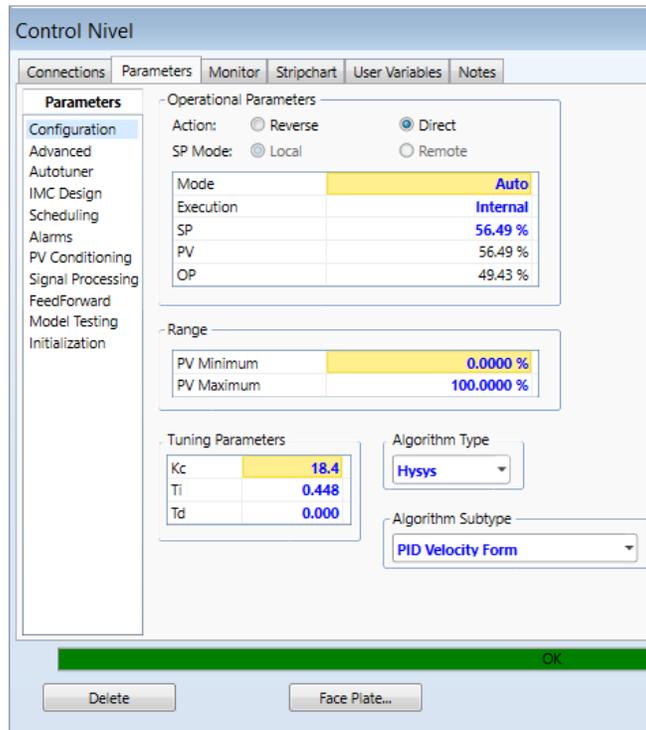


Figura 5.13. Parámetros del controlador de nivel.

Control de Temperatura:

1. Instalar un controlador PID con las siguientes propiedades:

Nombre	Control Temperatura
Variable controlada	Temperatura
Variable a manipular	Flujo de calor en la corriente de energía

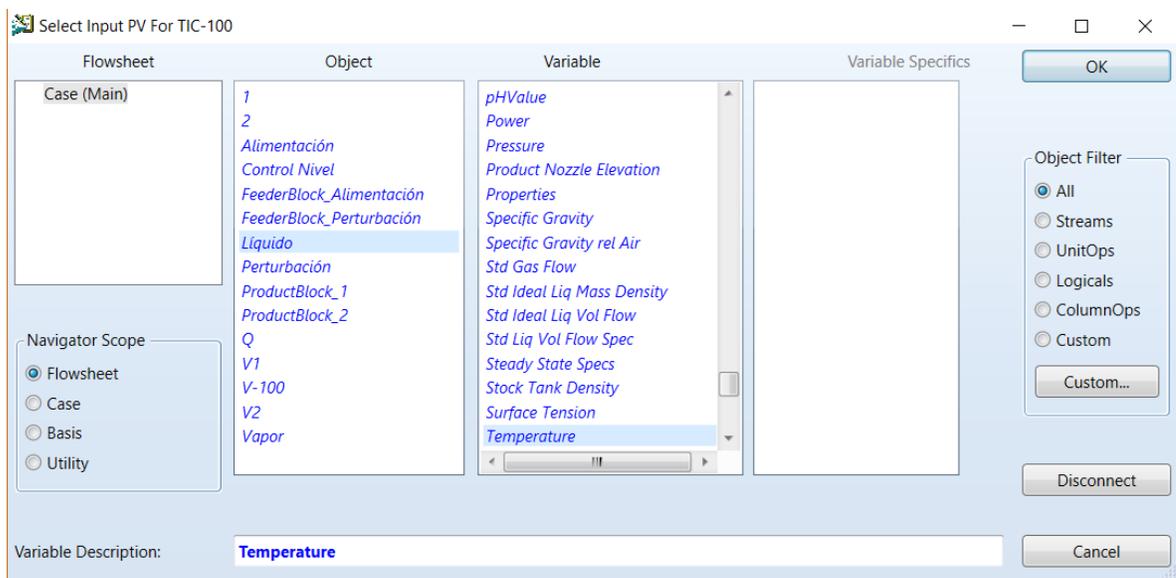


Figura 5.14. Variable controlada.

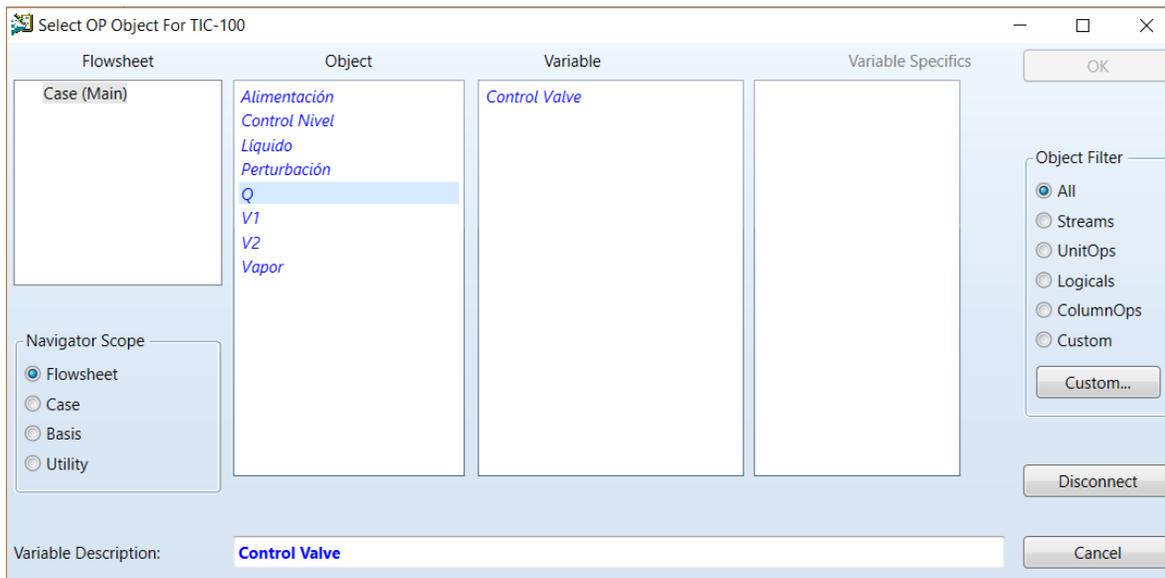


Figura 5.15. Variable a manipular.

2. En la pestaña **Parameters** seleccionar la acción **Reverse**. La acción es reversa debido a que un aumento de temperatura implica una disminución en la apertura de la válvula para suministrar un menor flujo de calor.
3. En la sección **Range** insertar el PV mínimo 90°C, y el PV máximo de 100°C. Se observa como el set point ST se fija en 92,73°C.
4. Realizar el autotuner de igual forma como se realizó con el control de alimentación y nivel.

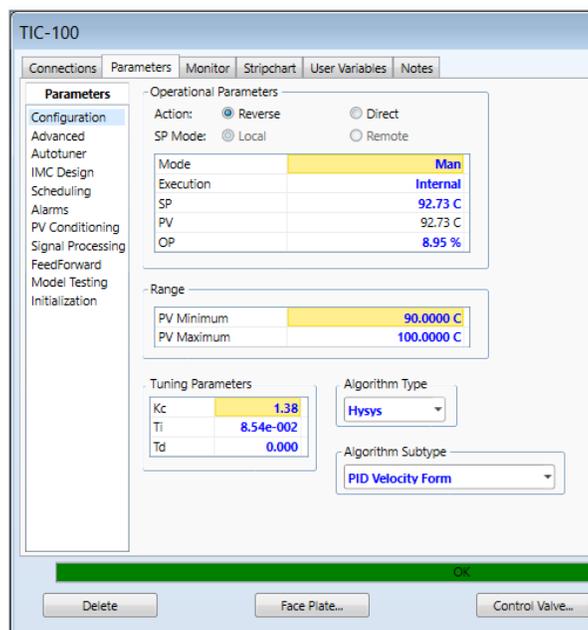


Figura 5.16. Parámetros del controlador de temperatura.

- Hacer doble clic sobre el separador y dirigirse a la pestaña **Dynamics**, entrar en la sección **Stripchart**. En **Variables Set** se selecciona **PFD Table Entries**. Hacer clic en **Create Stripchart**. Seleccionar únicamente las casillas **Vassel Temperature** y **Duty**. Hacer clic en **Display**.
- Hacer clic derecho sobre la corriente de energía Q y seleccionar **Show Table** con el fin de mostrar el valor del flujo de calor en el diagrama de procesos.

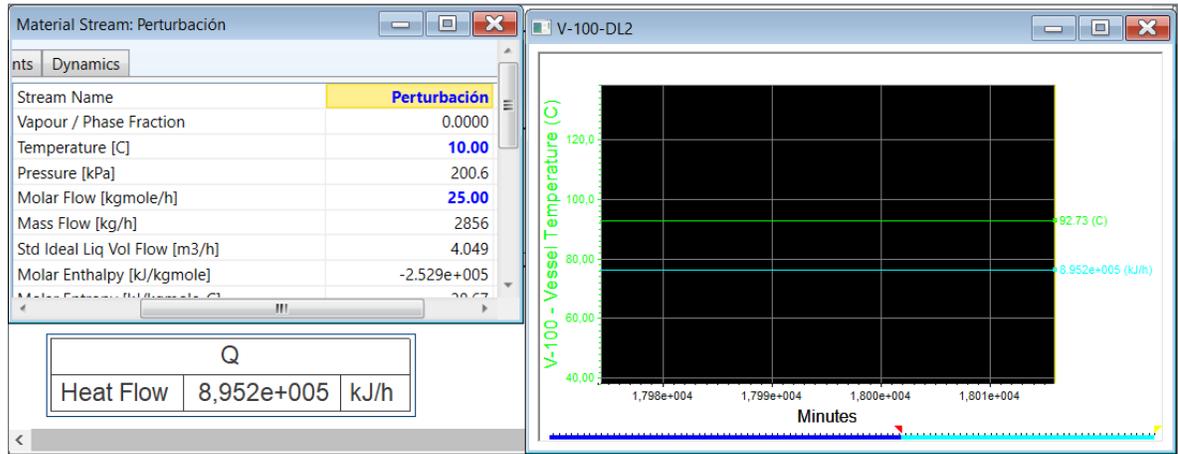


Figura 5.17. Controlador de temperatura sintonizado.

Se observa que el proceso se encuentra controlado con la temperatura de salida del líquido en un valor constante de 92,37°C y un flujo de calor de $8,952 \times 10^5$ kJ/h.

Para observar la respuesta del sistema frente a la perturbación, se modifica la temperatura de la corriente **Perturbación**. inmediatamente se observa como el flujo de calor se ajusta, para que la temperatura permanezca constante:

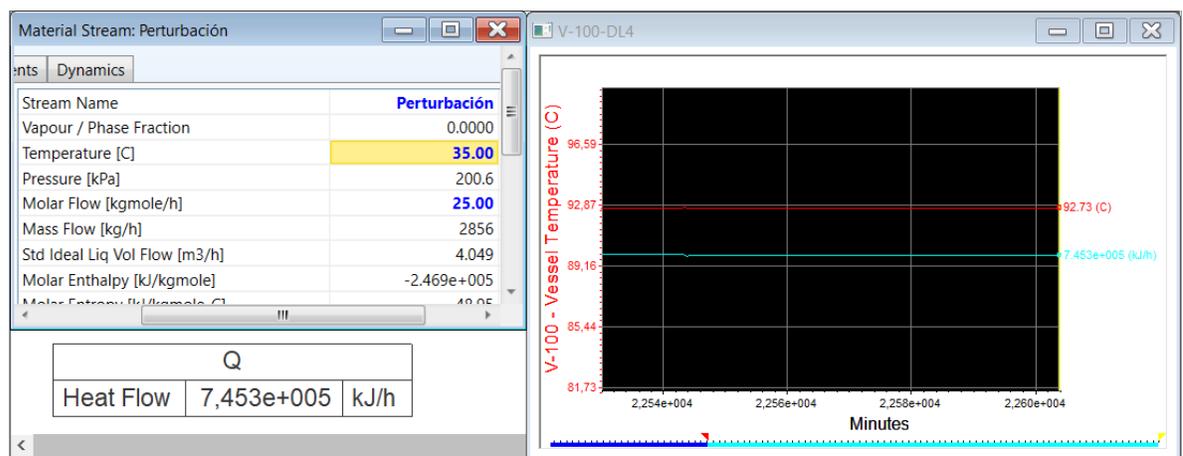


Figura 5.18. Respuesta del controlador frente a un cambio de temperatura.

Si la temperatura en la corriente **Perturbación** es alta, como en este caso de 160°C, el sistema de control deja de funcionar debido a que el flujo de calor a suministrar está por fuera de los límites establecidos.

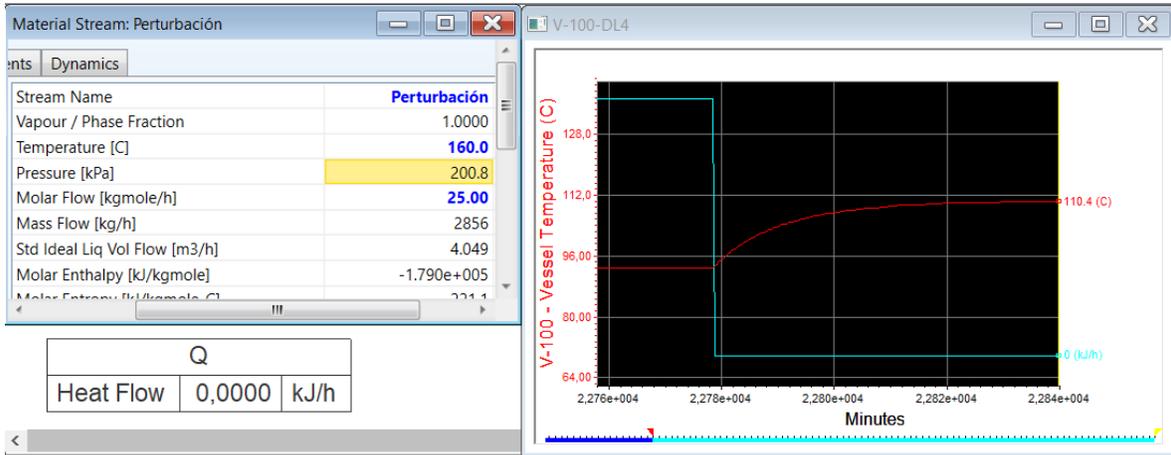


Figura 5.19. Respuesta del controlador frente a una temperatura alta.

Otro caso semejante ocurre si se le da un valor negativo a la temperatura (-15°C). El flujo de calor se ajusta para entregar el valor de temperatura deseado (92,73°C).



Figura 5.20. Respuesta del controlador a frente a una temperatura baja.

Conclusiones y Recomendaciones

Se ha desarrollado un documento que permite familiarizarse con los simuladores de procesos existentes en la industria química. Aspen-Hysys proporciona todas las herramientas necesarias para implementar los conocimientos adquiridos en las asignaturas de procesos y utilizarlos de forma práctica con la resolución de ejercicios, lo que lleva a un desarrollo de habilidades computacionales y un afianzamiento en los conocimientos técnicos, además de la clara ventaja de simplificar cálculos matemáticos y análisis extensos.

Aspen-Hysys como herramienta multifuncional permite la simulación de diversos casos que se presentan en la industria. Resalta la capacidad que tiene este software para visualizar los procesos en estado dinámico, lo que proporciona un enfoque más realista de cada operación que se lleva a cabo en los procesos.

Se recomienda guardar cada progreso que se logre en las simulaciones para tener una referencia clara de los procedimientos que se realizan. Así mismo, la utilización del modo dinámico y las diferentes operaciones unitarias incluidas en Aspen-Hysys deben ser de frecuente uso para obtener destreza con la herramienta de simulación.

Bibliografía

- [1] Area Moreira M. (2000). “Que aporta Internet al cambio pedagógico en la Educación Superior?”, en Redes Multimedia y diseños virtuales. Actas del III Congreso Internacional de Comunicación Tecnología y Educación, Universidad de Oviedo, septiembre, pp 128-135.
- [2] Vaquero J. (2007), “Herramienta interactiva para la enseñanza y entrenamiento en la técnica de control predictivo”, tesis en opción al grado de master, Instituto Politécnico José Antonio Hecheverría, La Habana. Cuba.
- [3] Cuevas-Aranda, M., Fernández-Valdivia, D. G., Parra-Ruiz, M. L., & Navarro-Nieto, S. (2014). Uso de simulaciones por ordenador para mejorar la enseñanza en el laboratorio de ingeniería química. *Modelling in Science Education and Learning*, 7, 93-102.
- [4] Streicher, S. J., West, K., Fraser, D. M., Case, J. M., & Linder, C. (2005). Learning through simulation: Student engagement. *Chemical Engineering Education*, 39(4), 288-295.
- [5] García, G. J., Ibarra, C.P., Félix, F. M., & Ríos, M. G. (2008). La simulación de procesos en ingeniería química. *Revista Investigación Científica*, 4(2), 1-9.
- [6] Fernandes F. (2002). Use of process simulators for the unit operations education of undergraduate chemical engineers. *Computer Applications in Engineering Education*, 10, 155-160.
- [7] Ferro V. R., Gómez J. O., Palomar J. F., Gómez L. M. (2006). Estrategia didáctica tipo ECTS basada en el uso de simuladores de proceso en la titulación de Ingeniero Técnico Industrial, especialidad en Química Industrial. Actas del XIV Congreso Universitario de Innovación Educativa en las Enseñanzas Técnicas (CUIEET), Gijón, España.
- [8] Corpas, C. C., Ramos, E. R., Galiano, E. C., Valdivia, D. F., Vilar, M. M., Pulido, I. R., ... & Lozano, F. E. (2010). Aplicación del programa de simulación de procesos Hysys para el diseño de actividades de aprendizaje de operaciones unitarias en las áreas de Ingeniería Química y Tecnologías del Medio Ambiente. *Iniciación a la Investigación*, (e4).
- [9] Maldonado, D. B. (2011). Simulación y modelos matemáticos. *EXPEDITO*, (7).

- [10] Ramírez Avelar, M. C. (2005). Desarrollo de módulos de simulación de procesos en Ingeniería Química (Doctoral dissertation, Universidad de El Salvador).
- [11] Scenna, N. J., Aguirre, P. A., Benz, S. J., Chiotti, O. J., Espinosa, H. J., Ferrero, M. B., ... & Salomone, H. E. (2015). Modelado, simulación y optimización de procesos químicos.
- [12] Sifuentes, V. H. M. (2000). Simulación de procesos en Ingeniería Química. Plaza y Valdés.
- [13] Gonzalez, C., & Vital, M. (2010). Curso Electivo: Simulación de procesos en Aspen HYSYS. Laboratorio de Simulación de Procesos Facultad de Ciencias Aplicadas a la Industria, UNCuyo.
- [14] Londoño R. (2015). Balance de Materia y Energía. Universidad Tecnológica de Pereira.
- [15] Çengel, Y. A., & Boles, M. A. (2015). Termodinámica (8a. McGraw Hill Mexico).
- [16] Mott, R. L. (2006). Mecánica de fluidos. Pearson educación.
- [17] Ghasem, N. (2011). Computer methods in chemical engineering. CRC Press.
- [18] Himmelblau, D. M. (1997). Principios básicos y cálculos en ingeniería química. Pearson Educación.
- [19] Reklaitis, G. V., & Schneider, D. R. (1983). Introduction to material and energy balances (pp. 55-56). New York: Wiley.
- [20] Hamid, M. K. A. (2007). HYSYS®: An Introduction to Chemical Engineering Simulation. Apostila de Hamid.