

69



**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA  
DE MÉXICO**

**FACULTAD DE QUIMICA**

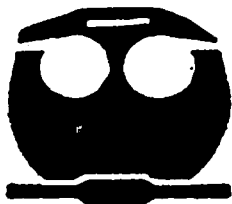
**DESARROLLO E IMPLEMENTACION DE LA INTERFASE  
GRAFICA DEL SIMULADOR GENERAL  
DE PROCESOS / FACULTAD DE QUIMICA.**

**T E S I S**

**QUE PARA OBTENER EL TITULO DE  
INGENIERO QUIMICO**

**P R E S E N T A**

**ALEJANDRO IVAN HERNANDEZ MARTINEZ**



**MEXICO, D.F.**



**2 0 0 2**



Universidad Nacional  
Autónoma de México

Dirección General de Bibliotecas de la UNAM

**Biblioteca Central**



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

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

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

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

## Jurado Asignado

Presidente: Prof. Manuel Vázquez Islas  
Vocal: Prof. Celestino Montiel Maldonado  
Secretario: Prof. Pedro Roquero Tejeda  
1er. Suplente: Prof. Martín Rivera Toledo  
2o. Suplente: Prof. Francisco Javier Garfías Vasquez

### Sitio donde se desarrolló el Tema:

Laboratorio de Simulación y Optimización de Procesos  
Facultad de Química, Edificio "E", Ciudad Universitaria

### Asesor del tema:



---

Ing. Celestino Montiel Maldonado

### Sustentante:

Hernández Martínez Alejandro I.  
Alejandro Iván Hernández Martínez.

# DEDICATORIAS

## A Dios ...

Por todo aquello con lo que me ha bendecido.

## A mi madre...

Por todo su amor y sacrificio para que yo lograra mis metas.  
Por el apoyo que dio a mis decisiones, por hacer de mí lo que soy  
y por enseñarme lo que es la fortaleza ante la adversidad.

## A mi familia ...

Por haber sido siempre tan buenos conmigo,  
por escucharme, comprenderme y apoyarme incondicionalmente.

## A mis primos...

Irving, Cesar, Jorge, Omar, Eduardo, Diego, Israel, Lizbeth, Vanesa,  
Sandra, Marco, Fabián, y en especial a José Alejandro "el Inge"  
por ser siempre todos, además de primos, mis mejores amigos.

## A mis compañeros de carrera...

Por compartir conmigo sus alegrías y tristezas, por apoyarme siempre,  
por mostrarme lo valioso e importante que es trabajar en equipo  
y sobre todo por brindarme su amistad en los momentos más difíciles.

## AGRADECIMIENTOS

A nuestra Máxima Casa de Estudios la Universidad Nacional Autónoma de México, cuyo nombre procuraré siempre poner muy en alto.

A la Facultad de Química, por el excelente nivel académico con el que forma a los futuros profesionales de la industria química de este país.

A todos mis profesores, por poner siempre su mejor esfuerzo en impartir sus conocimientos, por su paciencia y sobre todo por tan noble acción.

Al profesor Celestino, por apoyarme en la realización de este trabajo, por todas sus enseñanzas y sobre todo por orientarme en la realización de mis metas no sólo como profesor, sino como amigo.

# INDICE

<b>I. INTRODUCCIÓN</b>	<b>1</b>
<b>II. GENERALIDADES</b>	<b>2</b>
<b>II.1. INGENIERÍA QUÍMICA E INGENIERÍA DE PROCESOS</b>	<b>4</b>
<b>II.2. DISEÑO DE PROCESOS</b>	<b>9</b>
<b>II.3. SÍNTESIS DE PROCESOS</b>	<b>11</b>
<b>II.4. ANÁLISIS DE PROCESOS</b>	<b>12</b>
<b>II.5. SIMULACIÓN DE PROCESOS</b>	<b>13</b>
- IMPORTANCIA DE LA SIMULACIÓN DE PROCESOS	14
- PROCEDIMIENTO PARA LA SIMULACIÓN DE UN PROCESO	14
<b>II.6. OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS</b>	<b>16</b>
<b>III. SIMULACIÓN DE PROCESOS</b>	<b>19</b>
<b>III.1. ALGORITMOS</b>	<b>22</b>
<b>III.2. SIMULADOR DE PROCESOS</b>	<b>22</b>
<b>III.3. ESTADOS DE INTERÉS EN LA SIMULACIÓN DE PROCESOS</b>	<b>24</b>
- ESTADO ESTACIONARIO	24
- RÉGIMEN DINÁMICO	25
<b>III.4. ENFOQUES DE LA SIMULACIÓN</b>	<b>25</b>
- MODULAR SECUENCIAL	26
- ORIENTADO A ECUACIONES	27
- MODULAR SIMULTÁNEO	29
<b>IV. SGP-FQ: SIMULADOR GENERAL DE PROCESOS / FACULTAD DE QUÍMICA</b>	<b>33</b>
<b>IV.1. ANTECEDENTES</b>	<b>34</b>
<b>IV.2. ESTRUCTURACIÓN</b>	<b>35</b>
- CARACTERÍSTICAS DEL MÓDULO DE CÁLCULO	36
- MODELOS DE OPERACIONES UNITARIAS	37
- INTERFASE GRÁFICA DE USUARIO	39
- CRITERIOS DE DISEÑO PARA LA INTERFASE GRÁFICA	41

<b>V. APLICACIONES DEL SGP-FQ</b>	<b>43</b>
<b>V.1. PROBLEMA DE CAVETT</b>	<b>43</b>
<b>V.2. COLUMNA DE DESTILACIÓN</b>	<b>47</b>
<b>VI. ANÁLISIS DE RESULTADOS</b>	<b>50</b>
<b>VI.1. PROBLEMA DE CAVETT</b>	<b>50</b>
<b>VI.2. COLUMNA DE DESTILACIÓN</b>	<b>52</b>
<b>VII. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES</b>	<b>56</b>
<b>VIII. BIBLIOGRAFÍA</b>	<b>58</b>
<b>IX. APÉNDICES</b>	<b>60</b>
<b>IX.1. MANUAL DE USUARIO DEL SGP-FQ</b>	<b>60</b>
- REQUISITOS MÍNIMOS:	60
- INSTALACIÓN:	60
- AYUDA Y ASISTENTES DISPONIBLES.	61
- CONSTRUCCIÓN DE DIAGRAMAS DE PROCESO.	61
- DEFINIR COMPONENTES	63
- DEFINIR CORRIENTES DE ENTRADA	63
- PARÁMETROS DE LOS EQUIPOS	64
<b>IX.2. BANCO DE DATOS DE COMPONENTES PUROS DEL SIMULADOR GENERAL DE PROCESOS - FACULTAD DE QUÍMICA.</b>	<b>67</b>
<b>IX.3. ESTRUCTURA DEL ARCHIVO DE RESULTADOS DEL SIMULADOR GENERAL DE PROCESOS - FACULTAD DE QUÍMICA.</b>	<b>70</b>

# I. INTRODUCCIÓN

En este trabajo se presenta el desarrollo e Implementación de la Interfase gráfica del Simulador General de Procesos - Facultad de Química. El objetivo fundamental es hacer de este simulador, un programa fácil de usar y compatible con los sistemas operativos de mayor uso en la actualidad.

En el caso particular del Simulador General de Procesos - Facultad de Química, la interfase gráfica fue desarrollada en un lenguaje diferente al del módulo de cálculo, ya que lo que se buscaba era hacerlo funcional, y no tanto incorporarlo como parte de un solo programa, así que su función real es recopilar la información del proceso, organizarla y mandarla al módulo de cálculo para obtener posteriormente de éste, los resultados de la simulación del proceso,

La estructura en la que aparecen reportados los resultados es la misma que la que se utiliza en los simuladores comerciales, apareciendo primeramente, una descripción de los datos suministrados por el usuario, para verificar que correspondan al proceso que se está Simulando, y posteriormente, los balances de materia y energía reportados como una tabla en la que se listan las propiedades y composiciones de todas las corrientes de proceso.

Este simulador cuenta con la ventaja de poder ser modificado por el usuario, para incluir modelos de operaciones unitarias adicionales a los que contiene el programa, con el fin de acoplarlo a sus necesidades específicas.

Como ocurre con otros simuladores, el Simulador General de Procesos - Facultad de Química fue construido bajo el enfoque modular secuencial, y es capaz de identificar ciclos y corrientes de recirculación de la estructura del proceso para hallar solución de manera iterativa con métodos tales como Wegstein y Broyden.

Podemos decir a grandes rasgos, que las capacidades de este simulador son comparables a las de los simuladores comerciales; en la parte final de este trabajo se presenta la comparación para varios procesos de interés, como son el problema de Cavett (1963), donde puede apreciarse además de los resultados, el patrón de convergencia que presenta este simulador.



## II. GENERALIDADES

Tal vez una de las tareas más complejas y exigentes que tiene que afrontar un Ingeniero Químico es el Diseño de Procesos. Es la esencia misma de su educación y el punto donde convergen por una parte, sus conocimientos técnicos y experiencia industrial, y por otra, características propias de su ser, como son la intuición y el ingenio.

Contra lo que pudiera pensarse, el Diseño de Procesos como disciplina formal dentro de la Ingeniería Química, es de un desarrollo relativamente reciente, alentado por los cambios estructurales en la economía mundial así como en los sistemas de producción y comercialización, los cuales hicieron necesaria la revisión de las técnicas relativas a la concepción de los procesos químicos.

Cuando 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, los procesos fueron diseñados en una forma totalmente empírica e intuitiva, situación que se repite continuamente desde la Revolución Industrial hasta finales de la Segunda Guerra Mundial. Al finalizar la guerra 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; por otra parte, existía un ímpetu innovador creado por los anhelos de reconstrucción económica, todo lo cual conformaba un clima propicio para que el empirismo disminuyera y diera paso al espíritu científico dentro del Diseño de Procesos.

Es precisamente en la década de los cincuentas, cuando se sientan las bases formales del Diseño de Procesos, logrando altos niveles de creación, creando procesos industriales muy complejos, cuyo desarrollo y puesta en marcha exigían una gran conjunción de conocimientos referentes a los más variados campos de la ciencia y la tecnología.

Es a principios de los sesentas cuando se propone el término Ingeniería de Procesos, con el objeto de agrupar los campos de la Ingeniería Química destinados a indicar cómo planear, diseñar, operar y controlar las diferentes operaciones unitarias de un proceso químico. Esta disciplina surge en el campo académico a partir de la necesidad de reordenar todo el cúmulo de información

existente, así como la de fijar las pautas que habría de seguir el Diseño de Procesos, con el objeto de satisfacer los requerimientos de la expansión industrial.

Sin embargo, el impulso decisivo para el desarrollo del Diseño de Procesos fue dado a mediados de los sesentas, a través de dos sucesos, independientes entre sí. Primero, la productividad industrial muestra los primeros signos de descenso en sus tasas de crecimiento; la estructura productiva existente enfrenta sus primeras limitaciones serias en cuanto a la disponibilidad de materias primas y energía, lo que obliga a un estudio a fondo de las eficiencias y puntos críticos de los procesos productivos, tanto ya existentes, como por ser creados, promoviendo diseños con complejos esquemas de reutilización de materia y de integración de energía. Segundo, anteriormente la computación, como un auxiliar en el diseño de procesos, era prácticamente desconocida por el Ingeniero Químico; sin embargo, el explosivo desarrollo de las computadoras y la creación de lenguajes de alto nivel, abren nuevas y amplias perspectivas a la creación de Procesos Químicos más complejos y eficientes.

Ahora, de pronto, existe la necesidad y los medios para que todo el cúmulo de conocimientos generados desde los años cincuentas sea puesto a prueba, generando resultados que tuvieron un efecto multiplicador hasta constituir, en la actualidad, uno de los campos de mayor desarrollo dentro de la Ingeniería Química: el Diseño de Procesos Asistido por Computadora.

Los primeros pasos al respecto están representados por programas aislados, aplicables a operaciones unitarias y procesos muy específicos, con grandes limitaciones de flexibilidad. Actualmente, la complejidad de los procesos industriales hace imperativo el uso de grandes sistemas computacionales, capaces de manejar un proceso como un todo, pudiéndose afirmar que hoy en día ninguna gran planta química o petroquímica podría ser construida sin realizar la simulación y diseño del proceso en una computadora.

Sin embargo, la implementación de tales sistemas exige el uso de herramientas matemáticas sofisticadas, al grado de promover la creación, desarrollo y perfeccionamiento de técnicas especializadas para abordar los problemas muy particulares que se presentan al diseñar procesos químicos.

## II.1. Ingeniería Química e Ingeniería de Procesos

El Diseño de Procesos Químicos ha sufrido una rápida y muy significativa evolución, tal y como fue planteado en la sección anterior. De ser una actividad netamente empírica y aislada, fue nutriéndose de los avances de los más diversos campos de la ciencia y la técnica, hasta convertirse en un campo de investigación formal por sí mismo.

En el seno de la Ingeniería Química han madurado nuevas concepciones y surgido innovadoras tendencias que la enriquecen y la convierten en una disciplina cada vez más compleja y en donde el Diseño de Procesos adquiere una nueva dimensión.

A partir de 1963 se utilizó por primera vez, dentro de la Ingeniería Química, la terminología de Ingeniería de Procesos, aplicada a la dinámica y control de algunas operaciones unitarias, sin abordar conceptos de optimización en la toma de decisiones.

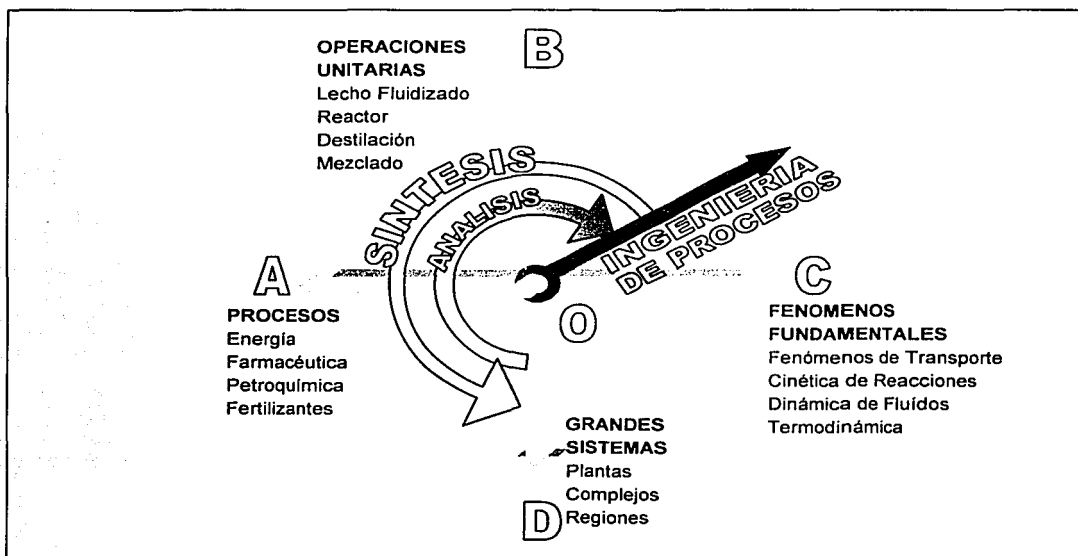
Su significado y contenido ha cambiado con el tiempo y desde la fecha en que se creó esta terminología, buscando recopilar y ordenar la información que estaba siendo generada en forma abundante, pero desarticulada, actualmente la Ingeniería de Procesos se ha constituido como un campo académico y tecnológico referente a las metodologías para la toma de decisiones en la Ingeniería Química. De aquí que la Ingeniería de Procesos pueda definirse como el conjunto de actividades encaminadas hacia la creación, cuantificación y análisis de esquemas de flujo proceso, los cuales formaran parte de una planta química, fácilmente operable y segura.

Debe notarse que esta concepción es muy amplia. Si bien es cierto, la Ingeniería Química puede partir desde el punto de vista de una operación unitaria, su objetivo final es la eficiencia en el diseño y operación de los procesos; sin embargo, no debe ignorarse que estos procesos no existen en forma independiente unos de otros, por lo tanto, es razonable considerarlos como subsistemas que forman parte de otros sistemas mayores, tal y como será descrito más adelante.

Los procesos químicos están compuestos de un número relativamente pequeño de operaciones unitarias, comparado con el gran número de procesos existentes. Desde este punto de vista todos los procesos deben ser construidos

razonablemente 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, haciendo un barrido de análisis del punto A al punto B en la Figura 2.1

Con el objeto de desarrollar nuevas operaciones unitarias y perfeccionar las ya existentes, es importante entender cuantitativamente los fenómenos fundamentales que son generados en ellas. De esta concepción han surgido las llamadas Ciencias de la Ingeniería Química, tales como Fenómenos de Transporte, Dinámica de Fluidos, Termodinámica, Cinética de Reacciones Químicas, y otras que han venido desarrollándose desde los años cincuentas.



**Figura 2.1 Ingeniería de Procesos en Ingeniería Química**

En otras palabras, cada operación unitaria puede ser identificada como un sistema combinado de fenómenos fundamentales, haciendo un barrido de análisis del punto B al punto C en la Figura 2.1

Hasta aquí se han considerado tres polos fundamentales de información:

- Fenómenos Fundamentales
- Operaciones Unitarias
- Procesos Químicos

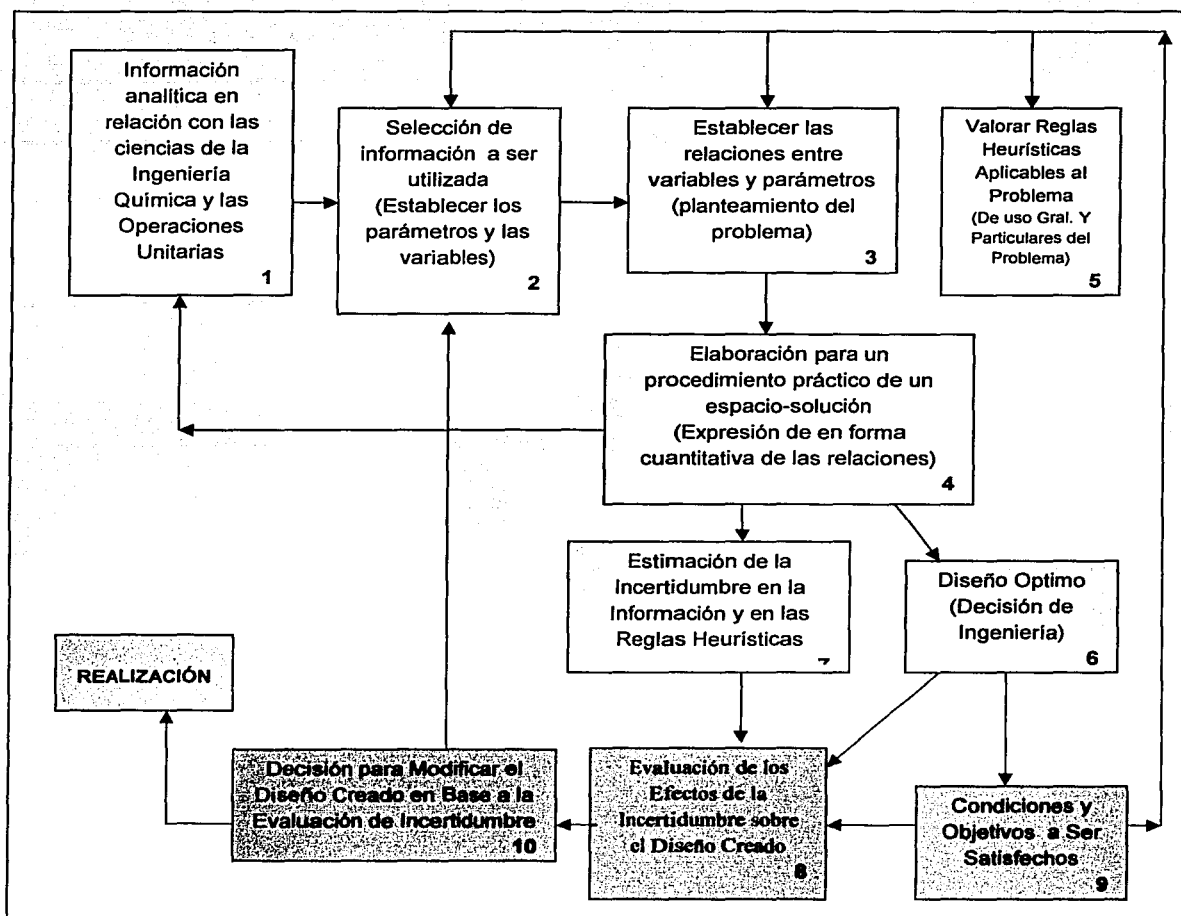
Sin embargo, falta la manera de relacionar en forma coherente y funcional estos conocimientos, puesto que la información analítica de los fenómenos fundamentales puede ser útil para tomar decisiones sobre las operaciones unitarias y la información de éstas influirá sobre los Procesos Químicos.

Ante tal situación, la Ingeniería de Procesos deberá proporcionar metodologías destinadas a cubrir los anteriores requerimientos. Con referencia a la figura 2.1, la flecha a modo de manecilla de reloj, que representa a la Ingeniería de Procesos, rota a través de todos los cuadrantes y cumple la tarea primordial de relacionar lo particular con lo general, en un sentido de síntesis para generar procesos, o en un sentido de análisis que nos lleva a los fenómenos fundamentales.

Recordando el hecho de que los procesos químicos no existen independientemente de su entorno, se debe tener en cuenta la existencia de sistemas mayores, constituidos a partir de una simple empresa, creciendo hasta constituir complejos industriales y llegando a influir sobre las políticas energéticas y ambientales de toda una nación, sistemas de los cuales los procesos químicos son sólo subsistemas. En la Figura 2.1, todos los procesos químicos representados en el eje OA, deben ser responsables de los grandes sistemas contenidos en el eje OD, es decir, la Ingeniería de Procesos deberá contribuir a planear complejos químicos, a resolver problemas ambientales y energéticos, tanto en el ámbito regional, como nacional y tomar decisiones de ingeniería acerca de otros problemas globales.

Ahora es posible entender que la motivación de introducir la terminología de Ingeniería de Procesos dentro de la Ingeniería Química, radica en que el diseño y operación de un proceso deberá cumplir múltiples objetivos, la mayoría de ellos fuertemente relacionados.

Anteriormente se mencionó que una de las tareas de la Ingeniería de Procesos era la de proporcionar una metodología tendiente a relacionar eficientemente Fenómenos Fundamentales - Operaciones Unitarias - Procesos Químicos, con el objeto de tomar decisiones acerca de problemas de diseño, operación y control, y para tal efecto se muestra en la Figura 2.2, una estructura general de la forma en que se aplica la Ingeniería de Procesos, y de la cual se pueden observar varios rasgos importantes.



**Figura 2.2 Metodología de la Ingeniería de Procesos.**

El punto 1 se refiere a la recopilación de información analítica con respecto a varias de las Ciencias de la Ingeniería Química (Dinámica de Fluidos, Termodinámica, Fenómenos de Transporte, etc.), y a las Operaciones Unitarias (reactores, destilación, mezclado, etc).

En el punto 2 se realiza la selección de la información que será útil. Aquí se presenta la dificultad de precisar que cantidad de información será utilizada en forma práctica. No es costumbre emplear la totalidad de la información recopilada, puesto que existe, en la mayoría de los casos, un cierto nivel de

precisión para cada condición u objetivo a ser satisfechos, además no todos los tipos de información disponibles tienen el mismo efecto sobre los objetivos y variables de decisión.

Los puntos 3, 4 y 5 se refieren esencialmente a la identificación del sistema que se va a manejar. A pesar de existir extensos trabajos acerca de cómo identificar cuantitativamente la relación entre variables y parámetros, aún son utilizadas las determinaciones empíricas e intuitivas, obtenidas a partir de la investigación analítica y representada en forma de reglas heurísticas, las que son de capital importancia, principalmente en la etapa inicial de diseño. Con estos conocimientos se elabora un procedimiento práctico que conduzca a obtener un espacio de solución, en base a la definición cuantitativa de las relaciones entre las variables de decisión y de estado, junto con los parámetros del sistema.

El punto 6, referente al Diseño de Procesos, es de suma importancia en el presente trabajo y será discutido con mayor amplitud en las secciones siguientes.

En el punto 7 se estudia el grado de incertidumbre existente al utilizar la información disponible junto con las reglas heurísticas, para que en el punto 8 sea evaluado su efecto sobre el diseño obtenido en el punto 6. No se debe pasar por alto que la incertidumbre en la información de un sistema de proceso se expresa siempre mediante cifras estadísticas y estocásticas, pero que las decisiones de ingeniería (diseño del proceso), deben ser proporcionadas en forma determinística.

El punto 9 se refiere a las condiciones y objetivos que deberá satisfacer el sistema que se va a diseñar y por tanto participa prácticamente en todas y cada una de las etapas de la estructura de la Figura 2.2.

En el punto 10, con base a la evaluación de la incertidumbre, se deberá decidir si el proceso diseñado cumple o no con las condiciones y objetivos iniciales, a fin de promover su realización o repetir el ciclo creativo, recurriendo a la selección de mayor cantidad y calidad de información.

Se puede concluir que la creación de un Proceso Químico es una tarea interdisciplinaria y que debe responder a múltiples objetivos, algunos de los cuales pueden estar en conflicto, por lo tanto, se necesitan establecer con claridad las prioridades, ponderaciones y criterios de decisión, a fin de lograr un proceso que cumpla con las necesidades existentes en una forma adecuada,

minimizando la incertidumbre y elevando la eficiencia, sobre la base de un diseño funcional y flexible.

## **II.2. Diseño de Procesos**

En la sección anterior se ubicó al Diseño de Procesos dentro del marco de la Ingeniería Química en general y en forma particular dentro de la Ingeniería de Procesos. También se presentó una estructura cuyo punto central es la obtención del mejor diseño.

El Diseño de Procesos forma parte de las primeras etapas en el proyecto global para la realización de una planta química y para ejemplificar esto, en la Figura 2.3 se muestran las principales áreas que considera el proyecto de creación para una planta química típica, desde la concepción del proceso hasta la construcción de las instalaciones.

El proyecto comienza con su etapa conceptual, es decir, se identifican las necesidades que cubrirá y una aproximación global a su solución, conteniendo estudios de factibilidad tanto técnica como económica. A continuación se inicia la etapa de Ingeniería de Procesos propiamente dicha, representada esencialmente por el Diseño del Proceso, generando los diagramas de flujo de proceso, balances de masa y energía y especificaciones para la construcción del equipo y tuberías, integrando una estructura funcional de proceso, como se ilustra en la figura 2.3.



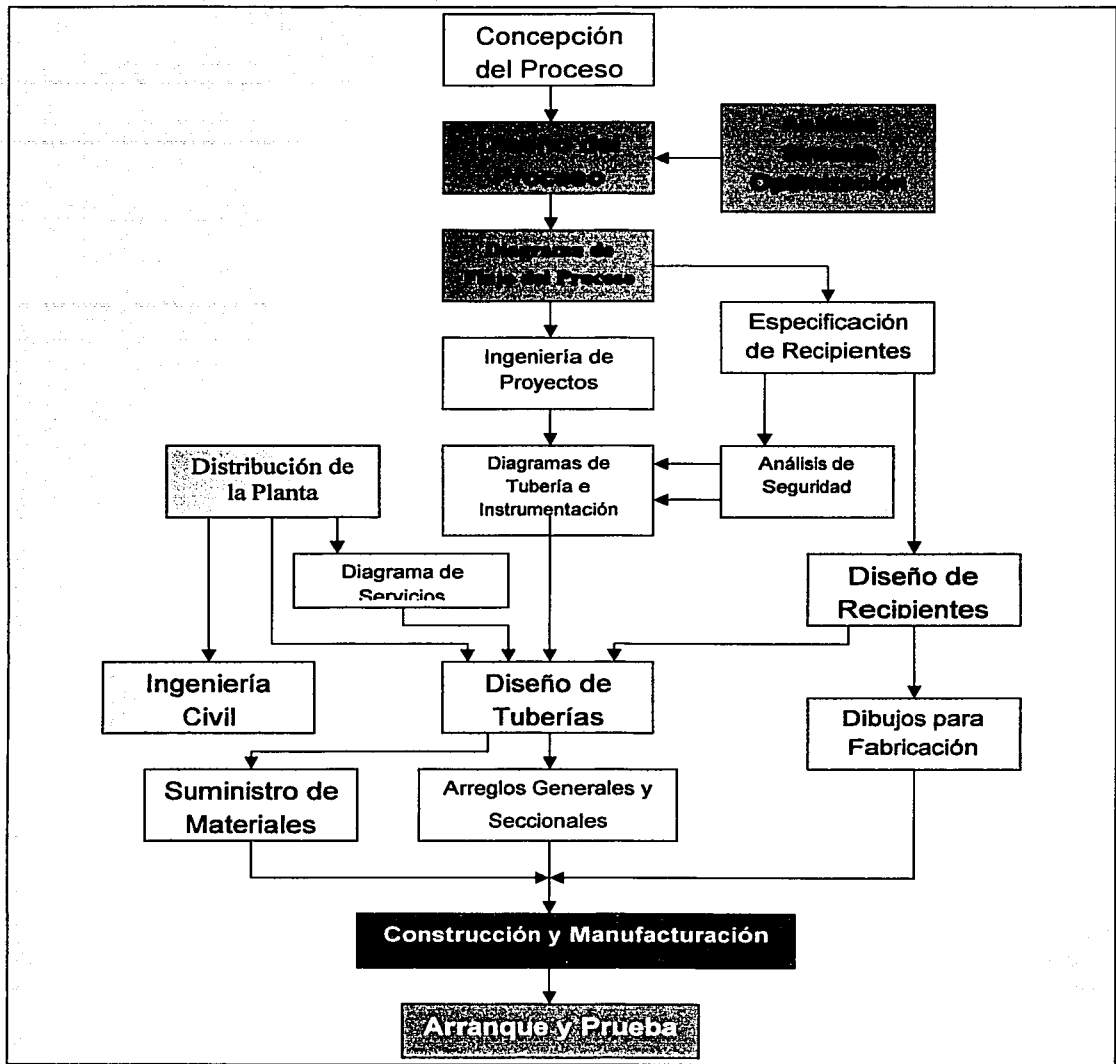


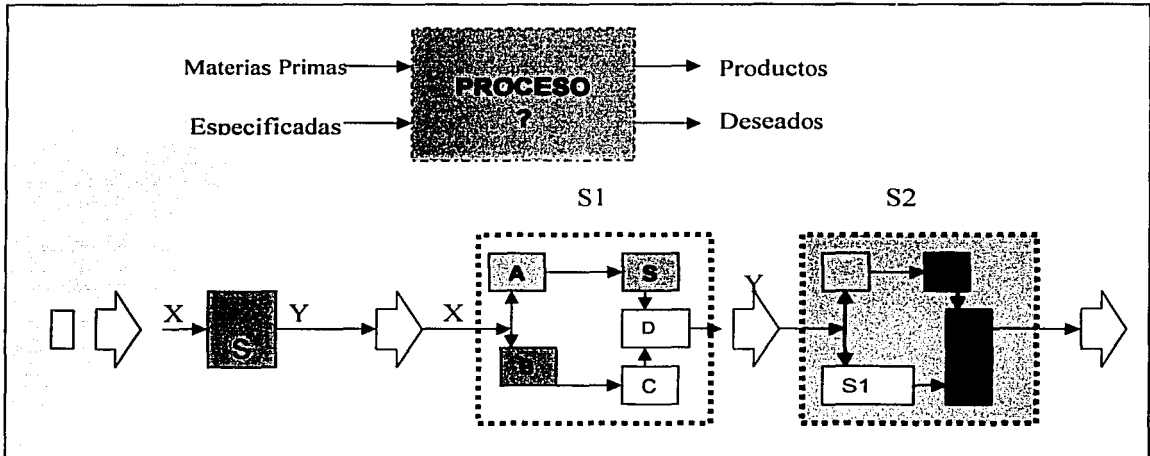
Figura 2.3. Proyecto Total para el Diseño y Construcción

### II.3. Síntesis de Procesos

Es la etapa inventiva en el diseño, en la cual se deciden las unidades de proceso requeridas y su interconexión, es decir, se proponen tanto la estructura como los flujos de materia y energía, necesarios para obtener los productos deseados.

A partir de una situación existente, estando presentes tanto una necesidad social como una oportunidad económica, se conciben una serie de ideas que involucran materias primas y una secuencia de operaciones que logran su transformación en los productos deseados.

Usualmente los productos de un sistema son especificados con claridad, mientras que las materias primas pueden ser especificadas con exactitud, o bien, formar parte de un conjunto de condiciones disponibles, como se muestra en la Figura 2.4.



**Figura 2.4. Concepto de la etapa de Síntesis**

En cualquier caso, el diseñador deberá identificar la naturaleza y estructura del bloque desconocido, en una forma en que los objetivos iniciales sean alcanzados de la mejor manera.

La etapa de síntesis puede ser usada para diseñar un proceso desde cero, o bien para diseñar y proponer modificaciones a un diseño existente.

## II.4. Análisis de Procesos

Desde el punto de vista de la Ingeniería de Procesos, la etapa de Análisis consiste en descomponer el sistema objetivo (en este caso, la estructura de proceso propuesta), en varios subsistemas (operaciones unitarias, corrientes de proceso, ciclos de recirculación, etc.), definiendo las relaciones entre cada uno.

Una vez elegida cierta estructura de proceso propuesta, se establecen las bases de diseño, las cuales consisten en la determinación de las variables de diseño, la elección de los valores de las variables de diseño fijas o dependientes y la selección de los modelos matemáticos para todas y cada una de las operaciones del proceso, para las correlaciones de propiedades termofísicas y servicios auxiliares del proceso.

A continuación se determina una estrategia de diseño, la cual incluye la estimación inicial de los valores para las variables de diseño no fijadas (variables independientes, libres o manipuladas). También se procede a elegir los métodos de cálculo y criterios de convergencia adecuados para desarrollar el balance de materia y energía.

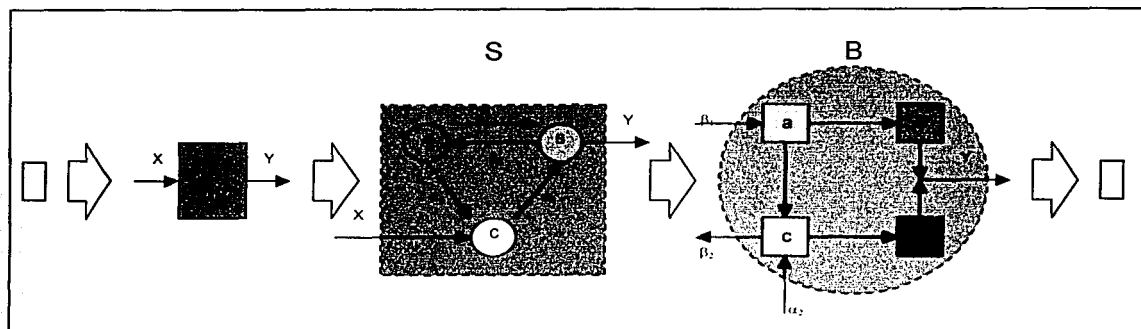
Una vez resumida toda la información anterior se procede a transformarla a fin de producir un diseño del proceso. Esta etapa comprende principalmente, en la obtención del balance de materia y energía, a través de simulación en estado estacionario. Otras actividades que contribuyen al diseño son la obtención de información resumida en cada corriente de proceso, información acerca de los requerimientos de servicios auxiliares, presentación del diagrama de flujo de proceso, análisis termodinámicos, etc.

Hasta este nivel de desarrollo se tienen elementos suficientes para realizar un estudio económico preliminar, considerando aspectos tales como el del capital requerido, costos de operación, criterios de plausibilidad, etc.

El siguiente paso es la confrontación de aspectos técnicos y económicos mediante la consideración de factores tales como la eficiencia termodinámica, eficiencia de operación, riesgos de salud, seguridad y ambientales, etc.

La forma en que el Análisis opera sobre la estructura del proceso propuesta, es aplicando total o parcialmente las bases de diseño con el objeto de definir las

condiciones de salida, que antes del análisis eran desconocidas, como se muestra en la figura 2.5.



**Figura 2.5. Análisis aplicado a una estructura de proceso**

Desde el punto de vista de la Ingeniería de Procesos, la etapa de Análisis consiste en descomponer el sistema objetivo en varios subsistemas (operaciones unitarias, corrientes de proceso, ciclos de recirculación, etc.), definiendo las relaciones entre cada uno.

## II.5. Simulación de Procesos

El proceso de interés es usualmente llamado un sistema, y para estudiarlo tenemos con frecuencia que hacer una serie de suposiciones acerca de como trabaja éste. Estas suposiciones las cuales usualmente toman la forma de relaciones matemáticas o lógicas, constituyen un modelo, el cual es usado para probar y obtener alguna información de como se comporta el sistema correspondiente.

En el mundo real los sistemas son complejos y estos modelos deben ser analizados por medio de la simulación. En una simulación se usa la computadora para evaluar un modelo numéricamente en un periodo de tiempo de interés, y los datos son resumidos para estimar las características verdaderas del modelo.

La Simulación de Procesos evalúa cuantitativamente las posibles alternativas que nacen de la síntesis y análisis de procesos, recurriendo para ello a modelos matemáticos que representan los fenómenos que ocurren en el proceso.

Este trabajo se centra en la Simulación de Procesos asistida por Computadora, así como el desarrollo de un simulador de procesos, por lo que posteriormente, se detallarán varios de los aspectos relevantes de la Simulación de Procesos y sus aplicaciones.

#### - Importancia de la Simulación de Procesos

La posibilidad de disponer de información y capacidad de reproducción de fenómenos aislados y de los efectos de sus interacciones permitirá diseñar procesos en los cuales, cada cambio pueda ser analizado por separado para simplificar su estudio.

La Simulación de Procesos hace posible el analizar la interacción de distintos fenómenos ordenados de múltiples maneras para estudiar el efecto de las variables que afectan de manera importante el desarrollo del proceso y que se ha denominado estudios de Sensibilidad con el fin de determinar en qué condiciones un proceso ofrece mayor seguridad operativa, es más rentable, genera más beneficios, etc.

#### - Procedimiento para la simulación de un proceso

La siguiente es una guía de carácter ilustrativo sobre cómo se lleva a cabo la simulación de un proceso. Cada etapa representa una serie de tareas que deben ser completadas para pasar a la siguiente etapa, la secuencia en la que se llevan a cabo estas etapas, se ilustra mediante flechas en la figura 2.6.

Las etapas principales de este procedimiento son:

- Planteamiento del Problema. Esta etapa, consiste primeramente, en la construcción del diagrama de flujo del proceso. En este, se plasman todos los equipos que intervienen en el proceso, las corrientes que los interconectan, así como las corrientes de alimentación y de productos.
- Identificación de los grados de libertad: los grados de libertad nos dicen cuántas de las variables debemos fijar, para especificar una condición de operación del proceso.

- Elección del comportamiento o tipo en el que se va a simular el problema: Puede ser Estado estacionario o dinámico, las características de cada uno se citan más adelante.
- Elección de los modelos para el cálculo de los diferentes equipos del proceso, así como establecimiento del modo de operación y parámetros requeridos por cada modelo.
- Elección del o los modelos termodinámicos para el cálculo de propiedades termofísicas.
- Identificación de la estructura de Proceso. Esto es, si están presentes ciclos y corrientes de recirculación, cuántos son y cuales equipos están involucrados en los mismos.
- Si la estructura de proceso presenta ciclos de recirculación, se deberá establecer una estrategia de solución de los mismos, pues en estos casos se presentan dificultades especiales en el cálculo de los balances de materia y energía.
- Establecimiento de las condiciones de operación: implica definir los parámetros con los que se van a modelar las operaciones que componen el proceso.
- Cálculo de los balances de materia y energía, con el objeto de conocer los flujos, composiciones y condiciones presentes en las corrientes y equipos que conforman el proceso
- Generación y análisis de resultados: En esta etapa, se detallan los resultados de los cálculos realizados para las condiciones de proceso que se hayan fijado.

Las etapas mencionadas, se muestran en figura 2.6 como un diagrama de flujo. Como se mencionó anteriormente, esta serie de pasos constituye solamente una parte del esquema global mostrado en la figura 2.3

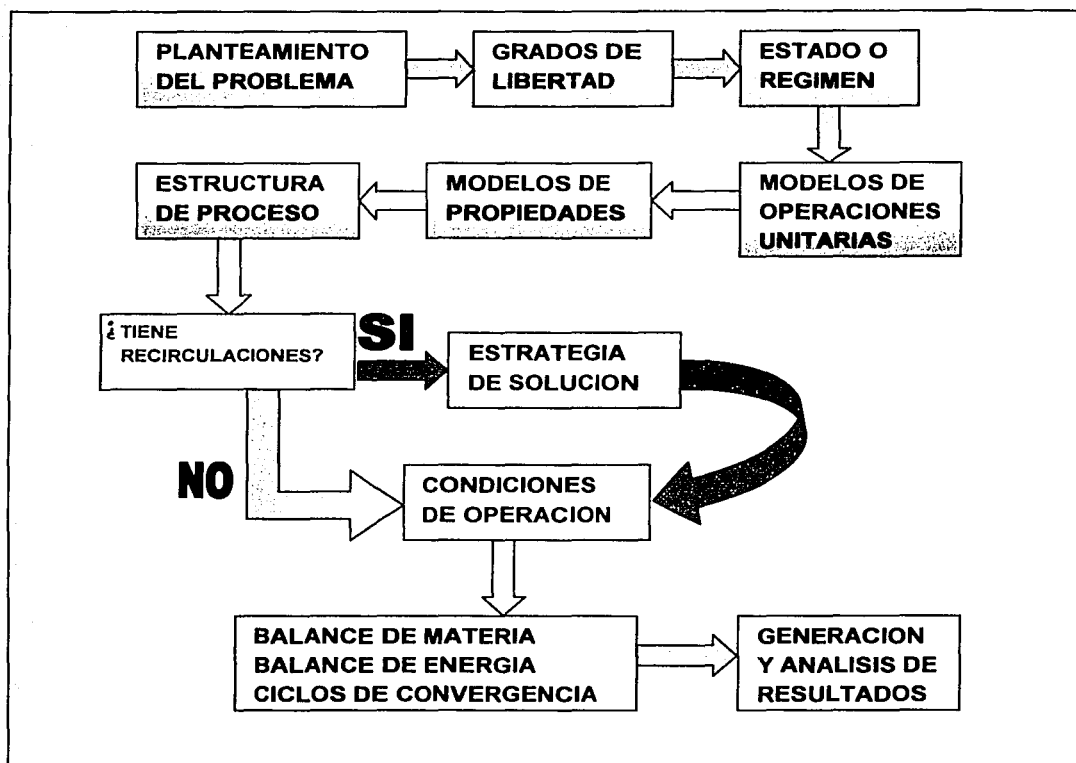


Figura 2.6: Procedimiento para realizar la simulación de un proceso

## II.6. Optimización de Procesos

A partir de la información obtenida en las etapas anteriores, se establece una estrategia de optimización, aplicada a una función objetivo adecuada. La optimización puede ser realizada tanto en la estructura como en los parámetros o condiciones de operación del proceso.

Cuando se evalúan los datos de la etapa de análisis, usualmente se descubre que ciertos niveles en las condiciones de operación (presiones, temperaturas, etc.), pueden influir profundamente en el dimensionamiento del equipo, en su operación, etc., por lo tanto, se conserva la estructura propuesta en la etapa de síntesis y únicamente se varían los valores de los parámetros de operación, y





Las bases teóricas para el desarrollo de la optimización de parámetros están más avanzadas que las teorías para la optimización de la estructura.

Una vez obtenido el diseño óptimo del proceso, se emite un reporte conteniendo la información generada en todas y cada una de las etapas de su concepción, así como detalles adicionales del diseño de equipo, útiles para la fase de la construcción, procediendo hacia la construcción de la Planta como se ilustra en la figura 2.7

Actualmente los grandes procesos no pueden ser construidos sin haber sido simulados previamente el proceso en una computadora mediante el uso de modelos matemáticos.

Por esto, se recomienda hacer uso de un sistema eficiente para el análisis de procesos, que permita a los Ingenieros evaluar más configuraciones de proceso de las que actualmente es posible. La computadora sirve como una herramienta que facilita al diseñador refinar su entendimiento de un proceso.

### III. SIMULACIÓN DE PROCESOS

La Simulación de Procesos consiste en la representación del proceso mediante el uso de modelos matemáticos que son resueltos para obtener información acerca del funcionamiento del mismo<sup>1</sup>.

Evidentemente, conforma un área importantísima dentro de la Ingeniería Química, ya sea para crear nuevos procesos, para modificar procesos existentes o simplemente para utilizar procesos existentes.

Con el objetivo de simular un proceso se requiere el disponer de un modelo matemático que estará conformado por un conjunto de ecuaciones y restricciones con las cuales se estarán representando cada uno de los fenómenos y sus interacciones y el resolver las ecuaciones equivale a la reproducción del proceso.

Un modelo matemático es una colección de ecuaciones que describen algunos aspectos del comportamiento del sistema que se está investigando.

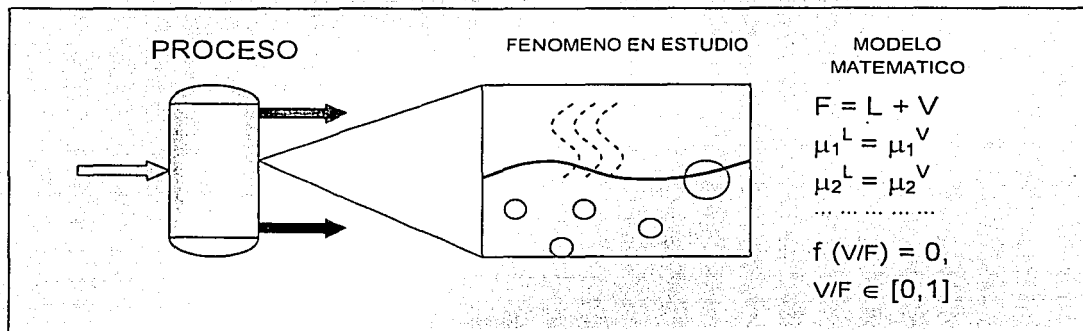


Figura 3.1 Modelo aplicado a la representación de un proceso.

Los modelos son todas las relaciones matemáticas derivadas a partir de las leyes de conservación, ecuaciones de velocidad, relaciones de propiedades físicas, termodinámicas y de transporte y de las restricciones de diseño y control, como se ilustran en la figura 3.1.

<sup>1</sup> Motard R.L, "Steady-State Chemical Process Simulation", AIChE Journal (1975)

Los modelos matemáticos toman la forma de ecuaciones algebraicas y diferenciales que describen el proceso. La característica más importante de los modelos matemáticos es que sean los más apropiados para su uso en términos de: rigor, nivel de detalle, exactitud, validez, generalidad.

El éxito de la aplicación del modelaje a cualquier proyecto, depende de la capacidad del mismo para anticipar las preguntas que pueden ser formuladas durante el desarrollo del proyecto y, entonces decidir si el modelo propuesto es el adecuado.

Una vez que se ha decidido la forma del modelo matemático, la siguiente etapa es la de coleccionar todas las ecuaciones matemáticas que representan al sistema con el objeto de construir el modelo. El tipo y características de las ecuaciones dependen directamente del sistema que se está estudiando.

Una vez que se ha establecido la forma de las ecuaciones que constituyen el modelo, la siguiente etapa es combinarlas de tal manera que se puedan resolver y, de esta forma, poder obtener las respuestas requeridas por el mismo.

Las ecuaciones que constituyen el modelo están formadas por variables y constantes numéricas; generalmente los modelos generan un conjunto de relaciones algebraicas no lineales de la forma:

$$\text{Variables de salida} = f(\text{variables de entrada})$$

Las variables de entrada son las variables de las corrientes de entrada y los parámetros de los modelos. Las variables de salida son las variables de la corriente de salida, las variables resultantes y las variables internas o de retención.

Las variables internas son valores intermedios no requeridos en el diagrama de flujo del proceso que pueden ser guardadas para ser usadas como valores iniciales en la siguiente iteración si la unidad está en una recirculación, como se muestra en la figura 3.2.

A su vez, las variables se clasifican en dos grupos:

- Variables independientes.
- Variables dependientes.

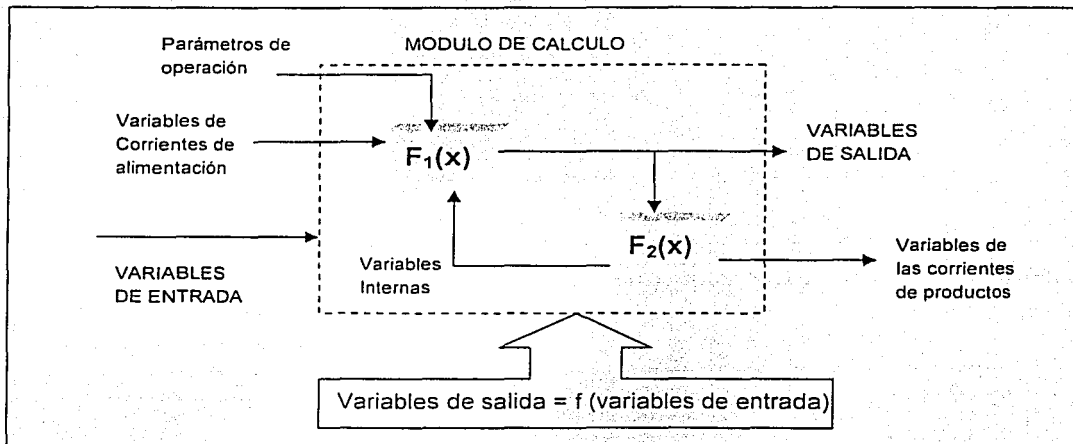
Es de vital importancia saber distinguir estos dos grupos de variables debido a que de esto depende el buen manejo y entendimiento de los modelos.

Las variables independientes son aquellas que especifican el problema y cuyos valores son dados como datos de entrada para cualquier problema y que, por lo general se clasifican en tres grupos:

- Variables de corrientes de entrada.
- Variables del equipo.
- Parámetros del modelo.

Variables dependientes son aquellas cuyos valores son determinados por medio de las ecuaciones del modelo. Dentro de esta categoría están:

- Variables de corriente de salida.
- Variables resultantes.
- Variables internas.



**Figura 3.2. Tipos de variables involucradas en la simulación de procesos**

En la simulación de un proceso, el número de ecuaciones es igual a la suma del número de variables de corrientes de salida, variables internas y variables resultantes y, el número de grados de libertad, es igual a la suma de los parámetros de los modelos y de las variables de corrientes de entrada. El número total de ecuaciones es más grande que el número de grados de libertad debido a que existe una gran cantidad de variables internas.

Existe una gran variedad de posibles combinaciones de parámetros de modelos que pueden ser usados para especificar una unidad de proceso.

En general, el número total de variables en un modelo de una unidad de proceso, permanecerá igual para diferentes conjuntos de especificaciones pero, su clasificación es diferente.

La última etapa en la construcción de un modelo la constituye el ajuste del mismo; para lograrlo es necesario ajustar los parámetros del modelo en base a datos experimentales, datos de planta o reportados en la literatura.

### **III.1. Algoritmos**

Es claro que al describir un proceso en términos de modelos matemáticos, se presenta cierta complejidad derivada de la interacción de unas variables con otras, por lo que se precisan de estrategias especiales a las que se les conoce como algoritmos.

Estos algoritmos resuelven el problema matemático generado por los modelos; el tipo de problema matemático que debe ser resuelto depende del tipo de análisis de interés pero, normalmente incluye la solución de ecuaciones algebraicas, diferenciales y programación no lineal.

Los requerimientos de un buen algoritmo son:

- Que sea adecuado para hacer converger el modelo matemático
- Tan general como sea posible
- Eficiente en términos de ejecución y almacenamiento
- Claro y funcional

### **III.2. Simulador de Procesos**

Un simulador de procesos es esencialmente un programa de computadora que permite realizar cálculos de manera rápida y eficiente. Se incorporan en este, los modelos y algoritmos apropiados para la representación y cálculo del proceso de interés, dado que el corazón de un sistema de simulación de procesos es el cálculo de propiedades, debe tenerse bastante cuidado con el modelo a elegir cuando se lleva a cabo la simulación de un proceso, ya que se debe asegurar que el modelo representa razonablemente bien las condiciones del proceso que se va a simular.

Las raíces de los sistemas de simulación en computadora pueden ser rastreadas a partir de la publicación del primer programa FLEXIBLE FLOWSHET en 1958 (Kesler y Kesler (1958)). A partir de ésta fecha se inicia la 1ª generación de los simuladores de proceso.

La característica más importante de los simuladores de la 1ª generación es que, básicamente, estaban enfocados hacia la simulación individual de las operaciones unitarias.

Estos programas fueron desarrollados por innovadores entusiastas que tenían que ser expertos en Ingeniería Química, Matemáticas y en los nuevos lenguajes de computadora. Afortunadamente hubo muchas de estas personas que pudieron adaptar los simuladores a las nuevas máquinas y usarlos a nivel industrial. Los éxitos (aunque fueron pocos) de estos programas, fueron lo suficientemente notables para garantizar el soporte continuo de este campo recién formado.

Los sistemas de simulación industrial más importantes fueron desarrollados en la década de los 60's. Esta 2ª "Generación" de programas, radicalmente no exhibieron cambios y generalmente fueron contruidos haciendo uso de la tecnología de los programas existentes.

Los términos 1ª y 2ª generación se manejan en el aspecto evolutivo. Se puede visualizar el surgimiento de los programas de la primera generación tales como: CHEVRON, FLEXIBLE FLOWSHEET, PACER Y CHESS. Los simuladores de la segunda generación fueron contruidos tomando como base la tecnología de los de la 1ª generación. Ejemplos de los simuladores de la 2a. generación son: FLOWTRAN, CAPES, IPES, CPES, etc.

A pesar de las impresionantes mejoras obtenidas en los nuevos modelos de simulación, permanecen ciertas deficiencias. Debido al alto costo del desarrollo, la mayoría de los paquetes industriales sólo son para uso privado. Este aislamiento resulta no solamente en la duplicación de esfuerzos sino que inhibe cualquier mejora de los mismos. El mantenimiento y actualización de los grandes sistemas de simulación requiere de mucha dedicación e inversión que, en muchas ocasiones, es difícil de justificar. Asociado con los problemas de mantener un sistema, está el problema de expandirlo. Independientemente de que se cuente con recursos y tiempo para desarrollar el sistema inicial,

posteriormente, las adiciones y modificaciones frecuentemente son precipitadas, contribuyendo así al deterioro gradual de todo el sistema lógico.

En los últimos años, los Simuladores de Proceso, se han convertido en una herramienta fundamental para el análisis y diseño de procesos. Desde su primera aparición, los Simuladores de Proceso han constituido una ayuda invaluable, reduciendo de manera considerable el tiempo necesario para realizar los cálculos involucrados en el diseño, análisis y optimización de una estructura de proceso.

La combinación de estos programas con el avance de la tecnología computacional, ha permitido la incorporación de modelos cada vez más complejos, para representar de manera más precisa, los fenómenos termodinámicos y de transporte que ocurren en las diferentes operaciones unitarias que conforman el proceso.

### **III.3. Estados de interés en la Simulación de Procesos**

Se considera como un Estado, al conjunto de condiciones, restricciones y suposiciones que deben hacerse para aislar temporalmente un fenómeno, a fin de poderlo estudiar. Muchas de las suposiciones se hacen para simplificar los modelos, y una vez que se obtienen resultados, es conveniente reflexionar si las suposiciones fueron apropiadas para representar la realidad. Definir el estado sobre el que se va a trabajar es fundamental, ya que cada estado presenta características especiales en la forma en la que se plantean los modelos y por ende, en la forma de resolverlos. Los dos principales estados de interés, cuando se simula un proceso, son el Estado Estacionario y el Estado o Régimen Dinámico.

#### **- Estado Estacionario**

Es aquel estado en el que las condiciones de operación de un proceso no cambian con el tiempo. Por supuesto, se trata de un estado idealizado, ya que en los procesos, como en muchas otras circunstancias, las condiciones cambian constantemente.

Es en el Estado Estacionario, que se pueden plantear ecuaciones que describan al fenómeno independiente del tiempo, como ocurre con prácticamente todos los

modelos de equilibrio de fases, cálculo de propiedades y todos aquellos que describan un proceso en términos de variables de estado.

Los procesos representados en estado estacionario, generalmente son descritos con modelos que involucran ecuaciones algebraicas, sean estas lineales o no lineales, por lo general buscan resolver el sistema a una condición dada. La complicación en este sentido, estará dada por la complejidad misma del proceso en cuanto a recirculaciones, especificaciones de diseño y restricciones que aseguren que el modelo está representando al proceso en condiciones reales.

Los balances de materia y energía resultantes del modelado de un proceso a estado estacionario, serán válidos para las condiciones asumidas al momento de efectuar los cálculos, pero su utilidad fundamental radica en la capacidad de predicción de los cambios que puede sufrir el proceso cuando se modifican los valores de una o más variables.

#### - Régimen Dinámico

El Régimen Dinámico es aquel en el que se toma en cuenta la variación de las variables de proceso respecto al tiempo, por lo que los modelos que describen las operaciones unitarias de proceso están constituidos por sistemas de ecuaciones diferenciales. La simulación de procesos a régimen dinámico tiene un mayor grado de complejidad, pero permite representar adecuadamente las operaciones de arranque y paro de una planta, o condiciones de operación que son controladas por fenómenos que dependen del tiempo, como la difusión o el flujo.

Una medida útil para saber si un modelo en régimen dinámico es adecuado, consiste en probar si puede predecir el comportamiento a Estado Estacionario cuando se le asigna un intervalo muy grande de tiempo.

### **III.4. Enfoques de la simulación**

La siguiente decisión importante para la simulación de un proceso, consiste en definir el enfoque bajo el cual se va a llevar a cabo la simulación. Cada enfoque constituye una manera diferente de atacar el problema de la simulación de un proceso. No todos los procesos pueden ser resueltos de la misma manera, y a lo largo de la historia, algunos han probado ser más eficaces que otros para ciertos tipos de procesos. La evolución de los algoritmos, sistemas y simuladores ha



dado lugar al surgimiento de tres principales enfoques para la simulación de procesos, el enfoque modular secuencial, el enfoque orientado a ecuaciones y el enfoque modular simultáneo.

#### - Modular Secuencial

El término secuencial modular fue usado por Westerberg para describir la aproximación usada actualmente por los simuladores industriales. En esta aproximación, el programa es dividido en varias subrutinas o módulos y, cada módulo corresponde a una o más etapas de la planta de procesamiento. Existe un programa ejecutivo que arma el diagrama de flujo de proceso y establece el orden de cálculo.

En ésta aproximación se presentan dos opciones diferentes de cálculo que son:

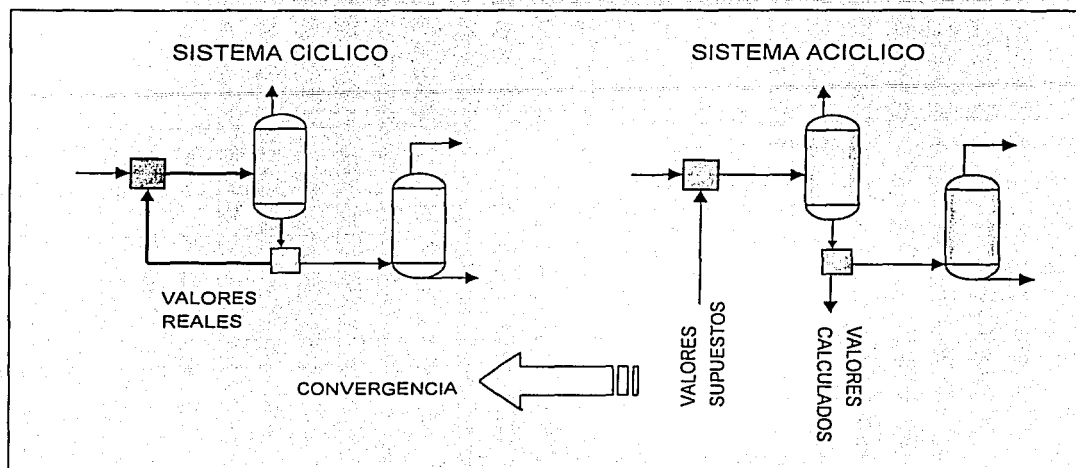
- Cálculos orientados al funcionamiento.
- Cálculos orientados al diseño.

En la primera opción, se desarrolla una subrutina para cualquier tipo de unidad y de esta forma, se calculan las variables de las corrientes de salida como una función de las variables de las corrientes de entrada y los parámetros de la unidad. Los cálculos proceden de módulo en módulo para simular el proceso. Aquí, generalmente el flujo de información es paralelo al flujo del proceso que está siendo simulado.

En el caso de usar un simulador como medio de diseño, es necesario hacer un diseño más detallado de los modelos de los módulos y tratarlos como en la primera opción. Para resolver este problema el procedimiento de solución es alterado debido a que las variables fijadas en la primera opción, ahora actuarán como grados de libertad. Este procedimiento es denominado flujo de información inverso.

En la aproximación modular secuencial, todas las corrientes, excepto las corrientes de conectividad, están contenidas en el módulo. Las corrientes de recirculación necesitan ser identificadas y rotas para posteriormente hacer que cumplan las condiciones de convergencia mediante un proceso iterativo. Los estimados iniciales de las variables de una corriente de recirculación deben ser dadas (ya sea por el usuario o asignadas por la computadora) y las especificaciones (restricciones) también deben ser resueltas iterativamente.

Para resolver una simulación por el método modular secuencial es necesario identificar las particiones del diagrama de flujo, seleccionar las corrientes de corte, almacenar los cálculos y determinar la secuencia de cálculo. Las particiones, identifican aquellas colecciones de bloques (referido como un subsistema cíclico máximo o red irreducible) que deben ser resueltos al mismo tiempo.



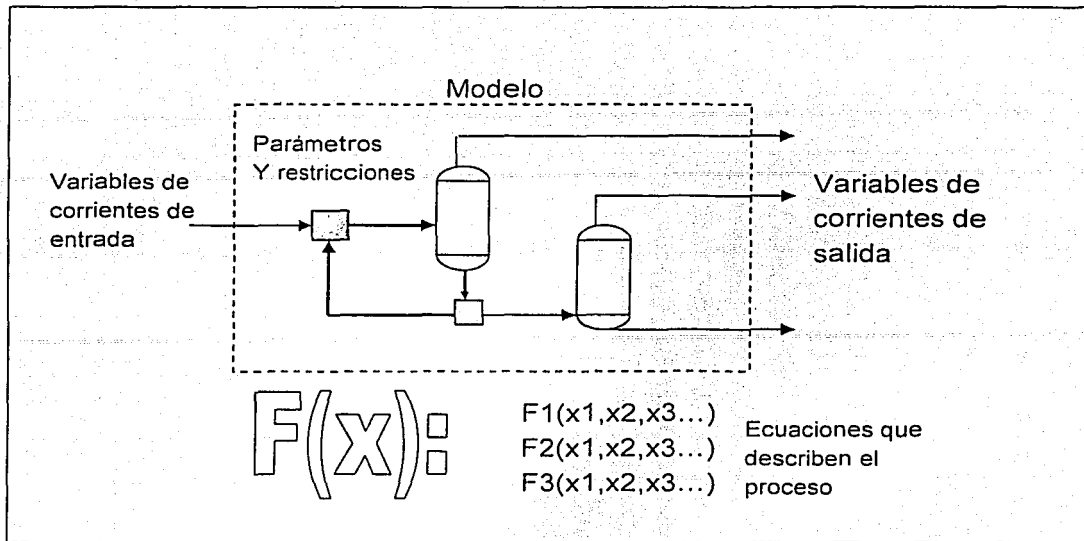
**Figura 3.3. Sistemas cíclicos y acíclicos**

El rompimiento determina aquellas corrientes o flujos de información que deben ser rotos para dar un sistema acíclico, como se muestra en la figura 3.3.

La agrupación de los cálculos, determina cuáles corrientes de corte y el orden en el cual la colección de corrientes de corte también las alcanzará. Una vez que la agrupación de corrientes de corte ha sido especificada, es necesario determinar la secuencia de cálculo y, finalmente, usar un algoritmo numérico adecuado.

- Orientado a Ecuaciones

Este enfoque está basado en la idea de formular y resolver en forma explícita, un solo sistema de ecuaciones que representa al proceso, como se puede ver en la figura 3.4.



**Figura 3.4. Enfoque Orientado a Ecuaciones**

Técnicas numéricas eficientes para la solución de grandes sistemas de ecuaciones no lineales son utilizadas para hacer converger las ecuaciones de simulación, tomando ventajas de la estructura dispersa y específica de la matriz Jacobiana.

A pesar de que los métodos orientados a ecuaciones prometen una rápida convergencia y una formulación más natural del problema de simulación y diseño, aún no han sido aplicados en forma eficiente en los simuladores comerciales por presentar varias desventajas.

Esta orientación es muy rígida en cuanto a la elección a priori del sistema de ecuaciones a resolver. Para su operación eficiente requiere de valores iniciales razonables, los cuales son prácticamente imposibles de obtener sin realizar un recorrido a través del proceso. Estos métodos no toman en cuenta el gran avance existente, a nivel industrial y académico, en el desarrollo de modelos de operación unitaria bajo el enfoque modular y en los sistemas publicados en la literatura, las ecuaciones para representar las operaciones de proceso son en la mayoría lineales, no dando un análisis riguroso de los fenómenos que se llevan a cabo.

## - Modular Simultáneo

Para un proceso cuyos ciclos de recirculación son independientes, el enfoque modular secuencial, con algún esquema de aceleración de convergencia del tipo Wegstein ha demostrado ser satisfactorio.

Sin embargo, para procesos complejos, con ciclos de recirculación anidados y con severas restricciones de diseño, se presenta un comportamiento de convergencia muy lento, en virtud de las fuertes interacciones entre los cálculos de los ciclos anidados.

Alternativamente, los enfoques orientados hacia ecuaciones presentan la ventaja de poder manejar los ciclos de cálculo en forma simultánea, sin que su eficiencia sea disminuida por las fuertes interacciones.

Ante esta situación, se presentan dos opciones a fin de mejorar la eficiencia de los cálculos:

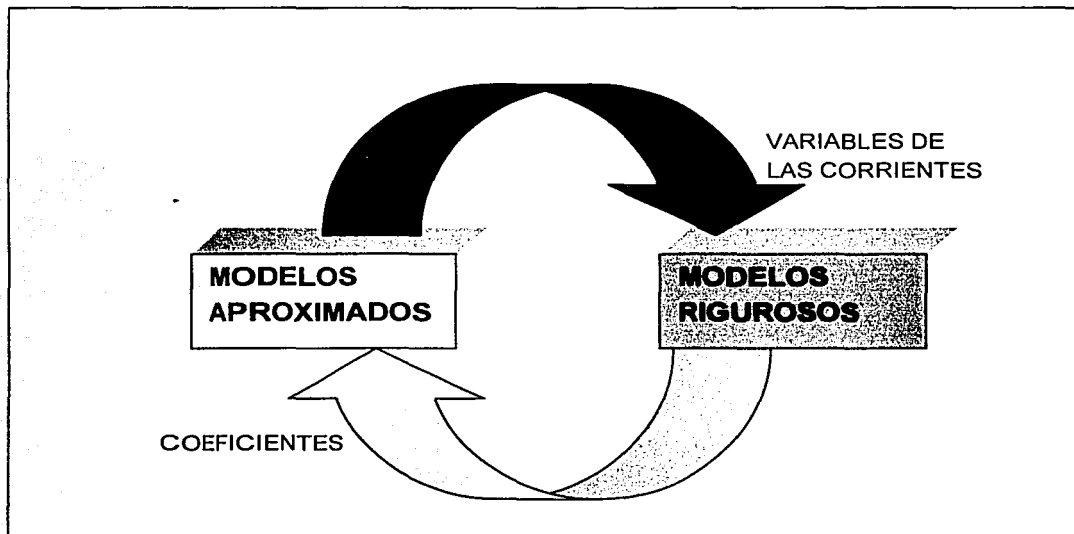
- Desarrollar totalmente nuevos simuladores, capaces de resolver grandes sistemas de ecuaciones no lineales y de hacer converger en forma simultánea tanto las especificaciones de diseño como los balances de materia y energía.
- Convertir los actuales simuladores modulares secuenciales en simuladores con un manejo más eficiente de las ecuaciones.

La primera alternativa parece ser la solución para un eficiente manejo de los problemas de simulación, diseño y optimización; sin embargo, aún se encuentra en etapa de investigación. Por lo tanto, en la actualidad, la segunda opción resulta más atractiva, puesto que requiere de una menor cantidad de recursos para ser puesta a punto y poder brindar los beneficios de un verdadero simulador con orientación al manejo más eficiente de las ecuaciones, para este caso el enfoque modular simultáneo es el que presenta las mayores ventajas.

Ante todo, se debe resaltar que el uso del término modular simultáneo para describir el enfoque al que se refiere esta sección trata de cubrir aquellos trabajos que han sido descritos con términos como el de doble rompimiento ("two tier") que se ilustra en la figura 3.5, o simplemente como un concepto diferente de convergencia para el enfoque modular secuencial.

El término modular simultáneo actualmente es de uso generalizado y razonablemente descriptivo del tipo de estrategia de cálculo usada.

La idea fundamental es emplear dos tipos de modelos: rigurosos y aproximados (simples), con el objeto de dar solución a todas las corrientes de proceso (y no únicamente a las corrientes de recirculación seleccionadas, como en el caso modular secuencial), y satisfacer las restricciones de diseño, simultáneamente, tal como lo muestra la figura 3.5.



**Figura 3.5. Algoritmo de doble rompimiento.**

Los modelos rigurosos son los modelos de operación unitaria empleados en los simuladores con un enfoque modular secuencial. Estos modelos son usados para determinar parámetros que posteriormente serán utilizados por los modelos simples.

Los modelos reducidos son modelos aproximados que requieren una cantidad menor de recursos computacionales para su solución. Una vez resuelto el modelo reducido, se obtienen valores aproximados de todas las variables de las corrientes, con los que se verifica la convergencia; de no obtenerse, existe la posibilidad de modificar los valores de los parámetros de los modelos

aproximados, o bien, llamar nuevamente a los modelos rigurosos y obtener valores más precisos. Este procedimiento continúa hasta que los cambios en los parámetros del modelo reducido son lo suficientemente pequeños, para dos iteraciones sucesivas, logrando la convergencia de las variables de proceso. Este procedimiento genera una estructura en forma de ciclo interno y ciclo externo.

Los modelos reducidos pueden ser de varios tipos. Los hay lineales, cuyos coeficientes pueden ser determinados mediante la perturbación numérica de los modelos rigurosos, y los hay no lineales, usualmente representados por modelos aproximados de Ingeniería. Cualquiera que sea el tipo, el modelo genera un sistema de ecuaciones de simulación equivalente al del modelo riguroso, pero de menor extensión, conteniendo un número mucho menor de variables internas e incluyendo correlaciones simples para propiedades termofísicas, originando lo que se conoce como problema reducido.

Los modelos simples, en virtud del reducido número y tamaño de sus ecuaciones, comparado con las dimensiones de los modelos rigurosos, pueden ser resueltos en forma muy eficiente por las técnicas desarrolladas ampliamente como parte de los simuladores orientados hacia las ecuaciones.

Los requerimientos básicos de un modelo reducido son:

- El número de ecuaciones deberá ser mucho menor que el del modelo riguroso.
- Las ecuaciones deberán tener estabilidad en su convergencia.
- El número de ecuaciones y variables de cada unidad, debe conservar los grados de libertad del modelo riguroso.
- Cada modelo reducido debe incluir un conjunto de coeficientes, cuyas expresiones sean únicas para cada tipo de unidad; expresiones que sean analíticas y que incluyan variables de entrada y salida, variables internas y parámetros de cada equipo.
- Las ecuaciones del modelo reducido deberán generar la misma solución que el modelo riguroso, en el punto donde sus coeficientes fueron generados.
- Las ecuaciones del modelo reducido y la matriz Jacobiana asociada a ellas, debe ser evaluada analíticamente, sin requerir otros cálculos auxiliares tales como propiedades termofísicas, y sin recurrir a cálculos iterativos.

Puesto que las especificaciones de diseño pueden ser manipuladas directamente a nivel de proceso, no hay necesidad de usar ciclos de control para hacerlas converger, eliminando de esta manera un ciclo iterativo, con respecto al enfoque modular secuencial.

El enfoque modular simultáneo posee la gran ventaja de poder utilizar la enorme cantidad de trabajo computacional existente bajo el enfoque modular secuencial, tanto en programas para operaciones unitarias, como de las reglas heurísticas que ha aplicado con éxito, lo que permite obtener útiles estimados iniciales.

De lo expuesto anteriormente, el enfoque modular simultáneo puede ser considerado como un intento de combinar algunas de las ventajas del enfoque modular secuencial y las ventajas propias de un eficiente sistema de solución de ecuaciones no lineales, propio del enfoque basado en las ecuaciones.

## IV. SGP-FQ: SIMULADOR GENERAL DE PROCESOS – FACULTAD DE QUÍMICA

El Simulador General de Procesos - Facultad de Química ha sido desarrollado por ingenieros y para ingenieros; se trata de un simulador en el que al usuario se le permite conocer y comprender todas sus características y funcionamiento interno sin restricciones. Su estructura es modular y abierta, permitiéndole al usuario incorporar nuevos módulos de operaciones unitarias, así como modelos de predicción de propiedades termodinámicas y métodos numéricos para la solución de sistemas con recirculaciones.

Es así, que siendo por sí mismo, una herramienta poderosa, puede ser al mismo tiempo, la base necesaria para resolver una enorme diversidad de problemas, pues una vez que el usuario comprende la manera en que funciona, le resultará sencillo incorporar sólo los módulos adicionales necesarios para continuar utilizando este Simulador, permitiéndole resolver nuevos problemas.

La ventaja que esto ofrece, es que el usuario no partirá de cero al enfrentarse a problemas nuevos, sino que puede utilizar además, los modelos de operaciones unitarias y de convergencia incluidos en el diseño de este programa, aprovechando así las ventajas de contar con un sistema de simulación estructurado.

Para el diseño del Simulador General de Procesos, se han considerado además de los aspectos mencionados, aquellas características que buscan hacer del mismo, un programa fácil de usar; un programa con el que el usuario se familiarice de manera rápida y sencilla.

En este sentido, cuenta con una interfase gráfica común a las demás aplicaciones de Windows, capacidad de importar y exportar datos, menús y comandos en español, además de un diseño lógico e intuitivo. Está diseñado para que pueda utilizarse desde el primer momento, sin entrenamiento previo y con ayuda paso-a-paso, para llevar a cabo la simulación de un proceso en muy poco tiempo.

De esta manera, se busca fomentar la enseñanza de la Simulación de Procesos, no como una rama de conocimiento en la que una "caja negra" pide información



y genera datos, sino como una ciencia con carácter "interactivo", en la que se puedan aplicar conocimientos de Ingeniería Química para entender la forma en la que se realiza la simulación del proceso.

El conocimiento sobre el funcionamiento interno del programa, la incorporación de una interfase gráfica amigable, así como la capacidad de desarrollar módulos de cálculo que puedan incorporarse al programa, son características básicas que buscan hacer de este simulador, una herramienta para la fomentar la cultura de la simulación de procesos.

#### **IV.1. Antecedentes**

Existen cinco etapas en el desarrollo de cualquier programa computacional a gran escala:

- Definición.
- Diseño
- Implementación
- Prueba
- Transferencia

La primera etapa es la definición de las especificaciones funcionales o criterios de diseño que plantean lo que el sistema podrá hacer pero, no indican cómo. Las especificaciones funcionales sirven para contestar preguntas tales como:

- ¿Qué tipo de modelos ingenieriles serán incluidos?
- ¿Qué tipos de análisis serán ejecutados?
- ¿Cuáles características de la interfase con el usuario son importantes?

El diseñador debe tener una buena visión de lo que hará el sistema. Durante la etapa de definición es muy importante realizar un estudio del software y de los sistemas existentes disponibles para evitar la repetición de información.

Una de las etapas más críticas de la etapa de definición es la comunicación de los diseñadores con los usuarios potenciales.

Esta comunicación se puede establecer por medio de cuestionarios en donde se les muestre a los usuarios las principales características del nuevo sistema y estos a su vez, den sus opiniones o comentarios del mismo.

Una vez que se han definido los requerimientos funcionales del sistema, la siguiente etapa corresponde al diseño del sistema.

El diseño, especifica detalladamente la forma como serán encontrados los requerimientos funcionales. En esta etapa se definen:

- Arquitectura del sistema.
- Estructura de datos.
- Lenguaje de programación, etc.

El diseño del sistema no es más que una síntesis de proceso en donde se necesitan considerar y evaluar diferentes alternativas.

Una vez que se ha diseñado el sistema, se inicia la etapa de la implementación. La implementación es el proceso que permite transcribir el sistema diseñado a un lenguaje computacional; en caso de no haber seleccionado un lenguaje de programación en la etapa de diseño, se debe seleccionar para poder iniciar la implementación.

Regularmente, se seleccionan lenguajes de alto nivel tales como FORTRAN que son bastantes comunes y con las características necesarias para poder manejar este tipo de problemas.

La cuarta etapa es la prueba, la cual resulta ser una de las etapas más costosas y de las que consumen más tiempo. En esta etapa se demuestra si el programa es confiable y si realmente está libre de fallas.

La etapa final en la vida del sistema es la fase de transferencia en la cual el programa, se empieza a usar continuamente para resolver problemas. En esta última etapa es de suma importancia establecer las estrategias para mantenimiento y futuras expansiones.

## **IV.2. Estructuración**

El Simulador General de Procesos - Facultad de Química consta de dos partes fundamentales:

- Un módulo de cálculo, con estructura modular secuencial, que utiliza eficientemente las capacidades del procesador, realizando las operaciones con números de precisión extendida, y que en cuestión de segundos, ha

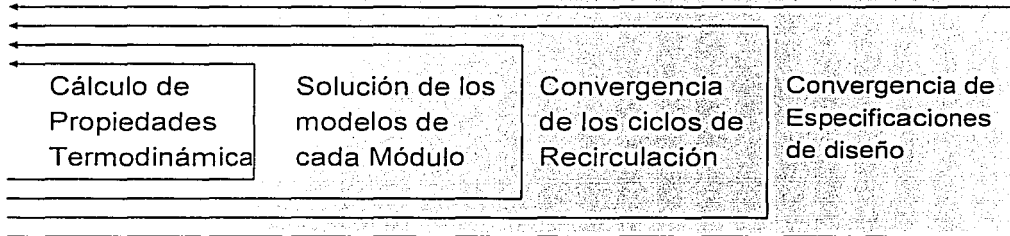
probado converger satisfactoriamente para un número razonable de iteraciones.

- Una interfase gráfica de usuario, desarrollada en Visual Basic, que aprovecha las capacidades gráficas y de manejo del mouse de Windows®, para hacer de SGP-FQ, un programa sencillo de usar, interactuando de forma intuitiva con el usuario, y que ofrece la facilidad de las teclas de método abreviado, menús y comandos típicos de una programa de Windows.

#### - Características del Módulo de Cálculo

El módulo de cálculo del Simulador General de Procesos - Facultad de Química ha sido desarrollado en lenguaje FORTRAN, bajo el enfoque modular secuencial.

Este módulo es el que efectúa todos los cálculos concernientes al proceso, agrupándolos en cuatro ciclos fundamentales, que son característicos del enfoque modular secuencial y que se encuentran representados en la figura 4.1



**Figura 4.1: Ciclos de convergencia del módulo de cálculo del SGP-FQ**

El ciclo más interno corresponde al cálculo de propiedades termodinámicas, pues estas son requeridas cada vez que se precisa averiguar las condiciones térmicas, mecánicas y de equilibrio de fases cuando se modelan las operaciones unitarias de proceso.

Los módulos de las operaciones unitarias de proceso contienen uno o más ciclos de convergencia, pues la mayoría de los modelos están constituidos por un conjunto de ecuaciones no lineales, que deben ser resueltas para calcular las variables de salida en función de las corrientes de entrada y de los parámetros suministrados.

Cuando existen casos que involucran ciclos y recirculaciones, existe un algoritmo dentro del simulador, que es capaz de identificar los ciclos existentes y el orden de los mismos interpretando las interconexiones de los equipos tal y como se representan en el diagrama de proceso. Descomponiendo la red de proceso, e identificando los equipos y corrientes involucrados en uno o más ciclos, el programa determina un conjunto de corrientes de corte para hallar la solución del sistema de manera iterativa.

Los tres ciclos descritos constituyen la simulación de un proceso a una condición dada, esto es, que se conocen todas las variables de entrada y parámetros de los equipos, siendo las únicas incógnitas las variables de las corrientes de productos. Cuando lo que se conoce son las condiciones de salida, y se desconocen las condiciones de entrada del proceso, estas últimas deben ser calculadas iterativamente, constituyendo así el ciclo de convergencia de las especificaciones de proceso.

#### - Modelos de Operaciones Unitarias

A lo largo de la historia, los modelos que han sido clave para el desarrollo de simuladores de proceso, son los de columnas de separación y tanques flash. Es un hecho bien conocido que la habilidad de predecir las condiciones de equilibrio entre fases de mezclas multicomponentes, es una de las más importantes funciones de un Simulador de Procesos.

Aún en aquellos modelos que involucran operaciones diferentes a la separación como son los compresores, válvulas y reactores, se deben determinar las condiciones de presión, temperatura y fase de las corrientes de salida, teniendo por tanto, que recurrir a los mismos algoritmos de las separaciones flash para predecir tales condiciones.

En la tabla 4.1 se detallan los módulos con los que cuenta actualmente el Simulador General de Procesos - Facultad de Química, cabe mencionar que el usuario puede incluir módulos adicionales para acoplar este simulador a sus necesidades.

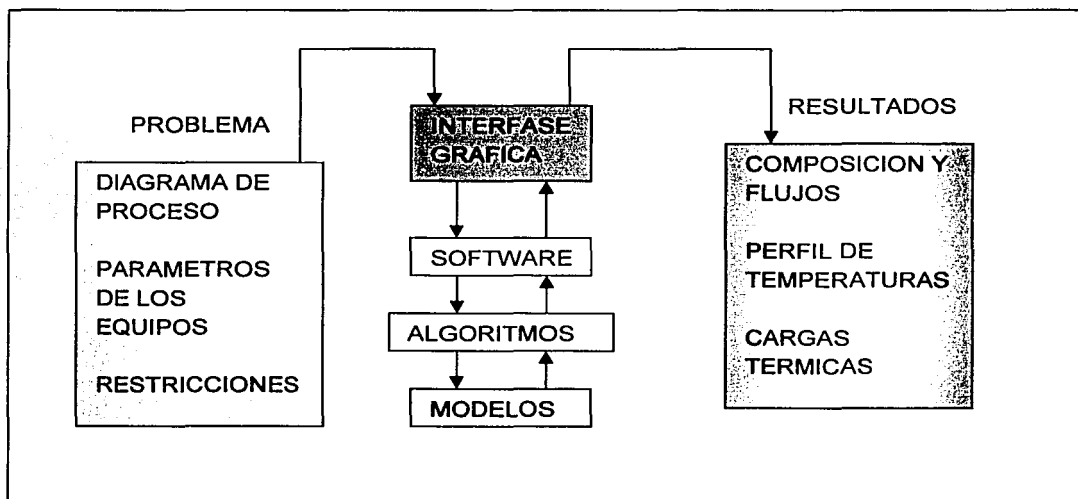
**Tabla 4.1 Módulos de cálculo de operaciones unitarias**

OPERACIÓN	OBJETIVO	MODULO
ABSORCION	Absorción de uno o varios componentes de interés presentes en una corriente de proceso.	ABSR
FLASH	Vaporización de una fracción de la corriente de alimentación. Cálculo de la temperatura de burbuja de una mezcla multicomponente. Cálculo del calor necesario para vaporizar parte de la mezcla multicomponente. Cálculo de la temperatura de rocío de una mezcla multicomponente Separación adiabática por medio de presión Separación isotérmica multicomponente Recuperación de un componente volátil	ADBF
CAMBIADOR DE CALOR	Calentar o evaporar una corriente de proceso Enfriar o condensar una corriente de proceso Intercambiar calor entre corrientes de proceso	HXER
DISEÑO DE COLUMNA	Determinar el número de etapas necesarias para la separación de una mezcla multicomponente.	DISC
EVALUACION DE COLUMNA	Evaluación de las condiciones de operación de una columna de destilación existente (rating)	
COLUMNA MULTIETAPA	Modelado riguroso de columnas de destilación con múltiples etapas de equilibrio, varias salidas laterales, varias alimentaciones, productos de domos y productos de fondos.	MSEQ
REHERVIDOR	Vaporización controlada de los productos de fondos de columnas de destilación	BOTT
CONDENSADOR	Condensación controlada de los productos de domos de columnas de destilación	OVHD
CALENTADOR A FUEGO DIRECTO	Calentamiento de una corriente de proceso a altas temperaturas.	FHTR
BOMBA	Incremento de la presión de una corriente de proceso.	PUMP
COMPRESOR		
VALVULA	Reducción de la presión de una corriente de proceso (expansión adiabática)	VALV

REACTOR	Modelado de reacciones químicas. Se trata de un reactor estequiométrico.	REAC
DIVISOR	Dividir una corriente de entrada en dos o más corrientes de salida. Todas tienen la misma composición y temperatura.	DVDR
MEZCLADOR	Combinar dos o más corrientes de entrada en una corriente de salida, las condiciones de salida dependen de las condiciones de entrada.	MIXR

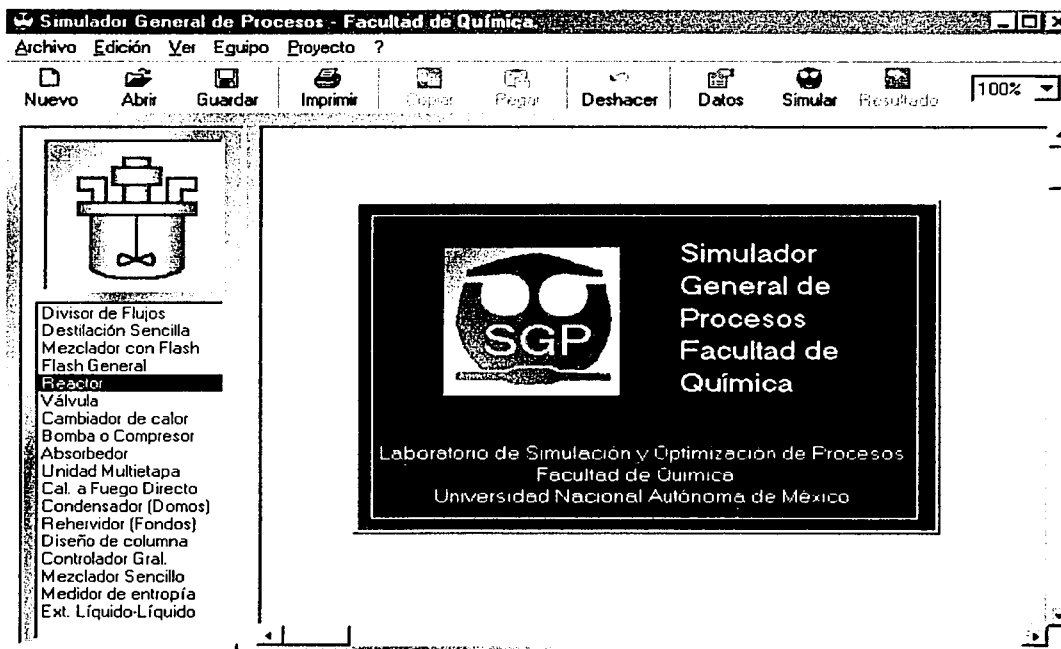
#### - Interfase Gráfica de Usuario

La Interfase Gráfica de Usuario constituye el medio por el cual, el usuario le suministra al programa, los datos del proceso que se desea simular. En el caso particular del Simulador General de Procesos - Facultad de Química, la interfase gráfica fue desarrollada en un lenguaje diferente al del módulo de cálculo, ya que lo que se buscaba era hacerlo funcional, y no tanto incorporarlo como parte de un solo programa, así que su función real es recopilar la información del proceso, organizarla y mandarla al módulo de cálculo para obtener posteriormente de éste, los resultados de la simulación del proceso, como se muestra en la figura 4.2



**Figura 4.2. Estructura de un sistema de simulación**

El Simulador General de Procesos - Facultad de Química se ejecuta por completo desde la interfase gráfica, la cual al correr en ambiente Windows, tiene el aspecto mostrado en la figura 4.4.



**Figura 4.4 Pantalla de presentación del SGP-FQ.**

Para el desarrollo de la interfase gráfica de usuario del Simulador General de Procesos - Facultad de Química, las fuentes de información halladas describían solamente los requisitos fundamentales, como se ha mencionado en los antecedentes, pero no había ejemplos tangibles del desarrollo de interfases para otros simuladores de proceso, lo cual no es de sorprender, pues estos sistemas son programas orientados a funcionar y no a que el usuario sepa como construirlos.

Así pues, para la programación de la interfase y su acoplamiento con el módulo de cálculo, hubo que recurrir primeramente a la observación. Gracias a que en el Laboratorio de Simulación y Optimización de Procesos de la Facultad de Química se cuenta con simuladores de proceso de nivel comercial como ASPEN PLUS® 10.2 de Aspentech, o HYSYS® 1.5 de Hyprotech, estos fueron utilizados como ejemplo para establecer los siguientes criterios de diseño:

## - Criterios de diseño para la Interfase gráfica

Primeramente, ambos simuladores funcionan bajo el ambiente Windows de 32 bits, siendo compatibles con Windows 95, 98, NT, 2000, Millennium y XP, por lo que se decidió que la interfase gráfica del Simulador General de Procesos - Facultad de Química fuera compatible con estos sistemas, ya que son los de mayor uso en nuestros días. Para ello, se requería un lenguaje visual y de fácil manejo, por lo que se seleccionó Visual Basic® 6.0 Profesional Edition, con el que afortunadamente se cuenta en el L S y O P.

Lo siguiente, es que ambos simuladores presentan un área donde se construye el diagrama de proceso. Este puede ser visualizado a diferentes niveles de detalle (zoom) y no está restringida al área que puede observarse en pantalla, ya que al igual que en muchas aplicaciones Windows, hay dos barras de desplazamiento, una vertical situada en el borde derecho del área mencionada y una horizontal situada en el borde inferior de la misma. A través de estas barras, el usuario puede explorar diferentes áreas del diagrama, permitiendo así que el área que este ocupa pueda ser más grande que lo que se puede apreciar en pantalla.

La implementación de las capacidades de "zoom" y "pan" como se les conoce en el argot informático, fueron de las primeras características implementadas en la interfase del Simulador General de Procesos - Facultad de Química, como se puede apreciar en la figura 4.4 y en las figuras subsecuentes.

Las operaciones unitarias están representadas por módulos de cálculo independientes, la decisión sobre cuántas y cuáles habrían de ser representadas en la interfase gráfica corresponden a aquellas que aparecen en el módulo de cálculo. Dada la capacidad del simulador de incluir nuevos módulos de cálculo, la interfase gráfica es susceptible de modificarse para incluir estos nuevos módulos, y su representación gráfica puede ser asignada por el usuario.

La simbología para la representación de los modelos de operaciones unitarias asociados al módulo de cálculo corresponde a la que se emplea comúnmente en los diagramas de proceso. Se recurrió a un programa de dibujo para generar figuras vectoriales que pudieran ser mostradas a diferentes tamaños.

Como se pudo observar usando ambos simuladores, la manera más sencilla de incorporar los citados modelos era a través de una lista vertical, pues no precisa



de instrucciones especiales y el usuario puede darse cuenta a primera vista de cuáles equipos dispone. Además, se incorpora en la parte superior, una ventana de pre-visualización (preview) con el fin de que el usuario esté seguro de incluir el modelo correcto para la operación que se va a representar.

El siguiente paso, era decidir sobre la manera en la que se debían crear las conexiones entre los equipos, es decir, las corrientes de proceso. Lo más sencillo fue hacerlo a la manera de ASPEN PLUS. El usuario selecciona el equipo que desea conectar y accede por medio del botón secundario del mouse, a un menú en el que puede especificar si desea conectar una salida o una alimentación al equipo en cuestión. Este mismo procedimiento sirve para declarar corrientes de alimentación y productos para el proceso. Hubo que añadir restricciones para que las corrientes de salida de un equipo no pudieran ser conectadas a las corrientes de entrada del mismo equipo, además de verificar cada vez que se creaba una conexión, cuáles entradas y salidas de cada equipo quedaban ocupadas y cuáles quedaban libres.

Ahora bien, las corrientes son representadas por líneas rectas horizontales y verticales. Las corrientes de un diagrama de proceso deberán incluir una flecha para indicar la dirección de flujo, además de una etiqueta que las identifique y cuyo texto se pueda modificar (renombrar corrientes). Las corrientes de proceso no deberán seguir necesariamente la trayectoria más corta entre dos puntos, sino que deberán rodear los equipos que se encuentran a su paso con el fin de hacer más explícito el diagrama de proceso. Cada vez que se cambia de tamaño, posición, nivel de detalle (zoom) y aún de zona de visualización (pan), se debe actualizar la posición de cada corriente de proceso, porque los puntos que conecta cambian de posición.

Por todo lo anteriormente citado, la representación de las corrientes de proceso y la capacidad de que se actualicen en tiempo real, constituye una tarea lógica compleja y para la cual hubo que desarrollar algoritmos asociados a eventos. Los eventos necesarios para actualizar la posición y estructura de las corrientes son secciones de código que se ejecutan una y otra vez, conforme el programa identifica que se modificaron las coordenadas del diagrama de proceso.

## V. APLICACIONES DEL SGP-FQ

### V.1. Problema de Cavett

A continuación se muestra un problema que típicamente ha sido empleado como ejemplo de prueba para Simuladores de Proceso. Este problema fue propuesto por Cavett en 1963, e involucra cuatro equipos de separación Flash, dos mezcladores sencillos y corrientes de recirculación. La intención de utilizar este ejemplo de prueba en particular, obedece a las razones expuestas a continuación.

- Verificar si el Simulador es capaz de identificar ciclos, así como si es capaz de determinar un conjunto válido de corrientes de corte.
- Probar las capacidades de cálculo de equilibrio en equipos de separación Flash.
- Probar las capacidades de convergencia del Simulador, así como el tiempo que tarda en llevarlo a cabo, y el número de iteraciones que requiere para ello.

El diagrama de proceso para este problema se muestra en la figura 5.1

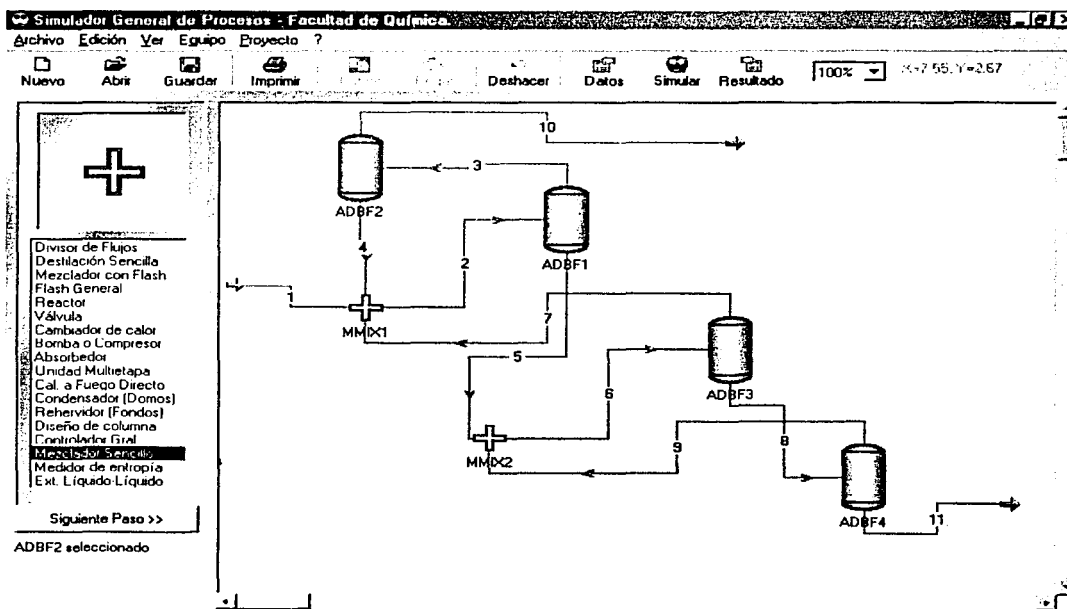


Figura 5.1 Diagrama de proceso para el problema de Cavett en SGP-FQ

En el diagrama de proceso aparecen tanques flash y mezcladores, se pueden identificar fácilmente los ciclos y corrientes de recirculación del proceso y en consecuencia, la necesidad de recurrir a una solución de tipo iterativo.

El primer paso, es la construcción del diagrama de proceso. Los equipos involucrados son 4 tanques flash isotérmicos a 2 fases, dos mezcladores sencillos, una alimentación y dos salidas de productos. El aspecto que tiene este diagrama, al representarlo en el Simulador General de Procesos - Facultad de Química es el que se muestra en la figura 5.1

En este ejemplo se alimentará a la corriente 1, una mezcla de 16 componentes, que son esencialmente, la serie homóloga de alcanos ligeros empezando por el metano, así como otros gases más ligeros. El sistema consiste sólo de etapas de separación en las que existe equilibrio líquido - vapor y no existe reacción química. La composición de la corriente de alimentación se muestra en la tabla 5.2.

Los equipos ADBF1, ADBF2, ADBF3 y ADBF4 representan módulos de separación Flash de manera general. Según la especificación del problema, estos equipos deben operar isotérmicamente, y cada uno a diferente presión, de acuerdo a las especificaciones que se muestran en la tabla 5.1.

Tabla 5.1: Especificaciones de los equipos.

Equipo	Temperatura (R)	Presión (Psia)
ADBF1	580	150
ADBF2	560	200
ADBF3	554	80
ADBF4	545	40

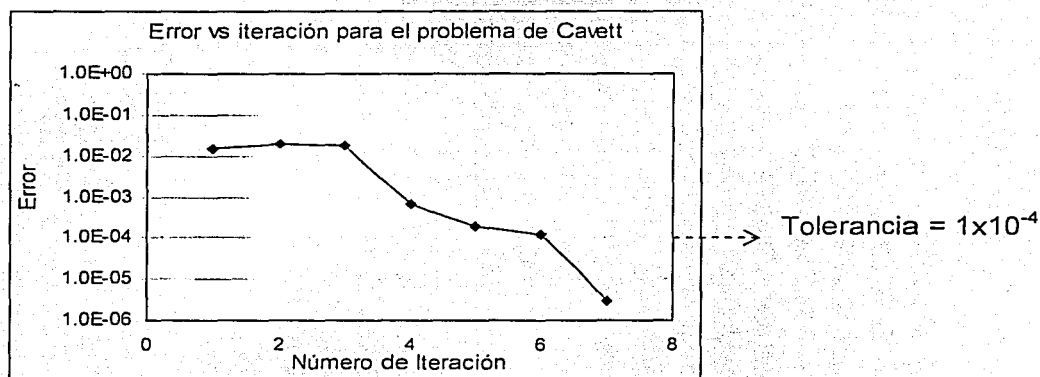
La composición de la corriente de alimentación (corriente 1), así como las composiciones calculadas para las corrientes de producto (10 y 11) aparecen en la Tabla 5.2.

Una vez especificado el problema, se realiza la simulación. Es en este punto, que la interfase gráfica comunica los datos al módulo de cálculo. Dentro del módulo de cálculo, se llevan a cabo una a una las tareas que se describen en la figura 2.6. Todo esto, coordinado por un programa base, que a su vez llama a los diferentes módulos de cálculo y genera el reporte de resultados de la simulación.

Las corrientes de corte, determinadas automáticamente por el Simulador, fueron la 2 y la 6. el algoritmo para la identificación de las corrientes de recirculación se encuentra dentro del módulo de cálculo, y su desarrollo se puede encontrar en la referencia 3.

Suponiendo inicialmente para estas corrientes, la misma composición que la corriente de entrada, el Simulador General de Procesos – Facultad de Química llega a la convergencia tras 7 iteraciones, con el patrón de convergencia que se muestra en la gráfica 5.1

**Gráfica 5.1 Convergencia del caso ejemplo.**



Los resultados obtenidos son entonces, mandados de vuelta a la interfase gráfica como texto y con la misma estructura de reporte que ASPEN PLUS. Este reporte está organizado por páginas, el usuario puede visualizar cada una de ellas por medio de los botones de exploración de la parte inferior de la pantalla, como se muestra en la figura 5.2

La estructura en la que aparecen reportados los resultados es la misma que la que se utiliza en los simuladores comerciales, apareciendo primeramente, una descripción de los datos suministrados por el usuario, para verificar que correspondan al proceso que se está Simulando, y posteriormente, los balances de materia y energía reportados como una tabla en la que se listan las propiedades y composiciones de todas las corrientes de proceso.

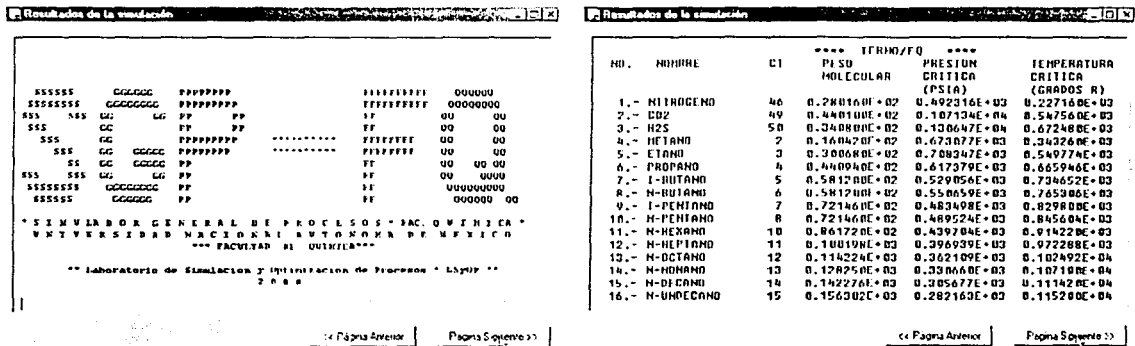


Figura 5.2: Pantallas de resultados de la simulación

En la tabla 5.2, se presentan los resultados de la simulación. Como puede observarse, los componentes más ligeros se concentran en la corriente 10, mientras que los más pesados, en la corriente 11, como resultado de las diferencias de presión y temperatura especificadas.

Tabla 5.2: Composiciones de alimentación y productos.

Componente:	Corriente 1 Alimentación	Corriente10 Ligeros	Corriente11 Pesados
NITROGENO	25.5800	25.4833	0.0970
CO2	112.8500	110.5815	2.2651
H2S	9.9800	8.9873	0.9922
METANO	187.2100	186.8320	0.3801
ETANO	79.8500	77.2131	2.6330
PROPANO	52.0700	44.9678	7.0997
N-BUTANO	10.4200	17.0487	9.5007
I-BUTANO	26.5500	7.4367	2.9830
N-PENTANO	10.9800	5.6793	10.0105
I-PENTANO	15.6900	4.6438	6.3361
N-HEXANO	20.5200	2.9475	17.5723
N-HEPTANO	26.0700	1.1274	24.9424
N-OCTANO	16.1800	0.1454	16.0346
N-NONANO	13.0300	0.0233	13.0067
N-DECANO	5.8600	0.0019	5.8581
N-UNDECANO	7.7900	0.0006	7.7895
TOTAL	620.6300	493.1195	127.5008

## V.2. Columna de Destilación

El modelado de columnas de destilación constituye uno de los problemas más complejos para los simuladores de proceso, pues involucran ciclos internos de convergencia. Las especificaciones de este problema son las siguientes:

- Número de etapas (excluyendo condensador y reboiler) : 15
- Número de etapa de alimentación: 7
- Presión de la columna: 250 psia
- Condensador Parcial con flujo de destilado = 23 lbmol/h
- Rehervidor con flujo de retorno = 150 lbmol/h
- Salida lateral de vapor de la etapa 4, flujo = 37 lbmol/h
- Composición y condiciones de la corriente de alimentación (lbmol/h):

Etano	3
Propano	20
n-Butano	37
n-Pentano	35
n-Hexano	5
Temp.	= 213.9 °F
Presión	= 250 psia

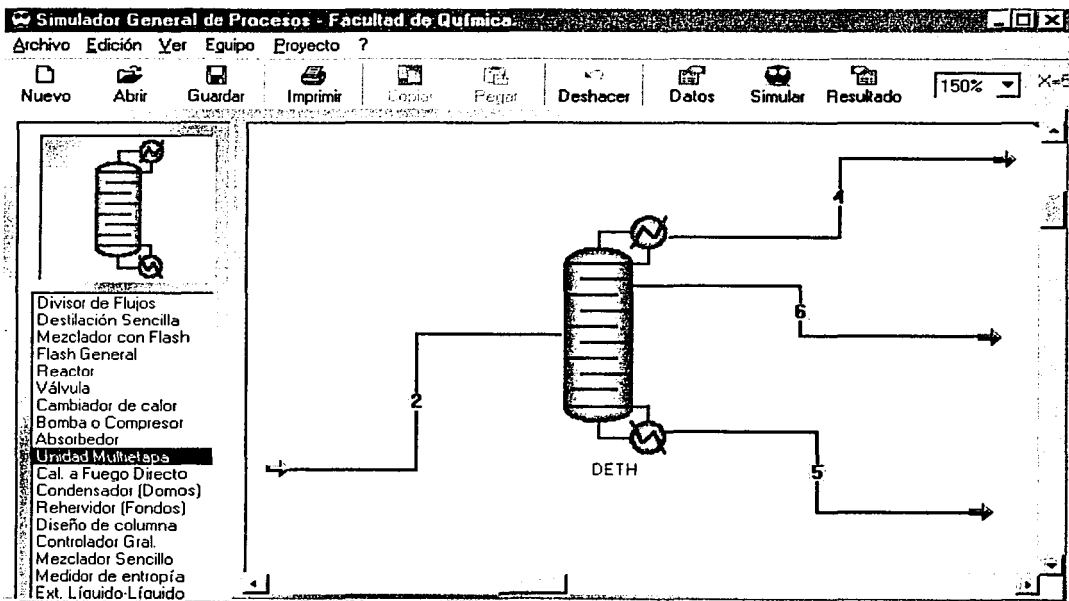


Figura 5.3. Columna de destilación multietapa en SGP-FQ

Para la simulación de esta columna de destilación se ha de requerir al modelado riguroso, ya que cuenta con una salida lateral de vapor de la cuarta etapa. Como se verá posteriormente, la presencia de este tipo de corrientes, al igual que las corrientes de alimentación, modifican apreciablemente los perfiles de composiciones y temperaturas que se presentan a lo largo de la columna porque intervienen substancialmente en los balances de materia y energía del plato al cual se encuentran conectadas.

Este tipo de equipos también es sensible a los cambios en las especificaciones de relación de reflujo y localización de la etapa de alimentación, con el fin de comparar posteriormente los resultados con los de un simulador comercial, estos parámetros se mantuvieron constantes según la especificación del problema.

El modelado riguroso de este tipo de equipos implica primeramente, suponer un estimado inicial de las concentraciones de todos los componentes en todas las etapas, para posteriormente hallar los valores que cumplen los balances de materia, energía y condiciones de equilibrio líquido vapor a través de un procedimiento iterativo, por lo que se deben establecer para este solo equipo, un número máximo de iteraciones y una tolerancia al criterio de convergencia.

En la tabla 5.3 se muestran los resultados de la simulación aplicada a esta columna, especificando como número máximo de iteraciones 50, y con tolerancia al error de 0.001.

**Tabla 5.3. Resultados de la simulación de la Columna Multietapa.**

CORRIENTE	ALIMENTACION	DESTILADO	FONDOS	SALIDA LATERAL
NO. DE CORRIENTE	2	4	5	6
FRACCION VAPOR	0.0379	1.0000	0.0000	1.0000
TEMPERATURA, R	673.5700	629.7618	762.2425	677.1346
PRESION, PSIA	250.0000	250.0000	250.6000	250.3000
ENTALPIA, M BTU	995.6332	303.7270	589.7104	574.0361
ETANO	3.0000	2.0729	0.0000	0.9271
PROPANO	20.0000	12.0127	0.0149	7.9725
N-BUTANO	37.0000	8.7883	3.7525	24.4592
N-PENTANO	35.0000	0.1000	31.2964	3.6036
N-HEXANO	5.0000	0.0000	4.9817	0.0183
TOTAL	100.0000	22.9739	40.0455	36.9806

**Tabla 5.4. Perfil de Temperaturas**

Etapa	Temp (°F)
1	169.101
2	188.849
3	200.537
4	208.866
5	216.699
6	223.219
7	228.864
8	233.736
9	238.051
10	249.285
11	257.974
12	265.674
13	273.073
14	280.351
15	287.503
16	294.642
17	302.24

**Tabla 5.4. Fracción mol de cada componente en el líquido de cada etapa.**

Etapa	C2	C3	N-C4	N-C5	N-C6
1	0.02936	0.35914	0.59652	0.01497	0.00001
2	0.01275	0.23820	0.71410	0.03490	0.00004
3	0.00842	0.16862	0.75396	0.06883	0.00018
4	0.00723	0.13168	0.73796	0.12251	0.00063
5	0.00683	0.11195	0.67950	0.19969	0.00202
6	0.00669	0.10327	0.61220	0.27289	0.00495
7	0.00660	0.09867	0.55022	0.33389	0.01061
8	0.00654	0.09570	0.49907	0.37780	0.02089
9	0.00649	0.09350	0.45882	0.40268	0.03851
10	0.00206	0.05364	0.45819	0.44671	0.03940
11	0.00064	0.02951	0.43055	0.49858	0.04073
12	0.00019	0.01568	0.38379	0.55768	0.04266
13	0.00005	0.00806	0.32515	0.62103	0.04570
14	0.00002	0.00401	0.26155	0.68329	0.05113
15	0.00000	0.00192	0.19909	0.73722	0.06176
16	0.00000	0.00088	0.14227	0.77375	0.08310
17	0.00000	0.00037	0.09365	0.78133	0.12465



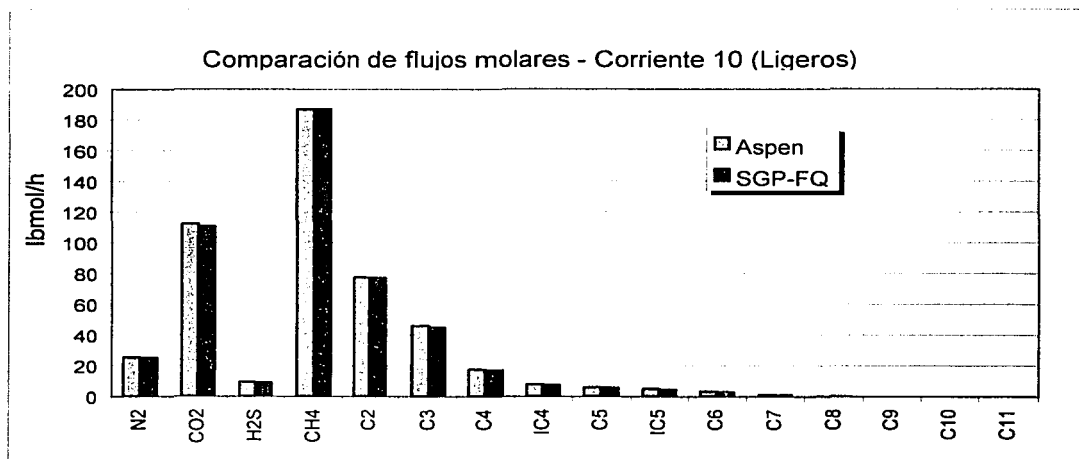
## VI. ANÁLISIS DE RESULTADOS

### VI.1. Problema de Cavett

Los resultados de este problema se muestran en la sección anterior. Con el fin de comparar estos resultados, se realizó la simulación de este mismo problema utilizando ASPEN PLUS®. Las gráficas 5.2 y 5.3 muestran cuán parecidos son los valores obtenidos para los flujos molares tanto de los componentes ligeros como de los pesados, en las corrientes de productos (10 y 11).

La razón de comparar los flujos molares de las corrientes de productos, es que tanto la temperatura como la presión de operación de los equipos ha sido fijada para que en cada etapa coexistan las fases líquido y vapor en equilibrio. Adicionalmente, los flujos molares pueden variar dependiendo del modelo empleado para predecir propiedades y del método de convergencia, aún cuando para dos casos se fijen los mismos valores iniciales y la misma tolerancia ( $1e-4$ ).

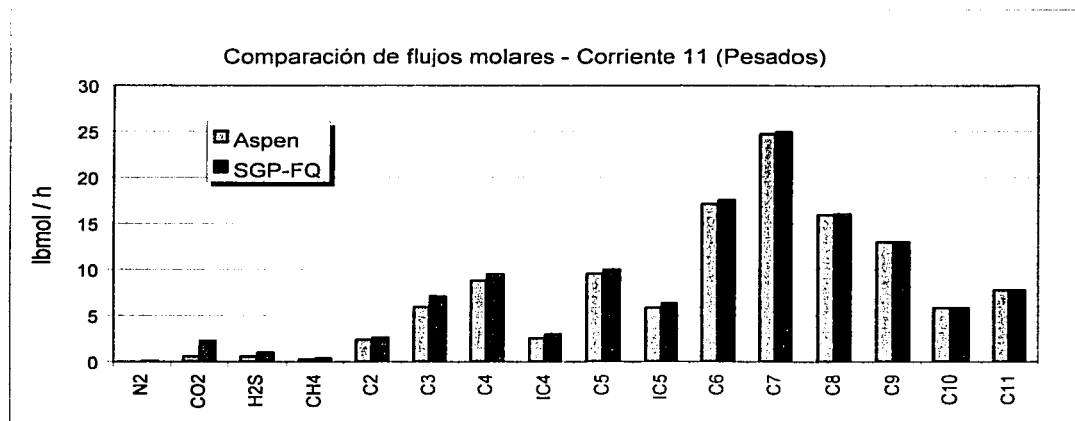
**Gráfica 6.1. Distribución de componentes ligeros en la corriente 10**



Como puede observarse, la corriente 10 consiste esencialmente de componentes ligeros, lo cual es entendible, dada la distribución de presiones y temperaturas de los 4 tanques flash, y el hecho de que la corriente 10 sea vapor saturado.

Para la corriente 11, como es de esperarse, ambos simuladores predicen una concentración mayor de componentes pesados, como el n-heptano, que se encuentra presente en gran cantidad en la corriente de alimentación.

**Gráfica 6.2. Distribución de componentes ligeros en la corriente 10**



Respecto a la forma de cálculo, podemos mencionar que ambos simuladores determinaron el mismo conjunto de corrientes de corte para este problema, las corrientes 2 y 6. Fueron necesarias 7 iteraciones para el Simulador General de Procesos y 11 para ASPEN PLUS. En ambos simuladores, se empleó el mismo método para predecir propiedades termodinámicas. Se empleó también la misma tolerancia y método de convergencia.

La razón de efectuar la comparación en base a flujos molares obedece a que las temperaturas y presiones habían sido previamente especificadas para este problema. Las corrientes que se tomaron en cuenta para esta comparación son las que corresponden a los productos porque independientemente de la forma de cálculo, estas corrientes deben presentar un perfil de concentraciones tales que los componentes más ligeros se concentren en la corriente 10 y los componentes más pesados en la corriente 11.

Como se mencionó anteriormente, este problema es muy sensible al método de convergencia. Al probar que el Simulador General de Procesos - Facultad de Química puede resolver problemas de este tipo y nivel de dificultad, podemos considerar que los métodos de convergencia de este simulador son tan buenos como los de ASPEN PLUS.

## VI.2. Columna de destilación

Para este ejemplo, resulta pertinente comparar tres aspectos fundamentales: el primero es la composición y condiciones de las corrientes de salida, (temperatura y presión) ya que estas se encuentran estrechamente ligadas por las condiciones de equilibrio y de balances de materia y energía para la columna. Los valores reportados por el Simulador General de Procesos - Facultad de Química se encuentran en la tabla 6.1, mientras que los valores obtenidos con ASPEN PLUS se encuentran en la tabla 6.2.

**Tabla 6.1. Simulación de Columna Multietapa con SGP-FQ**

CORRIENTE	ALIMENTACION	DESTILADO	FONDOS	SALIDA LATERAL
NO. DE CORRIENTE	2	4	5	6
FRACCION VAPOR	0.0379	1.0000	0.0000	1.0000
TEMPERATURA, R	673.5700	629.7618	762.2425	677.1346
PRESION , PSIA	250.0000	250.0000	250.6000	250.3000
ENTALPIA, M BTU	995.6332	303.7270	589.7104	574.0361
ETANO	3.0000	2.0729	0.0000	0.9271
PROPANO	20.0000	12.0127	0.0149	7.9725
N-BUTANO	37.0000	8.7883	3.7525	24.4592
N-PENTANO	35.0000	0.1000	31.2964	3.6036
N-HEXANO	5.0000	0.0000	4.9817	0.0183
TOTAL	100.0000	22.9739	40.0455	36.9806

**Tabla 6.2. Simulación de Columna Multietapa con ASPEN PLUS**

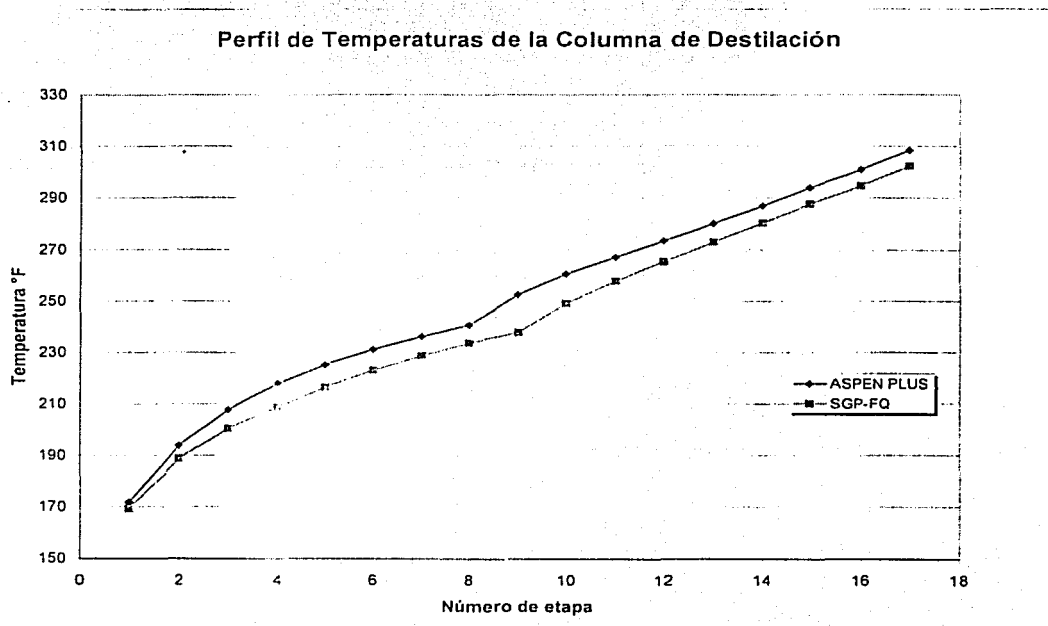
CORRIENTE	ALIMENTACION	DESTILADO	FONDOS	SALIDA LATERAL
Display	2	4	5	6
Temperature R	673.9	631.6	768.4	678.2
Pressure PSI	250.0000	250.0000	250.0000	250.0000
Vapor Frac	0.0960	1.0000	0.0000	1.0000
Mole Flow LBMOL/HR	100.0000	23.0000	40.0000	37.0000
Mass Flow LB/HR	6078.8510	1115.1210	2905.9420	2057.7890
Volume Flow CUFT/HR	400.1100	480.0190	102.5270	812.2600
Enthalpy MMBTU/HR	-5.9630	-1.0790	-2.5640	-1.8570
ETHANE	3.0000	2.1230	0.0000	0.8770
PROPANE	20.0000	11.7520	0.0020	8.2460
N-C4	37.0000	8.9330	3.5530	24.5130
N-C5	35.0000	0.1910	31.4680	3.3410
N-C6	5.0000	0.0000	4.9770	0.0230

Lo primero que podemos apreciar de estos resultados es que hay mucha similitud entre los valores reportados por ambos simuladores en cuanto a la composición y flujo de las corrientes de salida de la columna (destilado, fondos y salida lateral). Ambos simuladores determinan la fracción vapor de la corriente de alimentación, y los valores obtenidos para esta son muy similares, denotando que se está alimentando una mezcla predominantemente líquida, como es el caso en muchas columnas de destilación.

Una diferencia importante, es que las entalpías mostradas tienen valores substancialmente diferentes pero ello obedece a que estos valores dependen del estado de referencia. Ciertamente, los valores de las entalpías absolutas no influyen mucho porque para el cálculo de potencia y carga térmica sólo se consideran diferencias de entalpía y estas diferencias no dependen del estado de referencia.

En la gráfica 6.3 se presenta la comparación del Perfil de Temperaturas obtenido para este ejemplo con ambos simuladores. Podemos apreciar que los dos presentan aproximadamente la misma pendiente y el mismo valor para la temperatura de destilado.

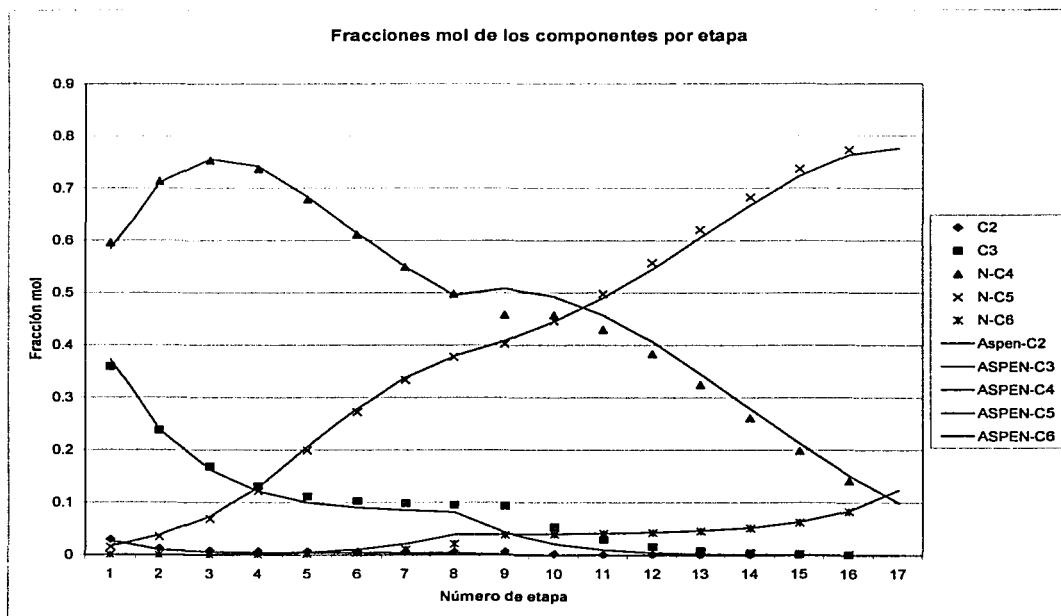
**Gráfica 6.3. Comparación del Perfil de Temperaturas**



En ambos casos, el perfil de temperaturas presenta un cambio de pendiente a partir de la séptima etapa, pues en esta se halla la corriente de alimentación. ASPEN PLUS reporta valores de temperatura ligeramente mayores, pero exhibe el mismo comportamiento a lo largo de la columna, con lo que podemos considerar que el Simulador General de Procesos - Facultad de Química tiene la misma capacidad de predicción del comportamiento térmico del sistema.

Un aspecto más que resulta interesante comparar es la distribución de los componentes a lo largo de la columna, en la gráfica 6.4 se muestra una gráfica de las fracciones mol de cada componente en cada etapa de la columna. Lo primero que podemos apreciar es que el Simulador General de Procesos - Facultad de Química presenta el mismo comportamiento que ASPEN PLUS respecto a la distribución de los componentes en las primeras secciones de la columna, mientras que difieren un poco en la zona cercana a la etapa de alimentación, ya que esta modifica substancialmente el perfil de composiciones como en su caso ocurrió con el perfil de temperaturas.

**Gráfica 6.4 Fracciones mol de los componentes por etapa.**



Estos resultados se presentan en forma numérica en las tablas 6.3 y 6.4.

**Tabla 6.3. Perfil de composiciones calculado con el Simulador General de Procesos - Facultad de Química**

Etapa	C2	C3	N-C4	N-C5	N-C6
1	0.02936	0.35914	0.59652	0.01497	0.00001
2	0.01275	0.23820	0.71410	0.03490	0.00004
3	0.00842	0.16862	0.75396	0.06883	0.00018
4	0.00723	0.13168	0.73796	0.12251	0.00063
5	0.00683	0.11195	0.67950	0.19969	0.00202
6	0.00669	0.10327	0.61220	0.27289	0.00495
7	0.00660	0.09867	0.55022	0.33389	0.01061
8	0.00654	0.09570	0.49907	0.37780	0.02089
9	0.00649	0.09350	0.45882	0.40268	0.03851
10	0.00206	0.05364	0.45819	0.44671	0.03940
11	0.00064	0.02951	0.43055	0.49858	0.04073
12	0.00019	0.01568	0.38379	0.55768	0.04266
13	0.00006	0.00806	0.32515	0.62103	0.04570
14	0.00002	0.00401	0.26155	0.68329	0.05113
15	0.00000	0.00192	0.19909	0.73722	0.06176
16	0.00000	0.00088	0.14227	0.77375	0.08310
17	0.00000	0.00037	0.09365	0.78133	0.12465

**Tabla 6.4. Perfil de composiciones calculado con ASPEN PLUS.**

Stage	ETHANE	PROPANE	N-C4	N-C5	N-C6
1	0.02644	0.37243	0.58454	0.01657	0.00003
2	0.00974	0.24068	0.71134	0.03812	0.00013
3	0.00590	0.16286	0.75690	0.07388	0.00046
4	0.00489	0.12185	0.74278	0.12897	0.00151
5	0.00448	0.10026	0.68428	0.20647	0.00451
6	0.00426	0.09077	0.61542	0.27918	0.01037
7	0.00410	0.08562	0.55078	0.33859	0.02091
8	0.00396	0.08213	0.49617	0.37913	0.03860
9	0.00079	0.04257	0.50884	0.40883	0.03897
10	0.00015	0.02094	0.49348	0.44562	0.03981
11	0.00003	0.00990	0.45787	0.49107	0.04113
12	0.00000	0.00451	0.40704	0.54532	0.04312
13	0.00000	0.00197	0.34573	0.60600	0.04629
14	0.00000	0.00083	0.27918	0.66809	0.05191
15	0.00000	0.00033	0.21295	0.72405	0.06267
16	0.00000	0.00013	0.15192	0.76423	0.08372
17	0.00000	0.00004	0.09937	0.77670	0.12389

## VII. CONCLUSIONES Y RECOMENDACIONES

Las conclusiones obtenidas durante la realización de este trabajo son las siguientes:

1. Los resultados que se obtienen con este simulador presentan una mínima diferencia a los obtenidos con el simulador comercial ASPEN PLUS, comprobando con esto su capacidad de reproducir los fenómenos que ocurren en los procesos simulados.
2. Los ejemplos planteados como aplicación del Simulador General de Procesos - Facultad de Química involucran recirculaciones, en las que el simulador es capaz de descomponer la estructura del proceso y generar con esto, una secuencia de cálculo, la cual es un potencial en todos los simuladores con estructura modular.
3. La información requerida para llevar a cabo las simulaciones se encuentra en los bancos de datos de los cuales pueden ser actualizados y con ello evitar el problema que se genera cuando los componentes no se encuentran en dicho banco.
4. Como se puede ver, la implantación de una interfase gráfica facilita la especificación del problema que se va a simular ya que dicha interfase va solicitando paso a paso los datos que se requieren para la simulación y en consecuencia, hace al Simulador General de Procesos - Facultad de Química un programa de fácil manejo y versátil.
5. La posibilidad de incluir cualquier módulo desarrollado por el usuario permite que este explote las capacidades del cálculo de propiedades y de convergencia de las estructuras de proceso.
6. Otra conclusión es que los usuarios puedan realizar la simulación en cualquier computadora, desde una 486 hasta una pentium 4, sin que ello represente una restricción por el tipo de computadora o de sistema operativo.

Las recomendaciones que consideramos pertinentes sobre este trabajo son:

Este simulador debe tener el compromiso de continuar su desarrollo con más y mejores métodos para el cálculo de propiedades, modelos de operaciones unitarias, modelos de reactores, así como el incluirle modelos para la evaluación económica de los procesos.



## VIII. BIBLIOGRAFÍA

1. Westerberg, Hutchison, Motard, Winter, "Process Flowsheeting", Cambridge University Press, New York, 1984
2. Evans, Lawrence B. "Advances In Process Flowsheeting" Foundations of Computer-Aided Chemical Process Design Vol. I. Engineering Foundation, New York, 1980
3. Ramos Olmos Mariano, "Simulación de Procesos a Estado Estacionario" Tesis Profesional, Facultad de Química, UNAM, 1984
4. Henley & Seader, "Operaciones de Separación por Etapas de Equilibrio en Ingeniería Química.", Ediciones Repla, México, 1990
5. Edgar, T. F., Himmelblau, Optimization of Chemical Processes, McGraw-Hill, New York, 1988.
6. Douglas, J. M., Conceptual Design of Chemical Processes, McGraw-Hill, 1988
7. ASPEN PLUS Reference Manual Vol I. Unit Operations Models, Aspen Technology Inc, 1994.
8. ASPEN PLUS – Getting Started. "Building and Running a Process Model", Aspen Technology Inc, 1994.
9. HYSYS PROCESS Reference Guide Vol 1. Hyprotech Inc, 1996.
10. HYSYS PLANT Simulation Basics, Hyprotech Inc, 1996.
11. Amundson, N.R. and Pontinen "Multicomponent Distillation Calculations on a Large Digital Computer", IEC, 50, 730, 1958
12. Benjamin, D.R.; Locke, M.H. and Westerberg, A.W., "Interactive Programs for Process Design", Design Research Center, Carnegie-Mellon University, Rep. DRC-06-28-81, 1981

13. Gani, R., Hytoft, G., Jaksland, C., Jensen, A. K., An integrated computer aided system for integrated design of chemical processes, *Computers and Chemical Engineering*, 21, pp1135-1146, 1997.
14. Sim, W.D.; Sauve, R.; Eastick, R. and Satyro, M.A. "An Open Architecture for Process Engineering", Hyprotech 1994 International Users' Conference, Lake Tahoe, September, 1994
15. Carlson, E. C., "Don't Gamble with Physical Properties for Simulations," *Chem. Eng. Progress*, Oct. 1996.
16. Tyreus, B. "Object-Oriented Dynamic Simulation", Hyprotech 1992 International Users' Conference 1992

## IX. APÉNDICES

### IX.1. Manual de Usuario del SGP-FQ

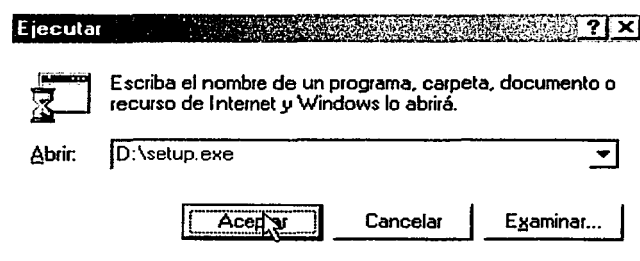
SGP-FQ: Simulador General de Procesos - Facultad de Química ver 1.27c.  
Laboratorio de Simulación y Optimización de Procesos.  
Facultad de Química, Universidad Nacional Autónoma de México.

#### - Requisitos Mínimos:

Procesador 486 o superior.  
8 MB o más de memoria RAM  
30 MB de espacio libre en disco duro.  
Windows 95, 98, NT, 2000, o XP.  
Resolución 800x600 o superior recomendada.

#### - Instalación:

Para instalar el Simulador General de Procesos - Facultad de Química en su computadora, introduzca el CD de instalación, si el programa de instalación no inicia automáticamente, ejecute el programa SETUP.EXE, localizado en el directorio raíz de la unidad de CD-ROM, como se muestra en la figura 9.1.



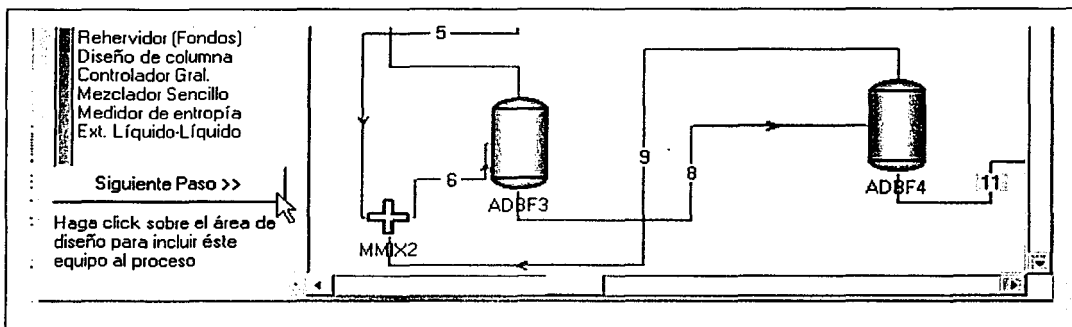
**Figura 9.1. Procedimiento para ejecutar el programa de instalación**

El programa de instalación guiará paso a paso sobre dónde desea que se instalen los archivos del Simulador General de Procesos - Facultad de Química. Como parte del proceso de instalación, se creará un grupo dentro del menú inicio desde el que podrá ejecutar el programa principal.

- Ayuda y asistentes disponibles.

Para activar la ayuda del Simulador General de Procesos - Facultad de Química, presione la tecla F1 durante la ejecución del programa.

Como ayuda adicional en tiempo real, se cuenta con el botón "siguiente paso", localizado en la parte inferior izquierda de la pantalla. Este botón tiene la función primordial de orientar al usuario sobre qué es lo siguiente que debe hacer para llevar a cabo la simulación, mediante un mensaje que aparece en la parte inferior izquierda de la pantalla, como se muestra en la figura.



- Construcción de Diagramas de Proceso.

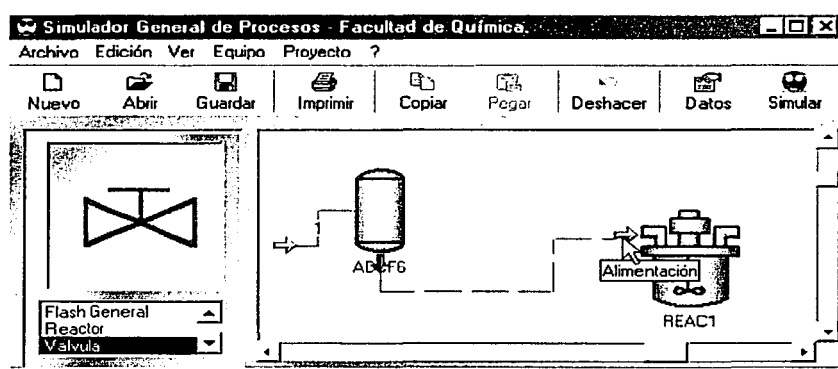
Para construir el Diagrama de Proceso el usuario debe seleccionar los modelos de las operaciones involucradas en el proceso. Estos están disponibles en una lista que aparece en la parte izquierda de la pantalla. Al hacer esto, se modificará el puntero del mouse, indicando que el programa está listo para colocar el modelo seleccionado en el área de dibujo donde el usuario haga click con el botón principal.

Si el diagrama de proceso excede las dimensiones del área de dibujo, el usuario puede desplazarse a otra sección por medio de las barras de desplazamiento horizontal y vertical que aparecen al margen del área de dibujo.

Una vez que se han incluido los equipos que aparecerán en el diagrama de proceso, el usuario deberá definir las conexiones entre ellos, es decir, las corrientes de proceso. Esto se hace a través de un menú desplegable que aparece al hacer click con el botón secundario del mouse sobre alguno de los modelos incluidos en el área de dibujo. El usuario tiene entonces, la opción de conectar una entrada o una corriente de salida al equipo seleccionado, como se muestra en la figura.

Cuando se activa una de las opciones de conexión, aparecerán en torno al equipo seleccionado, flechas que indican las entradas o salidas disponibles. Posicionando el puntero del mouse sobre cada una de estas flechas, aparecerá un mensaje con el nombre de la entrada o salida, y si esta es opcional. Para completar el diagrama de proceso, todas las corrientes de todos los equipos, salvo aquellas indicadas como "opcionales" deberán estar conectadas, a fin de evitar errores durante la ejecución del módulo de cálculo.

Para conectar a otro equipo, desplace el puntero del mouse sobre el equipo al cual desea conectar. Al hacer esto, aparecerán alrededor, las flechas de entradas o salidas disponibles para conectar. Finalmente, haciendo click en alguna de ellas, se establece la conexión entre equipos, representada en la por líneas rectas y un número que identifica a la corriente, como se aprecia en la figura.



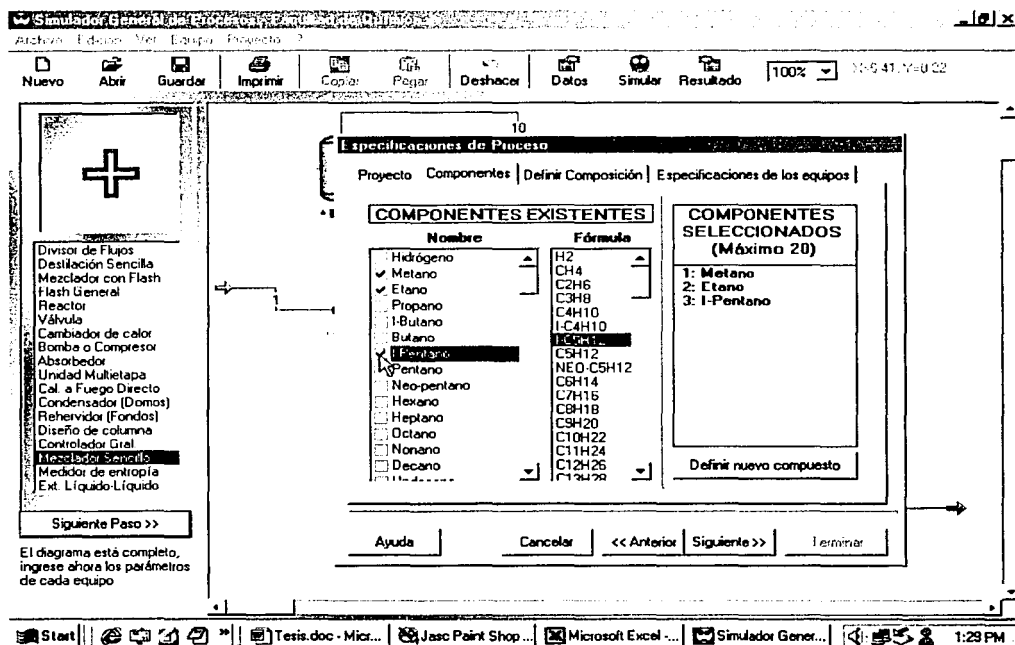
La opción de conectar corrientes de entrada o de salida a un equipo está restringida al número de corrientes no ocupadas en el equipo en cuestión. El programa está diseñado para no permitir que un equipo se conecte a sí mismo, salvo que exista un equipo intermedio, como se ilustra en la figura.

Para crear una corriente de alimentación al proceso, se selecciona la entrada del equipo al que se desea alimentar la corriente, y después se hace click sobre el área de dibujo donde se desea que aparezca la alimentación, como se muestra en la figura.

De la misma forma se crean las corrientes de producto del proceso, se selecciona un equipo del que salga la corriente y esta se conecta al área de dibujo.

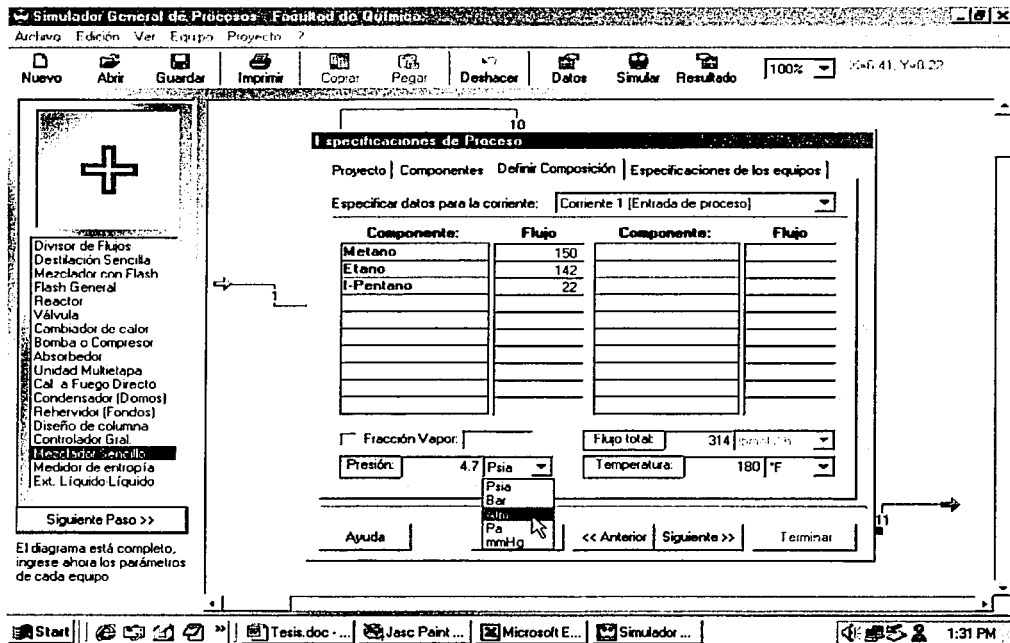
#### - Definir componentes

Para realizar la simulación del proceso, es necesario especificar todos los componentes presentes en todas las corrientes. El Simulador General de Procesos - Facultad de Química cuenta con un banco de datos de 98 componentes que corresponden a los hidrocarburos, solventes y sustancias de interés en la Industria Química y Petroquímica. Adicionalmente, el usuario puede definir las propiedades del o los componentes que no estén presentes en esta base de datos.



#### - Definir corrientes de entrada

Se deben especificar la composición, flujo y dos condiciones de las corrientes de alimentación. Esto se hace en el cuadro de diálogo que sigue al de la definición de componentes y que se muestra en la figura.



### - Parámetros de los equipos

Una vez que se han especificado las corrientes de alimentación del proceso, el usuario deberá suministrar los parámetros necesarios para efectuar los cálculos de los modelos de operaciones unitarias. Cada equipo representado en el diagrama de proceso cuenta con una pantalla de propiedades que es específica para el modelo de operación unitaria que representa, y se deben especificar como se describe a continuación.

MODELO	ESPECIFICACIONES
ABSORCION	<p>Número de etapas de equilibrio</p> <p>Incremento de temperatura (delta T)</p> <p>Opción de calcular la temperatura de salida del absorbente por balance de energía o que esta corresponda a su temperatura de burbuja.</p> <p>Opción de especificar la cantidad de calor absorbido, de lo contrario el equipo se calcula adiabáticamente (<math>Q=0</math>)</p>

FLASH	<p>Pueden especificarse las siguientes variables (cada pareja corresponde a un modo de operación en el que se calculan las variables restantes)</p> <ol style="list-style-type: none"> <li>1. Temperatura y presión de salida</li> <li>2. Temperatura y fracción vapor</li> <li>3. Temperatura para separación adiabática</li> <li>4. Temperatura para recuperación de un componente</li> <li>5. Presión y fracción vapor</li> <li>6. Presión para separación adiabática</li> <li>7. Presión para recuperación de un componente</li> </ol> <p>Cuando se especifican las opciones 3 o 7, se debe especificar qué componente se desea recuperar y su fracción.</p>
CAMBIADOR DE CALOR	<p>Opción de una corriente (calentador / enfriador): Especificar Temperatura de salida y caída de presión.</p> <p>Opción de dos corrientes (proceso-proceso) Temperatura de salida de alguna corriente Mínimo acercamiento de temperatura permitido.</p>
DISEÑO DE COLUMNA	<p>Especificar método para localizar la etapa de alimentación. Seleccionar componente clave ligero (LK) Seleccionar componente clave pesado (HK) Tipo de condensador (parcial o total) Relación R / Rmínimo</p>
EVALUACION DE COLUMNA	<p>Para este caso se especifican las mismas condiciones que para diseño, pero además se debe indicar el número de etapas de la columna.</p>
COLUMNA MULTIETAPA	<p>Especificar número de etapas, incluyendo condensador y reboiler si los hay. Número de etapa(s) de alimentación(es) Presión de la columna: 250 psia Relación de Reflujo (R o R/Rmin) Caída de presión por etapa. Tipo de condensador (parcial/total) Modo de operación del condensador Especificación del condensador Caída de presión del condensador Tipo de condensador (parcial/total) Modo de operación del condensador Especificación del condensador</p>



	<p>Caida de presión del condensador</p> <p>Localización de salidas laterales</p> <p>Flujo de las salidas laterales</p> <p>Especificación de salidas laterales (si son vapor o líquido)</p>
REHERVIDOR	Se especifica la relación líquido / vapor de retorno en flujo o en fracción de la corriente de entrada
CONDENSADOR	Se especifica la relación vapor / líquido de retorno en flujo o en fracción de la corriente de entrada
CALENTADOR A FUEGO DIRECTO	Especificar la cantidad de calor absorbido o bien la Temperatura a la que se lleva la corriente de proceso..
BOMBA	Especificar número de etapas de compresión, presión de salida y motivo de la potencia (electricidad / vapor / gas)
COMPRESOR	
VALVULA	Sólo requiere especificarse la presión de salida.
REACTOR	<p>Se precisa una sola reacción por equipo.</p> <p>Los coeficientes estiquiométricos son positivos (+) para productos y negativos (-) para reactivos</p> <p>Se especifica el avance de reacción.</p>
DIVISOR	Se especifica la fracción de alimentación que se va por cada corriente de salida
MEZCLADOR	Este equipo no requiere especificarse.

## IX.2. Banco de datos de componentes puros del Simulador General de Procesos - Facultad de Química.

ID	Nombre	Formula	Omega	P.solubilidad	Vmolar	Tc(K)	Pc(Atm)	Vc	P.molec	Dens
1	HIDROGENO	H2	0	3.25	0.955	33.27	12.79	65	2.016	0.07
2	METANO	CH4	0	5.66	5	190.7	45.8	99.5	16.042	0.2
3	ETANO	C2H6	0.1064	6.03	7.88	305.43	48.2	148	30.068	0.376
4	PROPANO	C3H8	0.1538	6.4	10.35	369.97	42.01	200	44.094	0.5076
5	I-BUTANO	C4H10	0.1825	6.73	13.37	408.14	36	263	58.12	0.5633
6	N-BUTANO	C4H10	0.1953	6.73	13	425.17	37.47	255	58.12	0.5847
7	I-PENTANO	C5H12	0.2104	7.021	15.36	461	32.9	308	72.146	0.6246
8	N-PENTANO	C5H12	0.2387	7.021	15.27	469.78	33.31	311	72.146	0.63089
9	NEO-PENTANO	C5H12	0.195	7.021	15.89	433.76	31.57	303	72.146	0.5967
10	N-HEXANO	C6H14	0.2927	7.266	17.64	507.9	29.92	368	86.172	0.66384
11	N-HEPTANO	C7H16	0.3403	7.43	20.05	540.16	27.01	426	100.198	0.68801
12	N-OCTANO	C8H18	0.3992	7.551	22.49	569.4	24.64	486	114.224	0.70654
13	N-NONANO	C9H20	0.4439	7.649	24.94	595	22.5	543	128.25	0.72146
14	N-DECANO	C10H22	0.4869	7.721	27.42	619	20.8	602	142.276	0.7339
15	N-UNDECANO	C11H24	0.521	7.79	29.9	640	19.2	660	156.302	0.744
16	N-DODECANO	C12H26	0.561	7.84	32.39	659	17.9	718	170.328	0.7525
17	N-TRIDECANO	C13H28	0.6002	7.89	34.88	677	17	780	184.354	0.76
18	N-TETRADECANO	C14H30	0.6399	7.92	37.39	695	16	830	198.38	0.7663
19	N-PENTADECANO	C15H32	0.6743	7.96	39.89	710	15	890	212.406	0.772
20	N-HEXADECANO	C16H34	0.7078	7.99	42.41	725	14	950	226.432	0.7734
21	N-HEPTADECANO	C17H36	0.7327	8.03	44.92	735	13	1000	240.458	0.778
22	ETILENO	C2H4	0.0949	6.02	6.88	283.06	50.5	124	28.052	0.349
23	PROPILENO	C3H6	0.1451	6.43	9.69	365.1	45.4	181	42.078	0.5226
24	1-BUTENO	C4H8	0.2085	6.76	12.17	419.6	39.7	240	56.104	0.6014
25	CIS-2-BUTENO	C4H8	0.2575	6.76	11.71	428	41	236	56.104	0.6271
26	TRANS-2BUTENO	C4H8	0.223	6.76	12	428	41	240	56.104	0.61
27	I-BUTENO	C4H8	0.1975	6.76	12.17	417.89	39.45	235	56.104	0.6005
28	1-3-BUTADIENO	C4H6	0.2028	6.94	11.27	425	42.7	221	54.088	0.6274
29	1-PENTENO	C5H10	0.2198	7.055	14.55	474	39.9	295	70.13	0.64565
30	CIS-2-PENTENO	C5H10	0.206	7.055	14.26	481.16	35.3	295	70.13	0.6607

31	TRANS-2-PENTENO	C5H10	0.209	7.055	14.41	479.16	35.1	295	70.13	0.6534
32	2-C1-1-BUTENO	C5H10	0.2	7.055	14.31	472.16	35	301	70.13	0.6558
33	3-C1-1-BUTENO	C5H10	0.149	7.055	14.77	461.16	34.5	291	70.13	0.6326
34	2-C1-2-BUTENO	C5H10	0.212	7.055	14.14	477.16	35.9	286	70.13	0.6776
35	1-HEXENO	C6H12	0.2463	7.4	16.9	503.99	32.1	350	84.156	0.67779
36	CICLOPENTANO	C5H10	0.2051	8.107	12.72	511.76	44.55	260	70.13	0.75018
37	C1-CICLO-C5	C6H12	0.2346	7.849	15.33	532.77	37.36	319	84.156	0.7534
38	CICLOEXANO	C6H12	0.2032	8.196	14.87	553.46	38.2	308	84.156	0.78314
39	C1-CICLO-C6	C7H14	0.2421	7.826	17.67	572.16	34.32	344	98.182	0.77371
40	BENCENO	C6H6	0.213	9.158	12.26	562.61	48.6	260	78.108	0.88417
41	TOLUENO	C7H8	0.2591	8.915	14.83	594	40	316	92.134	0.87146
42	O-XILENO	C8H10	0.2904	8.987	17.03	632.2	36	369	106.16	0.8844
43	M-XILENO	C8H10	0.3045	8.818	17.28	619.2	35	376	106.16	0.86836
44	P-XILENO	C8H10	0.2969	8.769	17.34	618.2	34	378	106.16	0.86532
45	ETILBENCENO	C8H10	0.2936	8.787	17.23	619.7	37	374	106.16	0.87141
46	NITROGENO	N2	0.0206	3.3	2.534	126.2	33.5	90.1	28.016	0.808
47	OXIGENO	O2	0.0299	4	2.871	154.8	50.1	74.4	32	1.14
48	CO	CO	-0.0067	3.13	2.584	133	34.5	93.1	28.01	0.804
49	CO2	CO2	0.1768	6	6.365	304.2	72.9	94	44.01	1.101
50	H2S	H2S	0.0868	6.03	5.081	373.6	88.9	95	34.08	0.79
51	SO2	SO2	0.2402	6	6.516	430.7	77.7	122	64.06	1.434
52	2-METIL-C5	C5H12	0.2771	7.018	17.727	498.06	29.94	367	86.2	0.6579
53	3-METIL-C5	C5H12	0.2746	7.132	17.473	504.33	30.83	367	86.2	0.669
54	2,2-DI-C1-C4	C6H14	0.2314	6.712	16.297	489.39	30.65	359	86.2	0.654
55	2,3-DI-C1-C4	C6H14	0.2466	6.967	17.519	500.28	30.99	358	86.2	0.6664
56	1-HEPTENO	C7H14	0.3471	7.168	19.223	535.5	28.05	405	98.2	0.7015
57	PROPADIENO	C3H4	0.1193	6.854	7.721	392.78	45.92	146	40.1	0.657
58	1,2BUTADIENO	C4H6	0.0987	7.95	10.936	458.06	40.12	221	54.1	0.658
59	C2-CICLO-C5	C7H14	0.2709	7.739	17.713	569.44	33.53	375	98.2	0.771
60	C2-CICLO-C6	C8H16	0.3046	7.743	19.916	602.61	30.88	419	112.2	0.7922
61	ISOPRENO	C5H8	0.213	7.277	13.297	484.28	38	266	68.1	0.6861
62	AGUA	H2O	0.348	23.4	2.552	647.33	218.37	56	18.02	1
63	AMONIO	NH3	0.255	16.3	6.908	405.72	111.32	80.1	17.03	0.6173
64	CARBONO	C	0	1	0.001	1	0.07	1	12.01	1

65	ACETILENO	C2H2	0.1803	4.55	4.983	309.49	61.58	113.3	26.036	0.615
66	PROPINO	C3H4	0.258	7.52	8.074	394.83	51.03	169.8	40.062	0.63
67	1-BUTINO	C4H6	0.096	7.56	11.091	474.83	46.5	237.2	54.088	0.65
68	2-METILPROPENO	C4H10	0.1951	6.76	12.169	417.89	39.45	237.6	56.104	0.6004
69	METANOL	CH3OH	0.1955	8.24	12.327	511.76	44.55	257.6	68.114	0.7505
70	N-PROPILBENCENO	C9H12	0.3463	8.64	19.745	638.38	31.3	434.5	120.186	0.866
71	I-PROPILBENCENO	C9H12	0.2862	8.53	19.714	631.05	31.3	438.2	120.186	0.866
72	1-C1-2-C2-BENCE	C9H12	0.3005	8.88	19.392	652.61	31.3	451	120.186	0.8852
73	1-C1-3-C2-BENCE	C9H12	0.3736	8.72	19.66	635.94	31.3	428.9	120.186	0.869
74	1-C1-4-C2-BENCE	C9H12	0.3874	8.67	19.73	635.94	31.3	427	120.186	0.8657
75	1,2,3-MESITILENO	C9H12	0.3081	9.08	19.178	667.56	31.3	460.2	120.186	0.8987
76	1,2,4-MESITILENO	C9H12	0.3379	8.88	19.517	654.72	31.98	437.3	120.186	0.8802
77	1,3,5-MESITILENO	C9H12	0.3792	8.78	19.683	642.05	31.98	423	120.186	0.8689
78	N-BUTILBENCENO	C10H14	0.407	8.52	22.229	660.38	29.4	469	134.212	0.965
79	2-METILHEXANO	C7H16	0.3336	7.21	20.077	525.38	27.22	421.9	100.198	0.683
80	3-METILHEXANO	C7H16	0.3257	7.29	19.907	535.61	28.1	408.8	100.198	0.6915
81	2-METILHEPTANO	C8H18	0.3832	7.35	22.555	559.55	24.77	475.4	114.224	0.7021
82	2,2,4-TRIMETILO	C8H18	0.3041	6.85	22.622	544.28	27.63	425.6	114.224	0.6963
83	1-OCTENO	C8H16	0.403	7.6	21.697	566.66	26.9	440.4	112.208	0.7194
84	CICLOPENTENO	C5H8	0.1955	8.24	12.327	511.76	43.94	261.6	68.114	0.7505
85	TNS-1,3-DIC1CIC6	C8H16	0.2401	7.81	19.987	598.16	29.6	446.2	112.208	0.7892
86	CIS-1,4-DIC1CIC6	C8H16	0.2278	7.79	20.029	598.16	29.6	448.1	112.208	0.7873
87	TNS-1,4-DIC1CIC6	C8H16	0.2421	7.56	20.531	592.61	29	450.9	112.208	0.767
88	1,1-DIC1CIC6	C8H16	0.2078	7.69	20.073	596.49	29.8	446.9	112.208	0.7854
89	CIS-1,2-DIC1CIC6	C8H16	0.2681	7.93	19.723	604.28	30.5	433.3	112.208	0.8006
90	CIS-1,3-DIC1CIC6	C8H16	0.254	7.68	20.218	595.38	28.3	462.3	112.208	0.7803
91	N-OCTADECANO	C18H38	0.759	7.44	47.517	749.83	11.98	1172.	254.48	0.7856
92	N-NONADECANO	C19H40	0.7723	7.41	50.152	762.05	11.02	1290.	268.51	0.7892
93	N-EICOSANO	C20H42	0.8234	7.38	52.579	773.16	11.02	1290.	282.54	0.7924
94	1,1-DIMETILCIC5	C7H14	0.2599	7.56	17.868	549.83	34.98	344.7	98.182	0.7593
95	CIS-1,2-DIC1CIC5	C7H14	0.266	7.89	17.548	564.83	34.02	363.4	98.182	0.7774
96	TNS-1,2-DIC1CIC5	C7H14	0.2543	7.64	17.986	554.83	34.02	358.4	98.182	0.7562
97	CIS-1,3-DIC1CIC5	C7H14	0.257	7.57	18.136	554.83	34.98	348.2	98.182	0.749
98	TNS-1,3-DIC1CIC5	C7H14	0.2422	7.62	18.041	554.83	34.02	259.8	98.182	0.7535

ESTADÍSTICAS NO SALIR  
 DE LA TABLA

### IX.3. Estructura del archivo de resultados del Simulador General de Procesos - Facultad de Química.

#### Carátula de presentación de resultados

```

SSSSSS      GGGGGG      PPPPPPPP      FFFFFFFF      QQQQQQ
SSSSSSSS    GGGGGGGG    PPPPPPPP    FFFFFFFF    QQQQQQQQ
SSS  SSS    GG      GG      PP      PP      FF      FF      QQ      QQ
SSS      GG      PP      PP      FF      FF      QQ      QQ
SSS      GG      PPPPPPPP      *****      FFFFFFFF      QQ      QQ
SSS      GG      GGGGGG      PPPPPPPP      *****      FFFFFFFF      QQ      QQ
SS      GG      GGGGGG      PP      FF      FF      QQ      QQ      QQ
SSS      SSS    GG      GG      PP      FF      FF      QQ      QQQQ
SSSSSSSS    GGGGGGGG      PP      FF      FF      QQQQQQQQ
SSSSSS      GGGGGG      PP      FF      FF      QQQQQQ      QQ
  
```

\* SIMULADOR GENERAL DE PROCESOS \* FAC. QUIMICA \*  
 UNIVERSIDAD NACIONAL AUTONOMA DE MEXICO  
 \*\*\* FACULTAD DE QUIMICA\*\*\*

\*\* Laboratorio de Simulacion y Optimizacion de Procesos \* LSyOP \*\*  
 2 0 0 1

#### Descomposición de la red de proceso.

\* \* SIMULADOR GENERAL DE PROCESOS \* \* SGP/FQ \* \*      PAGINA : 1  
 UNAM      FACULTAD DE QUIMICA      USUARIO :SGPFQ  
 FECHA :OCTUBRE 2001

PROYECTO : PROBLEMA DE CAVETT(1963)

\*\*\*\* DESCOMPOSICION DE LA RED DE PROCESO \*\*\*\*

\*\* LISTA DE PRECURSORES \*\*

1!	0	0	0	0	0	0
2!	1	4	7	0	0	0
3!	2	0	0	0	0	0
4!	3	0	0	0	0	0
5!	2	0	0	0	0	0
6!	5	9	0	0	0	0
7!	6	0	0	0	0	0
8!	6	0	0	0	0	0
9!	8	0	0	0	0	0
10!	3	0	0	0	0	0
11!	8	0	0	0	0	0

VERTICES DE CORTE PRECURSORES...

2!	2	6
6!	2	6

LISTA DE CORRIENTES DE CORTE:

2 6

KE2 ..

2	3	5	6	1	4
---	---	---	---	---	---

## Datos del diagrama de proceso.

\*\* SIMULADOR GENERAL DE PROCESOS \*\* SGP/FQ \*\*  
UNAM FACULTAD DE QUIMICA

PAGINA : 2  
USUARIO :SGPFQ  
FECHA :OCTUBRE 2001

PROYECTO : PROBLEMA DE CAVETT(1963)

### \*\*\*\* MATRIZ DE PROCESO \*\*\*\*

EQUIPO	SUBROUTINA	NOMBRE	CORRIENTES ASOCIADAS			
NUMERO		EXTERNO				
1	MMIX	M-01	1	4	7	-2
2	ADBF	F-01	2	-3	-5	0
3	ADBF	F-02	3	-10	-4	0
4	MMIX	M-02	5	9	-6	0
5	ADBF	F-03	6	-7	-8	0
6	ADBF	F-04	8	-9	-11	0

\*\* SIMULADOR GENERAL DE PROCESOS \*\* SGP/FQ \*\*  
UNAM FACULTAD DE QUIMICA

PAGINA : 3  
USUARIO :SGPFQ  
FECHA :OCTUBRE 2001

PROYECTO : PROBLEMA DE CAVETT(1963)

### \*\*\*\* MATRIZ DE CONEXION DE CORRIENTES \*\*\*\*

CORRT.	EQUIPO	DEL	AL
1	0	1	
2	1	2	
3	2	3	
4	3	1	
5	2	4	
6	4	5	
7	5	1	
8	5	6	
9	6	4	
10	3	0	
11	6	0	

## Otras variables del sistema.

\*\* SIMULADOR GENERAL DE PROCESOS \*\* SGP/FQ \*\*  
UNAM FACULTAD DE QUIMICA

PAGINA : 4  
USUARIO :SGPFQ  
FECHA :OCTUBRE 2001

PROYECTO : PROBLEMA DE CAVETT(1963)

### \*\*\*\* OTRAS VARIABLES DEL SISTEMA \*\*\*\*

No. DE COMPONENTES	16
Nos. DE LOS COMPONENTES USADOS	46, 49, 50, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 10, 11, 12, 13, 14, 15,
ORDEN DE CALCULO DE LOS EQUIPOS (KE2)	2, 3, 5, 6, 1, 4,
CORRIENTES USADAS EN CONVERGENCIA (KE4)	3, 6,
LISTA DE CORRIENTES DE CORTE PREFERENTES(KE3)	4, 6,
TOLERANCIA, 'ERROR'	0.0010
MAXIMO No. DE ITERACIONES EN RECIRCULACIONES	35
CORRIENTES A IMPRIMIR (PSTRMS) :	3, 6,

## Datos de entrada: especificación de corrientes de alimentación.

\* \* SIMULADOR GENERAL DE PROCESOS \* \* SGP/FQ \* \*  
UNAM FACULTAD DE QUIMICA

PAGINA : 5  
USUARIO :SGPFQ  
FECHA :OCTUBRE 2001

PROYECTO : PROBLEMA DE CAVETT(1963)

\*\*\*\* DATOS DE ENTRADA \*\*\*\*

NO. DE CORRIENTE	1	2	3
CONEXION DE EQUIPOS DEL	0 AL 1	1 AL 2	2 AL 3
FRACCION VAPOR	0.86564	0.00000	0.00000
TEMPERATURA, R	580.00000	0.00000	0.00000
PRESION , PSIA	49.00000	0.00000	0.00000
ENTALPIA,M BTU	6467.70752	0.00000	0.00000
COMPOSICION, LB-MOL/HORA			
NITROGENO	25.58000	0.00000	0.00000
CO2	112.85000	0.00000	0.00000
H2S	9.98000	0.00000	0.00000
METANO	187.21001	0.00000	0.00000
ETANO	79.85000	0.00000	0.00000
PROPANO	52.07000	0.00000	0.00000
I-BUTANO	10.42000	0.00000	0.00000
N-BUTANO	26.55000	0.00000	0.00000
I-PENTANO	10.98000	0.00000	0.00000
N-PENTANO	15.69000	0.00000	0.00000
N-HEXANO	20.52000	0.00000	0.00000
N-HEPTANO	26.07000	0.00000	0.00000
N-OCTANO	16.18000	0.00000	0.00000
N-NONANO	13.03000	0.00000	0.00000
N-DECANO	5.86000	0.00000	0.00000
N-UNDECANO	7.79000	0.00000	0.00000
TOTAL	620.63000	0.00000	0.00000

NO. DE CORRIENTE	4	5	6
CONEXION DE EQUIPOS DEL	3 AL 1	2 AL 4	4 AL 5
FRACCION VAPOR	0.00000	0.00000	0.00000
TEMPERATURA, R	0.00000	0.00000	0.00000
PRESION , PSIA	0.00000	0.00000	0.00000
ENTALPIA,M BTU	0.00000	0.00000	0.00000
COMPOSICION, LB-MOL/HORA			
NITROGENO	0.00000	0.00000	0.00000
CO2	0.00000	0.00000	0.00000
H2S	0.00000	0.00000	0.00000
METANO	0.00000	0.00000	0.00000
ETANO	0.00000	0.00000	0.00000
PROPANO	0.00000	0.00000	0.00000
I-BUTANO	0.00000	0.00000	0.00000
N-BUTANO	0.00000	0.00000	0.00000
I-PENTANO	0.00000	0.00000	0.00000
N-PENTANO	0.00000	0.00000	0.00000
N-HEXANO	0.00000	0.00000	0.00000
N-HEPTANO	0.00000	0.00000	0.00000
N-OCTANO	0.00000	0.00000	0.00000
N-NONANO	0.00000	0.00000	0.00000
N-DECANO	0.00000	0.00000	0.00000
N-UNDECANO	0.00000	0.00000	0.00000
TOTAL	0.00000	0.00000	0.00000

NO. DE CORRIENTE	7	8	9
CONEXION DE EQUIPOS DEL	5 AL 1	DEL 5 AL 6	DEL 6 AL 4
FRACCION VAPOR	0.00000	0.00000	0.00000
TEMPERATURA, R	0.00000	0.00000	0.00000
PRESION, PSIA	0.00000	0.00000	0.00000
ENTALPIA, M BTU	0.00000	0.00000	0.00000

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

NITROGENO	0.00000	0.00000	0.00000
CO2	0.00000	0.00000	0.00000
H2S	0.00000	0.00000	0.00000
METANO	0.00000	0.00000	0.00000
ETANO	0.00000	0.00000	0.00000
PROPANO	0.00000	0.00000	0.00000
I-BUTANO	0.00000	0.00000	0.00000
N-BUTANO	0.00000	0.00000	0.00000
I-PENTANO	0.00000	0.00000	0.00000
N-PENTANO	0.00000	0.00000	0.00000
N-HEXANO	0.00000	0.00000	0.00000
N-HEPTANO	0.00000	0.00000	0.00000
N-OCTANO	0.00000	0.00000	0.00000
N-NONANO	0.00000	0.00000	0.00000
N-DECANO	0.00000	0.00000	0.00000
N-UNDECANO	0.00000	0.00000	0.00000
TOTAL	0.00000	0.00000	0.00000

NO. DE CORRIENTE	10	11
CONEXION DE EQUIPOS DEL	3 AL 0	DEL 6 AL 0
FRACCION VAPOR	0.00000	0.00000
TEMPERATURA, R	0.00000	0.00000
PRESION, PSIA	0.00000	0.00000
ENTALPIA, M BTU	0.00000	0.00000

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

NITROGENO	0.00000	0.00000
CO2	0.00000	0.00000
H2S	0.00000	0.00000
METANO	0.00000	0.00000
ETANO	0.00000	0.00000
PROPANO	0.00000	0.00000
I-BUTANO	0.00000	0.00000
N-BUTANO	0.00000	0.00000
I-PENTANO	0.00000	0.00000
N-PENTANO	0.00000	0.00000
N-HEXANO	0.00000	0.00000
N-HEPTANO	0.00000	0.00000
N-OCTANO	0.00000	0.00000
N-NONANO	0.00000	0.00000
N-DECANO	0.00000	0.00000
N-UNDECANO	0.00000	0.00000
TOTAL	0.00000	0.00000



## Datos de los componentes empleados en la simulación

\* \* SIMULADOR GENERAL DE PROCESOS \* \* SGP/FQ \* \*  
UNAM FACULTAD DE QUIMICA

PAGINA : 6  
USUARIO :SGPFQ  
FECHA :OCTUBRE 2001

PROYECTO : PROBLEMA DE CAVETT(1963)

NO.	NOMBRE	CI	**** TERMO/FQ ****		TEMPERATURA CRITICA (GRADOS R)	FACTOR ACENTRICO
			PESO MOLECULAR	PRESION CRITICA (PSIA)		
1.-	NITROGENO	46	0.280160E+02	0.492316E+03	0.227160E+03	0.206000E-01
2.-	CO2	49	0.440100E+02	0.107134E+04	0.547560E+03	0.176800E+00
3.-	H2S	50	0.340800E+02	0.130647E+04	0.672480E+03	0.868000E-01
4.-	METANO	2	0.160420E+02	0.673077E+03	0.343260E+03	0.000000E+00
5.-	ETANO	3	0.300680E+02	0.708347E+03	0.549774E+03	0.106400E+00
6.-	PROPANO	4	0.440940E+02	0.617379E+03	0.665946E+03	0.153800E+00
7.-	I-BUTANO	5	0.581200E+02	0.529056E+03	0.734652E+03	0.182500E+00
8.-	N-BUTANO	6	0.581200E+02	0.550659E+03	0.765306E+03	0.195300E+00
9.-	I-PENTANO	7	0.721460E+02	0.483498E+03	0.829800E+03	0.210400E+00
10.-	N-PENTANO	8	0.721460E+02	0.489524E+03	0.845604E+03	0.238700E+00
11.-	N-HEXANO	10	0.861720E+02	0.439704E+03	0.914220E+03	0.292700E+00
12.-	N-HEPTANO	11	0.100198E+03	0.396939E+03	0.972288E+03	0.340300E+00
13.-	N-OCTANO	12	0.114224E+03	0.362109E+03	0.102492E+04	0.399200E+00
14.-	N-NONANO	13	0.128250E+03	0.330660E+03	0.107100E+04	0.443900E+00
15.-	N-DECANO	14	0.142276E+03	0.305677E+03	0.111420E+04	0.486900E+00
16.-	N-UNDECANO	15	0.156302E+03	0.282163E+03	0.115200E+04	0.521000E+00

## Lista de equipos

\* \* SIMULADOR GENERAL DE PROCESOS \* \* SGP/FQ \* \*  
UNAM FACULTAD DE QUIMICA

PAGINA : 7  
USUARIO :SGPFQ  
FECHA :OCTUBRE 2001

PROYECTO : PROBLEMA DE CAVETT(1963)

\*\*\*\* DATOS DE ENTRADA \*\*\*\*

\*\*\*\* RESUMEN DE EQUIPO - LISTA DE EQUIPO \*\*\*\*

EQ. #	NOMBRE EXT.	NOMBRE SUB.
1	M-01	MMIX
2	F-01	ADBF
3	F-02	ADBF
4	M-02	MMIX
5	F-03	ADBF
6	F-04	ADBF



# RESULTADOS FINALES: Tabla de corrientes y condiciones de operación

\* \* SIMULADOR GENERAL DE PROCESOS \* \* SGP/FQ \* \*  
UNAM FACULTAD DE QUIMICA

PAGINA : 2  
USUARIO :SGPFQ  
FECHA :OCTUBRE 2001

PROYECTO : PROBLEMA DE CAVETT(1963)

\*\*\*\* RESULTADOS FINALES \*\*\*\*

NO. DE CORRIENTE	1	2	3
CONEXION DE EQUIPOS DEL	0 AL 1	1 AL 2	2 AL 3
FRACCION VAPOR	0.86564	1.00000	1.00000
TEMPERATURA, R	580.00000	579.13190	580.00000
PRESION , PSIA	49.00000	49.00000	150.00000
ENTALPIA, M BTU	6467.70752	6672.44336	5244.50342

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

NITROGENO	25.58000	26.35788	25.53718
CO2	112.85000	117.39689	111.05769
H2S	9.98000	10.48038	9.09340
METANO	187.21001	191.29639	187.13411
ETANO	79.85000	83.43534	77.65295
PROPANO	52.07000	54.76183	45.69802
I-BUTANO	10.42000	11.00481	7.70795
N-BUTANO	26.55000	28.09581	17.88624
I-PENTANO	10.98000	11.68570	5.15754
N-PENTANO	15.69000	16.72144	6.47563
N-HEXANO	20.52000	21.81465	4.10493
N-HEPTANO	26.07000	27.29390	2.28033
N-OCTANO	16.18000	16.60193	0.55132
N-NONANO	13.03000	13.19615	0.18446
N-DECANO	5.86000	5.89359	0.03464
N-UNDECANO	7.79000	7.81100	0.02104
TOTAL	620.63000	643.84772	500.57742

NO. DE CORRIENTE	4	5	6
CONEXION DE EQUIPOS DEL	3 AL 1	2 AL 4	4 AL 5
FRACCION VAPOR	0.00000	0.00000	1.00000
TEMPERATURA, R	560.00000	580.00000	577.75165
PRESION , PSIA	200.00000	150.00000	40.00000
ENTALPIA, M BTU	40.37509	944.14020	1050.86792

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

NITROGENO	0.05393	0.82087	1.08419
CO2	0.47616	6.33708	8.74254
H2S	0.10612	1.38671	1.72890
METANO	0.30211	4.16360	5.33615
ETANO	0.43989	5.78012	7.89694
PROPANO	0.73024	9.06265	10.86969
I-BUTANO	0.27122	3.29673	3.61490
N-BUTANO	0.83759	10.20932	10.93914
I-PENTANO	0.51371	6.52812	6.72911
N-PENTANO	0.79629	10.24575	10.49124
N-HEXANO	1.15741	17.70967	17.85024
N-HEPTANO	1.15289	25.01354	25.08442
N-OCTANO	0.40598	16.05060	16.06606
N-NONANO	0.16114	13.01169	13.01643
N-DECANO	0.03270	5.85896	5.85977
N-UNDECANO	0.02049	7.78997	7.79043
TOTAL	7.45789	143.26543	153.10016

NO. DE CORRIENTE	7	8	9
CONEXION DE EQUIPOS DEL	5 AL 1	DEL 5 AL 6	DEL 6 AL 4
FRACCION VAPOR	1.00000	0.00000	1.00000
TEMPERATURA, R	554.00000	554.00000	545.00000
PRESION, PSIA	80.00000	80.00000	40.00000
ENTALPIA, M BTU	164.36095	719.76678	106.72763

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

NITROGENO	0.72395	0.36036	0.26332
CO2	4.07073	4.67060	2.40546
H2S	0.39425	1.33436	0.34219
METANO	3.78427	1.55260	1.17254
ETANO	3.14545	4.74985	2.11682
PROPANO	1.96158	8.90674	1.80704
I-BUTANO	0.31359	3.30112	0.31817
N-BUTANO	0.70822	10.23052	0.72983
I-PENTANO	0.19200	6.53706	0.20099
N-PENTANO	0.23514	10.25601	0.24549
N-HEXANO	0.13724	17.71288	0.14057
N-HEPTANO	0.07100	25.01326	0.07088
N-OCTANO	0.01595	16.05006	0.01546
N-NONANO	0.00502	13.01139	0.00474
N-DECANO	0.00089	5.85888	0.00082
N-UNDECANO	0.00051	7.78991	0.00046
TOTAL	15.75981	137.33560	9.83478

NO. DE CORRIENTE	10	11
CONEXION DE EQUIPOS DEL	3 AL 0	DEL 6 AL 0
FRACCION VAPOR	1.00000	0.00000
TEMPERATURA, R	560.00000	545.00000
PRESION, PSIA	200.00000	40.00000
ENTALPIA, M BTU	4975.01123	604.02661

COMPOSICION, LB-MOL/HORA

NITROGENO	25.48325	0.09704
CO2	110.58153	2.26514
H2S	8.98727	0.99217
METANO	186.83200	0.38005
ETANO	77.21306	2.63303
PROPANO	44.96778	7.09970
I-BUTANO	7.43674	2.98295
N-BUTANO	17.04865	9.50070
I-PENTANO	4.64383	6.33607
N-PENTANO	5.67933	10.01052
N-HEXANO	2.94752	17.57232
N-HEPTANO	1.12744	24.94238
N-OCTANO	0.14535	16.03460
N-NONANO	0.02333	13.00665
N-DECANO	0.00193	5.85806
N-UNDECANO	0.00055	7.78945
TOTAL	493.11954	127.50082

PROYECTO : PROBLEMA DE CAVETT(1963)

\*\*\*\* RESULTADOS FINALES \*\*\*\*

\*\*\*\* RESUMEN DE EQUIPO - LISTA DE EQUIPO \*\*\*\*

EQ. #	NOMBRE EXT.	NOMBRE SUB.
1	M-01	MMIX
2	F-01	ADBF
3	F-02	ADBF
4	M-02	MMIX
5	F-03	ADBF
6	F-04	ADBF

PROYECTO : PROBLEMA DE CAVETT(1963)

\*\*\*\* RESUMEN DE EQUIPOS - DETALLES INDIVIDUALES \*\*\*

\*\*\*FLASH GENERAL

\*\*\*

NUMERO DE EQUIPO	2	3	5	6
NOMBRE EXTERNO	F-01	F-02	F-03	F-04
MODO	5.0000	5.0000	5.0000	5.0000
PARAM # 3	580.0000	560.0000	554.0000	545.0000
PARAM # 4	150.0000	200.0000	80.0000	40.0000
CARGA TER,MBTU	-483.7463	-229.1174	-166.6922	-9.0126
VALOR-K # 1	8.9037	7.1465	17.5067	35.1779
VALOR-K # 2	5.0157	3.5123	7.5951	13.7674
VALOR-K # 3	1.8768	1.2808	2.5748	4.4713
VALOR-K # 4	12.8633	9.3528	21.2402	39.9978
VALOR-K # 5	3.8449	2.6547	5.7708	10.4226
VALOR-K # 6	1.4431	0.9313	1.9192	3.2997
VALOR-K # 7	0.6692	0.4147	0.8278	1.3828
VALOR-K # 8	0.5014	0.3078	0.6033	0.9959
VALOR-K # 9	0.2261	0.1367	0.2559	0.4112
VALOR-K # 10	0.1809	0.1079	0.1998	0.3179
VALOR-K # 11	0.0663	0.0385	0.0675	0.1037
VALOR-K # 12	0.0261	0.0148	0.0247	0.0368
VALOR-K # 13	0.0098	0.0054	0.0087	0.0125
VALOR-K # 14	0.0041	0.0022	0.0034	0.0047
VALOR-K # 15	0.0017	0.0009	0.0013	0.0018
VALOR-K # 16	0.0008	0.0004	0.0006	0.0008

\*\*\*MEZCLADORES/SIMPLES \*\*\*

NUMERO DE EQUIPO	1	4
NOMBRE EXTERNO	M-01	M-02