

1

2E



# UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO

## FACULTAD DE QUIMICA

### SIMULACION Y PROPUESTA DE MEJORAMIENTO DE UNA PLANTA PRODUCTORA DE METIL ISOBUTIL CETONA, MIBK

TESIS MANCOMUNADA  
QUE PARA OBTENER EL TITULO DE  
INGENIERO QUIMICO  
P R E S E N T A N  
ALEJANDRO <sup>AleF</sup> ACOSTA CASTILLEJOS  
OMAR ROMERO HERNANDEZ



MEXICO, D.F., CIUDAD UNIVERSITARIA 1994

TESIS CON  
FALLA DE ORIGEN



Universidad Nacional  
Autónoma de México



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

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

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

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



EXÁMENES PROFESIONALES  
FAC. DE QUÍMICA

## JURADO

Presidente	Prof:	Enrique Bazúa Rueda
Vocal	Prof:	Manuel Vázquez Islas
Secretario	Prof:	Celestino Montiel Maldonado
1er. suplente	Prof:	Genovevo Silva Pichardo
2o. suplente	Prof:	José Agustín Texta Mena

### Lugar donde se desarrollo este trabajo:

Departamento de Ingeniería Química,  
Facultad de Química, UNAM.

### Asesor del tema:

Ing. Celestino Montiel Maldonado

### Sustentantes:

Alejandro Alef Acosta Castillejos

Omar Romero Hernández

## **INDICE**

<b>CAPITULO 1. INTRODUCCION</b>	<b>2</b>
<b>CAPITULO 2. GENERALIDADES</b>	<b>4</b>
2.1 Antecedentes	5
2.2 Diseño de procesos	7
2.3 Simulación de procesos químicos	13
2.4 Sistemas de cómputo en la ingeniería de procesos	18
2.5 Enfoque de los sistemas de simulación	21
<b>CAPITULO 3. METIL ISOBUTIL CETONA, MIBK</b>	<b>37</b>
3.1 Metil isobutil cetona	38
3.2 Propiedades físicas	39
3.3 Toxicidad	40
3.4 Propiedades químicas	40
3.5 Manufactura	42
<b>CAPITULO 4. SIMULADOR ASPEN-PLUS</b>	<b>46</b>
4.1 Modelos	49
4.2 Algoritmos	51
4.3 Soporte computacional	54
4.4 Interfase con el usuario	55
4.5 Aplicaciones	58
<b>CAPITULO 5. SIMULACIÓN DE LA PLANTA PRODUCTORA DE MIBK</b>	<b>60</b>
5.1 Pasos a seguir en una simulación	61
5.2 Resultados de la simulación	65

<b>CAPITULO 6. OPTIMIZACION DEL PROCESO</b>	<b>74</b>
6.1 Propuesta de mejoramiento	76
6.2 Resultados de la optimización	78
<b>CAPITULO 7. ANALISIS DE RESULTADOS</b>	<b>80</b>
7.1 Simulación de la planta	81
7.2 Análisis de la propuesta	85
<b>CAPITULO 8. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES</b>	<b>87</b>
8.1 Simulación	88
8.2 Propuesta de mejoramiento	89
8.3 Trabajos futuros	89
<b>CAPITULO 9. BIBLIOGRAFIA</b>	<b>91</b>

**A mi mamá.**

**A Katia y Camila.**

**A mis hermanos y amigos.**

**A mi abuela Adela.**

**A mis padres.**

**A Cristina, Andrea, Karla,  
Enrique y Sergio.**

**A mis abuelitas.**

**A mis amigos.**

**CAPITULO 1**

**INTRODUCCION**

Actualmente, para la ingeniería de procesos no es suficiente lograr obtener los productos deseados a partir de la materia prima disponible; es también una tarea indispensable la de optimizar el consumo de energía, así como el de materia prima. El presente trabajo expone ciertos aspectos sobre la ingeniería de procesos, mostrando su aplicación en la simulación y optimización de una planta productora de metil isobutil cetona (MIBK).

El capítulo 2 trata sobre generalidades de la ingeniería de procesos, y ubica a la simulación dentro de esta disciplina, describiendo las bases teóricas y los elementos que la constituyen. Habla de la gran importancia y rápido crecimiento que la ingeniería de procesos ha alcanzado en las últimas décadas. También define qué es un sistema de simulación de procesos y las diferentes partes que lo conforman.

El capítulo 3 trata sobre generalidades de la metil isobutil cetona, producto principal de nuestro proceso. Habla de sus propiedades físicas y químicas, sus aplicaciones industriales y sus distintos procesos de obtención.

El capítulo 4 hace una descripción completa del simulador de procesos ASPEN-PLUS, que constituye la herramienta fundamental para el desarrollo de

simulador, los resultados obtenidos por éste, y tablas comparativas entre dichos resultados y los datos del diseño del proceso.

El capítulo 6 presenta la optimización de la planta mediante el uso del simulador ASPEN-PLUS. Se identifican las variables más susceptibles de alterar el proceso, se plantea una función objetivo y se presentan los resultados obtenidos a partir de la optimización.

El capítulo 7 presenta un análisis de los resultados obtenidos en la simulación y optimización del proceso.

En el capítulo 8 se exponen la conclusiones y recomendaciones generadas a lo largo de este trabajo.

Finalmente, el capítulo 9 presenta la bibliografía utilizada en el desarrollo de esta tesis.

**CAPITULO 2**

**GENERALIDADES**

## 2.1 ANTECEDENTES

Desde el nacimiento de la Industria Química a partir de la revolución industrial, los procesos fueron siempre diseñados en una forma totalmente empírica e intuitiva, ya que el objetivo de la producción era proporcionar bienes para una demanda creciente, dentro de economías de rápida expansión y en donde la energía y las materias primas estaban disponibles en cantidades abundantes.

Esta situación se repitió hasta finales de la Segunda Guerra Mundial, cuando se realizó una revisión de las importantes aportaciones que el afán bélico proporcionó en cuanto a producción industrial, alentándose su rápida asimilación con el objeto de mejorar los procesos ya existentes.

En la década de los cincuentas se sientan las bases formales del Diseño de Procesos, desarrollándose y poniéndose en marcha procesos industriales muy complejos, que exigían una gran conjunción de conocimientos referentes a todas las áreas de la Ingeniería Química.

A partir de 1963, se utilizó por primera vez la terminología de Ingeniería de Procesos, con el objeto de agrupar los campos de la Ingeniería Química destinados a indicar como planear, diseñar, operar y controlar las diferentes operaciones unitarias de un proceso químico, para satisfacer los requerimientos de la expansión industrial.

A mediados de los sesentas, la productividad industrial muestra serios indicios de descenso en sus tasas de crecimiento, ya que la

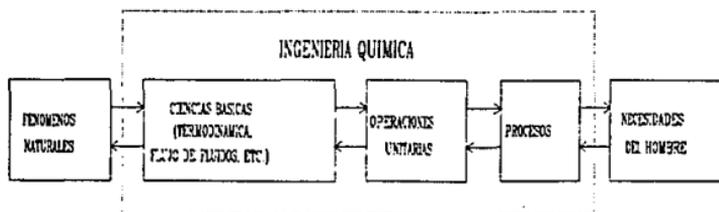
estructura productiva existente enfrenta sus primeras limitaciones en cuanto a la disponibilidad de materias primas y energía. Esto obliga a estudiar a fondo las eficiencias y puntos críticos de los procesos productivos, tanto existentes como por ser creados, promoviendo la creación de diseños que contienen complejos sistemas de recirculación de materiales y de integración de energía.

Simultáneamente, el explosivo desarrollo de las computadoras y la creación de lenguajes de alto nivel plantea amplias perspectivas para el análisis de procesos químicos complejos y eficientes. La computación, comenzó siendo una herramienta útil para la solución de operaciones simples dentro de un proceso. Posteriormente se aplicó a las diferentes operaciones unitarias por separado y procesos químicos específicos y pequeños.

Actualmente, la complejidad de los procesos industriales hace imperativo el uso de grandes sistemas computacionales, capaces de manejar un proceso como un todo. Hoy en día, ninguna planta química o petroquímica importante es construida sin realizar la simulación y diseño de proceso con la ayuda de una computadora.

## 2.2 DISEÑO DE PROCESOS

La transformación de una materia prima en producto se da gracias a los diferentes fenómenos naturales que permiten los cambios físicos y químicos de las sustancias. Estos fenómenos fundamentales están comprendidos en las diferentes ciencias de la ingeniería química como lo son la termodinámica, los fenómenos de transporte, la dinámica de fluidos etc. La adecuada comprensión de los fenómenos fundamentales ha permitido la elaboración de las diferentes operaciones unitarias existentes. Los procesos químicos, a su vez, están compuestos por un número relativamente pequeño de operaciones unitarias, si se compara con el gran número de procesos existentes. Todos los procesos deben ser construidos de acuerdo a los principios de diseño para operaciones unitarias, es decir, cada proceso químico puede ser considerado como un sistema de operaciones unitarias en combinación. Los procesos están diseñados para cubrir un sistema aún mayor que es el de las necesidades sociales y económicas del hombre.



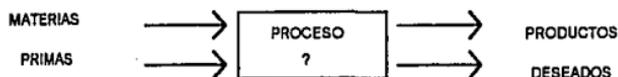
**Figura 2.1** Papel de la Ingeniería Química en la vida del hombre

Como se puede apreciar, el fin último, que consiste en satisfacer las necesidades del hombre, está relacionado con lo más elemental que son los fenómenos naturales. La conexión entre estos dos polos ha sido posible, en gran parte, gracias a la ingeniería química. La elaboración de los diferentes procesos se ha tenido que ajustar, por un lado, a las leyes fundamentales que los gobiernan y por otro, a las limitaciones y requerimientos que el hombre ha impuesto. Para satisfacer lo anterior, ya no sólo se requiere hacer un proceso, sino que cada día es más necesario analizarlo para su optimización. La síntesis, el análisis y la optimización son las partes que conforman lo que hoy se conoce como diseño de procesos, que es una de las etapas fundamentales dentro de un proyecto para la realización de una planta química.

### ***SINTESIS DE PROCESOS:***

Todo proceso nace de una necesidad social y/o una oportunidad económica, a partir de las cuáles surgen las diferentes ideas en cuanto a las materias primas, rutas químicas etc. En esta etapa se decide la estructura del proceso, es decir, la secuencia de operaciones unitarias y las diferentes interconexiones entre ellas; y se proponen los flujos de materia y energía necesarios para obtener los productos deseados.

En la síntesis de nuevos procesos es posible distinguir dos etapas: la elección de una ruta química de proceso, referida a las transformaciones químicas que unen materias primas con productos; y el desarrollo del diagrama de flujo del proceso, que incluye la secuencia de operaciones unitarias, recirculación de materias e integración de energía.



**Figura 2.2 Concepto fundamental de la etapa de síntesis.**

### ***ANALISIS DE PROCESO:***

Cuando se ha elegido la ruta química y se ha generado el esquema del proceso, arreglo de las operaciones unitarias involucradas, es necesario comprobar si las propuestas son factibles técnica y económicamente. Para ello se realizan una serie de pasos que conforman el análisis del proceso.

Primeramente, se establecen las bases de diseño que consisten en la elección de todas las variables involucradas en el proceso; se fijan los modelos matemáticos para cada una de las operaciones y cálculos de propiedades termofísicas así como los requerimientos de servicios auxiliares. Con lo anterior, se procede a establecer una estrategia de diseño que consiste en asignarle los valores adecuados a las variables independientes o manipulables del proceso y en determinar los métodos de convergencia a utilizar.

Con la información anterior se establecen los balances de materia y energía, se calculan todas las corrientes del proceso, los parámetros de los diferentes equipos, el resumen de servicios auxiliares y el diagrama de

flujo de proceso para el estado estacionario. También se comprueba si el proceso es factible termodinámicamente.

Con los resultados de los cálculos anteriores, es posible hacer un estudio económico preliminar. En él se deben incluir aspectos como el capital requerido, la rentabilidad, los costos de operación etc.. El siguiente paso es la confrontación de aspectos técnicos y económicos mediante la consideración de factores tales como la eficiencia termodinámica e impacto ambiental.

Como se puede apreciar, el análisis del proceso consiste en descomponer el sistema propuesto en la etapa de síntesis, en varios subsistemas (corrientes de proceso, operaciones unitarias, ciclos de recirculación, etc.), definiendo las relaciones entre cada uno de ellos.' Es importante saber descomponer al sistema ya que, al estar formado de muchos elementos, se puede llegar a generar un número muy grande de subsistemas, lo cual hace casi imposible su manejo.

### ***OPTIMIZACION DE PROCESOS:***

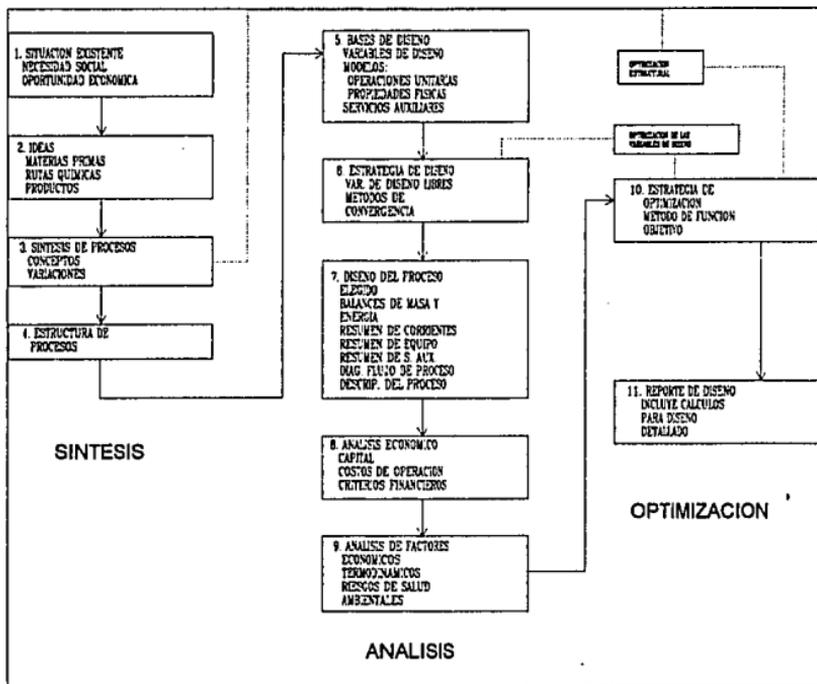
Con toda la información generada en la síntesis y análisis del proceso se propone una función objetivo adecuada para mejorar el proceso. Ahora bien, la optimización se puede llevar a cabo en dos niveles: en la estructura del proceso y en las condiciones de operación del mismo.

En ocasiones, en el análisis se puede descubrir que la alteración de algunos de los niveles en las condiciones de operación pueden influir en el dimensionamiento del equipo. De esta manera, conservando la estructura propuesta en la etapa de síntesis, se pueden modificar algunas de las condiciones de operación en la estrategia de diseño para el mejoramiento del proceso.

Por otro lado, una optimización estructural sería aquella en que se modifica el número de equipos de proceso o la manera en que éstos se interconectan. Con lo anterior se modifica la parte correspondiente a la síntesis lo que, por extensión, altera también el análisis del proceso.

Existen dos formas de atacar el problema de la optimización: la primera consta de dos ciclos iterativos anudados, uno para la optimización de los parámetros y el otro para la estructura; y la segunda consiste en realizar la optimización simultánea de los parámetros y la estructura.

Para todo lo anterior, se puede apreciar que el uso de métodos eficientes de cálculo es una de las bases principales. La computación ha ayudado notablemente en este aspecto, y gracias a su gran crecimiento, el diseño de procesos es una de las disciplinas que avanza más rápido. Debido a que las necesidades actuales del hombre son más y en ocasiones poco flexibles, el camino que se sigue actualmente en el diseño de procesos va dirigido a obtener los mejores procesos industriales.



**Figura 2.3 Etapas en el desarrollo del diseño de procesos.**

## 2.3 SIMULACION DE PROCESOS QUIMICOS

La simulación de procesos es la actividad que permite la representación del comportamiento de un proceso mediante la aplicación de modelos matemáticos adecuados, bajo ciertas condiciones y alcances, previamente definidos. En el caso de los procesos químicos, dicha representación se basa en las leyes naturales o empíricas que los describen. Es evidente que cuanto mejor sea el modelo, más eficiente y confiable resulta la simulación y, por lo tanto, la interpretación del fenómeno. La simulación es una de las partes principales del análisis de procesos.

Existen dos grandes vertientes dentro de la simulación de procesos: simulación en estado estacionario y simulación dinámica. La primera consta del estudio y representación de un proceso a régimen permanente, en el que se contemplan situaciones dentro de los límites considerados como normales en su diseño y operación. Con la simulación en estado estacionario se obtienen los balances de materia y energía del proceso, a partir de los cuales es posible obtener las dimensiones de los equipos y hacer una evaluación económica.

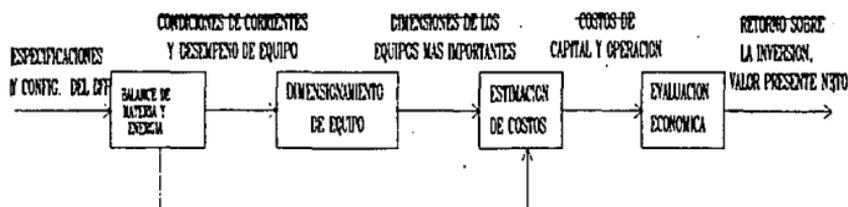


Figura 2.4 Etapas en los sistemas de simulación

La simulación dinámica consiste en representar aquellas situaciones poco frecuentes o fuera de los límites normales de operación de un proceso químico. Tales situaciones son típicas del arranque o paro de una planta, de la operación de la misma bajo condiciones de emergencia o para el diseño de las estrategias de control. En estos tres casos se estudia el comportamiento de las variables de proceso con respecto al tiempo.

Debido a que la representación de un proceso químico con modelos matemáticos es una tarea que requiere una gran cantidad de cálculos numéricos, es imprescindible la ayuda de una computadora para realizarlos. El avance en materia de computación ha permitido que se vaya ampliando el margen de cobertura de la máquina sobre el proceso en cuestión; de hecho, hoy en día se utilizan grandes redes de cómputo para abarcar procesos químicos enteros. A esto se le conoce como Sistema de Simulación de Procesos (Process Flowsheeting).

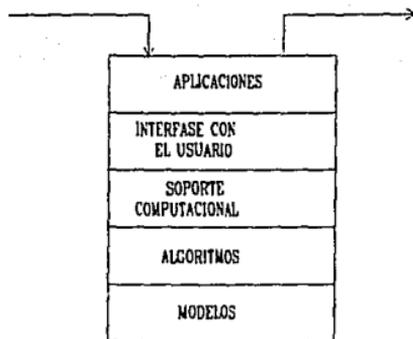
Un sistema de simulación de procesos se define (Evans, 1981) como aquél que acepta información sobre un proceso al nivel del diagrama de flujo del mismo y desarrolla los análisis relativos a su desempeño, diseño y operación. Las entradas típicas de un sistema de simulación de un proceso son las que están descritas en el diagrama de flujo del mismo; las salidas que se obtienen son las condiciones de todas las corrientes del sistema, los parámetros y dimensiones de los principales equipos de proceso, y la evaluación económica del mismo.

Todos los sistemas de simulación de procesos contienen cinco elementos principales: Modelos, Algoritmos, Soporte computacional (lógico o "software" y físico o "hardware"), Interfase con el usuario y Aplicaciones.

Los *modelos* utilizados por un sistema de simulación son todas las relaciones matemáticas derivadas de las leyes de conservación, ecuaciones de velocidad de reacción, correlaciones de propiedades termofísicas, relaciones de conexión y restricciones de diseño y control.

Estos modelos matemáticos se representan por ecuaciones algebraicas y/o diferenciales que definen el proceso. Lo más importante de estos modelos es que deben ser apropiados en términos de rigor, nivel de detalle, precisión, validez y generalidad para las aplicaciones que se desean.

Para que un modelo sea adecuado, es necesario que se entiendan los principios que rigen al proceso que se desea describir, ya que de esta manera se puede saber con exactitud la validez de la información que arroja el modelo. Cuanto más preciso sea el modelo, mejor es la representación de la realidad que se obtiene. En ocasiones no es necesario utilizar modelos muy exactos ya que la información que se quiere obtener es global o aproximada, y en consecuencia el tiempo de cómputo para estos casos es considerablemente menor.



**Figura 2.5 Solución del Problema de Simulación de Procesos**

Los *algoritmos* resuelven los problemas matemáticos que generan los modelos. De hecho, un algoritmo es el conjunto de operaciones que nos permiten llegar a este fin. El tipo de problema matemático que se presenta en simulación es muy variable; contiene ecuaciones algebraicas (lineales y no lineales) y diferenciales. Por lo tanto, se requiere que los algoritmos sean robustos, tan generales como sea posible, eficientes en términos de ejecución y almacenamiento, transparentes y elegantes. En ocasiones, estas necesidades se contraponen por lo que se debe hacer una elección adecuada para que los algoritmos exploten al máximo los recursos disponibles.

Para la simulación de procesos químicos se han desarrollado básicamente dos clases de algoritmos que se describirán con más detalle en la siguiente sección. Éstas son: la Orientación Modular y la Orientación hacia las Ecuaciones.

El siguiente bloque dentro del sistema de simulación de procesos es el relativo al *soporte computacional*. Las dos partes que lo conforman son el soporte lógico o "software" y el soporte físico o "hardware". Ambos incluyen todos los implementos necesarios para que se lleven a cabo los algoritmos en una computadora, bajo cierto sistema operativo. Dentro del soporte computacional se encuentra todo lo relativo a los programas, lenguajes de programación, codificación, estructura de datos, interfase con el sistema de archivo, documentación y arquitectura del sistema. Los requerimientos de un buen soporte computacional se basan en que debe ser fácilmente interpretado, manejado y tan transportable como sea posible.

El penúltimo elemento del sistema de simulación lo constituye la *interfase con el usuario*. Ésta incluye el lenguaje de entrada por medio del cuál el usuario describe su problema particular; los reportes que resumen los resultados; la documentación adecuada para el uso del sistema y los protocolos para la interacción con otros programas y sistemas. Una buena interfase con el usuario debe ser capaz de aceptar los datos de entrada en la manera más natural posible y generar los resultados de la forma más útil y práctica para el usuario.

Las *aplicaciones* son el último elemento dentro del sistema de simulación. Son, de hecho, la razón de existir de dicho sistema. Las adecuadas aplicaciones del sistema de simulación justifican todo el desarrollo del mismo. Es necesario conocer de antemano algunas de las formas en que un sistema de simulación se va a utilizar para sentar las bases sobre las cuales se diseñan todos los elementos anteriores.

Evidentemente se ha tratado de hacer los diferentes sistemas de simulación de forma que se puedan aplicar en un rango muy amplio de situaciones; los progresos en materia de computación (tanto en la parte lógica como en la física) han permitido que los diferentes sistemas actuales presenten cada día mayor versatilidad en sus aplicaciones.

## **2.4 SISTEMAS DE COMPUTO EN LA INGENIERIA DE PROCESOS**

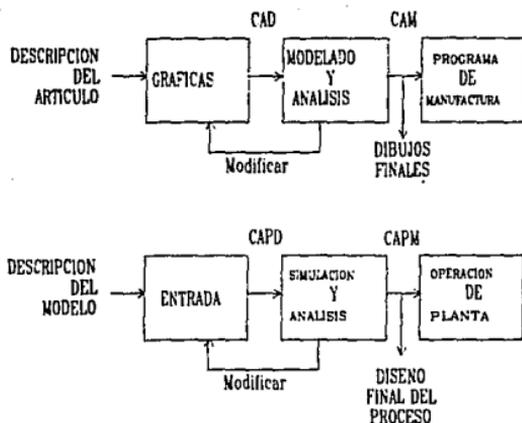
En la última década, ha habido un aumento casi explosivo en el uso de los sistemas de diseño auxiliado por computadora (CAD). Se estima que hoy en día el 50% de las partes mecánicas de las diversas máquinas y equipos se diseñan con sistemas de este tipo. La ingeniería química, desde el punto de vista del diseño de procesos, no utiliza los sistemas CAD por las razones que se verán más adelante.

Típicamente un buen sistema CAD sirve para elaborar el modelo de alguna pieza mecánica; puede calcular esfuerzos, peso y costos de manufactura. Cuando el diseñador ha terminado su trabajo, el sistema CAD es capaz de producir una serie de planos y dibujos necesarios para la construcción de la pieza diseñada. En cuanto a sistemas de computación, un paso más adelante lo constituyen los denominados sistemas de manufactura auxiliada por computadora (CAM). Éstos toman la información que se produce en el CAD y por medio de máquinas digitalmente controladas y operadas, y procesos de ensamblado automáticos, pueden elaborar al menos el prototipo de la pieza diseñada.

Ahora bien, debido a las limitaciones de los sistemas CAD, la ingeniería química ha tenido que recurrir a otros sistemas para el diseño de procesos. Los llamados sistemas de diseño de procesos auxiliados por computadora (CAPD) son aquellos que reciben, como información a la entrada, el diagrama de flujo del proceso y el ingeniero puede desarrollar la simulación y el análisis del proceso con estos sistemas. La información de salida de los CAPD es el diseño del proceso, incluyendo la configuración del mismo, la dimensión y patrón de funcionamiento de los equipos más importantes; los balances de materia y energía completos y un estimado de la economía del proceso.

El sistema análogo al CAM dentro de la ingeniería de procesos es el CAPM (sistema de manufactura de procesos auxiliado por computadora). Este utiliza el mismo modelo del proceso empleado en el diseño como una ayuda en el manejo de las operaciones de la planta una vez arrancada.

La principal diferencia entre el sistema tradicional CAD/CAM y las aplicaciones a la ingeniería de procesos CAPD/CAPM, es que el primero se refiere al diseño de un producto mientras que el segundo se encarga del diseño del proceso que hace el producto. La diferencia es tan grande que amerita el manejo de dichos sistemas por separado.



**Figura 2.6 Flujo de Información en los sistemas CAD y CAPD**

En los sistemas CAD/CAM, la apariencia física del producto en cuestión es de central importancia. Los dibujos y planos son el principal medio de comunicación; por esto, dichos sistemas tienen una capacidad considerable para elaborar gráficas. Los cálculos de que son capaces estos sistemas son tales que las subrutinas no son muy complicadas si se comparan con aquellas relacionadas con los cálculos de un proceso químico.

Por otro lado, lo central y más importante en los sistemas CAPD/CAPM lo constituye la estructura y diagrama de flujo del proceso ya que representan las interrelaciones entre los flujos de materia y energía del mismo. En este caso los medios de comunicación los constituyen precisamente los balances de materia y energía. La parte gráfica no es tan importante y se utiliza únicamente como una

herramienta para apreciar el diagrama de flujo del proceso o algún otro aspecto del mismo. Los cálculos de que son capaces estos sistemas son de un alto nivel de complejidad, ya que manejan modelos matemáticos muy elaborados. Es necesario que tengan subrutinas eficientes con las que se puedan desarrollar enormes cálculos en poco tiempo.

Las aplicaciones del sistema CAPD se han venido desarrollando cada vez con más fuerza. La simulación de procesos es la rama de la ingeniería que más utiliza estos sistemas; de hecho, la arquitectura de los mismos viene dada por los requerimientos surgidos en las áreas de simulación y diseño de procesos químicos.

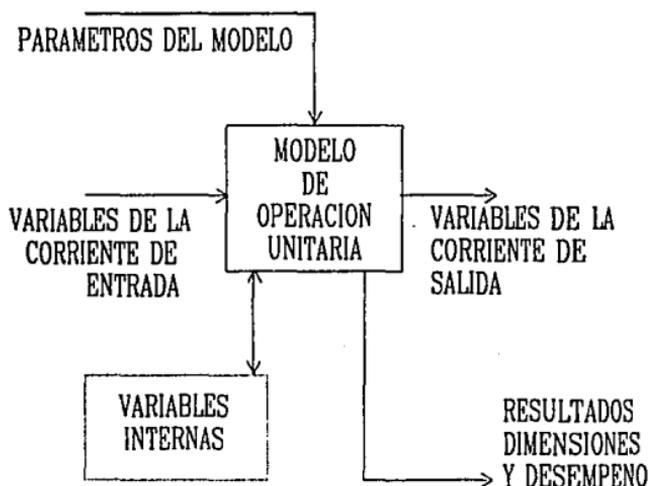
Desde el punto de vista computacional, un sistema de simulación es un típico sistema CAPD cuyo funcionamiento está estructurado bajo alguno de los enfoques que se describen en la siguiente sección.

## **2.5 ENFOQUES DE LOS SISTEMAS DE SIMULACION**

El primer problema a resolver en la simulación de procesos en estado estacionario es el de largos sistemas de ecuaciones algebraicas no lineales. En esta sección se describen las diferentes orientaciones encaminadas a resolver estos sistemas. El punto de partida para la simulación en estado estacionario es el diagrama de bloques que representa los modelos de todas las operaciones unitarias involucradas en el proceso; en dichos modelos se encuentran todas las ecuaciones que se deben resolver. Existen dos diferentes orientaciones para resolver las

ecuaciones generadas por los modelos: la Orientación Modular y la Orientación hacia Ecuaciones.

Las ecuaciones que describen a un proceso son independientes de la orientación que se utilice para resolverlas; lo que varía es la manera en que estas ecuaciones son manejadas y resueltas para llegar a la solución final del sistema. Es muy común encontrar que un proceso se puede describir adecuadamente por algunos cientos de ecuaciones; o, en ocasiones, el número de éstas puede sobrepasar las cien mil.



**Figura 2.7 Modelo de operación unitaria**

Por lo anterior, es conveniente saber la estructura del sistema de ecuaciones con el fin de acomodarlo de manera que su manejo sea más rápido y eficiente.

Los métodos actuales de solución de matrices completas no se pueden utilizar con eficiencia en sistemas de ecuaciones tan grandes; por ello, se han desarrollado técnicas de solución de matrices dispersas (lineales y no lineales) que pueden manejar con más facilidad los sistemas de ecuaciones que describen un proceso químico.

A continuación se presentan las dos orientaciones ya mencionadas con sus respectivos enfoques:

<b>ORIENTACION</b>	<b>ENFOQUE</b>
Modular	Secuencial
	Simultáneo
Hacia las ecuaciones	Con rompimiento
	Con linearización simultánea

### ***ORIENTACION MODULAR***

En la Orientación Modular un proceso químico se representa por la unión de diferentes módulos, cada uno describiendo a una operación unitaria en particular. Las ecuaciones que generan cada uno de estos módulos se pueden resolver de dos maneras: a nivel del diagrama de flujo (proceso completo) o por bloques (cada módulo por separado).

Si las ecuaciones se resuelven para cada módulo por separado (enfoque modular secuencial), los valores de las variables de las corrientes de salida de una operación unitaria se calculan a partir de los

valores conocidos de las variables de las corrientes de entrada y los parámetros de los equipos. En cambio, si los cálculos son al nivel del diagrama de flujo (enfoque modular simultáneo), se deben resolver las ecuaciones que describen la conexión entre cada módulo y las especificaciones de diseño.

La orientación modular ha sido ampliamente utilizada en los diferentes sistemas de simulación y esto se debe a que presenta ciertas ventajas que se resumen a continuación:

-Es una orientación fácilmente comprendida por el usuario del sistema ya que existe una gran semejanza entre el diagrama de flujo de proceso y el modelo implementado por la computadora.

-Debido a que cada módulo se calcula por separado, es posible utilizar algoritmos especializados para cada uno de ellos, lo que favorece la robustez y eficiencia en cada módulo. Además, cada bloque puede generar sus propios valores iniciales que se requieren para llegar a la solución de las ecuaciones que lo describen.

-Se pueden realizar programas aislados para cada operación unitaria, lo que añade versatilidad al sistema ya que dichos programas se pueden utilizar en diferentes arreglos de módulos.

-Con este tipo de orientación es factible obtener información de puntos muy localizados del proceso. Es decir, se pueden apreciar los comportamientos de las diferentes operaciones unitarias aun si la

simulación total no ha llegado a su fin o no converge. También se pueden detectar los diferentes errores y fallas del sistema de manera muy simple.

La principal desventaja, sin embargo, que presenta la orientación modular es que la convergencia en la solución de los sistemas de ecuaciones es muy lenta debido a las grandes matrices del proceso y a los ciclos iterativos que se generan con las recirculaciones que la gran mayoría de los procesos químicos actuales contienen.

Como se mencionó anteriormente, existen dos enfoques dentro de la orientación modular: el enfoque modular secuencial y el enfoque modular simultáneo. Es conveniente aclarar que el segundo también ha sido tratado por algunos autores (Evans, 1981) como una mezcla entre las dos diferentes orientaciones. El presente trabajo se cataloga dentro de la orientación modular.

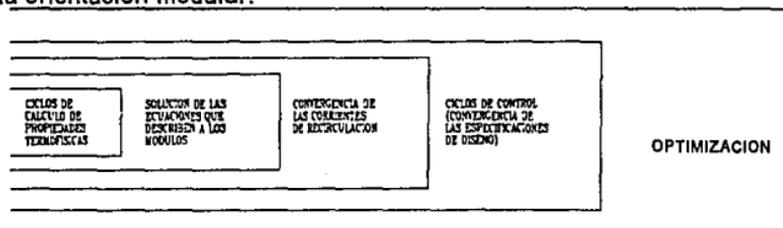


Figura 2.8 Ciclos de iteración en el enfoque modular

#### Enfoque modular secuencial:

El enfoque modular secuencial utiliza una subrutina de computadora para representar a cada operación unitaria o bloque del

diagrama de flujo del proceso. El encargado de ir llamando a estas subrutinas en el orden en el que aparecen en el diagrama de flujo es un programa principal. Cada subrutina se diseña de manera que sea capaz de calcular los valores de las variables de las corrientes de salida en función de los valores de las variables de las corrientes de entrada y los parámetros de los equipos.

Cuando los diagramas de flujo no tienen recirculaciones, los cálculos se hacen en forma secuencial sin ningún tipo de iteración entre dos o más equipos de proceso. Pero como lo común en casi todos los procesos químicos es tener corrientes de recirculación, el cálculo se complica notablemente. Una corriente de recirculación introduce cálculos iterativos ya que está relacionada tanto con la entrada como con la salida de un módulo determinado. Cuando se encuentran, en el cálculo, módulos con recirculaciones, es necesario estimar los valores iniciales para dichas corrientes; estas estimaciones las determina el usuario o el sistema basado en ciertas reglas heurísticas.

Como se puede ver, para resolver la simulación con este enfoque, es necesario romper o cortar el diagrama de flujo y seleccionar las denominadas "corrientes de corte", que son aquellas que convierten el proceso en un sistema acíclico si se les estiman valores iniciales. Una vez determinadas las corrientes de corte del proceso, se debe determinar la mejor secuencia para realizar los cálculos. Los diferentes sistemas de simulación presentan algunos algoritmos ya implementados tanto para escoger las corrientes de corte como para establecer la mejor secuencia de cálculo.

Las ecuaciones que describen las conexiones entre los diferentes módulos se manejan de manera que el programa principal transfiera los valores de la salida de un módulo como valores de entrada del siguiente módulo. Las especificaciones simples, tales como los datos de las corrientes de entrada y los parámetros de equipos, se manejan fácilmente, transfiriendo estos valores directamente al módulo que así lo requiera. Sin embargo, otras especificaciones, tales como las de diseño y otras que afectan directamente a las variables de las corrientes de salida, no pueden ser introducidas en forma directa y requieren el uso de ciclos de control.

En problemas de diseño se utiliza lo que se conoce como simulación controlada en la que el proceso se simula en forma repetitiva hasta que se satisfagan las especificaciones de diseño. De esta manera, se dice que se manejan dos tipos de ciclos: aquellos relacionados con las recirculaciones y los derivados de las especificaciones de diseño. Ambos ciclos son iterativos, lo que hace que los cálculos se vuelvan más largos y complicados.

Para el manejo de los ciclos existe cierta jerarquía: los ciclos de control, con los que se logra la convergencia de las especificaciones de diseño, son los más externos. En su interior se encuentran los ciclos necesarios para lograr la convergencia de las corrientes de recirculación (corrientes de corte). Dentro de los anteriores están los ciclos específicos de cada operación unitaria y finalmente se manejan los ciclos destinados a la estimación de propiedades termofísicas.

La tendencia actual en los sistemas de simulación consiste en obtener el resultado óptimo para cualquier problema. En el enfoque modular secuencial, la optimización se llevaría a cabo en otro ciclo exterior, lo que complica de manera considerable los cálculos y requiere de mayor uso del soporte computacional.

Actualmente el enfoque modular secuencial no resulta muy eficiente puesto que se requiere mayor optimización en los diferentes procesos. Éstos, además, se han vuelto más complicados debido al aprovechamiento necesario de materias primas y energía, lo que introduce mayores ciclos por recirculaciones y control.

#### **ORIENTACION A ECUACIONES:**

La idea principal de la orientación hacia las ecuaciones es la de resolver todas las ecuaciones que describen al proceso químico (operaciones unitarias, corrientes de conexión y especificaciones de diseño) simultáneamente como un enorme sistema de ecuaciones no lineales que se puede representar matemáticamente como:

$$\begin{array}{ll} \text{Resolver} & \mathbf{F}(\mathbf{X}, \mathbf{U}) = 0 \\ \text{con} & \mathbf{G}(\mathbf{X}, \mathbf{U}) = 0 \end{array}$$

donde:

**X** es el vector de las variables de estado (dependientes).

**U** es el vector de las variables de decisión (independientes).

**F (X,U)** son las ecuaciones que modelan al proceso.

**G (X,U)** son las restricciones de igualdad o desigualdad del proceso.

Las variables de decisión son los parámetros de equipos y variables de corrientes de entrada que usualmente se especifican en las diferentes operaciones unitarias. Las variables de estado son las variables internas y las relativas a las corrientes de salida de las operaciones unitarias.

Alternativamente, el problema se puede formular matemáticamente como un problema de optimización:

$$\begin{array}{ll} \text{Minimizar} & \mathbf{H (X,U)} \\ \text{con} & \mathbf{F (X,U) = 0} \\ & \mathbf{G (X,U) = 0} \end{array}$$

en donde **H (X,U)** es la función objetivo y **F (X,U)** y **G (X,U)** son los mismos conjuntos de ecuaciones planteados anteriormente, con algunas restricciones adicionales inherentes a la optimización. Para este tipo de problemas las variables de decisión ya no se especifican arbitrariamente, sino que se seleccionan con el fin de minimizar la función objetivo.

En los últimos años se ha manejado el hecho de que un problema de diseño se formula más naturalmente si se trata como una optimización. Sin embargo, la dificultad que se ha presentado es la falta de algoritmos

eficientes para manejar adecuadamente grandes cantidades de restricciones de igualdad.

La orientación hacia las ecuaciones no ha sido muy utilizada en los sistemas de simulación comerciales porque presenta varias desventajas. En primer lugar, ha sido muy complicado encontrar algoritmos que puedan resolver de forma general los sistemas tan grandes de ecuaciones que genera un proceso químico (decenas de miles de ecuaciones). Además, es posible que aparezcan inconsistencias termodinámicas en el sistema de ecuaciones planteado, lo que impide su solución o lleva a soluciones físicamente inexistentes. En segundo lugar, se requiere de valores iniciales razonables, los cuales son difíciles de obtener sin un recorrido secuencial a través de las diferentes operaciones unitarias del proceso. Por último, la orientación hacia las ecuaciones no permite un fácil diagnóstico de los posibles problemas que resulten de su operación; además es imposible obtener resultados parciales ya que todo el proceso se maneja simultáneamente.

Dentro de la orientación hacia las ecuaciones se manejan dos enfoques principalmente, mismos que se describen brevemente a continuación:

#### **Enfoque basado en las ecuaciones con rompimiento:**

En este enfoque se suponen los valores iniciales para un número suficiente de variables como para permitir el cálculo directo de las variables restantes. Con éstos se calculan los nuevos valores de las

variables supuestas utilizando ciertos procedimientos de sustituciones sucesivas, siempre y cuando las ecuaciones que las contengan estén en forma explícita. Si este no fuera el caso, los residuales en las ecuaciones que contienen las variables supuestas pueden utilizarse para aplicar algún otro método de evaluación de raíces.

La ventaja que presenta este enfoque es que un sistema del tipo ecuación-variable muy extenso, puede ser reducido a un sistema mucho menor del tipo ecuación supuesta - variable supuesta, lo que facilita su solución simultánea.

#### **Enfoque a las ecuaciones con linearización simultánea:**

Este enfoque se basa en la linearización simultánea de todas las ecuaciones y la iteración sobre todas las variables, utilizando para ello métodos del tipo Newton-Raphson, Quasi-Newton o alguna combinación de ambos. Las ecuaciones se pueden resolver en cualquier orden ya que todas las variables se manejan al mismo tiempo; ésto evita el problema de flujo de información de los enfoques modulares.

La principal dificultad que presenta este enfoque es que genera un sistema muy extenso de ecuaciones, lo que implica un requerimiento computacional muy alto en su solución. Además, las técnicas conocidas para la solución de matrices dispersas son capaces de resolver eficientemente sistemas de estas dimensiones en forma simultánea. Como en el enfoque anterior, es posible (y de hecho, frecuente) que se

obtengan soluciones matemáticamente correctas pero físicamente inexistentes debido a la facilidad que se da para formular incorrectamente las ecuaciones descriptivas del proceso. Por lo anterior, es necesario que los sistemas de simulación que incorporen este procedimiento tengan un generador de ecuaciones de proceso realmente eficiente.

### **Enfoque Modular Simultáneo:**

El enfoque modular simultáneo ha demostrado ser uno de los más eficientes y sus aplicaciones se han venido desarrollando últimamente. Surge de las ideas presentadas en los trabajos en los que ha sido llamado enfoque de doble rompimiento o "Two tier" (Rosen, 1962); o como una diferente aproximación a la convergencia del enfoque modular secuencial (Perkins, 1979).

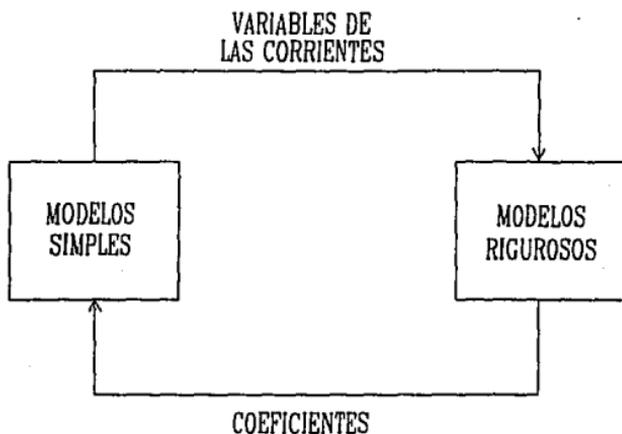
En el enfoque modular simultáneo se conserva la estructura de módulos descrita para el enfoque anterior. La variante consiste en que las ecuaciones de las corrientes de conexión, así como las variables de diseño, se resuelven simultáneamente y no en ciclos diferentes.

Dentro de este enfoque se utilizan dos tipos de modelos: simples y rigurosos. Los modelos rigurosos son aquellos que describen una operación unitaria con el modelo completo de ecuaciones (como en el enfoque modular secuencial), sin embargo, en el modular simultáneo éstos se utilizan para determinar parámetros dentro de la otra clase de

modelos: los simples (que constan de un juego aproximado de ecuaciones que describen a la operación unitaria). Los modelos simples se resuelven con cualquier técnica de solución de sistemas de ecuaciones para obtener todos los valores de las variables de las corrientes de proceso con las que es posible, si así se plantea, volver a llamar a los modelos rigurosos; esto último se discute a continuación.

Una vez resuelto el modelo simple, se obtienen valores aproximados para cada variable de las corrientes de proceso; con ellos se verifica la convergencia. Si ésta no se obtiene, existen dos posibilidades: modificar los valores de los parámetros en el modelo simple o volver a llamar al modelo riguroso para obtener valores mucho más precisos. El procedimiento acaba cuando no se obtienen cambios importantes (bajo cierta tolerancia) en los valores de los parámetros del modelo simple.

Cuando se modifican los valores de los parámetros en el ciclo interno es porque se plantea lo que se conoce como un problema de optimización reducido, en el que el modelo simple contiene las restricciones de igualdad. El modelo simple se encarga de resolver el problema de optimización reducido para los parámetros producidos por los modelos rigurosos.



**Figura 2.9: Concepto básico del enfoque modular simultáneo**

El éxito del enfoque modular simultáneo radica en tener modelos simples eficientes. Estos pueden ser lineales cuyos coeficientes son obtenidos por medio de una perturbación numérica de los modelos rigurosos. También pueden ser modelos no lineales, representados comúnmente por modelos aproximados de ingeniería. De cualquier modo, el modelo simple genera un sistema de ecuaciones de simulación equivalente al del modelo riguroso, pero con menos variables; también utilizan correlaciones sencillas para el cálculo de propiedades termofísicas. Es por esta "sencillez" que se puede hablar de un problema reducido, cuya optimización (como se mencionó anteriormente) es más fácil de llevar a cabo gracias a que requieren menos recursos computacionales.

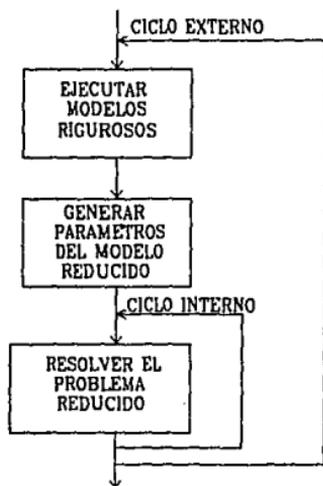
El hecho de que se resuelva un sistema de ecuaciones que describe a todo el proceso hace que este enfoque haya querido ser

clasificado como una mezcla entre el enfoque modular secuencial y los enfoques de la orientación hacia las ecuaciones.

Una de las ventajas que presenta este enfoque frente al modular secuencial es el hecho de que las especificaciones de diseño se calculan paralelamente a todo el proceso, lo que elimina los ciclos iterativos relativos a los ciclos de control. Adicionalmente, el enfoque modular simultáneo puede aprovechar la gran cantidad de trabajo computacional que se ha desarrollado para el enfoque modular secuencial: se tienen ya probados los diferentes modelos de las operaciones unitarias y las técnicas de estimación de valores iniciales por medio de reglas heurísticas. La estructura que maneja este enfoque es muy similar a la forma en que el ingeniero químico resuelve los problemas: lleva a cabo análisis preliminares aproximados y luego los verifica con modelos rigurosos.

Pero el éxito o fracaso del enfoque modular simultáneo depende de los métodos empleados para resolver los sistemas de ecuaciones de todo el proceso. Si bien estos sistemas son "simples", pueden contener un gran número de ecuaciones para las que se requiere un buen método de convergencia. Actualmente los sistemas de simulación tienden a integrar el enfoque modular simultáneo en su estructura. Ésto se debe a las

grandes ventajas antes mencionadas y al poco éxito que ha tenido hasta el momento la orientación hacia las ecuaciones aplicada a procesos complejos.



**Figura 2.10: Ciclos interno y externo del enfoque modular simultáneo**

**CAPITULO 3**

**METIL ISOBUTIL CETONA, MIBK**

### 3.1 METIL ISOBUTIL CETONA

La Metil Isobutil Cetona (MIBK), también conocida como 4-metil-2-pentanona es un compuesto químicamente estable. Generalmente es usada como solvente, ya que es miscible con casi todos los otros solventes orgánicos, muchas resinas naturales y sintéticas, ceras y aceites.

Industrialmente, la MIBK se utiliza como solvente para recubrimientos protectores, pesticidas y otros compuestos orgánicos, en la manufactura de adhesivos, farmacéuticos y antiozonantes para el hule, y en la extracción de metales raros.

Debido a su elevada solvencia y a su baja densidad, la MIBK es empleada en sistemas recubridores sólidos, principalmente acrílico y poliéster, para incrementar el contenido de sólidos en la solución recubridora, manteniendo características de viscosidad deseables.

Otro campo de aplicación para la MIBK es en la recuperación, separación y purificación de elementos de transición raros, usualmente en forma de complejos.

En la producción de farmacéuticos, la MIBK es utilizada en la extracción y purificación de penicilina; en formulación de adhesivos basados en hule nitrilo y acrílicos y, en pesticidas donde es utilizado como un solvente para ingredientes activos.

### 3.2 PROPIEDADES FÍSICAS

Punto de ebullición a 1 atm (°C)	116.2
Azeótropo con agua, PE (°C)	87.9
Temperatura de autoignición del vapor (°C)	456
Coefficiente de expansión cúbica, por °C	0.00116
Presión crítica (atm)	32
Temperatura crítica (°C)	298
Densidad (g/mL)	0.8006
Momento dipolar (debye)	2.7
Límites explosivos en aire (% vol.):	
superior	7.5
inferior	1.4
Punto de congelación (°C)	-80.2
Calor de combustión (cal/g)	8,878
Calor de vaporización (cal/g)	86.7
Peso molecular	100.156
Índice de refracción	1.3956
Solubilidad (% peso):	
Cetona en agua	1.7
Agua en cetona	1.9
Parámetro de solubilidad	8.4
Gravedad específica (g/mL)	0.842
Calor específico (cal/g °C)	0.459
Tensión superficial (dina/cm)	23.64
Viscosidad (cP)	0.58

### **3.3 TOXICIDAD**

La MIBK es ampliamente utilizada en la industria, no posee efectos tóxicos acumulativos ni es considerada altamente tóxica. Sin embargo, el contacto frecuente o prolongado puede irritar la piel y causar dermatitis.

En concentraciones elevadas, el vapor es irritante para los ojos y membranas mucosas, y es anestésico. El valor umbral de toxicidad para la MIBK en aire es 50 ppm. Este compuesto es inflamable y puede encenderse a temperatura ambiente y/o formar mezclas inflamables.

### **3.4 PROPIEDADES QUIMICAS**

La reactividad de la MIBK se centra en el grupo carbonilo y en los átomos de hidrógeno adyacentes. La MIBK ofrece posibilidades interesantes para síntesis, algunas de las cuales se describen a continuación:

#### **Autocondensación**

Una cetona insaturada se produce por la condensación de dos moléculas de MIBK. El proceso, ya sea en catálisis ácida o básica se lleva a cabo a bajas temperaturas.

#### **Condensación con otros compuestos**

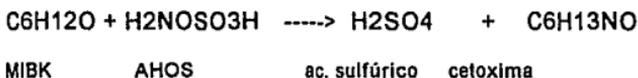
La MIBK condensa con otras cetonas. Por ejemplo, la condensación con acetona en fase líquida o vapor en presencia de un catalizador ácido

(p.e. fosfato de circonio, resinas de intercambio iónico, etc.), produce 2,6-dimetil-2-hepteno-4-ona que subsecuentemente puede ser hidrogenado a diisobutilcetona (DIBK).

La condensación con aldehidos seguida de hidrogenación y sulfonación produce alquilsulfatos útiles como agentes humectantes de textiles. Por ejemplo, la MIBK condensa con benzaldehido para dar estiril isobutil cetona.



Al reaccionar con ácido hidroxilamin o-sulfónico (AHOS), la MIBK da la cetoxima.



### Otras reacciones

La MIBK puede hidrogenarse a metil isobutil carbinol (MIBC), que puede ser uno de los principales subproductos en la hidrogenación de óxido de mesitil a MIBK, especialmente si la hidrogenación es llevada a cabo a bajas concentraciones de óxido de mesitil en la alimentación. La reacción ocurre sobre un catalizador soportado en níquel o paladio, ya sea en fase líquida o vapor. La operación típica en fase líquida ocurre a una presión de 10-50 atm. y 100-140 °C.



MIBK      Hidrógeno                  MIBC

### 3.5 MANUFACTURA

Existen muchos procesos industriales para la manufactura de MIBK a partir de acetona. Estos incluyen:

Condensación a baja temperatura de acetona en presencia de un catalizador básico en fase líquida para dar alcohol diacetónico (DAA) seguida por una deshidratación de DAA a óxido de mesitil (MO) en presencia de un catalizador ácido. El MO es posteriormente hidrogenado a MIBK en presencia de un catalizador de níquel.

Condensación a alta temperatura de acetona en presencia de un catalizador ácido o básico en fase líquida dando directamente óxido de mesitil seguido por la hidrogenación a MIBK. La isoforona es un subproducto de esta reacción. Este proceso es de interés comercial sólo si la isoforona es recuperada como un coproducto, debido a que la formación de óxido de mesitil es menor que en el proceso de condensación a baja temperatura.

Condensación de acetona e hidrógeno en fase vapor en presencia de un catalizador para formar directamente MO o MIBK.

Condensación-deshidratación-hidrogenación directa en fase líquida de acetona en presencia de hidrógeno empleando un catalizador bifuncional para formar MIBK.

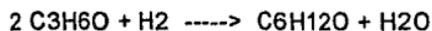
MIBK vía condensación a baja temperatura de acetona a alcohol diacetónico:

La producción industrial de DAA se lleva a cabo en fase líquida utilizando un catalizador básico. El agua inhibe la reacción de condensación, por lo que se debe utilizar acetona que no contenga más de 0.5 % en peso de agua.

### **Descripción General del Proceso**

#### *MIBK vía condensación directa de acetona*

Acetona e hidrógeno se calientan a la temperatura de reacción y se convierten a MIBK, usando catalizador de lecho fijo. El exceso de hidrógeno se enfría y se retorna a la reacción por medio de un compresor. Los productos de la reacción y la acetona que no reaccionó son enviados a un recipiente y de ahí a la unidad de destilación. La reacción que se efectúa es la siguiente:



Acetona      Hidrógeno      MIBK      Agua

Sin embargo, se forma también en la reacción, Di Isobutil Cetona (DIBK), como subproducto en una cantidad aproximada del 7%. Este producto es vendido en el mercado.

El producto de la reacción se alimenta a la columna primaria, en la cual, por la parte superior, la acetona que no reaccionó se retorna al reactor y por la parte inferior se envían a un decantador la MIBK cruda y el agua.

La MIBK cruda pasa a la segunda columna para separar por la parte superior ligeros y por el fondo la MIBK cruda. La MIBK cruda se alimenta en la tercera columna y es separada por la parte superior y enviada a tanques intermedios para su análisis y después a tanques finales.

Las otras dos columnas son para la obtención de la DIBK. La primera columna es para eliminar los compuestos ligeros de la DIBK, y la segunda columna es para la obtención de la DIBK por la parte superior.

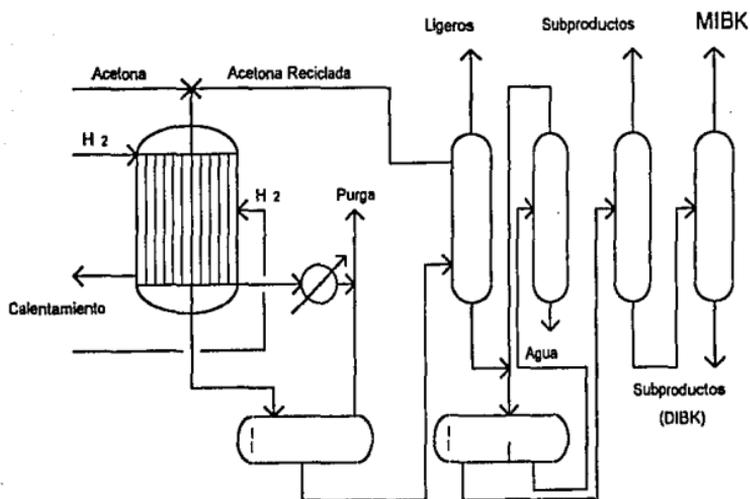


Figura 3.1 Diagrama de Flujo de Proceso

**CAPITULO 4**

**SIMULADOR DE PROCESOS  
ASPEN-PLUS**

En los inicios de la década de los sesentas las computadoras dejan de ser una curiosidad científica para pasar a ser una herramienta de la industria. De la mano del desarrollo en el soporte físico de las computadoras, las firmas de ingeniería, compañías operadoras e instituciones académicas empiezan a preparar la primera generación de programas simuladores de proceso.

Alrededor de 1961 la compañía Monsanto comienza a preocuparse por unir modelos computacionales de operaciones unitarias individuales para formar un sistema de simulación de procesos. En 1964 esta tarea se ve complementada con el desarrollo de rutinas para simulación, cálculos de propiedades termodinámicas, entrada y salida de datos, y documentación para el usuario; dos años más tarde Monsanto cuenta con el simulador FLOWTRAN cuyo nombre se deriva de "FLOWsheet TRANslator" (traductor de diagramas de proceso) indicando además su compatibilidad con el lenguaje FORTRAN.

En 1969 Monsanto ofrece como servicio el uso de FLOWTRAN en locales abiertos al público. En el lapso de 4 años, más de 70 clientes en más de 100 diferentes localidades usaban éste servicio. Al inicio de 1972 se licencia y comercializa FLOWTRAN, un año más tarde se cierra el servicio de locales. En 1976, FLOWTRAN es seleccionado por el Instituto Tecnológico de Massachusetts (MIT) y licenciado a éste para servir de base en el desarrollo de ASPEN, un simulador de procesos avanzado, contratado por el Departamento de Energía de los Estados Unidos para simular procesos basados en el carbón, ya que el petróleo presentaba constantes alzas en sus precios.

Desde su introducción en 1981, el simulador de procesos ASPEN, "Advanced System for Process Engineering" (Sistema avanzado para ingeniería de procesos), ha sido ampliamente conocido. Aunque en sus principios ASPEN se desarrolló para conversión de combustibles fósiles, ha demostrado ser aplicable para diversas industrias de proceso, universidades, firmas de ingeniería, compañías consultoras, centros de tecnología del gobierno de E.U., entre otros usuarios.

En 1981 se funda Aspen Technology a un lado del MIT para realizar nuevos esfuerzos junto con más de 20 compañías líderes en la industria de proceso. En 1983 la creación de más de 600 subrutinas enteras y nuevos cambios en más de 300 rutinas ya existentes dan como resultado el simulador de procesos ASPEN PLUS: una versión expandida, mejorada y soportada comercialmente del simulador ASPEN; con mayor calidad, eficiencia y facilidad en su uso. Desde 1983 ASPEN PLUS se ha mejorado año tras año para ofrecer más y mejores aplicaciones, que hacen de este simulador una herramienta cada vez más poderosa y fácil de usar.

En 1992 la Facultad de Química de la UNAM adquiere la versión 8.5.3 del ASPEN PLUS, versión con la que se desarrolla éste trabajo y la cual se explica en el presente capítulo. Siguiendo los lineamientos propuestos por Evans (Evans, 1981), explicados en el capítulo 2, todos los sistemas de simulación de procesos contienen cinco elementos principales: Modelos, Algoritmos, Soporte computacional, Interfase con el usuario y Aplicaciones. A continuación se habla de cada uno de estos elementos de la versión antes mencionada del ASPEN PLUS.

## 4.1 MODELOS

El punto de partida para la simulación en estado estacionario es el diagrama de bloques que representa las operaciones unitarias involucradas en el proceso; cada bloque es un modelo en el que se encuentran todas las ecuaciones que se deben resolver para dicha operación unitaria. ASPEN-PLUS ofrece una biblioteca completa de modelos generalizados para simular cualquier tipo de proceso, incluyendo procesos con sólidos, electrolitos o sustancias complejas; además, mediante el implemento de subrutinas, el ingeniero puede definir modelos de sus propias operaciones unitarias.

En la tabla 4.1 se muestran los modelos de operaciones unitarias que se pueden simular con ASPEN-PLUS. Estos modelos no tienen ninguna limitación dimensional ya que pueden manejar cualquier número de componentes, alimentaciones, etapas, reacciones, etc. y prácticamente todos pueden manejar sólidos.

ASPEN-PLUS genera automáticamente las relaciones matemáticas derivadas de las leyes de conservación, las relaciones de conexión, y acepta fácilmente ecuaciones de velocidad de reacción y restricciones de diseño y control. En los capítulos 10 - 16 de la guía del usuario de ASPEN-PLUS se encuentra información específica sobre cada uno de éstos modelos.

## MODELOS DE OPERACIONES UNITARIAS DEL ASPEN PLUS

### MEZCLADORES, DIVISORES Y SEPARADORES

- Mezclador general MIXER
- Divisor de flujo FSPLIT
- Divisor de componentes SEP
- Separador de dos productos SEP2

### SEPARADORES FLASH

- Flash de dos fases FLASH2
- Flash de tres fases FLASH3

### CALENTADORES Y CAMBIADORES DE CALOR

- Calentador general de proceso HEATER
- Cambiador de calor HEATA

### SEPARACION MULTITAPA

- Fraccionamiento riguroso RADFRAC
- Col. de fracc. riguroso multiple MULTIFRAC
- Absorción rigurosa ABSBR
- Extractor riguroso EXTRC
- Destilación, diseño DSTWU
- Destilación, simulación DISTL

### REACTORES

- Reactor de selección RYIELD
- Reactor estequiometrico RSTOIC
- Reactor de tanque continuo agitado RCSTR
- Reactor de flujo tampon RPLUG
- Equilibrio químico a dos fases REQUIL
- Equilibrio de fases y químico RCIBES

### BOMBAS Y COMPRESORES

- Bomba PUMP
- Compresor de una etapa COMPR
- Compresor de etapas multiples MCOMPR

### MANEJO DE SOLIDOS

- Cíclon CYCLONE
- Precipitador electrostático ESP
- Filtro de tela FABFL
- Limpiador Venturi VSCRUB
- Triturador CRUSH
- Pantalla/clasificador SCREEN
- Hidrociclón HCYC
- Filtro de tambor rotatorio FILTER
- Filtro centrífugo CFUGE
- Lavador de sólidos SWASH
- Decantador contracorriente CCD

### MANIPULADORES DE CORRIENTES

- Multiplicador MULT
- Duplicador DUPL

**Tabla 4.1: Modelos de operaciones unitarias**

Los modelos y datos de propiedades termofísicas son la clave para obtener buenos resultados en la simulación. El sistema de propiedades de ASPEN-PLUS calcula todas las propiedades termodinámicas y de transporte requeridas para simular todos los modelos de operaciones unitarias, para dimensionar los equipos y para producir reportes y tablas. Dicho sistema ofrece un amplio rango de modelos termodinámicos, basado en ecuaciones de estado y aproximaciones por coeficientes de actividad, permitiendo definir diferentes modelos a utilizar en cada parte del proceso.

Para la solución de estos modelos, ASPEN-PLUS cuenta con cuatro diferentes bancos de datos, que contienen diversos datos físicos (como peso molecular o punto de ebullición) para más de 1,500 compuestos químicos. Si el valor de algún parámetro no se encuentra, se puede suministrar directamente, o si se desea definir algún parámetro especial, se puede alimentar en un banco de datos creado. Además es posible definir cualquier modelo deseado mediante rutinas en FORTRAN, o alimentar datos directamente para todas las propiedades termodinámicas y de transporte que dependen de la temperatura, éstos pueden ser suministrados como valores numéricos que el usuario define sin límite de número o como coeficientes polinomiales. Los datos de entalpía pueden ser basados en cualquier condición de referencia. En la página siguiente se muestran los modelos de propiedades termofísicas que maneja ASPEN-PLUS.

En el capítulo 5 de la guía del usuario de ASPEN-PLUS y más detalladamente en la guía de propiedades físicas, se encuentra información sobre los modelos para el cálculo de propiedades. La información sobre los bancos de datos y sus componentes se encuentra en el capítulo 4 de la misma guía.

## **4.2 ALGORITMOS**

Los algoritmos son los conjuntos de operaciones que permiten al simulador resolver los problemas matemáticos generados por los modelos. ASPEN-PLUS, como la gran mayoría de simuladores comerciales, utiliza algoritmos de simulación modular secuencial (ver capítulo 2), en donde a partir

de la definición de las corrientes de alimentación y las condiciones de operación, se van calculando de forma secuencial las operaciones unitarias.

ASPEN-PLUS cuenta con rutinas para detectar los ciclos de recirculación, seleccionar las corrientes de corte, generar bloques de convergencia y definir la secuencia de cálculo, sin importar el orden en que se introduzcan las operaciones unitarias. Alternativamente se pueden alimentar especificaciones propias de convergencia, o crear un amplio rango de aplicaciones con módulos escritos en FORTRAN.

Como se vió en el capítulo 2, sección E, existe una jerarquía en el manejo de los ciclos de la simulación modular secuencial: los ciclos de control, con los que se logra la convergencia de las especificaciones de diseño son los más externos. ASPEN-PLUS genera automáticamente las secuencias de convergencia para las especificaciones de diseño y realiza dicha convergencia mediante el método de la secante para una sola especificación o el método de Broyden para dos o más especificaciones simultáneas; también acepta cualquier especificación de convergencia que el usuario quiera definir. Con esta poderosa herramienta se puede definir cualquier cantidad de valores deseados para especificar el resultado de un bloque, el flujo o cualquier propiedad de una corriente, la pureza de un componente, o alguna función de estas variables; incluso se puede designar un rango dentro del cual deba ser manipulada alguna variable.

Para la convergencia de los ciclos internos, necesarios para lograr la convergencia de las corrientes de recirculación, ASPEN-PLUS ofrece muchos métodos que se pueden aplicar simultáneamente a cualquier número de corrientes. Entre estos métodos se encuentra la modificación del método quasi-

Newton de Broyden que utiliza información sobre la interacción de las variables de las corrientes de corte.

#### MODELOS DE CALCULO DE PROPIEDADES FISICAS EN ASPEN PLUS

##### ECUACIONES DE ESTADO

- Redlich-Kwong
- Redlich-Kwong-Soave
- Redlich-Kwong-ASPEN
- Peng-Robinson
- Cadena dura perturbada (polar)
- Cadena dura perturbada (no polar)
- Peng-Robinson (agua/hidrocarburo)
- Lee-Kesler
- BWR
- Hayden-O'Connell
- Nothnagel
- Tablas de vapor ASME. 1967

##### COEFICIENTES DE FUGACIDAD

- Grayson-Slreed
- Chao-Seader
- Chao-Seader/Prausnitz-Shair

##### COEFICIENTES DE ACTIVIDAD

- Scatchard-Hildebrand extendido
- Ecuacion de Wilson
- Ecuacion de Van Laar
- Ecuacion NRTL
- UNIQUAC
- UNIFAC
- Electrolito de composicion local

##### VOLUMEN MOLAR

- Líquido saturado Cavett
- Líquido saturado Rackett
- Líquido comprimido Chueh-Prausnitz
- Liq. molar parcial Brelvi-O'Connell
- Sólido, polinomial
- Vol. electrolitos Debye-Huckel
- Polinomial modificada

##### ENTALPIA/E LIBRE/ENTROPIA

- liq. y vapor Yen-Alexander
- Líquido saturado Cavett
- Sólido, polinomial
- Ec. de Watson modificada
- Fusion solida polinomial
- Sublimacion solida polinomial
- Sublimacion solida generalizada
- Polinomial modificada
- Entalpia de electrolitos Criss-Cobble

##### PRESION DE VAPOR

- Presion liq. vapor de Antoine
- Presion liq. vapor de Cavett
- Presion solido vapor de Antoine
- Polinomial modificada

##### RELACION DE EQUILIBRIO LIQ-VAP

- Datos de entrada
- Polinomial modificada

##### CONSTANTE DE HENRY

- Datos de entrada
- Polinomial modificada

##### DENSIDAD DE SOLIDOS COMPLEJOS

- Modelo de solidos secos IGT
- Modelo de densidad generalizado

##### ENTALPIA DE SOLIDOS COMPLEJOS

- Correlacion de Boie
- Correlacion de Dulong
- Corr. de Grummel y Davis
- Corr. del calor de combustion
- Corr. de Chang-Jirapongphan-Boston
- Correlacion de Kirov
- Ecuacion cubica de temperatura
- Modelo generalizado de entalpia

##### CONDUCTIVIDAD TERMICA

- Presion de vapor baja WMS
- P. de vapor alta de Stiel-Thodos
- Líquido de Sato-Reidel
- Solidos polinomial

##### TENSION SUPERFICIAL

- Hakim-Steinberg-Stiel (liq. puro)
- Hakim-Steinberg-Stiel (mezcla liq.)

##### VISCOSIDAD

- Chapman-Enskog-Brokaw
- Dean-Stiel
- Liq. modificado de Andrade
- Letsou-Stiel (liq.)

##### COEFICIENTE DE DIFUSION

- Chapman-Enskog/Wilke-Lee
- Dawson-Khoury-Kobayashi
- Wilke-Chang

Tabla 4.2: Modelos de cálculo de propiedades

Además, ASPEN-PLUS cuenta con una modificación apropiada del método de Broyden, que permite realizar la convergencia de las especificaciones de diseño (ciclos externos), y de las corrientes de recirculación (ciclos internos) de manera simultánea. Con este método se pueden resolver problemas en los cuales los ciclos externos e internos estén fuertemente relacionados, como un tren de precalentamiento o de evaporadores, o un proceso de cogeneración.

Todas estas herramientas hacen que el sistema de simulación utilizado por ASPEN-PLUS aumente los beneficios del enfoque modular secuencial y ofrezca alternativas para cubrir las deficiencias de este enfoque. En los capítulos 17 - 25 de la guía del usuario, o en forma más detallada en la guía de simulación interactiva, se encuentra información específica sobre los distintos algoritmos.

### **4.3 SOPORTE COMPUTACIONAL**

El soporte computacional está formado por dos partes: el soporte físico o "hardware" y el soporte lógico o "software". En el caso de ASPEN-PLUS, el soporte físico se debe adquirir por cuenta propia, la versión 8.5 requiere del siguiente sistema:

- \* Una computadora personal (PC) con procesador 386 - 486 compatible con IBM.
- \* 640 KB de memoria base, de la cual deben estar disponibles por lo menos 480 KB.
- \* 8 - 10 MB de memoria extendida. Se recomiendan de 12 a 14 MB.
- \* Un coprocesador matemático 80387 (o equivalente).
- \* Monitor a color (EGA, VGA) o Hercules monocromático para utilizar el sistema gráfico.

- \* Un ratón "mouse" para utilizar el sistema gráfico.
- \* Un puerto paralelo.
- \* Un mínimo de 70 MB de espacio en disco duro.
- \* Un dispositivo de seguridad para conectar en el puerto paralelo, sin el cual ASPEN-PLUS no funciona.

El soporte lógico está formado principalmente por dos partes: el sistema operativo, (en el caso del sistema operativo DOS, se requiere una versión 3.3 o mayor y se debe configurar al sistema para que maneje por lo menos 50 archivos) y los programas que conforman al simulador, en el caso de ASPEN-PLUS se encuentran agrupados en tres paquetes:

- \* ASPEN-PLUS para computadoras 386 con todas las rutinas necesarias para efectuar la simulación.

- \* Model Manager, interfase con el usuario, cuenta con un sistema gráfico experto que ayuda a crear fácilmente los diagramas de flujo de proceso, correr las simulaciones, y a interpretar y editar los resultados.

- \* La Tercera Parte del sistema incluye el compilador NDP-FORTRAN, el Phar Lap 386|ASM / 386|LINK y el DOS extender.

#### **4.4 INTERFASE CON EL USUARIO**

Como se vió en el capítulo 2, sección C, la interfase con el usuario incluye el lenguaje por medio del cual la persona describe su problema particular, los reportes que resumen los resultados, la documentación adecuada para el uso del sistema, y los protocolos para la interacción con otros programas y sistemas. En esta sección se describe el funcionamiento de dichos elementos en la interfase del simulador ASPEN-PLUS.

El **lenguaje de entrada** consiste en una descripción del proceso con la información disponible en el diagrama de flujo. Esta información incluye los flujos y composiciones de las corrientes de alimentación, los parámetros de los equipos del proceso y la interconexión entre éstos. En ASPEN-PLUS dicha información puede ser introducida de tres formas: con un editor de textos utilizando el lenguaje de entrada, mediante el llenado de formas, y utilizando gráficos; las últimas dos a través de ModelManager (Interfase con el usuario).

El **reporte de resultados** incluye información sobre todas las corrientes y sus propiedades, las operaciones unitarias y de manera opcional los costos y economía del proceso. Dichos reportes pueden incluir información tan específica como los flujos, composiciones y propiedades de cada plato de una torre; pueden generar gráficas como las curvas de calor en un intercambiador y si se desea, se puede generar hasta el diagrama de flujo del proceso con la información requerida en la tabla de balances. Todos los reportes y diagramas pueden ser editados e impresos de manera directa o desde casi cualquier procesador de palabras, hoja de cálculo o sistema CAD.

La **documentación adecuada para el uso del sistema** se encuentra organizada en diferentes manuales dirigidos a todos los niveles de usuario, desde principiantes hasta gente experta en versiones antiguas de ASPEN. A continuación se citan los principales manuales del sistema y se explica brevemente la información que contienen:

\* **ModelManager Getting Started and Tutorials for the PC** introduce al usuario al manejo del ModelManager a través de tutoriales en donde se enseñan, paso a paso, los conceptos básicos para crear y usar modelos en ASPEN-PLUS.

\* **ModelManager and ASPEN PLUS, Installation and Reference for the PC** explica como configurar el sistema y como instalar las tres partes que conforman el soporte lógico del simulador, tanto en una PC como en una estación de trabajo.

\* **ASPEN-PLUS User Guide** contiene toda la información necesaria para empezar a utilizar ASPEN-PLUS en el modelado de procesos líquido-vapor, típicos en la industria química y del petróleo.

\* **ASPEN-PLUS Interactive Simulation** es una guía completa del las habilidades de la simulación interactivas en ASPEN-PLUS; incluye dos ejemplos con tutoriales.

\* **ASPEN-PLUS Costing Manual** describe el uso de los sistemas de costos (modelos de costos de equipos, costos de capital, costos de operación, evaluaciones económicas, etc), así como su simulación y el reporte de los resultados.

\* **ASPEN-PLUS Data Regression Manual** es una guía completa del uso del sistema de regresion lineal de ASPEN-PLUS, incluyendo ejemplos y parámetros recomendados para problemas de regresión comunes.

\* **ASPEN-PLUS Electrolytes Manual** describe y ejemplifica el uso de ASPEN-PLUS en el modelado de procesos que involucran electrolitos en soluciones acuosas y no acuosas.

\* **ASPEN-PLUS Solids Manual** es un suplemento de la guía del usuario, donde se describe el uso de corrientes y propiedades de compuestos sólidos y compuestos no convencionales, así como las operaciones unitarias que los manejan.

\* **ASPEN-PLUS Guide to Physical Properties** es una guía para usuarios avanzados, donde se explican las habilidades de ASPEN-PLUS en el cálculo y uso de propiedades termofísicas.

\* **ASPEN-PLUS Notes on Interfaces and User Models** es una guía para aprender como escribir y aplicar modelos y subrutinas definidas por el usuario,

también se discute sobre los diferentes archivos de interfase con que cuenta ASPEN-PLUS.

\* **ASPEN-PLUS Stream Libraries and Insert Libraries** describe como usar la biblioteca de corrientes para almacenar información entre distintas corridas y como almacenar fragmentos comunes usados en el lenguaje de entrada.

\* **ASPEN-PLUS Summary File Toolkit** describe como hacer programas usando toolkit. Toolkit (estuche de herramientas) es una herramienta que consiste en una serie de subrutinas en FORTRAN, las cuales se utilizan para extraer información de los resultados de la simulación.

Una vez terminada la simulación, ya que se generaron todos los datos y gráficos que se requieren, es fácil comunicarse con otros programas para realizar diversas actividades. ASPEN-Plus cuenta con **protocolos para la interacción con otros programas** tales como: bases de datos, hojas de cálculo o sistemas CAD/CAM.

#### 4.5 APLICACIONES

Durante el desarrollo de un proceso, se pueden utilizar datos preliminares para preparar un modelo. A esta altura, el diagrama de flujo de proceso se usa en ASPEN-PLUS para evaluar las configuraciones alternativas de proceso, analizar la adición, eliminación o sustitución de equipos y para comparar procesos alternativos con bases comunes. El modelo puede ayudar a la interpretación de los datos de la planta piloto y a darnos una buena idea del comportamiento y la economía del proceso.

Para el diseño de plantas nuevas o la modernización de las ya existentes, ASPEN-PLUS permite a los ingenieros determinar con detalle los

balances de materia y energía, analizar alternativas de cambio y evaluar las condiciones de operación. Es posible construir una serie de casos de estudio para asegurarnos que la planta puede enfrentarse a un amplio rango de condiciones de operación.

En plantas ya existentes, se puede utilizar ASPEN-PLUS para reducir los costos de operación, mejorar el rendimiento y la eficiencia de energía. En caso de que las materias primas o los productos cambien de especificaciones, se pueden determinar fácilmente las modificaciones en las condiciones de operación. Con ASPEN-PLUS se pueden eliminar los cuellos de botella del proceso o los problemas causados por algunos equipos.

En pocas palabras ASPEN-PLUS tiene aplicaciones en la síntesis, análisis, optimización y operación de cualquier proceso, en cualquier etapa y en cualquier nivel que se efectúe.

**CAPITULO 5**

**SIMULACION DE LA PLANTA  
PRODUCTORA DE MIBK**

## 5.1 PASOS A SEGUIR EN UNA SIMULACION.

Para llevar a cabo la simulación de un proceso en cualquier simulador, es necesario realizar cada uno de los pasos que se muestran a continuación. En cada uno de ellos se explica la manera específica en que se definió la simulación del proceso de obtención de MIBK, cuyos resultados se muestran en la siguiente sección. Los pasos están numerados en el orden lógico en que se deben realizar, aunque no es necesario seguir la misma secuencia. Las opciones que se mencionan a continuación se utilizaron en todas las simulaciones que se reportan a lo largo de este trabajo.

**A.- Definición del diagrama de flujo de proceso y su alcance:** El primer paso para realizar la simulación de un proceso es definir sus límites, ya que es común que éste no se encuentre como una entidad independiente, sino que tenga flujos de materia y/o energía interconectados con otros procesos, de forma que si se altera el proceso en cuestión, se alteran los demás o viceversa. Es por esto que no siempre resulta fácil definir que parte del proceso o que procesos se deben simular.

**B.- Selección de unidades:** Se deben seleccionar las unidades en las que se van a especificar las variables de entrada y en las que se desean obtener los reportes de salida. Es posible escoger unidades de diferentes sistemas para las variables, incluso se pueden especificar diferentes unidades en cada operación unitaria y no es necesario que las unidades de entrada y salida sean iguales. En el presente trabajo se utilizan las unidades pertenecientes al sistema métrico decimal; la razón por la que se escogió este sistema se basa en el hecho de que la información que obtuvimos del proceso real está reportada en dichas unidades.

**C.- Selección del método o modelo para calcular las propiedades termofísicas:** Este es un paso clave para una buena simulación ya que desafortunadamente no existe una ecuación de estado o modelo para predecir las propiedades de todos los compuestos y todas las condiciones. Es por esta razón que se debe elegir el modelo que calcule con mayor precisión las propiedades de los compuestos que maneja el proceso a simular; de hecho, es posible utilizar diferentes ecuaciones de estado o modelos termodinámicos en las distintas operaciones unitarias según lo requieran las condiciones de éstas, lo que le da mayor flexibilidad a la simulación.

El proceso de obtención de MIBK maneja, en casi todos los equipos, mezclas de compuestos no polares o ligeramente polares, para las que existen varias ecuaciones de estado que predicen sus propiedades con bastante exactitud. Realizamos la simulación utilizando las ecuaciones de estado de Redlich-Kwong-Soave, Redlich-Kwong-Aspen y Peng-Robinson, obtenido con la primera los resultados más cercanos al proceso real. Para los equipos en que no obtuvimos resultados satisfactorios con esta ecuación de estado, debido a la alta concentración de compuestos polares como agua e isopropanol, utilizamos la ecuación de estado de UNIFAC/Redlich-Kwong, basada en modelos de coeficientes de actividad.

**D.- Partir el proceso en bloques de operaciones unitarias y escoger el modelo para cada bloque:** Este paso se realizó en varias etapas; primero se dividió el proceso completo en tres secciones. La primera está compuesta por el suministro de materias primas, su entrada al reactor y la separación de los productos de reacción mediante tres tanques tipo flash. La segunda tiene como equipo principal una torre de destilación (desacetonzadora), una torre estabilizadora y una lavadora de incondensables. La tercera sección la

componen dos torres de destilación destinadas a purificar nuestro producto principal, MIBK.

Antes que nada, identificamos todos los bloques a simular. Los bloques no son necesariamente los equipos mostrados en el diagrama de flujo de proceso de la planta original, ya que además incluimos divisores y mezcladores de flujo. Posteriormente, procedimos a nombrar todas las corrientes de proceso; realizamos la simulación de cada bloque por separado, y una vez que los resultados fueron satisfactorios, integramos todos los bloques en tres secciones. Nos vimos obligados a reajustar la simulación de cada bloque y definir corrientes de corte (recirculaciones en el proceso) para lograr que la gran cantidad de cálculos que realiza el simulador alcanzara la convergencia. Una vez logrado ésto, habiendo obtenido resultados que representan las condiciones de operación reales del proceso con bastante exactitud, integramos las tres secciones, concluyendo así la simulación del proceso completo.

Los modelos usados en la simulación de las operaciones unitarias fueron: RADFRAC para columnas de destilación; RGIBBS para el reactor; FLASH2 para separadores tipo flash; HEATX para intercambiadores de calor con corrientes de proceso; HEATER para condensadores, rehervidores, válvulas e intercambiadores con servicios auxiliares; MIXER para mezcladores de corrientes; y FSPLIT para divisores.

**E.- Definición de las corrientes de entrada y sus compuestos químicos:** En esta parte se deben especificar los flujos, los compuestos presentes y las composiciones de todas las corrientes que alimentan al proceso, así como las condiciones de operación (presión y temperatura o fracción de

vapor). Para este caso se tienen dos corrientes de alimentación, la de hidrógeno y la de acetona, ambas con concentraciones más bajas de los demás compuestos que intervienen en el proceso.

**F.- Especificación de las condiciones de operación:** En esta parte se deben definir cuales de las variables de operación se van a especificar en cada operación unitaria. El número de variables que se deben especificar depende de la operación que deseamos representar. El simulador ofrece opciones de grupos de variables para especificar en cada operación unitaria. Lo importante, y no tan sencillo, es elegir el conjunto de variables adecuado, de forma que la simulación converja, y lo haga de la manera más adecuada posible, ya que el hecho de definir variables permitidas no garantiza que el sistema llegue a la convergencia.

**G.- Especificación de condiciones de diseño:** Muchas veces existen condiciones en el diseño que es importantante conservar, ya que una pequeña alteración puede cambiar el comportamiento del proceso o las propiedades de los productos. En este caso sólo se debe de tener cuidado con la determinación de dichas condiciones para no sobre-especificar el proceso. Se puede dar el caso de que si se añade una condición al proceso sea necesario modificar las condiciones de operación definidas, para que no existan redundancias que imposibiliten la convergencia.

**H.- Definición de los métodos de convergencia:** El simulador genera automáticamente las secuencias de convergencia para las especificaciones de diseño y realiza dicha convergencia mediante el método de la secante para una sola especificación o el método de Broyden para dos o más especificaciones simultáneas; también acepta cualquier especificación de convergencia que el usuario quiera definir. Para la convergencia de los ciclos internos existe una

amplia gama de métodos que se pueden aplicar simultáneamente a cualquier número de corrientes. Entre éstos se encuentra el método de Wegstein, que utiliza información sobre la interacción de las variables de las corrientes de corte; dicho método fue el que utilizamos para la simulación de nuestro proceso. La definición de métodos adecuados, además de garantizar la convergencia (en caso de que los datos estén alimentados correctamente), puede representar un ahorro de tiempo considerable, sobre todo en procesos con grandes dimensiones.

***1.- Estudio de casos o análisis de sensibilidad:*** Una vez que la simulación se realiza adecuadamente, se puede hacer un estudio de sensibilidad en donde se varían algunos parámetros para analizar qué tanto se altera el proceso; también se puede alterar la estructura del proceso para analizar distintas opciones, lo que nos permite conocer profundamente al proceso y si se desea, modificar las condiciones de operación o el proceso mismo de forma que se obtenga un mayor rendimiento de éste, o en muchos casos la solución a algún problema específico.

## **5.2 RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN**

En esta sección se presentan los resultados obtenidos en la simulación del proceso de obtención de MIBK. Primero se muestra el diagrama de flujo de proceso (DFP) completo, acompañado de una tabla con los valores de las corrientes obtenidas en la simulación; a continuación se muestra un diagrama de bloques del proceso, el cual representa la simulación del proceso incluyendo todos los equipos y accesorios reportados en el DFP.

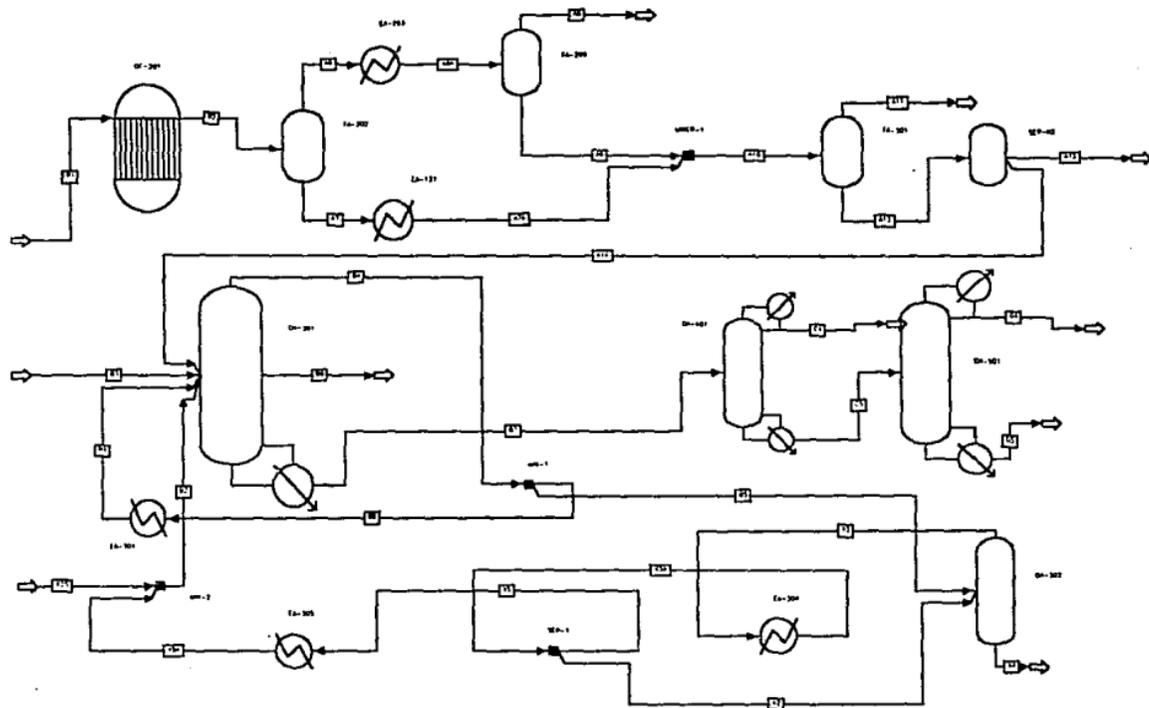


Figura 5.1 Diagrama de Flujo de Proceso, Planta MIBK

	R1	R2	A6	A6A	A7	A7A
De:	---	DC-201	FA-202	EA-203	FA-202	EA-127
A:	DC-201	FA-202	EA-203	FA-209	EA-127	MIXER-1
Fase:	MEZ	MEZ	VAP	MEZ	LIQ	MEZ
Componentes:						
-Hidrógeno	1459.53	1399.42	1388.85	1388.85	10.57	10.57
-Metano	75.32	75.32	73.62	73.62	1.71	1.71
-Propano	1.51	1.51	1.3	1.3	0.2	0.2
-Agua	22.75	82.4	49.89	49.89	32.52	32.52
-Metil-pentano	2.68	2.68	1.32	1.32	1.37	1.37
-Acetona	496.63	379.15	184.23	184.23	194.92	194.92
-Isopropanol	0.93	1.39	0.55	0.55	0.84	0.84
-MIBK	11.96	67.04	12.7	12.7	54.34	54.34
-DIBK	0.49	2.78	0.17	0.17	2.61	2.61
Flujo total:						
-Lbmol/hr	2071.81	2011.7	1712.62	1712.62	299.07	299.07
-kg/hr	15888	15888	7747.47	7747.47	8140.33	8140.33
-ft3/hr	15017	16078	15536	11726	541.17	506.85
Temp. °C	105	130	130	60	130	66
Presión Bar	60	60	60	60	60	60
Frac. vapor	0.8064	0.8513	1	0.8738	0	0.0127
Frac. líquido	0.1936	0.1487	0	0.1262	1	0.9873
Entalpía:						
-BTU/lbmol	-26243	-27232	-13876	-16518	-103710	-107880
-BTU/lb	-1552.24	-1564.01	-1391.38	-1656.22	-1728.3	-1797.81
-BTU/hr	-5.44E+07	-5.48E+07	-2.38E+07	-2.83E+07	-3.10E+07	-3.23E+07
Entropía:						
-BTU/lbmol-R	-21.28	-20.75	-12.02	-15.98	-70.78	-77.02
-BTU/lb-R	-1.26	-1.19	-1.2	-1.6	-1.18	-1.28
Densidad:						
-Lbmol/ft3	0.1379	0.1251	0.1102	0.146	0.5526	0.5902
-Lb/ft3	2.3323	2.1788	1.0993	1.4565	33.1621	35.4215
PM promedio	16.9062	17.4114	9.9731	9.9731	60.0066	60.0066

Tabla 5.1 VALORES DE LAS CORRIENTES REPORTADOS POR LA SIMULACION

Corriente número	A8	A9	A10	A11	A12	A13
De:	FA-209	FA-209	MIXER-1	FA-301	FA-302	SEP-H2
A:	"---	MIXER-1	FA-301	"---	SEP-H2	"---
Fase:	VAP	LIQ	MEZ	VAP	LIQ	VAP
Componentes:						
-Hidrógeno	1384.85	4	14.56	14.47	0.1	0.1
-Metano	72.6	1.02	2.73	2.63	0.1	0.1
-Propano	1.12	0.19	0.39	0.24	0.15	0.15
-Agua	19.11	30.78	63.3	8.71	54.58	0
-Metil-pentano	0.47	0.85	2.22	0.22	1.99	0
-Acetona	53.71	130.51	325.44	26.64	298.79	0
-Isopropanol	0.09	0.46	1.3	4.46	1.26	0
-MIBK	0.86	11.84	66.18	0.8	65.38	0
-DIBK	0.003	0.17	2.78	5.51	2.77	0
Flujo total:						
-Lbmo/hr	1532.8	179.83	478.9	53.77	425.13	0.35
-kg/hr	3447.87	4299.6	12440	857.17	11583	3.84
-ft3/hr	12395	283.68	770.69	11889	628.66	79.18
Temp. °C	80.9	80.9	71.17	66	66	66
Presión Bar	60	60	60	2	2	2
Frac. vapor	1	0	0.0079	1	0	1
Frac. líquido	0	1	0.9921	0	1	0
Entalpía:						
-BTU/lbmol	-5447.95	-104790	-106720	-65915	-111330	-27643
-BTU/lb	-1098.58	-1987.88	-1863.49	-1875.48	-1853.45	-1151.09
-BTU/hr	-8.35E+06	-1.88E+07	-5.11E+07	-3.54E+06	-4.73E+07	-9741.5
Entropía:						
-BTU/lbmol-R	-9.06	-65.13	-72.52	-28.17	-76.48	-30.81
-BTU/lb-R	-1.83	-1.24	-1.27	-0.8	-1.27	-1.27
Densidad:						
-Lbmo/ft3	0.1236	0.6819	0.6213	0.0045	0.6227	0.0044
-Lb/ft3	0.6132	35.9484	35.5856	0.1589	37.406	0.1061
PM promedio	4.959	52.7122	57.2675	35.146	60.0653	24.0149

Tabla 5.2 VALORES DE LAS CORRIENTES REPORTADOS POR LA SIMULACION

Corriente número	A14	B2	B3	B4	B5	B6
De:	SEP-H2	MIX-2	*---	DA-301	MIX-1	DA-301
A:	DA-301	DA-301	DA-302	MIX-1	DA-302	SEP-H2O
Fase:	LIQ	MEZ	LIQ	VAP	MEZ	MEZ
Componentes:						
-Hidrógeno	0	0	0	0	0	0
-Metano	0	0	0	0	0	0
-Propano	0	0	0	0	0	0
-Agua	54.58	48.45	0.13	30.99	2.17	69.83
-Metil-pentano	1.99	1	5.14	113.47	7.94	0
-Acelona	298.79	4.99	25.81	828.95	58.03	0
-Isopropanol	1.26	0.21	0	0.076	0.005	0
-MIBK	65.38	0.18	0	0	0	64.62
-DIBK	2.77	0.006	0	0	0	2.77
Flujo total:						
-Lbmol/hr	424.78	54.85	31.09	973.49	68.14	137.23
-kg/hr	11579	581.08	882.2	26529	1857.05	3685.3
-ft <sup>3</sup> /hr	682.23	2228.03	42.48	347270	24309	31857
Temp. °C	66	71.16	45	58.17	58.17	91.73
Presión Bar	2	1.1	1.2	1.2	1.2	1.3
Frac. vapor	0	0.0987	0	1	1	0.632
Frac. líquido	1	0.9013	1	0	0	0.368
Entalpía:						
-BTU/lbmol	-111400	-117800	-101870	-89925	-89925	-117420
-BTU/lb	-1853.6	-5043.2	-1628.43	-1496.75	-1496.75	-1983.26
-BTU/hr	-4.73E+07	-6.46E+06	-3.17E+06	-8.75E+07	-6.13E+06	-1.61E+07
Entropía:						
-BTU/lbmol-R	-76.52	-39.51	-84.92	-57.42	-57.42	-69.95
-BTU/lb-R	-1.27	-1.69	-1.36	-0.96	-0.96	-1.18
Densidad:						
-Lbmol/ft <sup>3</sup>	0.6226	0.0246	0.7318	0.0028	0.0028	0.0043
-Lb/ft <sup>3</sup>	37.4173	0.5749	45.7838	0.1684	0.1684	0.255
PM promedio	60.095	23.3574	62.5594	60.079	60.079	59.207

Tabla 5.3 VALORES DE LAS CORRIENTES REPORTADOS POR LA SIMULACION

Corriente número	B6A	B7	B8	B9	C4	C5
De:	SEP-H2O	SEP-H2O	MIX-1	EA-301	DA-401	DA-401
A:	*---	DA-401	EA-301	DA-301	*---	DA-501
Fase:	LIQ	LIQ	MEZ	LIQ	LIQ	LIQ
Componentes:						
-Hidrógeno	0	0	0	0	0	0
-Metano	0	0	0	0	0	0
-Propano	0	0	0	0	0	0
-Agua	64.95	4.89	28.82	28.82	4.89	0
-Metil-pentano	0	0	105.53	105.53	0	0
-Acetona	0	0	770.92	770.92	0	0
-Isopropanol	0	0	0.07	0.07	0	0
-MIBK	0	64.62	0	0	2.52	62.1
-DIBK	0	2.77	0	0	0	2.77
Flujo total:						
-Lbmol/hr	64.95	72.28	905.35	905.34	7.41	64.87
-kg/hr	530.71	3154.59	24672	24672	154.29	3000.3
-ft <sup>3</sup> /hr	26.19	174.58	322970	1189.81	8.36	174.05
Temp. °C	91.73	91.73	58.17	53.45	67.16	127.06
Presión Bar	1.3	1.3	1.2	1.2	1	1.3
Frac. vapor	0	0	1	0	0	0
Frac. líquido	1	1	0	1	1	1
Entalpía:						
-BTU/lbmol	-121700	-135410	-89925	-102800	-123060	-133340
-BTU/lb	-8755.16	-1407.26	-1496.75	-1711.14	-2698.59	-1307.82
-BTU/hr	-7.90E+07	-9.79E+06	-8.14E+07	-9.31E+07	-9.18E+05	-8.65E+06
Entropía:						
-BTU/lbmol-R	-38.62	-132.65	-57.42	-79.14	-68.48	-135.45
-BTU/lb-R	-2.03	-1.38	-0.96	-1.32	-1.49	-1.33
Densidad:						
-Lbmol/ft <sup>3</sup>	2.48	0.414	0.0028	0.7609	0.8858	0.3727
-Lb/ft <sup>3</sup>	44.6778	39.8372	0.1784	45.72	40.6824	38.0043
PM promedio	18.0163	96.2191	60.0798	60.08	45.9344	101.9589

Tabla 5.4 VALORES DE LAS CORRIENTES REPORTADOS POR LA SIMULACION

Corriente número	D4	D5	X2	X3	X3A	X4
De:	DA-501	DA-501	SEP-1	DA-302	EA-304	DA-302
A:	"--	"--	DA-302	EA-304	SEP-1	"--
Fase:	LIQ	LIQ	LIQ	VAP	LIQ	LIQ
Componentes:						
-Hidrógeno	0	0	0	0	0	0
-Metano	0	0	0	0	0	0
-Propano	0	0	0	0	0	0
-Agua	0	0	13.02	14.23	14.23	0.96
-Metil-pentano	0	0	10.75	11.75	11.75	6.94
-Acetona	0	0	38.66	42.27	42.27	54.42
-Isopropanol	0	0	0	0	0	0.005
-MIBK	62.1	0	0	0	0	0
-DIBK	0.3	2.48	0	0	0	0
Flujo total:						
-Lbmol/hr	62.4	2.48	62.43	68.25	68.25	62.32
-kg/hr	2840.6	159.7	1544.99	1689.05	1689.05	1712.99
-ft <sup>3</sup> /hr	142.02	8.5	92.88	26306	101.54	104.1
Temp. °C	116.3	177.85	52.83	54.71	52.83	57.96
Presión Bar	1	1.3	1.1	1.1	1.1	1.1
Frac. vapor	0	0	0	1	0	0
Frac. líquido	1	1	1	0	1	1
Entalpía:						
-BTU/lbmol	-133300	-153610	-103940	-91100	-103940	-102680
-BTU/lb	-1328.24	-1079.9	-1905.05	-1669.84	-1905.04	-1694.53
-BTU/hr	-8.32E+06	-380210	-6.49E+06	-6.22E+06	-7.09E+06	-6.40E+06
Entropía:						
-BTU/lbmol-R	-134.67	-191.85	-75.96	-54.13	-75.95	-79.17
-BTU/lb-R	-1.34	-1.35	-1.39	-0.99	-1.39	-1.31
Densidad:						
-Lbmol/ft <sup>3</sup>	0.4393	0.2911	0.672	0.0026	0.672	0.5987
-Lb/ft <sup>3</sup>	44.094	41.4105	36.67	0.1415	36.67	36.2785
PM promedio	100.3611	142.241	54.5627	54.563	54.5628	60.5949

Tabla 5.5 VALORES DE LAS CORRIENTES REPORTADOS POR LA SIMULACION

Corriente número	X5	X5A	X25
De:	SEP-1	EA-305	"---
A:	EA-305	MIX-2	MIX-2
Fase:	LIQ	VAP	LIQ
Componentes:			
-Hidrógeno	0	0	0
-Metano	0	0	0
-Propano	0	0	0
-Agua	1.21	1.21	47.24
-Metil-pentano	1	1	0
-Acetona	3.61	3.61	1.38
-Isopropanol	0	0	0.21
-MIBK	0	0	0.18
-DIBK	0	0	0.006
Flujo total:			
-Lbmol/hr	5.82	5.82	49.02
-kg/hr	144.08	144.08	437
-ft <sup>3</sup> /hr	8.66	2357.22	16.81
Temp. °C	52.83	70	70
Presión Bar	1.1	1.1	1.2
Frac. vapor	0	1	0
Frac. líquido	1	0	1
Entalpía:			
-BTU/lbmol	-103940	-90539	-121030
-BTU/lb	-1905.04	-1659.35	-6158.81
-BTU/hr	-605100	-527060	-5.93E+06
Entropía:			
-BTU/lbmol-R	-75.96	-53.2	-37.91
-BTU/lb-R	-1.39	-0.97	-1.93
Densidad:			
-Lbmol/ft <sup>3</sup>	0.672	0.0024	2.9166
-Lb/ft <sup>3</sup>	36.6707	0.1347	57.3173
PM promedio	54.5628	54.5628	19.6519

Tabla 5.6 VALORES DE LAS CORRIENTES REPORTADOS POR LA SIMULACION



**CAPITULO 6**

**OPTIMIZACION DEL PROCESO**

Hoy en día, como resultado de una exigencia ecológica y una necesidad económica de ahorro de recursos, una de las tareas más importantes para el ingeniero químico es transformar la materia, empleando la menor cantidad de energía posible.

Las separaciones son la parte más importante de la mayoría de los procesos químicos. Son necesarias porque las especies químicas de una corriente deben ser enviadas a múltiples destinos con concentraciones específicas. En la industria química y petroquímica, la destilación es por mucho el método más usado para separar mezclas, y en muchas plantas las columnas de destilación consumen una gran cantidad de energía. En las plantas con columnas de destilación convencionales, la mayor parte de energía es requerida para el funcionamiento del rehedidor. Durante décadas los ingenieros han tratado de reducir el consumo de energía requerido por una columna de destilación, ya que desde los años cincuentas se sabe que la energía teórica requerida para estos sistemas es un pequeño porcentaje del consumo actual.

Ahora bien, esta reducción en el consumo de energía se puede llevar a cabo ya sea modificando la estructura del proceso o las condiciones de operación del mismo. Analizando los resultados obtenidos en la simulación del proceso, nos dimos cuenta de que era posible disminuir el consumo de servicios auxiliares (vapor y agua de enfriamiento) modificando únicamente las condiciones de operación de la torre de destilación DA-501.

## 6.1 PROPUESTA DE MEJORAMIENTO

La torre de destilación DA-501 es el equipo terminal del proceso; en él se separan por domos el producto principal, MIBK, y por fondos el subproducto, DIBK. La propuesta de mejoramiento está enfocada a aumentar las utilidades generadas por la venta de dichos productos, disminuyendo el costo de operación por consumo de energía.

### FUNCION OBJETIVO

Maximizar la ganancia, en función de la venta del producto y subproducto, costo de la materia prima y costo por consumo de energía (vapor).

$$\text{GANANCIA} = f(\text{MIBK, DIBK, MP, ENERGIA})$$

Para desarrollar esta función, fue necesario investigar el precio de los productos, la materia prima y el vapor, obteniéndose los siguientes valores:

CONCEPTO	PRECIO
MIBK	N\$ 0.53 / kg
DIBK	N\$ 0.52 / kg
MAT. PRIMA	N\$ 0.41 / kg
VAPOR	N\$ 16.0 / MMBTU

**Tabla 6.1 Precio de las variables de la función objetivo.**

La función desarrollada a partir del análisis resultó ser la siguiente:

### MAXIMIZAR

$$\text{GANANCIA (N\$/hr)} = (\text{kg/hr MIBK}) * (\text{N}\$0.53/\text{kg MIBK})$$

$$+(\text{kg/hr DIBK}) * (\text{N}\$0.52/\text{kg DIBK})$$

$$-(\text{kg/hrMP}) * (\text{N}\$0.41/\text{kgMP})$$

$$-(\text{MMBTU/hr}) * (\text{N}\$16.0/\text{MMBTU})$$

### RESTRICCIONES

1. La composición de MIBK a la salida de la torre (domos) debe ser mayor al 96%.

2. La carga térmica del calentador debe ser siempre positiva.

$$Q_n \geq 0$$

3. La carga térmica del condensador debe ser siempre negativa.

$$Q_1 \leq 0$$

Las variables a manipular por el simulador fueron:

1. Relación de reflujo en el rehedidor.

2. Plato de alimentación.

Una vez codificadas al lenguaje de ASPEN-PLUS la función objetivo, restricciones y variables a manipular, el simulador realizó una serie de cálculos

hasta encontrar los valores (condiciones de operación) que maximizaron la ganancia.

## 6.2 RESULTADOS DE LA OPTIMIZACION

En esta sección se presentan los resultados obtenidos en la optimización del proceso de obtención de MIBK. Se muestran los valores de las variables obtenidas en la simulación el valor de la función objetivo y los valores de las corrientes.

VARIABLE	VALOR
FLUJO DE MIBK	2,702.78 kg
FLUJO DE DIBK	176.99 kg
FLUJO DE MP	3,000.30 kg
FLUJO DE VAPOR	2.7001 MMBTU
FUNCION OBJETIVO	313.90 N\$/hr
PLATO DE ALIMENTACION	31

Tabla 6.2 Resultados de la optimización.

ESTA TESIS NO DEBE SALIR DE LA BIBLIOTECA

Corriente número	C5	D4	D5
De:	DA-401	DA-501	DA-501
A:	DA-501	"---	"---
Fase:	LIQ	LIQ	LIQ
Componentes:			
-Hidrógeno	0	0	0
-Metano	0	0	0
-Propano	0	0	0
-Agua	0	0	0
-Metil-pentano	0	0	0
-Acetona	0	0	0
-Isopropanol	0	0	0
-MIBK	62.14	59.59	2.55
-DIBK	2.75	0	2.75
Flujo total:			
-Lbmol/hr	64.89	59.59	5.3
-kg/hr	3000.3	2713.13	293.17
-ft <sup>3</sup> /hr	174.05	154.93	16.95
Temp. °C	127.05	116.68	145.06
Presión Bar	1.3	1	1.3
Frac. vapor	0	1	0
Frac. líquido	1	0	1
Entalpía:			
-BTU/lbmol	-133330	-133140	-145360
-BTU/lb	-1307.92	-1329.29	-1191.64
-BTU/hr	-8.65E+06	-7.93E+06	-7.70E+05
Entropía:			
-BTU/lbmol-R	-135.43	-134.33	-164.69
-BTU/lb-R	-1.33	-1.34	-1.35
Densidad:			
-Lbmol/ft <sup>3</sup>	0.3728	0.3845	0.3126
-Lb/ft <sup>3</sup>	38.004	38.5207	38.1386
PM promedio	101.9431	100.161	121.9848

Tabla 6.3 VALORES DE LAS CORRIENTES REPORTADOS POR LA SIMULACION

**CAPITULO 7**

**ANALISIS DE RESULTADOS**

## 7.1 SIMULACION DE LA PLANTA

En esta sección se presenta un análisis de los resultados obtenidos por la simulación y se comparan estos valores con los reportados en el diagrama de flujo de proceso. Podemos notar que para todas las corrientes el porcentaje de error de los flujos es bastante aceptable, aunque cabe notar que en ocasiones varía considerablemente el error en flujo másico con respecto al error en flujo molar (ver tablas 7.1 a 7.3). Esto se debe a que entre los compuestos presentes en las mezclas del proceso existe una gran diferencia en pesos moleculares, que van desde 2 para el H<sub>2</sub> hasta 142 para el DIBK. Así, por ejemplo, al obtener un error en flujo molar de una lbmol de DIBK, éste se traduce a un error de 142 lb para el flujo másico total. En contraste, un error de 142 lb de H<sub>2</sub> equivale a 71 lbmol de error en flujo molar total.

Para la primera sección (tabla 7.1), se analizan los productos presentes a la entrada y salida del reactor, así como también la mezcla líquida que alimenta la torre DA-301, equipo principal de la segunda sección. La alimentación al reactor fue especificada en el archivo de entrada al simulador; su salida, en cambio, fue el resultado de calcular las condiciones al equilibrio (químico y de fases), observándose un resultado acorde al esperado. Por otro lado, la separación de productos llevada a cabo por los tres tanques tipo "flash" fue bastante acertada, tomando en cuenta que las condiciones de operación (presión y temperatura) estaban especificadas en el diagrama de flujo de proceso.

La segunda sección (tabla 7.2) presenta la simulación de la torre desacetonzadora DA-301, la torre estabilizadora DA-302 y equipos auxiliares. Prestamos especial atención a los fondos de la torre DA-301, ya que éstos contenían nuestro principal producto, MIBK. Además, se verificó dicha torre

CORRIENTE	REAL R1	SIMUL R1		REAL R2	SIMUL R2	
FASE	MEZCLA	MEZCLA		MEZCLA	MEZCLA	
HIDROGENO	1469.49	1459.53		1410.02	1399.41	
METANO	75.51	75.32		75.51	75.32	
PROPANO	1.50	1.51		1.98	1.51	
2-MET PENT	2.68	2.68		5.26	2.68	
ACETONA	496.88	496.63		373.67	379.15	
ISOPROPANOL	0.92	0.93		1.38	1.39	
MIBK	11.98	11.96		66.98	67.04	
DIBK	0.49	0.49		2.78	2.78	
AGUA	22.76	22.75		87.69	82.40	
SOSA						
TOTAL:			% ERROR			% ERROR
lbmol/hr	2082.21	2071.80	0.50	2025.27	2011.68	0.68
lb / hr	34995.59	34995.59	0.00	34995.15	34995.59	0.00
			ERROR			ERROR
TEMP.	105	105	0	130	130	0
PRESION	60	60	0	60	60	0

CORRIENTE	REAL A9	SIMUL A9		REAL A12	SIMUL A12	
FASE	LIQUIDO	LIQUIDO		LIQUIDO	LIQUIDO	
HIDROGENO	4.41	4.00		0.00	0.09	
METANO	0.83	1.02		0.00	0.10	
PROPANO	0.20	0.19		0.00	0.14	
2-MET PENT	1.49	0.86		1.19	1.99	
ACETONA	116.28	130.51		282.45	298.79	
ISOPROPANOL	0.33	0.46		0.46	1.25	
MIBK	21.94	11.84		55.44	65.37	
DIBK	0.25	0.17		2.41	2.77	
AGUA	37.57	30.78		74.00	54.58	
SOSA						
TOTAL:			% ERROR			% ERROR
lbmol/hr	183.29	179.83	1.92	415.95	425.08	-2.15
lb / hr	9828.85	9470.48	3.78	23733.48	25513.22	-8.98
			ERROR			ERROR
TEMP.	60	80	-20	66	66	0
PRESION	60	60	0	1.5	2	-0.5

Tabla 7.1 ANALISIS DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS POR LA SIMULACION

	REAL	SIMUL		REAL	SIMUL	
CORRIENTE	B2	B2		B6	B6	
FASE	LIQUIDO	LIQUIDO		LIQUIDO	LIQUIDO	
HIDROGENO	0	0		0	0	
METANO	0	0		0	0	
PROPANO	0	0		0	0	
2-MET PENT	0.02561213	1		0.19209097	0.19	
ACETONA	2.95837764	4.99		283.68525	271.58	
ISOPROPANOL	0.21292217	0.21		0	1.46	
MIBK	0.18281938	0.18		0	0.94	
DIBK	0.00820463	0.01		0	0	
AGUA	47.3890651	48.45		4.60107685	31.16	
SOSA						
TOTAL:			% ERROR			% ERROR
lbmol/hr	50.76	54.84	-7.45	288.48	305.33	-5.52
lb / hr	1060.35	1279.74	-17.14	16519.82	16519.82	0.00
			ERROR			ERROR
TEMP.	72	71.1	0.9	81	81.73	-0.73
PRESION	1.2	1.1	0.1	1.21	1.21	0

	REAL	SIMUL	
CORRIENTE	B7	B7	
FASE	LIQUIDO	LIQUIDO	
HIDROGENO	0	0	
METANO	0	0	
PROPANO	0	0	
2-MET PENT	0	0	
ACETONA	0.16709707	0	
ISOPROPANOL	0.79295154	0.01	
MIBK	56.1189427	64.61	
DIBK	2.41980517	2.78	
AGUA	116.666667	69.83	
SOSA			
TOTAL:			% ERROR
lbmol/hr	176.17	137.23	28.37
lb / hr	8117.40	8117.36	0.00
			ERROR
TEMP.	98	91.73	6.27
PRESION	1.3	1.3	0

Tabla 7.2 ANALISIS DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS POR LA SIMULACION

	REAL	SIMUL		REAL	SIMUL	
CORRIENTE	C4	C4		C5	C5	
FASE	VAPOR	VAPOR		LIQUIDO	LIQUIDO	
HIDROGENO	0.00	0.00		0.00	0.00	
METANO	0.00	0.00		0.00	0.00	
PROPANO	0.00	0.00		0.00	0.00	
2-MET PENT	0.00	0.00		0.00	0.00	
ACETONA	0.09	0.00		0.00	0.00	
ISOPROPANOL	0.30	0.00		0.00	0.00	
MIBK	55.70	64.62		55.18	62.10	
DIBK	2.40	2.77		2.40	2.77	
AGUA	8.15	4.89		0.00	0.00	
SOSA						
TOTAL:			% ERROR			% ERROR
lbmol/hr	66.65	72.28	-7.78	57.58	64.87	-11.24
lb / hr	6082.16	6947.14	-12.45	5858.37	6608.59	-11.35
			ERROR			ERROR
TEMP.	90	65	25	118	128	-10
PRESION	1	1	0	1.3	1.3	0

	REAL	SIMUL		REAL	SIMUL	
CORRIENTE	D4	D4		D5	D5	
FASE	VAPOR	VAPOR		LIQUIDO	LIQUIDO	
HIDROGENO	0.00	0.00		0.00	0.00	
METANO	0.00	0.00		0.00	0.00	
PROPANO	0.00	0.00		0.00	0.00	
2-MET PENT	0.00	0.00		0.00	0.00	
ACETONA	0.00	0.00		0.00	0.00	
ISOPROPANOL	0.00	0.00		0.00	0.00	
MIBK	54.74	62.10		0.44	0.00	
DIBK	0.23	0.30		2.17	2.47	
AGUA	0.00	0.00		0.00	0.00	
SOSA						
TOTAL:			% ERROR			% ERROR
lbmol/hr	54.97	62.40	-11.91	2.61	2.47	5.59
lb / hr	2500.00	2840.00	-11.97	159.70	159.70	0.00
			ERROR			ERROR
TEMP.	118	116.42	-0.42	170	177	-7
PRESION	1	1	0	1.3	1.3	0

Tabla 7.3 ANALISIS DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS POR LA SIMULACION

recuperara por domos casi la totalidad de la acetona, materia prima indispensable para la reacción.

En última sección (tabla 7.3) se compararon las corrientes presentes a la salida de cada torre, respetando las condiciones de operación, notándose que los productos obtenidos cumplen con las especificaciones requeridas para su venta.

## 7.2 ANALISIS DE LA PROPUESTA

Los resultados generados tras aplicar las modificaciones en las condiciones de operación muestran que es posible ahorrar energía y por lo tanto reducir los costos de operación de la planta. A continuación se presentan tablas comparativas entre los valores en condiciones normales y óptimas de operación, de las corrientes de salida de la torre terminal DA-501, los consumos de energía, así como también algunos aspectos económicos.

	NORMAL	OPTIMO		NORMAL	OPTIMO	
CORRIENTE	D4	D4		D5	D5	
FASE	VAPOR	VAPOR		LIQUIDO	LIQUIDO	
HIDROGENO	0.00	0.00		0.00	0.00	
METANO	0.00	0.00		0.00	0.00	
PROPANO	0.00	0.00		0.00	0.00	
2-MET PENT	0.00	0.00		0.00	0.00	
ACETONA	0.00	0.00		0.00	0.00	
ISOPROPANOL	0.00	0.00		0.00	0.00	
MIBK	54.74	59.58		0.44	2.55	
DIBK	0.23	0.00		2.17	2.74	
AGUA	0.00	0.00		0.00	0.00	
SOSA						
TOTAL:			% DIFERENCIA			% DIFERENCIA
lbmol/hr	54.97	59.58	-7.73	2.61	5.29	-50.70
lb / hr	2500.00	2707.13	-7.65	159.70	293.17	-45.53
			DIFERENCIA			DIFERENCIA
TEMP.	116	116.68	-0.68	170	145.06	24.94
PRESION	1	1	0	1.3	1.3	0

Tabla 7.4 ANALISIS DE LOS RESULTADOS OBTENIDOS POR LA SIMULACION

	CONSUMO DE ENERGIA (MMBTU/hr)		
	NORMAL	OPTIMO	AHORRO
REHERVIDOR	4.9584	2.7001	2.2583
CONDENSADOR	-4.6154	-2.7525	1.8629

Tabla 7.5 CONSUMO Y AHORRO ENERGETICO

GANANCIA		AHORRO	
<i>Cond. Normales</i>	<i>Cond. Optimas</i>	<i>(N\$/hr)</i>	<i>(N\$/año)</i>
N\$ 277.68 / hr	N\$ 313.9 / hr	36.22	286,862.4 *

Tabla 7.6 ASPECTOS ECONOMICOS DE LA PROPUESTA

\* Se considera que la planta opera 330 días al año

Como se puede observar, se logró así incrementar sustancialmente las ganancias de la planta, sin necesidad de hacer alguna inversión extra de capital, es decir, sin modificar la estructura de la misma.

**CAPITULO 8**

**CONCLUSIONES Y  
RECOMENDACIONES**

## 8.1 SIMULACION

Se puede destacar que la simulación representa bastante bien al proceso real, teniendo variaciones aceptables. El simulador ASPEN-PLUS demostró ser una herramienta confiable para el desarrollo de este trabajo. Podemos afirmar que todos y cada uno de los equipos cumplieron con sus funciones, esto es:

- Los productos obtenidos a la salida del reactor cumplen con las especificaciones indicadas en el diagrama de flujo de proceso.

- Los tres tanques tipo "flash" lograron separar de la salida del reactor los productos más ligeros ( $H_2$ ,  $CH_4$ ,  $C_3H_8$ ), permitiendo así que la alimentación a la torre DA-301 estuviera compuesta únicamente por los productos a destilar.

- La torre DA-301 presentó un comportamiento satisfactorio puesto que fue posible separar por los domos prácticamente toda la acetona que no logró reaccionar, del resto de la mezcla.

- El comportamiento observado después de simular la torre de destilación DA-401 fue el esperado; se separaron por el domo los compuestos ligeros (impurezas) presentes en la mezcla, permitiendo así que la entrada a la torre DA-501 estuviera compuesta únicamente por MIBK y DIBK.

- Por último, en la torre DA-501 se obtuvo por domos el MIBK, producto principal del proceso.

El manejo del simulador resultó ser bastante sencillo, aunque en ocasiones éste exigió de una mayor atención, obligándonos a realizar varios

intentos para elegir el conjunto de variables más adecuado, ya que el hecho de definir variables permitidas no garantiza que el sistema llegue a converger.

Por último vale la pena mencionar que ASPEN-PLUS demostró ser más rápido, preciso y versátil que otros simuladores con que cuenta el departamento de ingeniería de la Facultad.

## **8.2 PROPUESTA DE MEJORAMIENTO**

La estrategia empleada en la optimización de la planta es una de las más recomendables, ya que hoy en día existe un gran número de procesos que requieren ser mejorados sin modificar su estructura. El modificar únicamente las condiciones de operación permite que una planta incremente sus ganancias en el corto plazo, sin necesidad de grandes inversiones. El presente trabajo logró sus objetivos de mejoramiento, ya que hubo un aumento en las ganancias y una reducción en el consumo de energía.

## **8.3 TRABAJOS FUTUROS**

Durante la elaboración de esta tesis nos dimos cuenta de la posibilidad de desarrollar mucho más algunos de los temas presentados. Dichos temas pueden ser la materia de otros trabajos y los resumimos a continuación:

- Optimización del reactor empleando un modelo matemático más elaborado.

- Optimizar las condiciones de operación de toda la planta, partiendo de una evaluación del trabajo perdido.

- Disminuir el consumo de servicios auxiliares mediante una integración térmica de las corrientes de proceso.

**CAPITULO 9**

**BIBLIOGRAFIA**

Alonso, A., Giral, F., Propuesta de mejoramiento del tren de recuperación de vapores de la planta catalítica de Tula. Tesis. México: C.U., 1992. 107pp.

Balzhiser, R.E., Samuels M.R. Termodinámica para ingenieros. Cali: Prentice Hall, 1977. 610 pp.

Bazúa Rueda Enrique "*Notas del curso de propiedades termodinámicas*" México: Facultad de Química, UNAM, 1990.

Boston, J.F., et. al. "*Successive Quadratic Programming in Sequential Modular Process Optimization*". Massachusetts Institute of Technology, 1986.

CELANESE MEXICANA, S.A., Anteproyecto "*MIBK ruta directa*". 1980. 42 pp.

Chávez Chavarría Ambrosio, Un nuevo método para la simulación de torres de destilación de multicomponentes. Tesis. México: UNAM, ENEP Zaragoza, 1985. 236 pp.

Edgar, T.F., Himmelblau, D.M., Optimization of Chemical Processes. McGraw Hill, 1989. 652 pp.

Evans, Lawrence B. "*Advances in Process Flowsheeting Systems*" en Mah, R. S. H., Seider, W.D. Foundations of Computer-Aided Chemical Process Design. V.1. New York: Engineering Foundation, 1981. p. 425-469.

Evans, Lawrence B. "*Computer-Aided Design (CAD): Advances in Process Flowsheeting Systems*" Gran Bretaña. Computers & Chemical Engineering. V. 3 pp. 329-352, 1989.

González Ayala Laura Patricia. Simulación de torres de destilación multicomponente usando la ecuación de estado PRSV con diferentes reglas de mezclado. Tesis. México: C.U., 1992. 172 pp.

Henley, E.J., Seader, J.D. Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química. México: Reverté, 1990. 814 p.

Holland, Charles D. Fundamentos de destilación de mezclas multicomponentes. México: Limusa, 1988. 705 pp.

Husain, Asghar. Chemical Process Simulation. New Delhi: Wiley Eastern Ltd., 1986. 376 pp.

Kenney W.F. Energy Conservation in the Process Industries. Orlando: Academic Press, 1984. 329 pp.

Luyben, William M. Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers. 2a ed. Singapur: McGraw Hill, 1989. 726 pp.

Montiel M. Celestino, Gutiérrez C. David. "*Simulación y optimización de una planta de etileno*" Departamento de ingeniería química, Facultad de Química, UNAM.

Ojeda Ramos Miguel, Métodos modulares simultáneos para la simulación de procesos químicos en estado estacionario. Tesis. México: UNAM, ENEP Zaragoza, 1987. 562 pp.

Peters M.S., Timmerhaus K.D. Plant Design and Economics for Chemical Engineers. Singapur: McGraw Hill, 1991. 910 pp.

Smith, J.M., Van Ness, H.C. Introducción a la termodinámica en ingeniería química. México: McGraw Hill, 1989. 717 pp.

UOP, Equipo de Proceso. "*Platos de alta capacidad para destilación, absorción y extracción*" Houston, 1991.

Urbina del Raso, Alberto. "*El método McCabe-Thiele según lo impartía el maestro Estanislao Ramírez*" Educación Química, V1, No. 4. Oct. 1990, pp. 180-185.

Vogler, T.C., Weissman, W. "*Thermodynamic Availability Analysis for Maximizing a System's Efficiency*". Chemical Engineering Progress. Marzo, 1988. pp. 35-42.

Wang, J.C., "Fibonacci Search for Optimal Feed Location". Chemical Engineering Community. Vol. 4. 1980. pp. 651-663.

Watanabe, Y. et. al., "Synthesis of MIBK from acetone and hydrogen catalyzed by palladium supported on zirconium phosphate". Bulletin Chemical Soc. of Japan. Vol. 47. 1974. pp. 2922-2925.

Westerberg A.W. et al. Process Flowsheeting. Melbourne: Cambridge, 1976. 345 pp.

Yasuharu, C., et. al. "MIBK by the direct conversion of acetone and hydrogen". Bulletin of Japan Petroleum Institute. Vol. 16. 1974. pp. 55-59.

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Costing Manual, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Data Regression Manual, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Electrolytes Manual, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Guide to Physical Properties, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Interactive Simulation, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS ModelManager and ASPEN PLUS, Installation and Reference for the PC, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS ModelManager, Getting Started and Tutorials for the PC., 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Notes on Interfaces and User Models, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Solids Manual, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Stream Libraries and Insert Libraries, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS Summary File Toolkit, 1991.*

Aspen Technology Inc. *ASPEN-PLUS User Guide, 1991.*