



UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES ZARAGOZA

BALANCE DE MATERIA EN UNIDADES SIMPLES Y MÚLTIPLES CON AYUDA COMPUTACIONAL

TESIS

QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE:

INGENIERO QUÍMICO

PRESENTA:

PAZ CHÁVEZ ANA LUCERO

DIRECTOR DE TESIS:

I.Q. JOSÉ ANTONIO ZAMORA PLATA



MÉXICO D.F. 2013



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.



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.

Agradecimientos

A mi mamá; **Cruz Chávez**, porque has estado conmigo en todo momento, has sido mi más importante compañía, gracias por tus consejos, por las sabias palabras que siempre me das, por tu apoyo incondicional, por tu cariño, por tus regaños pero sobre todo por tu amor. Por ser la mejor madre de todo el mundo, por eso y mucho más, gracias mamá.

A mi papá, **Jesús Asunción Paz**. Papá no tengo las palabras correctas para agradecerte infinitamente por todo lo que me has dado. Gracias por estar conmigo, por haberme apoyado en todos los aspectos. Gracias por la disciplina que me has inculcado desde siempre, eres mi más grande admiración, te quiero mucho.

Papás, están hoy por cosechar el fruto de tanto esfuerzo, estamos por culminar otra más de mis grandes metas, gracias por haberme dado el regalo más preciado que es la vida. Gracias por todo lo que me han dado, por haberme educado, ustedes son el tesoro más valioso que tengo y mi ejemplo a seguir, ustedes son las personas más importantes de mi vida, me debo a ustedes.

A mis hermanos: **José Antonio, Melva Edith y Maricruz**, por haberme apoyado en todo momento, por los consejos, los regaños, los tantos y maravillosos momentos que hemos compartido, por el amor que nos une. Porque los admiro muchísimo y por el cariño que me han regalado siempre.

A mis sobrinos queridos; **Mailo, Denice, Fabián y Gustavo**. Porque ustedes son mi adoración, son el motor que le da energía a mi vida; deben saber que siempre estaré aquí para ustedes, para lo que necesiten siempre. Espero que la culminación de este proyecto les sirva un poco de ejemplo y ustedes logren mucho más.

Mi querida familia gracias por hacerme siempre tan feliz. Este logro no es mío, es de ustedes. Con mucho cariño, y mi más grande amor. Gracias

Gracias **Ingeniero José Antonio Zamora**, primeramente por haber aceptado dirigir este proyecto, por sus enseñanzas, consejos y apoyo; pero sobre todo por la gran paciencia que me ha tenido durante el desarrollo de este trabajo. Muchas gracias.

Ingeniero Eduardo Vázquez, comparto con usted esta meta concluida, millones de gracias por todo el apoyo que me ha brindado desde que fui su alumna hasta la culminación de este proyecto. De verdad muchísimas gracias.

A mi jurado:

Muchas gracias **Ing. Dominga Ortiz** por el apoyo y las enseñanzas que me ha otorgado, gracias también por las gratas experiencias compartidas.

Maestra Ma. Estela De La Torre, muchas gracias por haber aceptado participar en este proyecto, también por los consejos que me ha brindado.

Maestro Genaro Altamirano, mis más sinceros agradecimientos por el tan valioso apoyo que me ha brindado y por los conocimientos que compartió conmigo en el salón de clases.

Maestro Cresenciano Echavarrieta, no sé como agradecer todos los conocimientos que ha compartido conmigo, los múltiples consejos, pero sobre todo el apoyo, muchas gracias.

Maestros millones de gracias por tan importantes aportaciones que hicieron a este proyecto, también ustedes son mi admiración, de verdad muchas gracias.

A mis amigas queridas **Ing. Daniela Ceballos** y **Rosa Ma. Guzmán**, por haber sido mi gran compañía de estudio y diversión durante los últimos cinco años, por lo feliz que fuimos y por todo lo que compartimos, muchas gracias.

También a mis grandes amigos, **José, Ino, Joel, Fany, Mich** y **Elizabeth** por todo lo bien que la hemos pasado juntos, mis respetos para ustedes, los quiero mucho.

Gracias a mis compañeros de trabajo, **Ing. Raúl Villegas** por lo afortunada que fui al tener un compañero como usted, lo último que he aprendido se lo debo a usted, gracias por compartir sus conocimientos conmigo, el apoyo y todos los consejos que me da.

Ing. José Antonio Hernández por el infinito apoyo que me has regalado, los consejos y grata compañía que también me das, muchas gracias.

Recuerden, este logro es de todos ustedes.

**BALANCE DE MATERIA EN
UNIDADES SIMPLES Y MÚLTIPLES
CON AYUDA COMPUTACIONAL**

ÍNDICE

•	Introducción.....	1
✓	Objetivos.....	3
1.	Fundamentos del balance de materia.....	4
✓	Dimensiones y unidades.....	6
✓	Sistemas de unidades.....	7
✓	Sistema Internacional de unidades.....	10
✓	Conversión de unidades y homogeneidad dimensional.....	11
✓	Variables relacionadas con la materia.....	12
✓	Variables relacionadas con energía.....	15
✓	Resolución de problemas de balance.....	16
✓	Estequiometría química.....	22
2.	Simulación de procesos.....	23
✓	Antecedentes.....	24
✓	Descripción del simulador de procesos.....	24
3.	Rutinas de simulación para unidades simples.....	79
4.	Rutinas de simulación para unidades múltiples.....	87
5.	Tablas de resultados.....	91
6.	Análisis de resultados.....	103
✓	Recomendaciones.....	115
7.	Conclusiones.....	116
8.	Apéndice A.....	119
	Apéndice B.....	121
	Apéndice C.....	122
9.	Referencias Bibliográficas.....	123

Introducción

Dentro de las funciones básicas del Ingeniero Químico están el diseño y la operación de un proceso seguro en donde se convierten materias primas en productos deseados. El diseño de un proceso involucra la selección de una secuencia apropiada de transformaciones y de las especificaciones necesarias del equipo que se requieren para ello. Se deben indicar las alimentaciones, los productos y las operaciones unitarias que se emplean en el proceso. Hay procesos que se analizan considerando incluso al tiempo como variable de proceso. El tipo de diseño que se analiza en este material está enfocado a diseños con un régimen estacionario donde las condiciones de temperatura, presión y concentración son todas independientes del tiempo. Entre los objetivos de este trabajo se encuentra el proporcionar los fundamentos básicos del balance de materia.

La ausencia de instrucción en el salón de clases, acerca del uso de simuladores de procesos en el dimensionamiento y cálculo de propiedades termodinámicas de especies puras y sus mezclas, determina significativamente el tiempo de respuesta en la propuesta preliminar de un diseño de la Ingeniería Química.

Cada día es más común que las empresas inviertan grandes cantidades de dinero en la adquisición de programas de cómputo para el dimensionamiento de equipos y plantas de proceso. Todo esto, pone de manifiesto una desventaja competitiva de nuestros egresados con el de otras instituciones. Si bien, en algunas materias como Balance de Masa, Flujo de Fluidos e Ingeniería de Procesos se utilizan herramientas de cálculo como Excel, o el de un programa específico como PRO II o Chemcad, éstos solo son calculados en algunos casos sin la experiencia adecuada o necesaria para llegar propiamente a la especificación de diseño. Todavía, se siguen utilizando tablas y gráficas para especificar los cálculos de manera artesanal y se realiza mucho trabajo a mano.

Con el presente trabajo se pretende proporcionar información a los estudiantes de cuarto semestre de la carrera de Ingeniería Química de la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza, para la iniciación al diseño o especificación de procesos con ayuda de un simulador de procesos llamado PRO II, como herramienta de diseño. Se han seleccionado varios procesos simples y complejos para orientar y dirigir el aprendizaje del uso del simulador de forma gradual.

Este material está conformado por siete capítulos, el primero contiene la información teórica necesaria para comprender lo que es un balance de masa y las variables que están involucradas en el cálculo de un balance. En el segundo capítulo se introduce al alumno de manera breve al mundo de la simulación, se describe lo que es y cómo está conformado el simulador de procesos PRO II, además en este capítulo se desarrollan paso a paso cinco ejemplos de procesos de unidades simples y múltiples para la fácil comprensión de la obtención de balances de materia usando el simulador. Los capítulos tres y cuatro son una recopilación de veinte procesos que se sugieren para ser simulados en el software PRO II y así obtener el balance de masa de cada uno, está formado por quince procesos simples y cinco procesos de unidades múltiples, respectivamente. En el capítulo cinco se pueden consultar los resultados de los balances de masa de cada uno de los veinte procesos sugeridos. El capítulo siguiente es el análisis de resultados de diez procesos escogidos al azar, se incluyen los cálculos de balance obtenidos en el simulador y los cálculos obtenidos por el balance de masa realizado a mano, la comparación entre ambos resultados es analizada en este capítulo.

En el capítulo siete se encuentran las conclusiones obtenidas con la realización de este proyecto.

Y finalmente se incluyen tres anexos que se han considerado de mucho apoyo para la comprensión del contenido de este material.

OBJETIVOS DE LA TESIS:

1. Describir los fundamentos de balance de materia.
2. Establecer una metodología para el uso del simulador de procesos
3. Seleccionar una serie de procesos viables para ser modelados con el simulador de procesos PRO II.
4. Establecer las limitantes que pueda tener el emplear un simulador de procesos en la Facultad de Estudios Superiores Zaragoza.

1. Fundamentos del balance de materia

Entre las muchas habilidades que posee el Ingeniero Químico, se encuentra el desarrollo de balances de masa y de energía, dichos balances son un proceso contable en los que se mide e iguala la cantidad de materiales y energéticos, a la entrada y la salida de un proceso químico; en los cuales, según la Ley de la conservación de la materia, *“la masa total de entrada es igual a la masa total de salida”*. Es decir, no se puede especificar la entrada a un equipo de por ejemplo 750 Kg de algún material y obtener a la salida de éste sólo 500 Kg del mismo material.

La elaboración de balances de masa es indispensable y de gran importancia para calcular los requerimientos de material necesarios para la obtención de un nuevo producto, para el diseño y la optimización de nuevos procesos, además de que nos ayudan a determinar la magnitud que deberán tener los equipos del proceso.

Antes de comenzar con las técnicas para la realización de balances de materia en el simulador; se van a presentar algunos conceptos básicos, los cuales nos ayudarán a la comprensión de la realización de balances de masa con simulación de procesos.

Como se sabe, los procesos químicos pueden clasificarse en intermitentes o batch en los cuales la alimentación se introduce al inicio del proceso y después de determinado tiempo, se obtienen todos los productos al final del proceso; o como procesos continuos, en este tipo de procesos las alimentaciones y las salidas fluyen continuamente, es decir todo el tiempo mientras el proceso se encuentre activo, se van a alimentar los equipos y se van a estar obteniendo productos. Cuando los valores de las variables del proceso (como son temperaturas, presiones, volúmenes, velocidades de flujo, etc.) no varían con el tiempo, se dice que el proceso opera en régimen permanente o estacionario; por otra parte si dichos valores cambian, se dice que el proceso se encuentra en régimen

dinámico. Para fines de este trabajo se realizaron sólo simulaciones de procesos en estado estacionario.

Para realizar el balance de materia de un proceso químico es indispensable partir de un diagrama que muestre la transformación de la materia prima a un producto deseado, aunque en Ingeniería se utilizan diagramas de flujo muy detallados (que son dibujos que traducen la descripción del proceso a un lenguaje de Ingeniería y que muestran cómo se lleva a cabo el flujo de la materia a través de los diferentes equipos y sus interconexiones, desde la alimentación hasta la obtención del producto, dentro de los límites de batería); el balance se puede realizar únicamente partiendo de un diagrama de bloques en el que se deben representar los equipos con formas geométricas lo más parecidas al equipo real, siempre y cuando no se olvide indicar la dirección de los flujos, las entradas y salidas de los equipos y algunas condiciones y características de la materia prima.

La mayoría de los procesos de la industria química se encuentran formados por diversas series de operaciones y procesos llamadas unitarios, en las operaciones unitarias las materias no sufren cambios a nivel molecular, aunque sí cambios físicos tales como cambios de estado, concentración, presión y temperatura; y en los segundos por el contrario que en las operaciones unitarias, en la materia si existen cambios químicos, como por ejemplo en la combustión o polimerización, por mencionar algunos. La combinación de procesos unitarios y operaciones unitarias permite la formación de cualquier proceso químico y por lo tanto cualquier planta química.

Dimensiones y unidades

Una cantidad medida o una cantidad dimensional no son más que aquella que está definida por una magnitud (valor numérico) y una unidad (la literatura define unidad como “cualquier cantidad determinada conocida, por cuya aplicación constante se puede medir cualquier otra cantidad similar” o “nombre de la unidad de medición”) en los cálculos de Ingeniería resulta indispensable escribir el valor y la unidad de cada cantidad. Las variables fundamentales suelen llamarse dimensiones básicas o magnitudes físicas y no son más que una propiedad que puede medirse, como la masa M (cantidad de materia que contiene un cuerpo), el tiempo que puede representarse por θ , el espacio representado por L y la temperatura T ; esto permite que al analizarse las variables derivadas (por ejemplo, densidad o velocidad) se puedan descomponer en sus variables básicas como sigue:

$$\text{densidad } \rho = \frac{M}{V} = \frac{M}{L^3} = \frac{kg}{m^3}, \text{ velocidad } v = \frac{L}{\theta} = \frac{m}{s}$$

Algunas definiciones según la literatura, de aquellas unidades básicas que intervienen en los cálculos de balance son:

La unidad de longitud, *metro*, que es igual a 1 650 763.73 veces la longitud de onda en el vacío de la radiación correspondiente a la transición entre los niveles $2p_{10}$ y $5d_5$ del átomo de kriptón-86.

La unidad de masa, *kilogramo*, es la masa de un prototipo compuesto de una aleación de platino e iridio, que se guarda en la Oficina Internacional de Pesos y Medidas en París, Francia.

La unidad de tiempo, *segundo*, es la duración de 9, 192, 631,770 periodos de la radiación correspondiente a la transición entre los dos niveles hiperfinos del estado basal del átomo de cesio-133.

La unidad de temperatura, *kelvin*, es la fracción $1/273.16$ de la temperatura termodinámica del punto triple del agua.

Un *gramo mol*, o simplemente *mol* de una sustancia, es la cantidad de dicha sustancia que contiene igual número de entidades elementales que 12 gramos de carbono-12. Si la sustancia es un elemento, las entidades elementales serán átomos. Si es un compuesto, las entidades elementales serán moléculas. Debido a que el gramo mol como el peso molecular de un compuesto se define en base al carbono-12, la masa de un mol de un compuesto puede calcularse como el producto de la masa de un mol de carbono-12 por el peso molecular del compuesto:

$$\text{Un gramo mol} = (12g \text{ de carbono} - 12) \left(\frac{\text{peso molecular de } x}{12} \right) \text{ es decir,}$$

$$\text{Un gramo mol} = (\text{peso molecular de } x) \text{ gramos}$$

Las unidades básicas pueden usarse en combinación para obtener unidades derivadas, tales como la fuerza o el newton, definida como un kilogramo metro sobre segundo cuadrado. También se pueden relacionar en términos de unidades del Sistema Internacional como longitud, tiempo o temperatura; como por ejemplo, una hora se define como 3600s o un centímetro como 10^{-2} m.

Sistemas de unidades

Un sistema de unidades de acuerdo a lo que explica Rhys Lewis, en su libro "*Magnitudes en Ingeniería y sistemas de unidades*", significa "un orden lógico de cantidades definidas por cuya aplicación constante se pueden medir otras cantidades similares"

Cualquier unidad que por definición es independiente de cantidades físicas variables, se le denomina unidad absoluta, los sistemas conformados por este tipo de unidades se denominan *sistemas absolutos*, los *sistemas gravitacionales* son los que tienen unidades basadas en la aceleración debida a la gravedad, las cuales no son absolutas y se hace referencia a ellas como unidades gravitacionales.

El sistema anglosajón de unidades (o sistema inglés) es oficial en solo tres países de todo el mundo, entre los cuales está Estados Unidos de América y comúnmente es usado en Ingeniería. Sus unidades de medida son guardadas en Londres, Inglaterra. Este sistema para medir longitudes se basa en la pulgada, el pie, la yarda o la milla; y para medir el volumen en la pulgada cubica, el pie cubico, etc. Hay muchas unidades que se derivan de este sistema pero son utilizados principalmente en países de habla inglesa.

SISTEMA	LONGITUD	MASA	TIEMPO	FUERZA	ENERGÍA	POTENCIA
CGS	centímetro cm	gramo g	segundo s	dina dyn	ergio erg	ergio/segundo
MKS absoluto (sistema SI)	metro m	kilogramo kg	segundo s	newton N	julio J	vatio W
MKS gravitacional	metro m	geokilo	segundo s	kilogramo fuerza \vec{Kg}	kilogramo metro \vec{kgm}	kilográmometro segundo \vec{kgm}/seg
MKS ingeniería	metro m	kilogramo kg	segundo s	kilogramo fuerza \vec{Kg}	kilovatio-hora kw-h	caballo de vapor c.v.
Inglés absoluto	pie ft	libra lb	segundo s	poundal	poundal-pie	$\frac{\text{poundal} - \text{pie}}{\text{segundo}}$
Inglés de ingeniería	pie ft	libra lb	segundo s	libra-fuerza \vec{lb}	pie-libra $\vec{ft-lb}$	Horse-power Hp
Inglés gravitacional	pie ft	slug	segundo s	libra-fuerza \vec{lb}	pie-libra $\vec{ft-lb}$	$\frac{\text{pie} - \text{libra}}{\text{segundo}}$ $\frac{ft - lb}{seg}$

Tabla 1. Unidades básicas y sistemas empleados en Ingeniería.

El sistema decimal de unidades (mks) fue un sistema destinado a remplazar a todos los demás, se fundó basado en tres principios:

- a) Que los estándares básicos se deberán derivar de fenómenos naturales y no ser establecidos arbitrariamente por el humano.

- b) Todas las unidades deberán derivarse de un número fijo de unidades fundamentales, y
- c) Que todos los múltiplos y las subdivisiones de unidades deberán basarse en el sistema decimal.

El sistema métrico, basado en las unidades de gramo, metro y segundo; y en los tres principios, fue establecido legalmente en Francia en 1795 y aproximadamente 40 años después se prohibió el uso de todos los demás sistemas. Más tarde, el gramo fue sustituido por el kilogramo y aunque las definiciones básicas de las tres unidades fundamentales han cambiado a través de los años por patrones más correctamente medibles, las tres unidades básicas adoptadas por el actual *Système International d'Unités* (Sistema Internacional) siguen siendo las unidades básicas de las cuáles nacen otras magnitudes derivadas.

Sistema Internacional de Unidades

Aunque en la actualidad existen diversos sistemas de unidades, que son conjuntos consistentes de unidades de medida a partir del cual se derivan el resto como ya se explicó, por normatividad, el sistema que se utiliza en casi todos los países es el Sistema Internacional de Unidades, también denominado Sistema Internacional de Medidas.

El Sistema Internacional de Unidades es el sucesor del antiguo Sistema Métrico Decimal, se instauró en el año 1960 en la XI Conferencia General de Pesos y Medidas durante la cual se reconocieron seis unidades físicas básicas y en el año de 1971 se añadió la séptima unidad básica: el mol. Las siete unidades básicas de las que consta el SI se presentan a continuación:

Magnitud física básica	Símbolo dimensional	Unidad básica	Símbolo de la unidad
Longitud	L	metro	m
Masa	M	kilogramo	kg
Tiempo	θ	segundo	s
Intensidad de la corriente eléctrica	I	ampere	A
Temperatura	T	kelvin	°K
Cantidad de sustancia	N	mol	mol
Intensidad luminosa	J	candela	cd

Tabla 2. Magnitudes y unidades básicas del Sistema Internacional.

Conversión de unidades y homogeneidad dimensional

Como ya se mencionó, en cálculos de Ingeniería es de suma importancia indicar siempre las unidades de las que se está hablando, esto tiene como consecuencia que se van a encontrar datos expresados en diferentes unidades aunque se hable de la misma magnitud física, por lo tanto, un Ingeniero debe ser capaz de realizar las transformaciones necesarias para llegar a una congruencia matemática, es decir que todos los términos sean congruentes dimensionalmente, o más fácil que los términos de la ecuación tengan las mismas unidades.

Para realizar las correspondientes conversiones se parte del principio algebraico de que multiplicar por uno no afecta el resultado, esto es:

$$X \left(\frac{Y}{X} \right) = Y, \quad \text{por ejemplo:} \quad 9.81 \frac{m}{s^2} \left(\frac{km}{1000m} \right) \left(\frac{3600s}{1 hr} \right)^2 = 127,137.6 \frac{km}{hr^2}$$

El ejemplo anterior se basa en la aplicación de factores de conversión, los cuales son una cantidad expresada en términos de una unidad en su equivalente en términos de otra unidad, únicamente se debe multiplicar la cantidad dada por el factor de conversión. Nótese que las unidades del denominador se encuentran elevadas a una potencia cuadrada, entonces el factor de conversión debe encontrarse elevada de igual manera a una potencia cuadrada para lograr la eliminación de los términos, esta regla deberá de ser aplicada cuantas veces sea necesario hasta lograr una homogeneidad dimensional.

Se dice que una ecuación que predice el comportamiento de un fenómeno físico es dimensionalmente consistente cuando al sustituir las dimensiones (unidades) de cada una de las variables involucradas, se verifica la igualdad. Esto implica que la ecuación permanece inalterable al ser utilizada en cualquier sistema de unidades y que la constante participante en la ecuación es dimensional.

En el Apéndice A (página 119), se puede encontrar una tabla con las conversiones más utilizadas.

Variables relacionadas con la materia

En esta sección se resumen los conceptos elementales de las variables que están relacionadas con la materia; como se sabe, en una planta química, se debe tener un estricto control sobre los flujos de materia a lo largo del proceso, este control se lleva a cabo midiendo los gastos; esto es, la cantidad de materia por unidad de tiempo que pasa por un punto específico de las corrientes del proceso. Los gastos pueden clasificarse como:

Gasto másico	$\frac{\text{masa}}{\text{tiempo}}$	$\frac{M}{\theta}$
Gasto volumétrico	$\frac{\text{volumen}}{\text{tiempo}}$	$\frac{L^3}{\theta}$
Gasto molar	$\frac{\text{moles}}{\text{tiempo}}$	$\frac{M}{\theta}$

Otra manera de representar una corriente es proporcionar su flujo total, en moles o en unidades masa, junto con la composición de la corriente. La *composición* es una variable intensiva que generalmente se expresa como la concentración de los diferentes componentes de una mezcla. Esta concentración se puede expresar como concentración masa o molar. En la primera se refiere a la masa de un compuesto por unidad de volumen de solución.

$$C = \frac{\text{masa del componente } i}{\text{volumen}} = \frac{M}{L^3}$$

La relación anterior aplica cuando se tiene más de un componente en una mezcla, cuando se refiere a un solo componente la concentración es la densidad absoluta de dicho componente.

La concentración molar, es el número de moles de un compuesto por unidad de volumen de solución:

$$\tilde{C} = \frac{\text{concentración masa de } i}{\text{peso molar de } i} = \frac{C_i}{PM_i} = \frac{M}{L^3}$$

Cuando se habla de la masa de una sustancia dividida entre la masa total de una solución, se está trabajando con *fracciones masa*, es decir:

$$x^i = \frac{\text{masa de } i}{\text{masa total}} = \frac{M}{M} \text{ adimensional}$$

$$x^i = \frac{\tilde{x}^i PM_i}{\tilde{x}_a PM_a + \tilde{x}_b PM_b + \dots + \tilde{x}_i PM_i}$$

La fracción mol es el número de moles de una sustancia dividida entre el número total de moles en la solución.

$$\tilde{x}_i = \frac{\text{moles de } i}{\text{moles totales}} = \frac{M}{M} \text{ adimensional}$$

$$\tilde{x}^i = \frac{\frac{x^i}{PM_i}}{\frac{x_a}{PM_a} + \frac{x_b}{PM_b} + \dots + \frac{x_i}{PM_i}}$$

Relación masa. Masa de una sustancia dividida entre la masa total de una mezcla, menos la masa de la sustancia.

$$x^i = \frac{\text{masa del componente } i}{\text{masa de la mezcla sin componente } i} = \frac{M}{M} \text{ adimensional}$$

$$X^i = \frac{x^i}{1 - x^i} \quad ; \quad x^i = \frac{X^i}{1 + X^i}$$

Relación mol.

$$\tilde{X}_i = \frac{\text{moles del componente } i}{\text{moles de la mezcla sin } i}$$

Por ciento en volumen. Volumen de una sustancia entre el volumen total.

$$\% \text{ en volumen} = \left(\frac{v^i}{v_T} \right) 100$$

Densidad. Es una variable intensiva que relaciona la masa con el volumen de un cuerpo. Existen dos maneras de indicar la densidad:

Densidad absoluta, la cantidad de masa contenida en la unidad de volumen de una sustancia

$$\rho = \frac{\text{masa}}{\text{volumen}} = \frac{M}{L^3}$$

Densidad relativa, es la densidad de una sustancia con la densidad de una sustancia tomada como referencia. La sustancia de referencia en el caso de sólidos y líquidos suele ser agua; en los gases se toma al aire.

$$\rho_R = \frac{\rho^i}{\rho_{H_2O}} = \frac{ML^{-3}}{ML^{-3}} = \text{adimensional}$$

Debido a que la densidad de una sustancia y la del agua se ven afectadas por la temperatura, aunque no en el mismo grado, se debe especificar la temperatura cuando se habla de densidad relativa.

VARIABLES RELACIONADAS CON ENERGÍA

Presión. Es la variable intensiva definida como la fuerza ejercida sobre la unidad de área.

$$presión = \frac{F}{A} = \frac{\frac{ML}{\theta^2}}{\frac{1}{L^2}} = \frac{M}{L\theta^2}$$

Presión hidrostática, es el peso de una columna de fluido sobre la unidad de área.

$$Ph = \frac{\text{peso}}{\text{área}} = \frac{PeAh}{A} = Peh$$

Presión atmosférica. Debido a su peso, el aire produce sobre una superficie situada en su seno una presión análoga a la hidrostática; esto es la presión atmosférica y varía según la ubicación en la superficie terrestre.

Presión manométrica. Usando la presión atmosférica como referencia, la presión manométrica es una medida de la fuerza por unidad de área ejercida por un fluido. En otras palabras es la presión medida por instrumentos llamados manómetros.

Presión de vacío. Es una presión por debajo de la presión atmosférica normal; se mide frecuentemente como la diferencia entre la presión medida y la presión atmosférica en unidades de mm o pulgadas de mercurio de vacío.

Presión absoluta. Se refiere a la fuerza total por unidad de área ejercida por un fluido. Es igual a la presión atmosférica más la presión manométrica.

Temperatura. Es una variable intensiva que puede definirse como una medida indirecta del grado de excitación de la materia; se mide con instrumentos llamados termómetros, que utilizan escalas arbitrarias.

Escala en grados Celsius, en la cual se toma como punto cero la temperatura de fusión del hielo y como 100 grados la temperatura de ebullición del agua a la presión de 760 mmHg.

Escala en grados Fahrenheit, en esta escala la temperatura de fusión del hielo es de 32°F y la de ebullición a la presión normal es de 212°F. La relación entre escalas es:

$$t^{\circ}C = \frac{t^{\circ}F - 32^{\circ}F}{1.8} \quad y \quad t^{\circ}F = 32^{\circ}F + 1.8^{\circ}C$$

Escala en grados Kelvin, es una escala absoluta en la que el cero corresponde a la temperatura más baja posible en el universo (-273°C). Usa divisiones en grados centígrados.

$$t^{\circ}K = t^{\circ}C + 273$$

Escala en grados Rankine, es una escala absoluta en la cual el cero corresponde a la temperatura más baja posible (-460°F). Cada división corresponde a un grado Fahrenheit. Es usada comúnmente en Estados Unidos de América, como medida de temperatura termodinámica. Aunque actualmente en la comunidad científica, las medidas son efectuadas en Sistema Internacional, es decir, grados kelvin (°K).

$$t^{\circ}R = t^{\circ}F + 460$$

En general, los procesos químicos reales, producen cambios en casi todas las propiedades de la materia. Pero hay algunas excepciones en donde las variables permanecen constantes. Es decir, cuando en un proceso no existe un cambio en la presión, se dice que es isobárico; si el volumen no cambia se dice que es isocórico; si la temperatura permanece constante es un proceso isotérmico y finalmente si no ocurre cambio en el contenido de energía se dice que es isoentálpico.

RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS DE BALANCE

Para resolver los problemas con los que se enfrenta el ingeniero químico se deben trasladar los requerimientos del mundo exterior al mundo de la mente y así con la ayuda de la Matemáticas, Física y Química se podrá encontrar la respuesta, la cual deberá cambiarse nuevamente a términos utilizados realmente.

Para la resolución de problemas se debe seguir una secuencia, para la cual el primer término será un enunciado que resume los requerimientos de algún problema real.

Para iniciar el proceso contable de la resolución del balance de materia, se establecen expresiones a partir del principio de conservación de la masa. La expresión general es la siguiente:

$$\text{Entradas} - \text{Salidas} + \text{Generación} - \text{Consumo} = \text{Acumulación}$$

Los primeros pasos para definir un problema de balance incluyen definir primeramente las fronteras del sistema, identificar todas las corrientes de entrada y salida, e identificar las sustancias que contiene cada corriente. El siguiente paso para resolver el balance de materia, será traducir el enunciado a un lenguaje de ingeniería química, es decir, dibujar un diagrama de flujo con todos los equipos y corrientes que participen en el proceso, después se debe representar en forma matemática las interrogantes que deben ser resueltas para resolver el balance de materia. Inmediatamente se procede a la resolución a partir del sistema de ecuaciones que se haya presentado, aplicando los conocimientos que sean necesarios tanto matemáticos como químicos o físicos.

Secuencia de resolución:

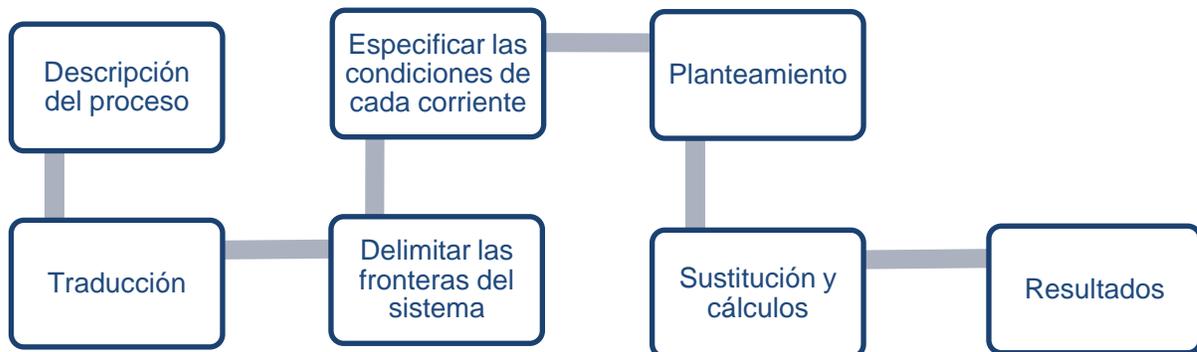


Figura 1. Secuencia de resolución para problemas de balance.

Fuente: Creación propia

En una unidad de proceso, se pueden establecer las siguientes expresiones:



Figura 2. Unidad de proceso con dos corrientes de entrada y dos de salida.

1. Relación de las corrientes del proceso:

$$A + B = C + D$$

2. Componentes: Es posible establecer expresiones linealmente independientes cuyo número depende del número de componentes participantes en el proceso.

x_{1A} = fracción del componente 1 en la corriente A

$$x_{1A} = \frac{g \text{ de componente 1}}{g \text{ totales en la corriente A}}$$

Entonces se tiene:

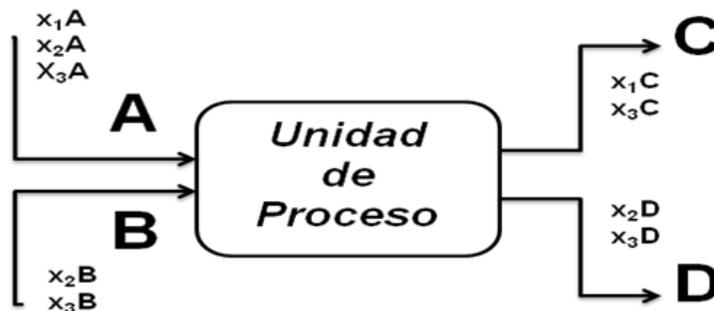
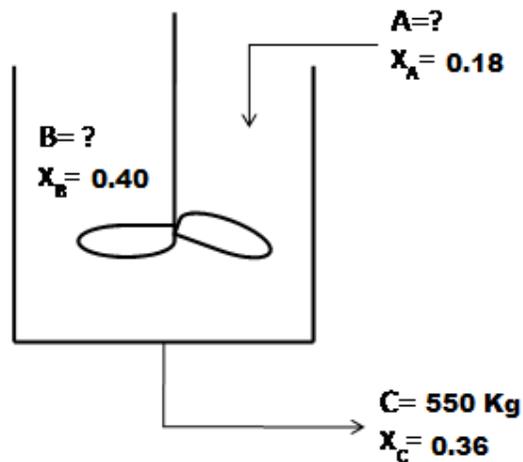


Figura 3. Unidad de proceso con flujos y concentraciones desconocidos.

Por ejemplo:

1. Se desea obtener a la salida de un mezclador 550Kg de una sustancia que contenga 36% volumen de un solvente. Se sabe que el mezclador contiene una solución con el 40% de solvente y se le agrega otra solución la cual contiene 18% de ese mismo solvente. Determine qué cantidades contiene el mezclador y cuánto se ha de agregar para satisfacer las características del producto deseado.



Planteamiento:

$$A + B = C \quad (1)$$

$$A + B = 550 \text{ Kg}$$

$$A = 550 - B$$

$$\text{Sólidos} = 0.18A + 0.40B = 0.36C \quad (2)$$

$$\text{Disolventes} = (1 - 0.18)A + (1 - 0.40)B = (1 - 0.36)C \quad (3)$$

Sustitución de A en la ecuación 2:

$$0.18(550 - B) + 0.40B = 0.36(550)$$

$$99 - 0.18B + 0.40B = 198$$

$$-0.18B + 0.40B = 198 - 99$$

$$0.22B = 99$$

$$B = \frac{99}{0.22}$$

$$B = 450 \text{ kg}$$

Entonces:

$$A + B = C$$

$$A = C - B$$

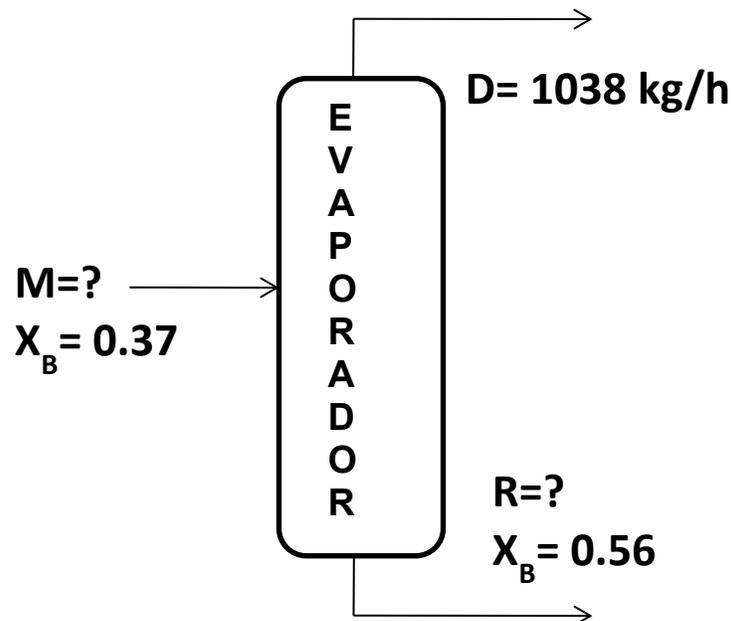
$$A = 550 - 450$$

$$A = 100 \text{ kg}$$

Ya se ha descrito cómo resolver un proceso de mezclado, ahora se incluye un ejemplo más pero ahora una separación, las condiciones del proceso son las siguientes:

Ejemplo dos:

2. Se retira de un evaporador 1038 kg/h de H_2O . La corriente que alimenta al evaporador contiene 37% de butanol y se desea obtener en el residuo, una solución concentrada que contenga 56%. Determine los gastos máxicos de las corrientes de alimentación y producto; M (mezcla), D (destilado) y R (residuo).



Planteamiento:

$$M = D + R \quad (1)$$

$$M = 1038 + R$$

$$0.37 M = 1038 + 0.56 R \quad (2)$$

$$(1 - 0.37)M = 1038 + (1 - 0.56)R \quad (3)$$

$$0.63 M = 1038 + 0.44 R$$

Sustitución de M en la ecuación 2:

$$0.63(1038 + R) = 1038 + 0.44 R$$

$$653.94 + 0.63 R = 1038 + 0.44 R$$

$$0.63 R - 0.44 R = 1038 - 653.94$$

$$0.19 R = 384.06$$

$$R = \frac{384.06}{0.19} = 2021.368$$

$$R = 2021.368 \frac{kg}{h}$$

Entonces:

$$M = 1038 + 2021.368$$

$$M = 3059.368 \frac{kg}{h}$$

Estequiometria química

En el caso de presentarse un sistema en el que intervenga una o varias transformaciones químicas, será necesario considerar a las especies químicas individuales que compongan la mezcla. En la cual deberán aplicarse conceptos básicos de ecuaciones estequiométricas y pesos atómicos y moleculares, los que son fundamentales para la aplicación del principio de conservación de la materia.

Aunque cabe resaltar que en los objetivos planteados en este proyecto no se contemplan balances de materia con reacción química, puesto que para desarrollarlos en el simulador, se tendrá que utilizar un reactor químico, concepto que el alumno desconoce y aplicará hasta octavo semestre (según el plan de estudios vigente de la FES Zaragoza); es por esta razón que los balances de materia con reacción química quedan descartados para el desarrollo de este proyecto.

Como ya se ha mencionado, en la actualidad es de suma importancia el uso de la tecnología en la resolución de problemas, y en ingeniería no es la excepción; se debe inculcar a los alumnos primeramente, de cuarto semestre el uso de simuladores para la resolución de los balances de masa, para que después estén familiarizados con el funcionamiento del simulador y lo puedan ir aplicando conforme van aprendiendo nuevos procesos a lo largo de la carrera.

En el capítulo dos, se describe de manera explícita como comenzar a trabajar con el simulador de procesos PRO II a partir de ejemplos desarrollados paso a paso para su fácil comprensión.

2. Simulación de procesos

La simulación de procesos es una herramienta eficaz y efectiva para el análisis, la síntesis y la optimización de un proceso. La simulación es la imitación del funcionamiento de un sistema real, que nos permite obtener conocimiento acerca de este sistema a partir de un modelo ideal. La simulación desde el punto de vista de la Ingeniería Química es la solución de las ecuaciones de balance de materia y energía para procesos químicos en estado estacionario o dinámico. Así como del dimensionamiento y la obtención de costos de los equipos involucrados en un proceso. Los simuladores se pueden clasificar en a) simuladores en estado estacionario o simuladores dinámicos; b) simuladores de uso específico (creados para una operación unitaria específica y un determinado rango de operación, o c) simuladores de uso general (contienen en su estructura varias operaciones unitarias las cuales pueden ser interrelacionadas para simular un proceso, por ejemplo Aspen, HYSYS, Chemcad, PRO II, etc.).

Entre las ventajas en el uso de la simulación de procesos se encuentra: la importancia de evaluar el proceso a partir de un diagrama de proceso, antes de comprometerse a la construcción de una planta química lo que podría generar excesos en costo, se puede mejorar el rendimiento a través de la optimización del proceso ya existente, es rentable para evaluar, documentar y cumplir con los requisitos ambientales de cada país, acelerar el proceso en la resolución de problemas, ofrece un banco de datos termodinámicos y propiedades físicas muy amplio, que abarca diversos sectores. Es una herramienta de apoyo en la toma crítica de decisiones ya que se pueden probar diferentes alternativas de procesos y condiciones de operación.

La simulación proporciona todos los datos de proceso requeridos para el diseño detallado de los diferentes equipos y para la construcción de plantas a nivel piloto o industrial, que después de construirlas y operarlas servirán para retroalimentar el modelo utilizado para validarlo.

Antecedentes

Los orígenes de la simulación comienzan en la segunda Guerra Mundial cuando dos matemáticos, J. V. Neumann y S. Ulam, tenían el reto de resolver un problema complejo relacionado con el comportamiento de los neutrones, los experimentos basados en prueba y error resultaban muy caros y el problema era demasiado complicado para resolverlo mediante técnicas analíticas.

El desarrollo tecnológico para el diseño de nuevos procesos y para la mejora de los procesos existentes fue la primera motivación en el desarrollo de la simulación de procesos; aunque el comienzo fue lento, entre los años 1966-1968 aparecieron los primeros paquetes de simulación de procesos, encaminados a la realización de balances de materia y de energía para procesos en estado estacionario. Los primeros paquetes difundidos fueron el PACER y el CHESS (desarrollados en universidades norteamericanas) y el FLOWTRAN (desarrollado por Monsanto). Durante la década de los sesentas se sofisticaron los cálculos, se refinaron los modelos de estimación de propiedades fisicoquímicas, se aumentaron las unidades de proceso, entre otras cosas.

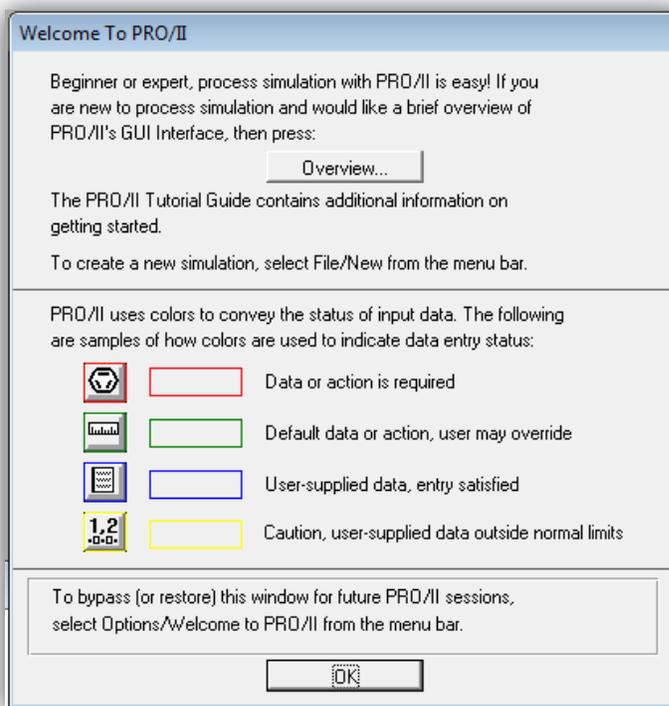
En los años ochenta surgieron las compañías que elaboraban el software y que desarrollaban paquetes de simulación para su comercialización. A finales de los ochenta inició el desarrollo de paquetes de simulación interactivos (Chemcad, Hysys, Aspen, etc.) su comercialización marcó el comienzo de un uso mas intensivo generalizado en la industria y universidades.

Descripción del simulador de procesos PRO II.

El software de simulación de procesos @PRO II es un simulador en estado estacionario de los más completos disponibles hoy en día, funciona como una aplicación compatible con Windows. Entre las ventajas que se tienen al hacer uso de este simulador se tienen: que permite realizar un análisis operativo y realizar mejoras al diseño de procesos. Además está diseñado para realizar cálculos de balance para una amplia gama de componentes químicos.

Está diseñado con una característica única que ayuda en la construcción del diagrama de flujo del proceso, ofrece una serie de herramientas que apoyan en la especificación de las condiciones en que se presentan los componentes. Presenta pantallas formadas confinadas en cuatro colores, los cuales indican el estado de los datos introducidos por el usuario (Figura 4).

Algunas de las desventajas que presenta el simulador se encuentran: que solo se pueden realizar simulaciones en estado estacionario. Como con el resto de simuladores tienden a ser vistos como cajas negras, debido a que no se conocen los modelos de cálculo que el simulador utiliza; además de que en algunas ocasiones los resultados que arroja resultan difíciles de interpretar.



COLOR	SIGNIFICADO
ROJO	<i>Se requieren datos o acciones</i>
VERDE	<i>Datos opcionales, que el usuario puede proporcionar o no.</i>
AZUL	<i>Los datos suministrados por el usuario son suficientes.</i>
AMARILLO	<i>Precaución, los datos suministrados por el usuario están fuera de los límites normales</i>

Figura 4 y Tabla 3. Ventana que muestra los colores y el significado con los que el simulador indica el estado de los datos.

Al iniciar el programa la primera ventana que aparece es una como la que se muestra en la siguiente Figura:

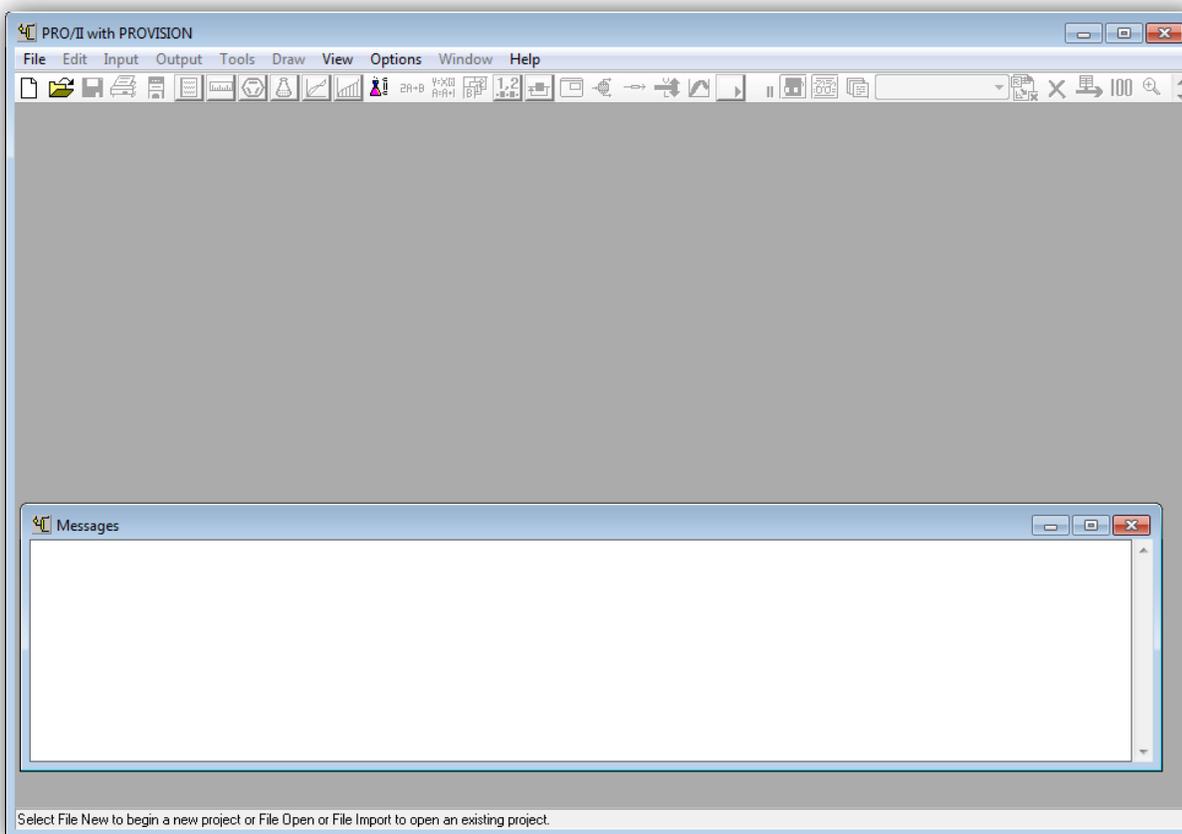


Figura 5. Ventana inicial.

Para comenzar a simular un proceso se debe de seleccionar la opción "New" ubicada en la parte superior izquierda de la barra de herramientas:



Para que se abra una nueva ventana y aparezca en pantalla la barra de herramientas de dibujo "PDF" o "PFD" (ver Figura 6).

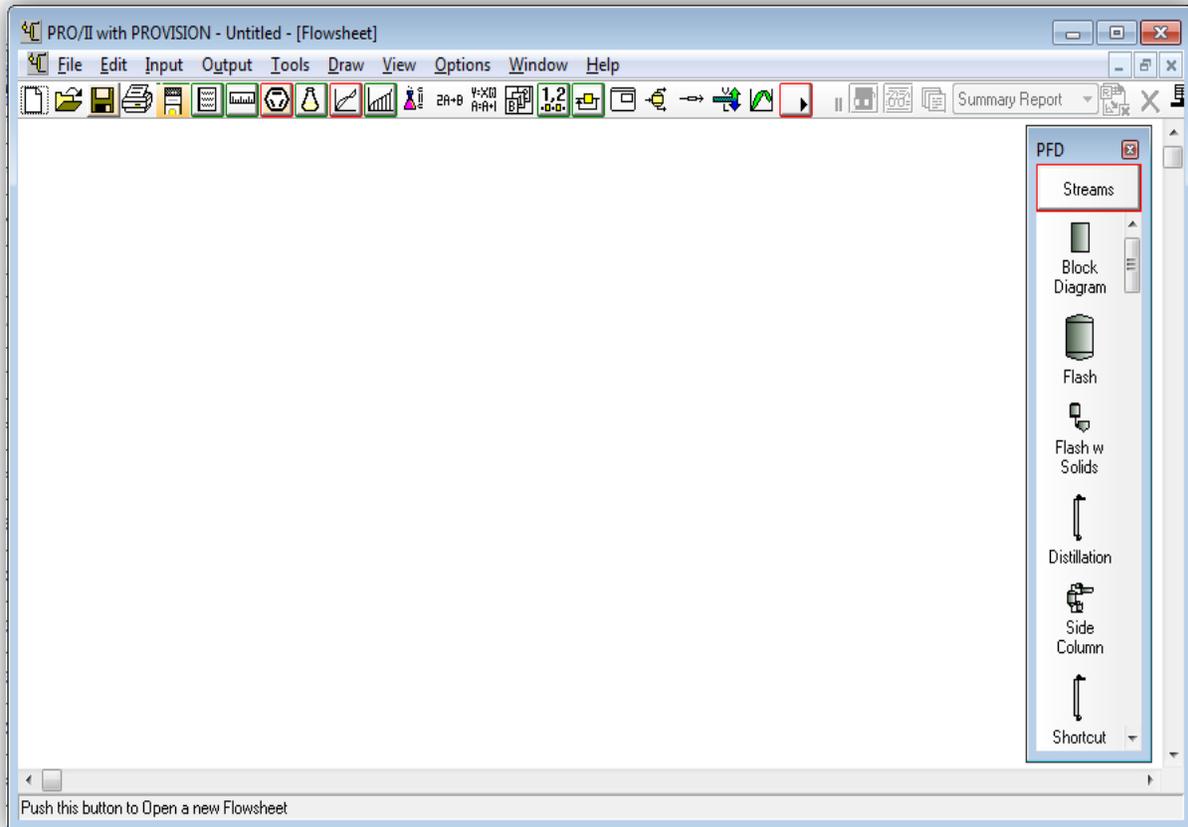


Figura 6. Ventana para iniciar una simulación.

Ahora para explicar cómo se inicia la simulación de operaciones unitarias básicas, se va a partir de tres ejemplos sencillos y dos un poco más complejos, en los cuales se explica paso a paso como se opera el simulador, desde el diseño del DFP hasta la ejecución de la simulación. Se recomienda revisar el Apéndice B y C para conocer algunos equipos las herramientas que ofrece el simulador, antes de comenzar a realizar los procesos sugeridos.

1. El ejemplo uno es un proceso que consta de un mezclador, con dos alimentaciones y una salida. La primera alimentación entra a una temperatura de 500 °K y una presión de 50 KPa contiene 100 Kgmol/hr de NH_3 ; la segunda alimentación tiene 200 Kgmol/hr de H_2O a una Temperatura de 300 °K y 100 KPa. Resuélvase el balance de masa, en el simulador de procesos PRO/II.

- a. El primer paso, es elaborar el DFP del ejercicio (ver Figura 7), desde la selección del equipo “mixer” hasta el acomodo de las corrientes con la opción “streams”. Dibujar el equipo que en este caso es un mezclador, con sus correspondientes entradas y salidas, para este caso son dos corrientes de entrada y una salida. El DFP se elabora utilizando las opciones que nos presenta la barra de herramientas “PDF”.

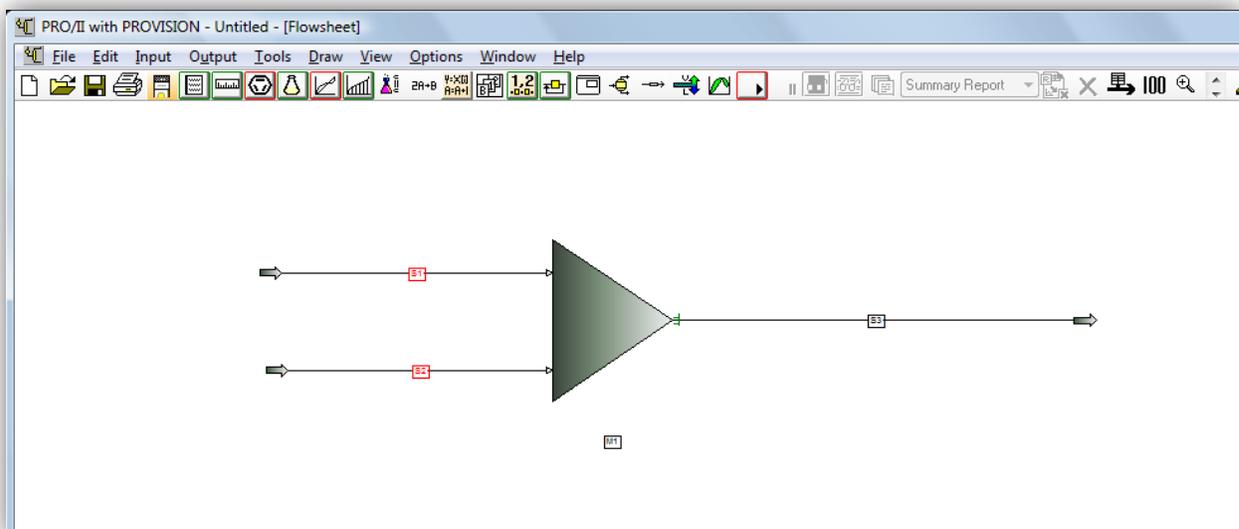


Figura 7. DFP del ejemplo uno, un mezclador con dos corrientes de entrada y una salida.

- b. Ya que se tiene dibujado el DFP de la operación, se procede a seleccionar los componentes en la opción ‘component selection’ de la  barra de herramientas; para este ejercicio son H_2O y NH_3 ; ir a la sección que dice ‘select from lists’, después seleccionar la opción ‘most commonly used’ para los más comúnmente usados, de ahí se procede a buscar en la lista los componentes o en la sección ‘Sort/search by’ se pueden buscar los componentes por nombre completo, abreviación, o fórmula química (Figura 8, 9 y 10).

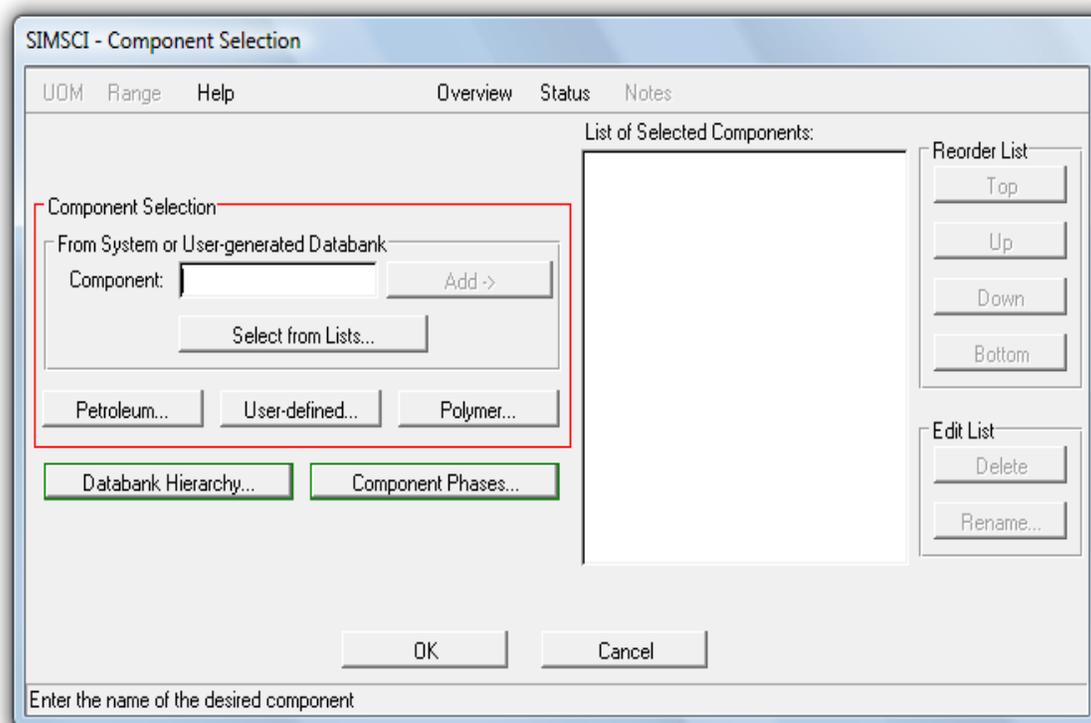


Figura 8. Selección de los componentes.

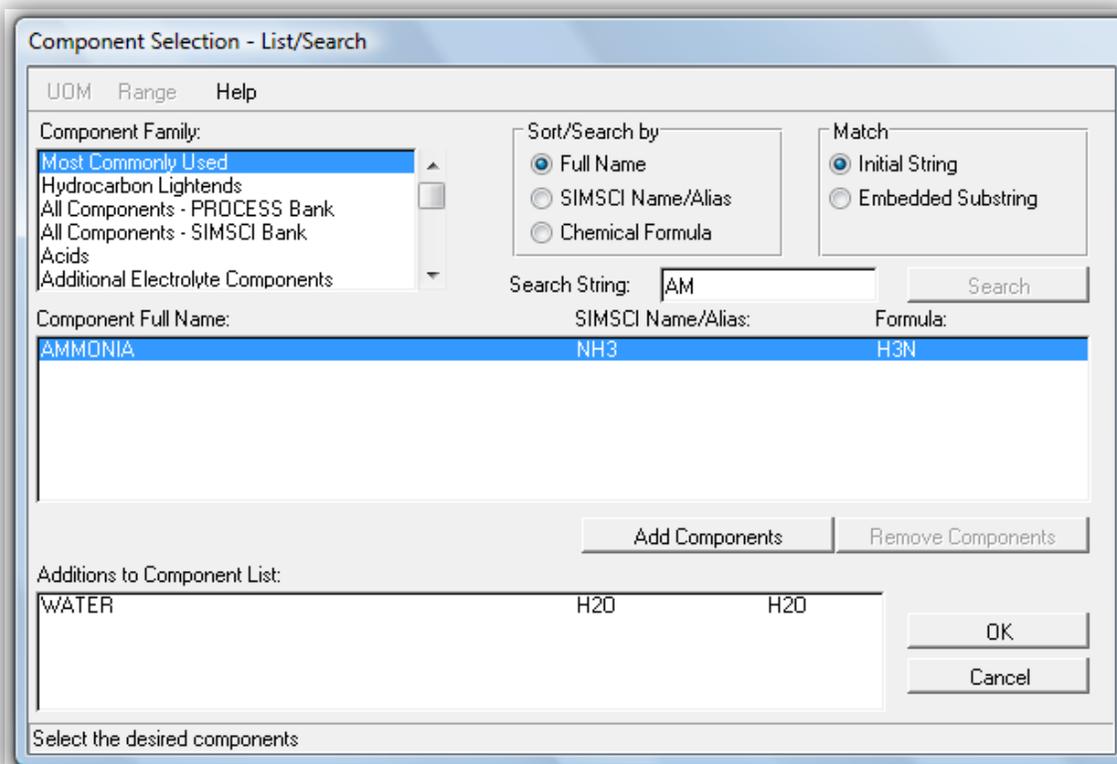


Figura 9. Selección de los componentes a partir de una lista de búsqueda.

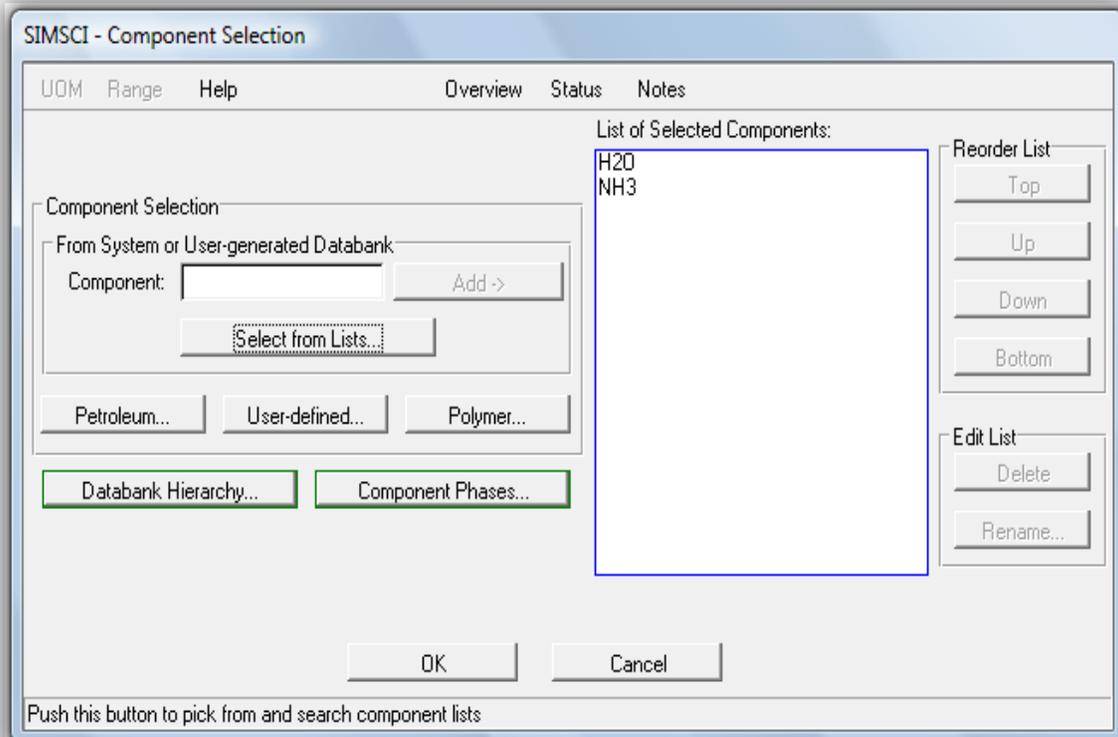


Figura 10. Componentes del ejemplo uno, seleccionados correctamente.

- c. Ahora en la herramienta 'thermodynamic data' se selecciona la opción 'ideal' de la lista de los más comúnmente usados; ya que el modelo termodinámico a utilizar siempre será inicialmente el ideal. 

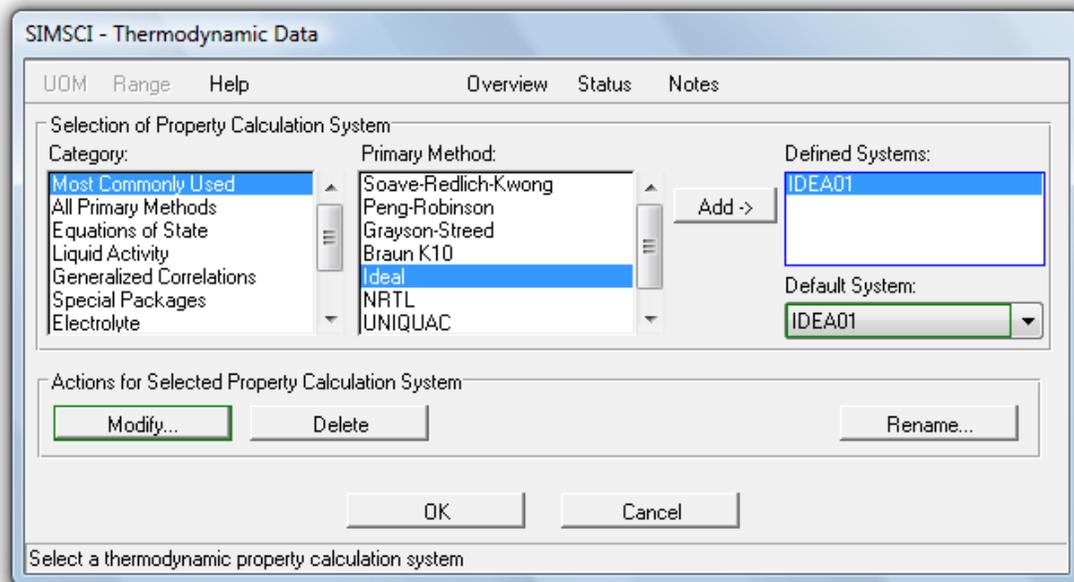


Figura 11. Selección del modelo termodinámico.

- d. Ahora se van a seleccionar el tipo de unidades que se van a utilizar, para este caso se seleccionara el sistema SI que se selecciona en la barra de herramientas en la opción 'units of measure'. Y después se selecciona la opción Initialize from UOM Library.

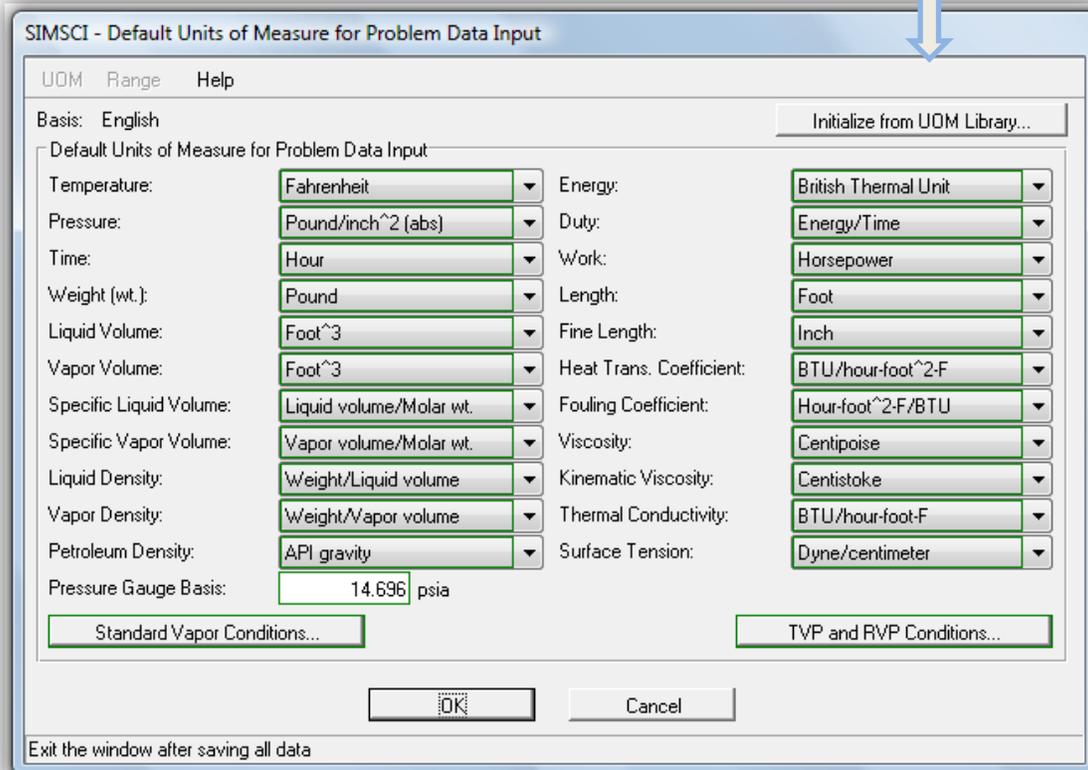


Figura 12. Selección del sistema de unidades.

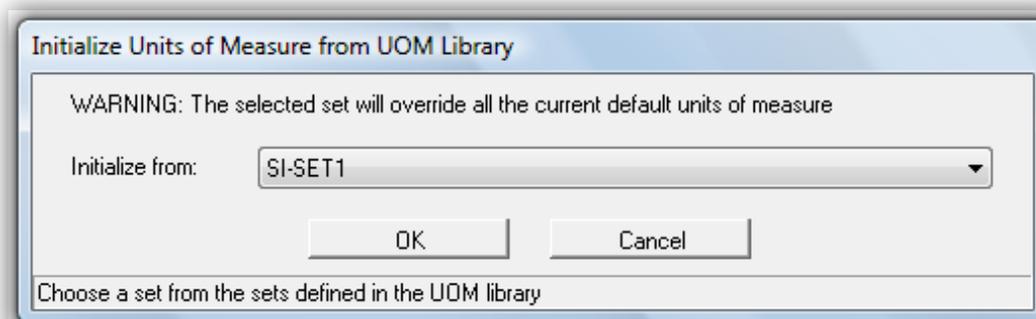


Figura 13. Selección del Sistema Internacional de Unidades.

e. Ya que se tienen especificados los componentes y el tipo de modelo termodinámico de la operación, se van a especificar las condiciones iniciales como temperatura, presión, flujo y concentraciones (Figura 14 y 15).

Después se especifican para cada una de las corrientes de entrada, haciendo doble clic primero sobre la línea de la corriente uno, se abrirá una ventana; en la sección de Flowrate and Composition se deberá indicar el flujo y las composiciones de la alimentación.

PRO/II - Stream Data

UDM Range Help Tag Overview Status Notes

Stream: S1 Description:

To Unit: M1

Stream Type

- Composition Defined
- Petroleum Assay
- Referenced to Stream
- Solids Only Stream

Flowrate and Composition...

Stream Solids Data...

Stream Polymer Data...

Thermal Condition

First Specification:

Temperature 500.00 K

Second Specification:

Pressure 50.000 kPa

Thermodynamic System: Determined From Connectivity

OK Cancel

Exit the window after saving all data

Figura 14. Especificación de la presión y temperatura de la corriente uno.

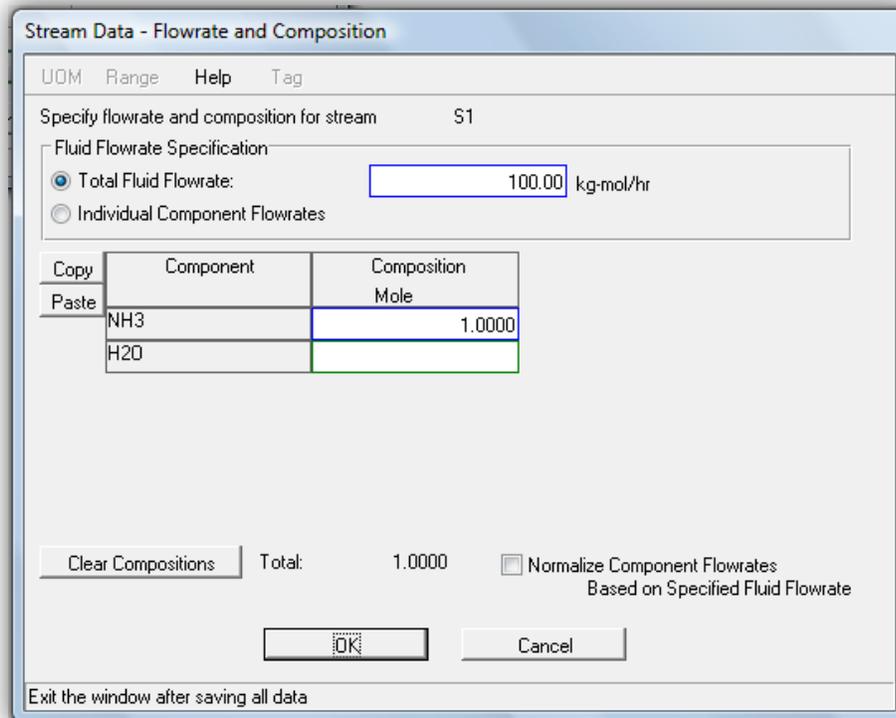


Figura 15. Especificación del flujo y concentración de los componentes de la corriente uno.

- f. Se hace exactamente lo mismo del paso anterior pero ahora con la corriente número dos, con sus respectivas especificaciones (ver Figura 16 y 17).

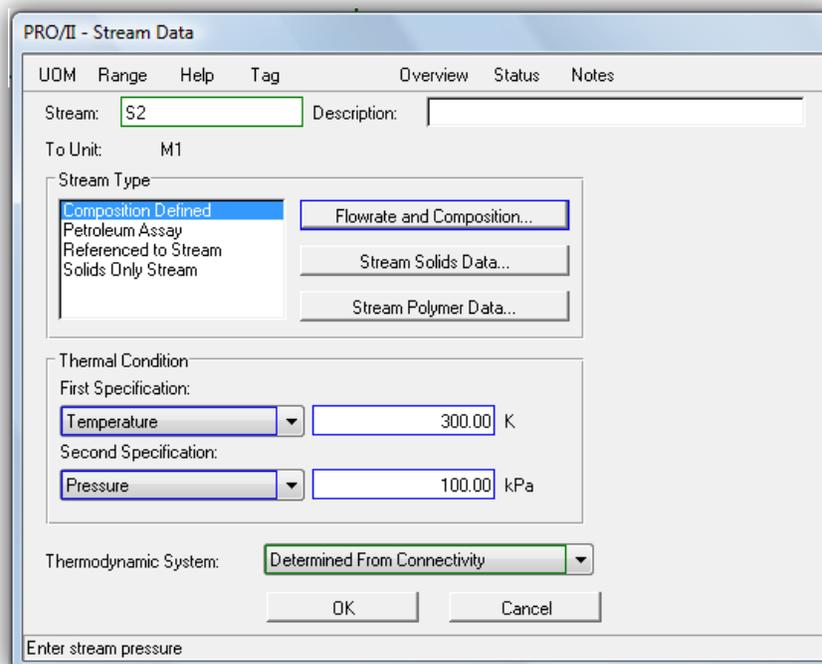


Figura 16. Especificación de la temperatura y presión de la corriente dos.

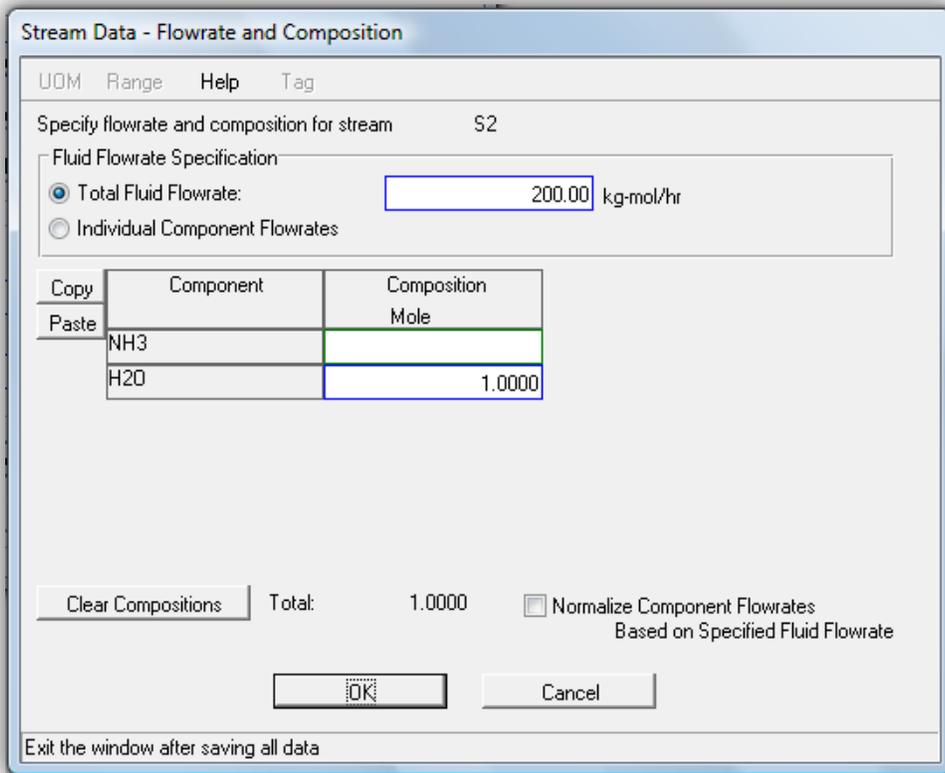


Figura 17. Especificación del y concentración de los componentes de la corriente dos.

g. Para finalizar y se pueda ejecutar la operación, se debe agregar una tabla de propiedades de todas las corrientes, para verificar y analizar los resultados arrojados por el simulador (Figura 18).

En la herramienta de PDF se selecciona 'Stream properties', después de dar doble clic en la tabla que se acaba de crear para abrir la ventana de la Tabla de Propiedades de las Corrientes.

Stream Name		S1	S2	S3
Stream Description				
Phase		Unknown	Unknown	Unknown
Temperature	C	n/a	n/a	n/a
Pressure	KG/CM2	n/a	n/a	n/a
Flowrate	KG-MOL/HR	n/a	n/a	n/a
Composition				
H2O		n/a	n/a	n/a
NH3		n/a	n/a	n/a

Figura 18. Herramienta PDF y tabla de balance de materia.

Seleccionar la opción Material Balance List y después dar clic en el botón “Add All” para que nos muestre todas las corrientes en los resultados (ver Figura 19).

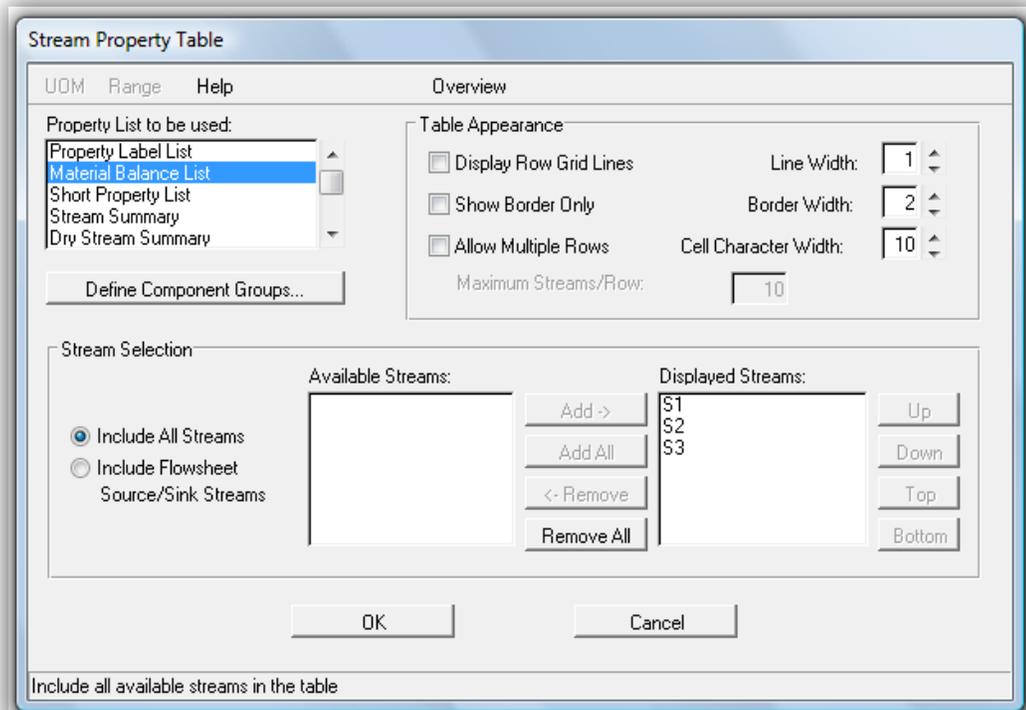


Figura 19. Especificación del contenido de la tabla de balance.

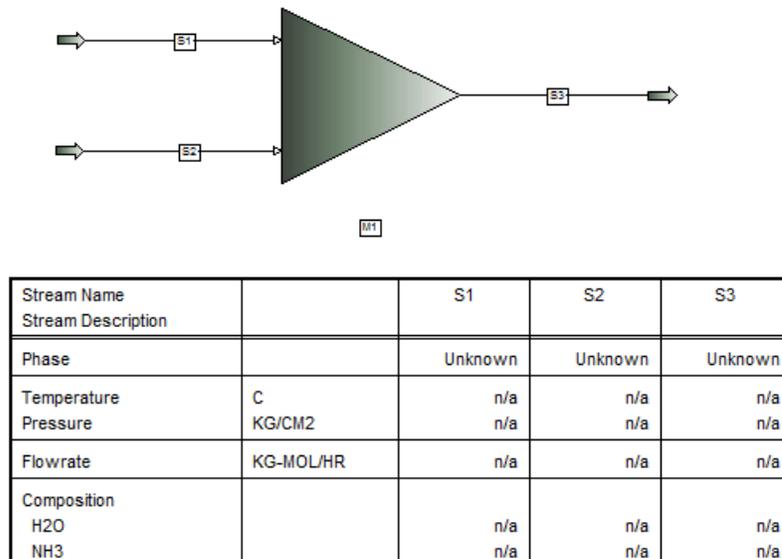
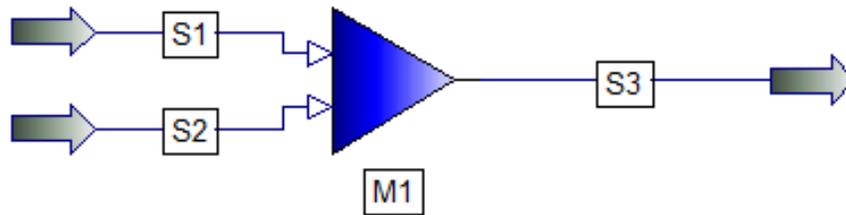


Figura 20. DFP y tabla de balance de materia.

h. Finalmente se puede ejecutar el ejercicio. Dando clic a la opción 'run' de la barra de herramientas.



Stream Name		S1	S2	S3
Stream Description				
Phase		Vapor	Liquid	Mixed
Temperature	K	500.000	300.000	300.496
Pressure	KPA	50.000	100.000	50.000
Flowrate	KG-MOL/HR	100.000	200.000	300.000
Composition				
NH3		1.000	0.000	0.333
H2O		0.000	1.000	0.667

Figura 21. Proceso finalizado con DFP y tabla de propiedades.

A la salida del mezclador se tiene simplemente, respecto a fases; una mezcla de líquido y vapor a una temperatura de 300.496 °K se puede observar que predominó la temperatura del líquido, una presión de 50 KPa, obviamente, de acuerdo a lo que nos dice la Ley de la conservación de la materia, se obtienen a la salida del equipo, 300 Kgmol/hr de mezcla, y a pesar de que se mezclaron dos corrientes puras de cada compuesto, se obtiene una mezcla al 33% de NH₃. Se puede concluir que como se trata de una operación de mezclado de tan solo dos corrientes, el balance de masa en realidad es sencillo y como son dos fases diferentes, realmente el simulador no va a determinar si hay una transferencia de masa entre las fases puesto que no se utiliza un equipo para ello, se está utilizando un mezclador y así es como lo realiza el simulador, solo una mezcla de fases.

Ya que se inició la simulación de procesos con el ejemplo desarrollado de un proceso de mezclado, ahora se va a utilizar como referencia una separación de una mezcla equimolar líquida, las condiciones para el proceso son las siguientes:

2. En el ejemplo dos, entra a un tanque flash una alimentación de 1000 lbmol/hr, la cual es una mezcla formada por Etanol y Agua; a una misma concentración, a una temperatura de 190 °F y una presión de 14.22 psi.

a. El primer paso como se sabe, es elaborar el DFP del ejercicio (Figura 22). Seleccionar el equipo que en este caso es un tanque flash, con sus correspondientes entradas y salidas, para este caso es una corriente de entrada y dos de salida (destilado y fondos).

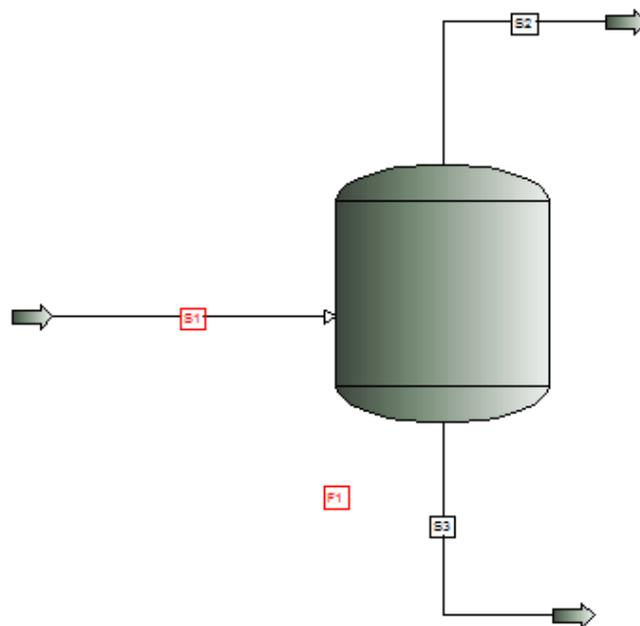


Figura 22. DFP para el segundo ejemplo, un proceso de separación.

b. Ya que se tiene dibujado el DFP de la operación, se procede a seleccionar los componentes en la opción 'component selection' de la barra de herramientas, para este ejercicio son H_2O y C_2H_6O ;



Ir a la sección que dice 'select from lists', después seleccionamos la opción 'most commonly used' para los más comúnmente usados, de ahí ya se procede a buscar en la lista los componentes o en la sección 'Sort/search by' buscar por nombre completo, abreviación, o formula química (Figura 23, 24 y 25).

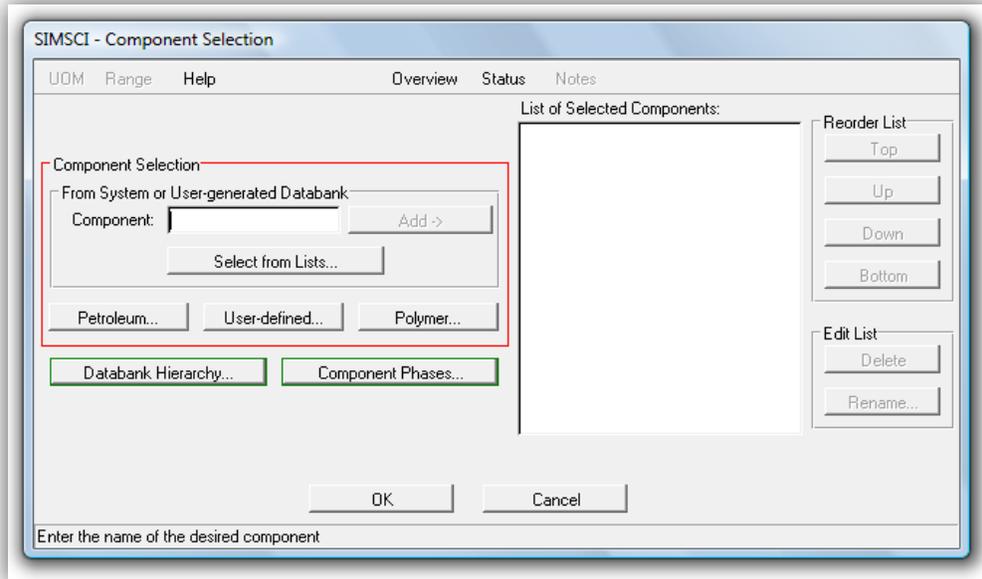


Figura 23. Selección de los componentes.

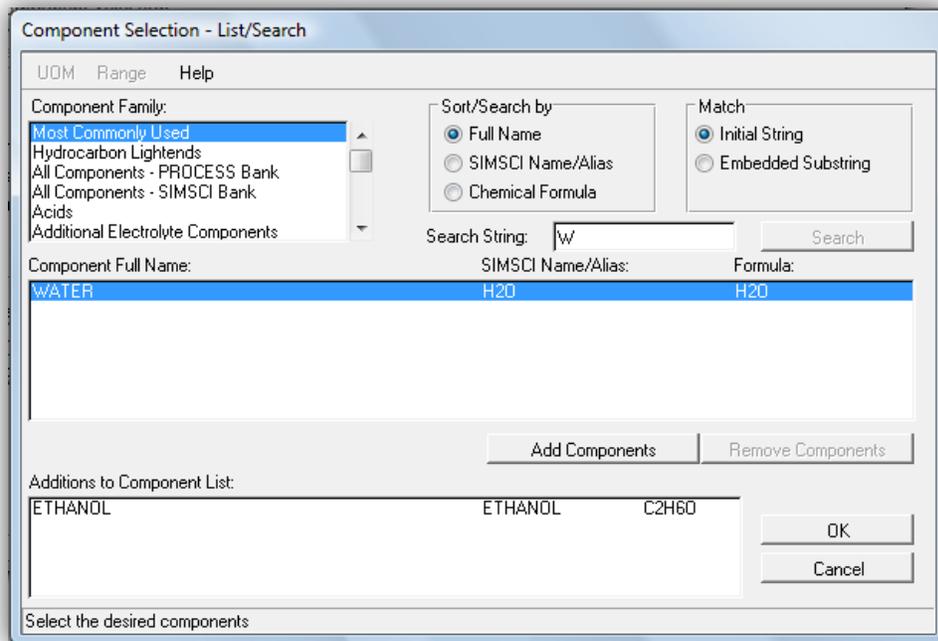


Figura 24. Selección de los componentes a partir de una lista de búsqueda.

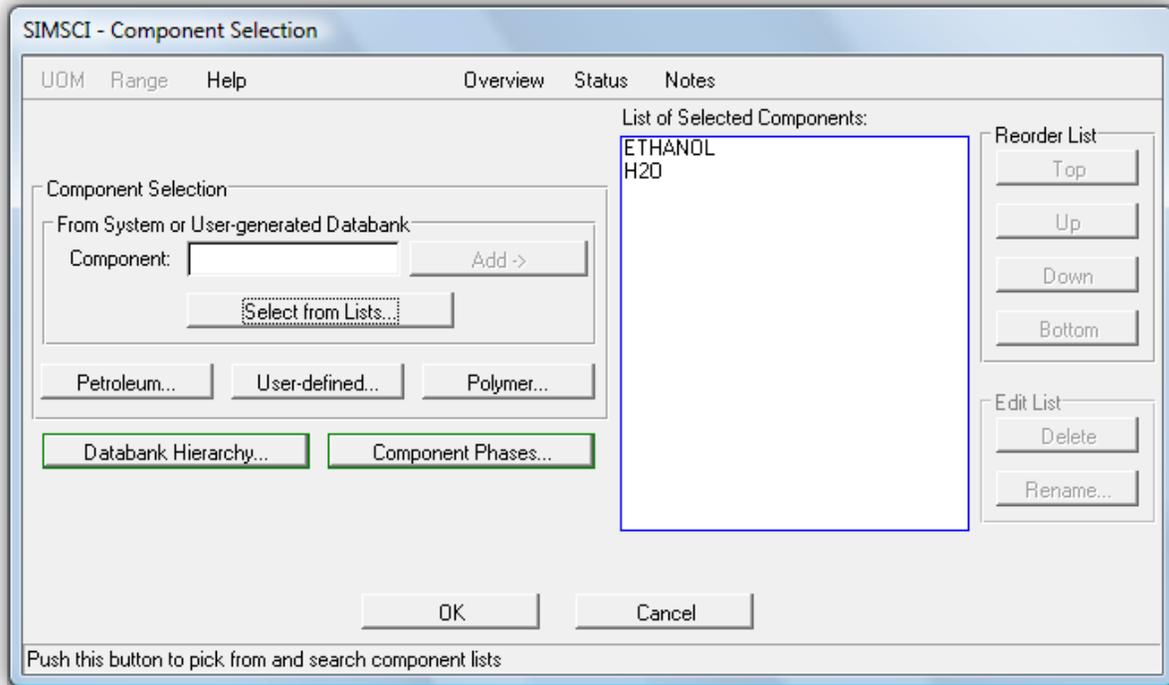


Figura 25. Componentes del ejemplo dos, seleccionados correctamente.

- c. Ahora en la herramienta 'thermodynamic data' se selecciona la opción 'ideal' de la lista de los más comúnmente usados; ya que el modelo termodinámico a utilizar siempre será inicialmente el ideal (Fig. 26)

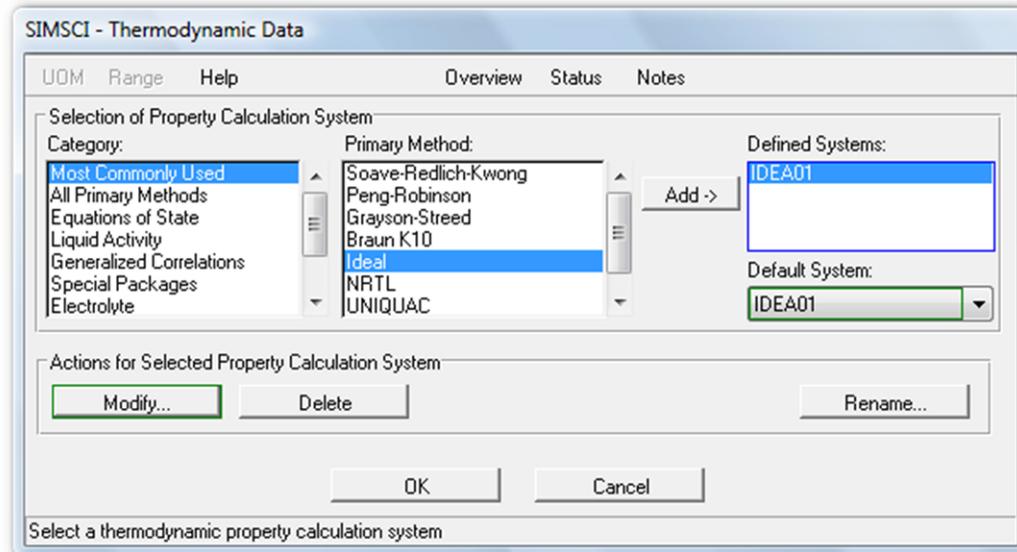


Figura 26. Selección del modelo termodinámico.

- d. Ahora se va a seleccionar el tipo de unidades que se va a manejar. Para este caso utilizar el sistema Inglés que se selecciona en la barra de herramientas en la opción 'units of measure' (Figura 27).

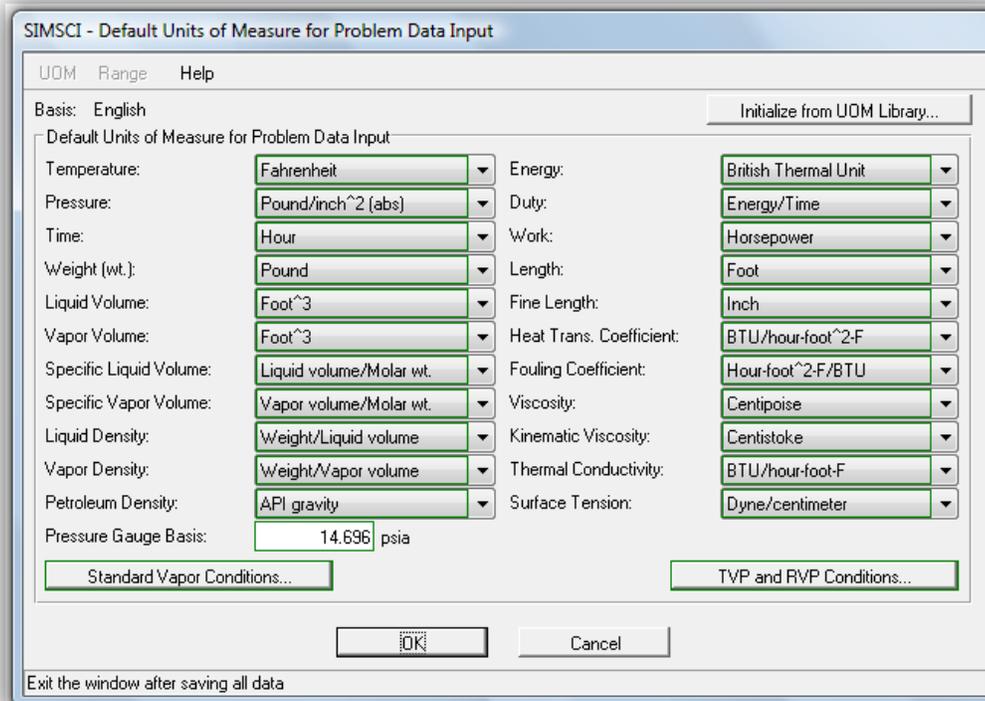


Figura 27. Selección del sistema de unidades.

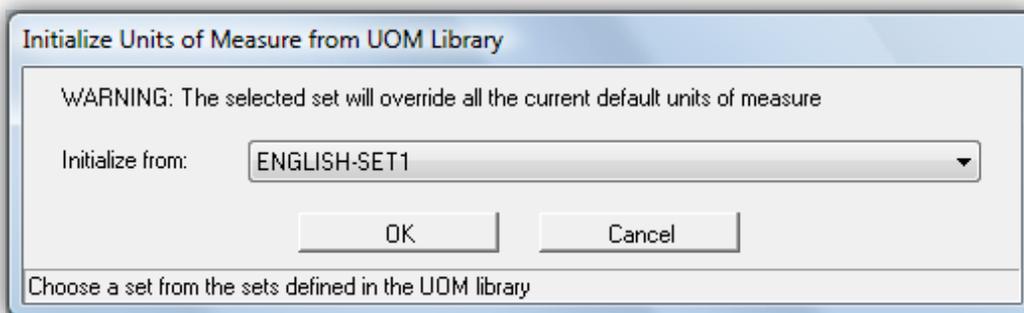


Figura 28. Selección del Sistema Inglés.

- e. Ya que se tienen especificados los componentes y el tipo de modelo termodinámico de la operación, ahora se van a especificar las condiciones iniciales como temperatura, presión, flujo y concentraciones (Figura 29 y 30). Se repite para cada una de nuestras corrientes de entrada, haciendo doble clic primero sobre la línea de la corriente uno, se abrirá una ventana; en la sección de Flowrate and Composition se deberá indicar el flujo y las composiciones de la alimentación.

The image shows a software dialog box titled "PRO/II - Stream Data". It has a menu bar with "UOM", "Range", "Help", "Tag", "Overview", "Status", and "Notes". The "Stream" field contains "S1" and the "Description" field is empty. The "To Unit" is set to "F1". Under the "Stream Type" section, a list includes "Composition Defined" (highlighted), "Petroleum Assay", "Referenced to Stream", and "Solids Only Stream". To the right of this list are three buttons: "Flowrate and Composition...", "Stream Solids Data...", and "Stream Polymer Data...". The "Thermal Condition" section has two rows: "First Specification" with a dropdown set to "Temperature" and a text box containing "190.00" followed by "F"; and "Second Specification" with a dropdown set to "Pressure" and a text box containing "14.220" followed by "psia". Below this is a "Thermodynamic System" dropdown set to "Determined From Connectivity". At the bottom are "OK" and "Cancel" buttons. A footer note says "Exit the window after saving all data".

Figura 29. Especificación de la presión y temperatura de la corriente uno.

Stream Data - Flowrate and Composition

UOM Range Help Tag

Specify flowrate and composition for stream S1

Fluid Flowrate Specification

Total Fluid Flowrate: lb-mol/hr

Individual Component Flowrates

Copy	Component	Composition Mole
Paste	ETHANOL	0.50000
	H2O	0.5

Clear Compositions Total: 0.50000 Normalize Component Flowrates Based on Specified Fluid Flowrate

OK Cancel

Enter the composition

Figura 30. Especificación del flujo y las concentraciones de los componentes de la corriente uno.

- f. Dar doble clic en el recuadro rojo **F1** que aparece en la parte inferior del tanque para poder especificar las condiciones de operación de nuestro equipo. Ir a la opción 'Unit Specification' y seleccionar 'Temperature' después dar un valor a esa temperatura, que es a la cual se quiere que se lleve a cabo la separación, en este caso serán 190 °F.

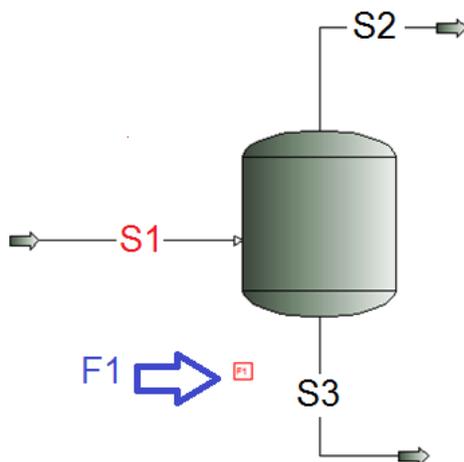


Figura 31. Especificación de las condiciones de operación del equipo.

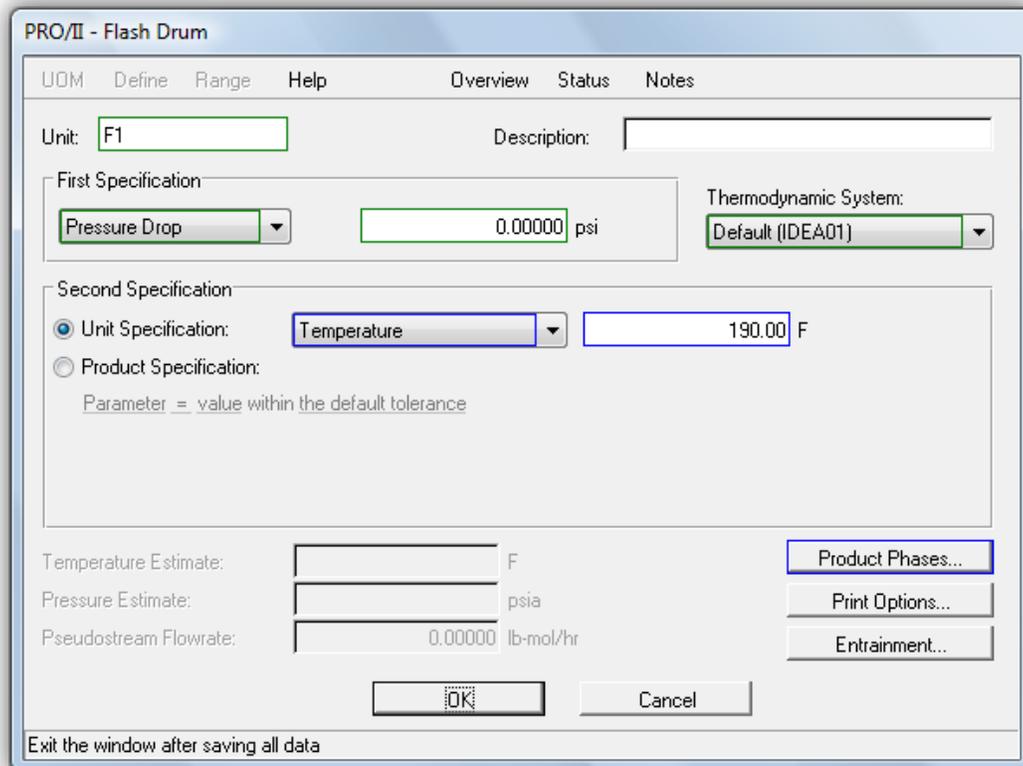


Figura 32. Especificación de las condiciones de operación del equipo.

- g. Para finalizar y poder ejecutar la operación, se debe agregar una tabla de propiedades que incluya todas las corrientes, para que se pueda verificar y analizar los resultados arrojados por el simulador. Ir a la herramienta de PFD y seleccionar 'Stream Properties',

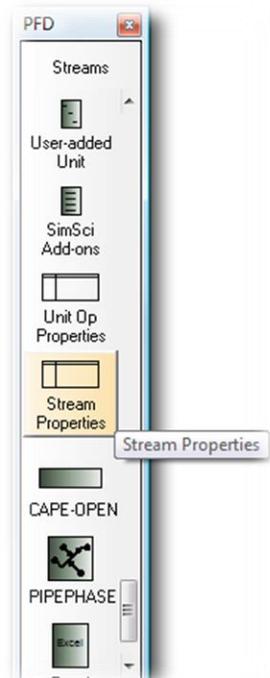


Figura 33. Herramienta PFD o DFP.

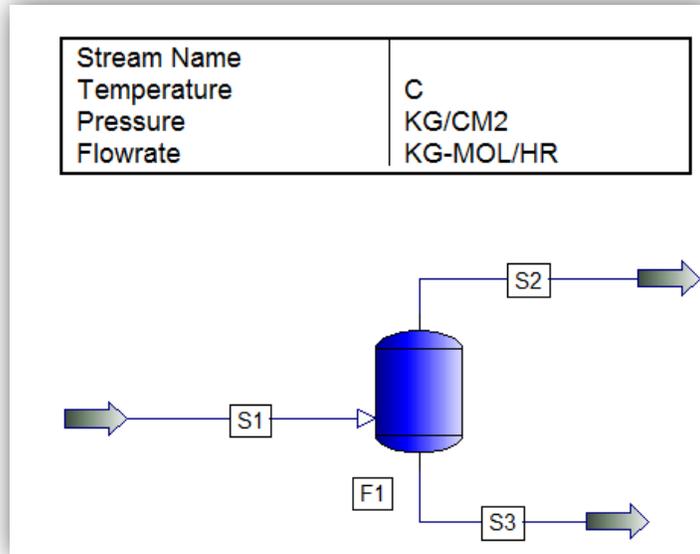


Figura 34. DFP del proceso con la tabla de balance, aun sin terminar.

Después hay que dar doble clic en la tabla que se acaba de crear para abrir la ventana de la Tabla de Propiedades de las Corrientes (Figura 35). Seleccionar la opción “Material Balance List” y después dar clic en el botón “Add All” para que muestre todas las corrientes en los resultados.

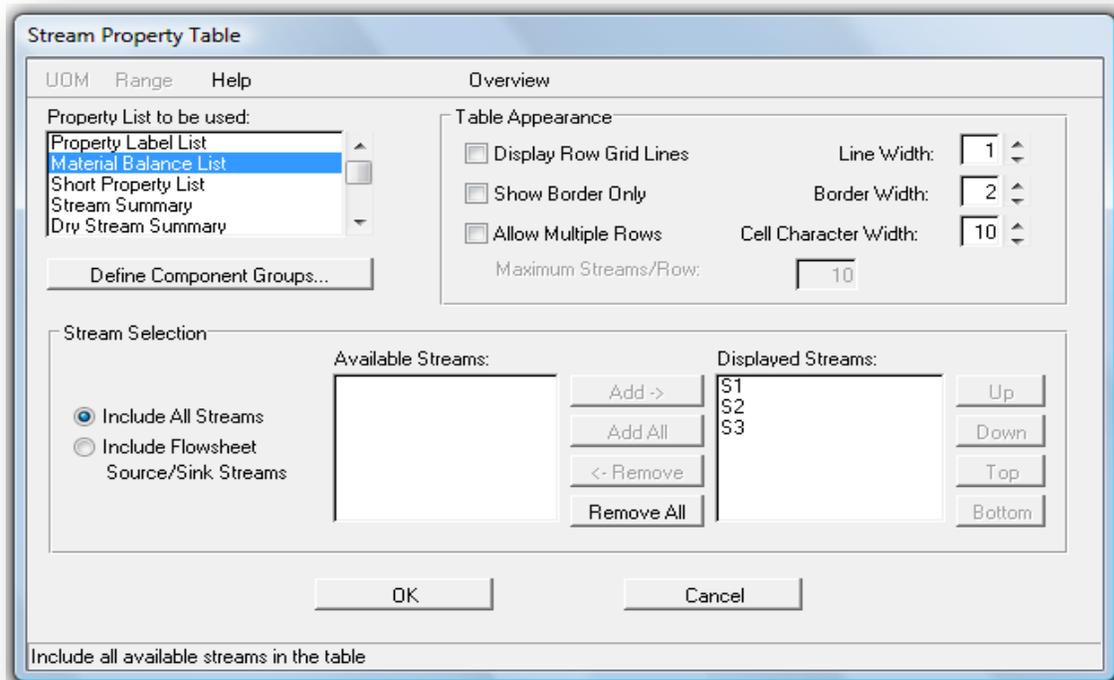


Figura 35. Especificación del contenido de la tabla de balance.

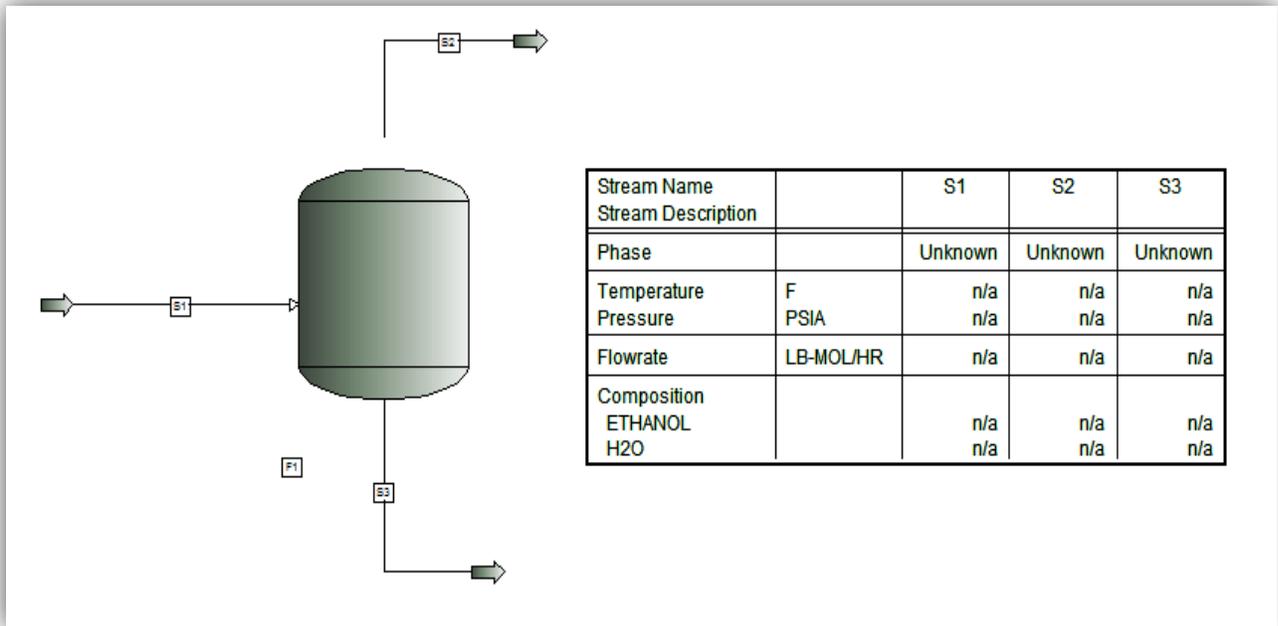


Figura 36. DFP y tabla de balance de materia.

h. Finalmente ejecutar el ejercicio o simulación dando clic a la opción 'run' de la barra de herramientas.

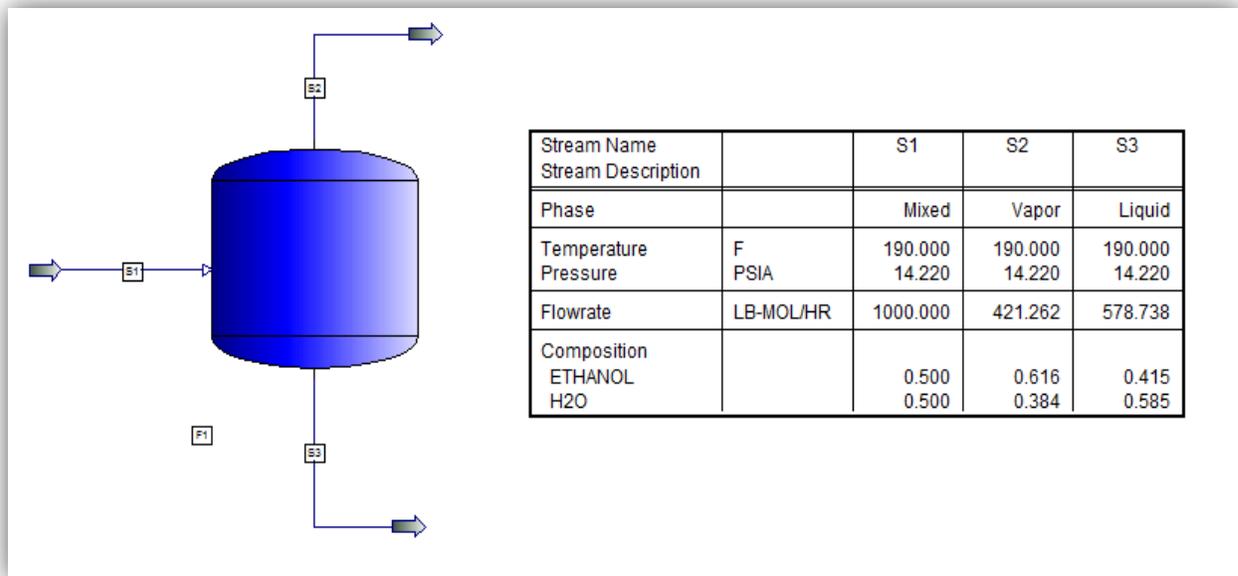


Figura 37. Proceso finalizado con DFP y tabla de propiedades.

Partiendo de un nuevo proceso similar al anterior (mismo equipo), se tiene:

3. El ejemplo tres consta de un tanque flash con una alimentación que es una mezcla de benceno y tolueno. La alimentación tiene un flujo de 450 Kgmol/hr. A una Temperatura de 100°C y 2 Kg/cm². Las fracciones mol para la alimentación son de 0.36 y 0.64 respectivamente.

- a. El primer paso, elaborar el DFP del ejercicio. Dibujar el equipo con sus correspondientes corrientes y sus salidas, para este caso es un tanque flash con una corriente de entrada y dos de salida.

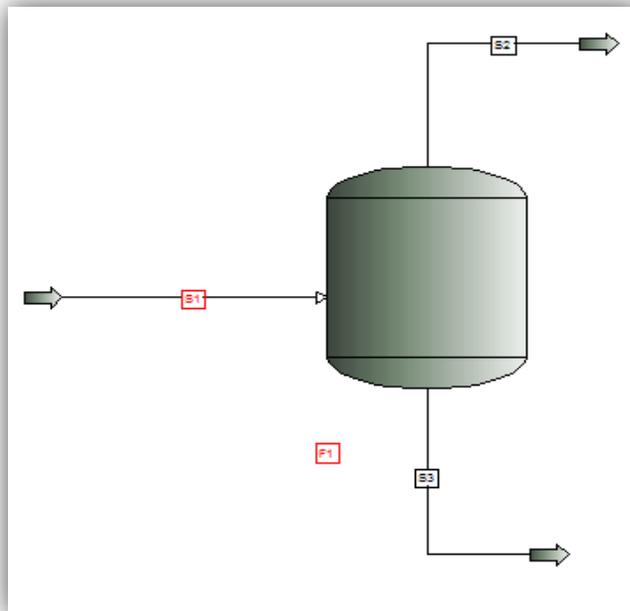


Figura 38. DFP del ejemplo tres.

- b. Ya que se tiene dibujado el DFP de la operación, se procede a seleccionar los componentes en la opción 'component selection' de la  barra de herramientas, para este ejercicio son C₆H₆ y C₇H₈; ir a la sección que dice 'select from lists', después seleccionamos la opción 'most commonly used' para los más comúnmente usados, de ahí ya se procede a buscar en la lista nuestros componentes o en la sección 'Sort/search by' se busca por nombre completo, abreviación, o fórmula química.

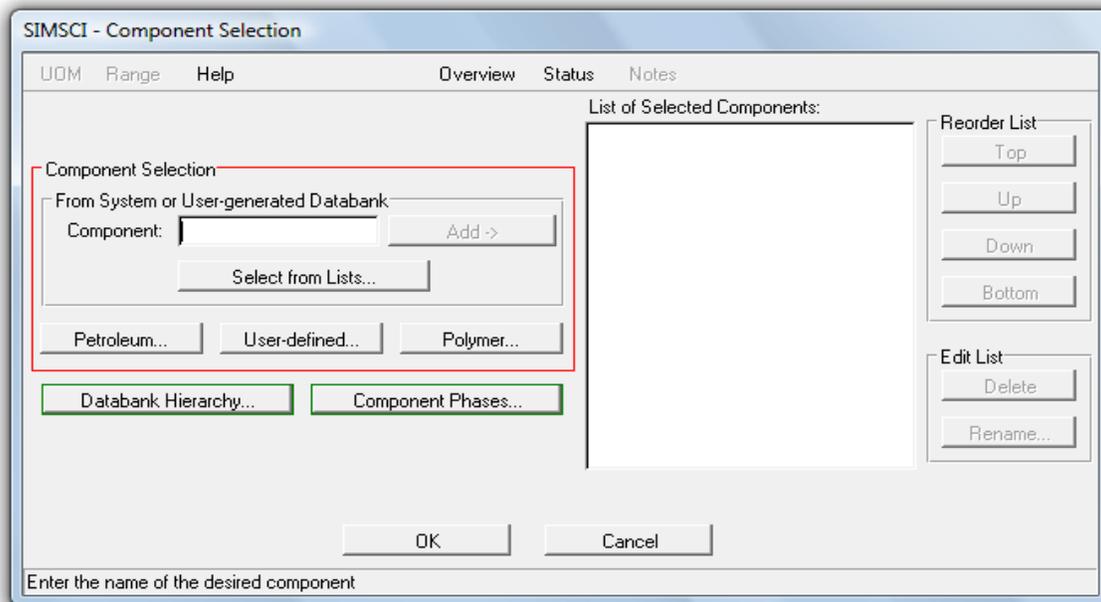


Figura 39. Selección de los componentes.

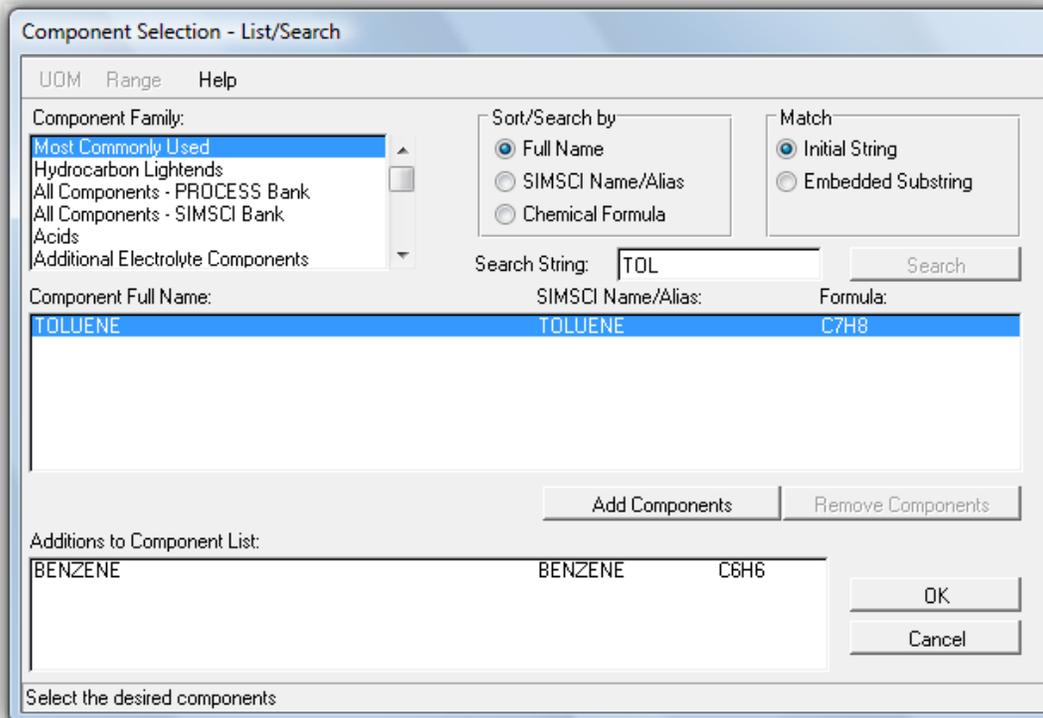


Figura 40. Selección de los componentes a partir de una lista de búsqueda.

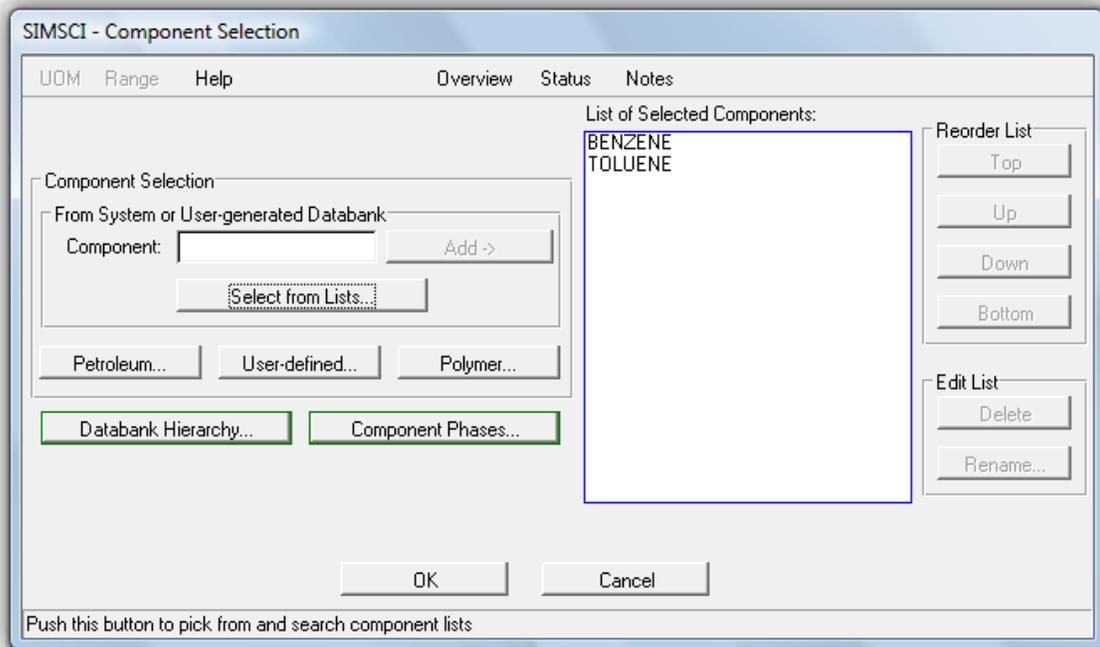


Figura 41. Componentes del ejemplo tres, seleccionados correctamente.

- c. Ahora en la herramienta ‘thermodynamic data’ se selecciona la opción ‘ideal’ de la lista de los más comúnmente usados; ya que el modelo termodinámico a utilizar inicialmente siempre será el ideal.

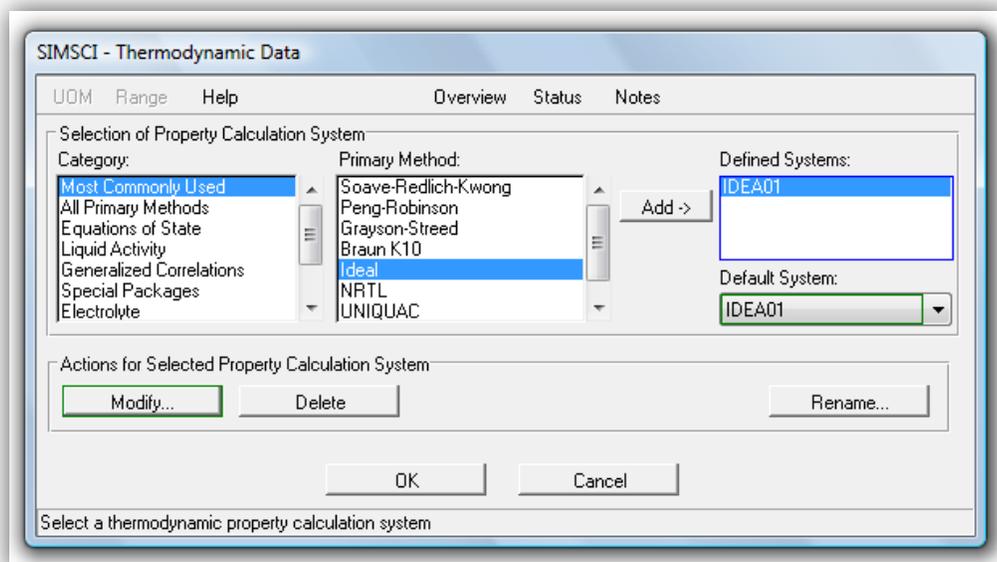


Figura 42. Selección del modelo termodinámico.

- d. Ahora se ha de seleccionar el tipo de unidades que se van a manejar, para este caso utilizar el sistema métrico que se selecciona en la barra de herramientas en la opción 'units of measure'

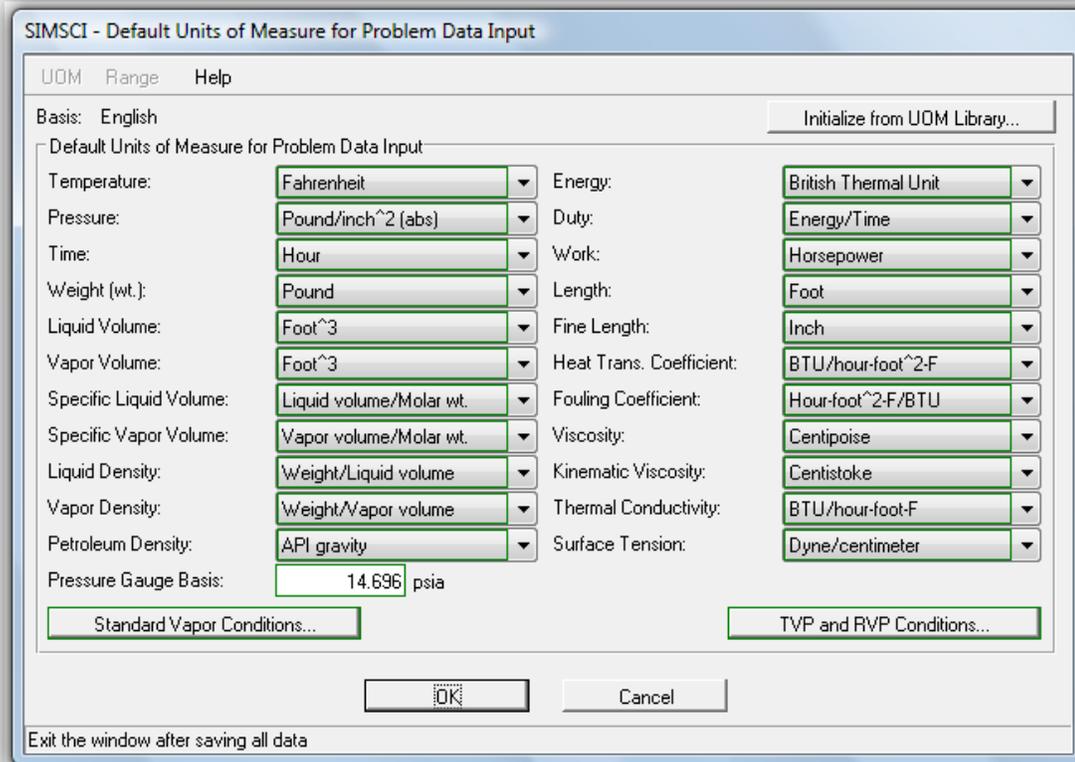


Figura 43. Selección del sistema de unidades.

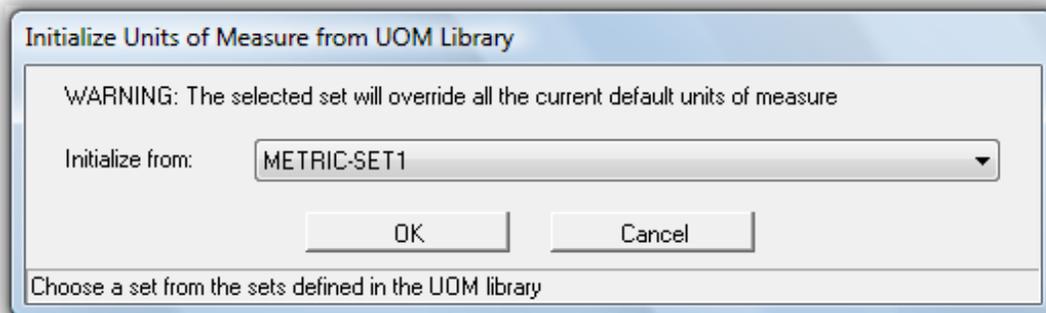


Figura 44. Selección del Sistema Métrico.

- e. Ya que se tienen especificados los componentes y el tipo de modelo termodinámico de la operación, ahora se especifican las condiciones iniciales como temperatura, presión, flujo y concentraciones (ver Figura 45 y 46). Después se repite para cada una de nuestras corrientes de entrada, haciendo doble clic primero sobre la línea de la corriente uno, se abrirá una ventana; en la sección de Flowrate and Composition se deberá indicar el flujo y las composiciones de la alimentación.

PRO/II - Stream Data

UOM Range Help Tag Overview Status Notes

Stream: S1 Description:

To Unit: F1

Stream Type

- Composition Defined
- Petroleum Assay
- Referenced to Stream
- Solids Only Stream

Flowrate and Composition...

Stream Solids Data...

Stream Polymer Data...

Thermal Condition

First Specification:

Temperature 100.00 C

Second Specification:

Pressure 2 kg/cm2

Thermodynamic System: Determined From Connectivity

OK Cancel

Enter stream pressure

Figura 45. Especificación de la presión y temperatura de la corriente uno.

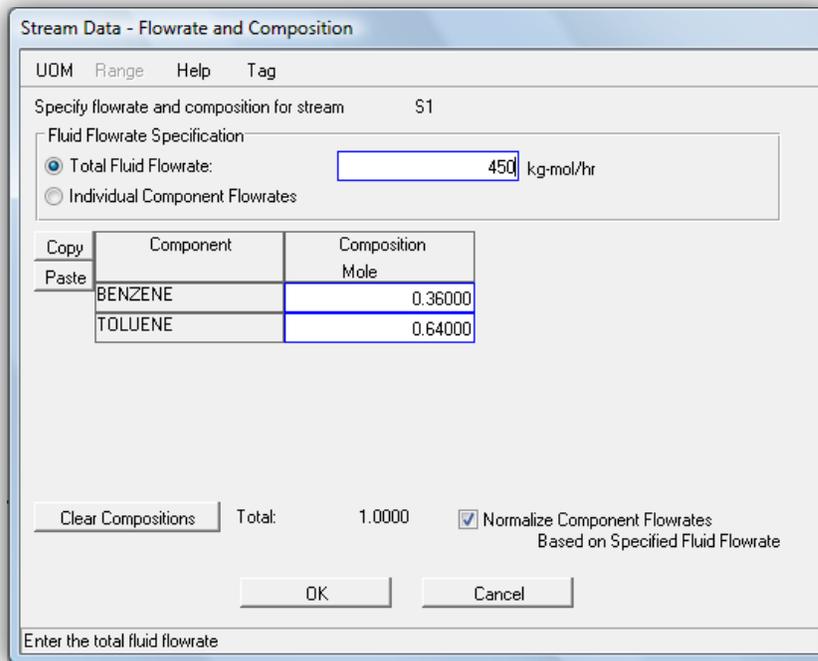


Figura 46. Especificación del flujo y concentración de los componentes de la corriente uno.

- f. Dar doble clic en el recuadro rojo F1 que aparece en la parte inferior del tanque para poder especificar las condiciones de operación del equipo. Ir a la opción 'Unit Specification' y seleccionamos Temperature después damos un valor a esa temperatura, que es a la cual queremos que se lleve a cabo la separación. En este caso serán 100°C (Figura 47).

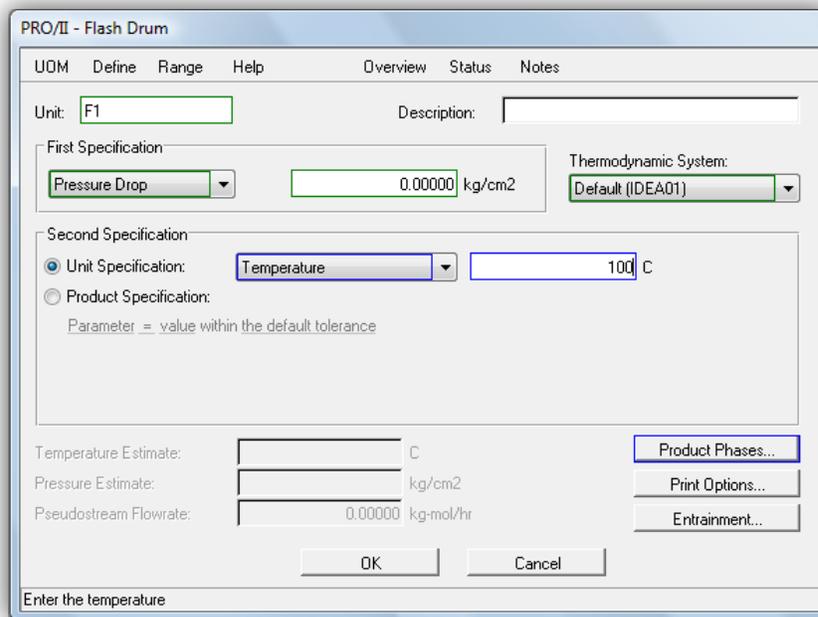


Figura 47. Especificación de las condiciones de operación del equipo.

- g. Para finalizar y poder ejecutar la operación, se debe agregar una tabla de propiedades de todas las corrientes, para que podamos verificar y analizar los resultados arrojados por el simulador.

En la herramienta de PFD seleccionar ‘Stream Properties’, después dar doble clic en la tabla que se acaban de crear para abrir la ventana de la Tabla de Propiedades de las Corrientes (Figura 48).

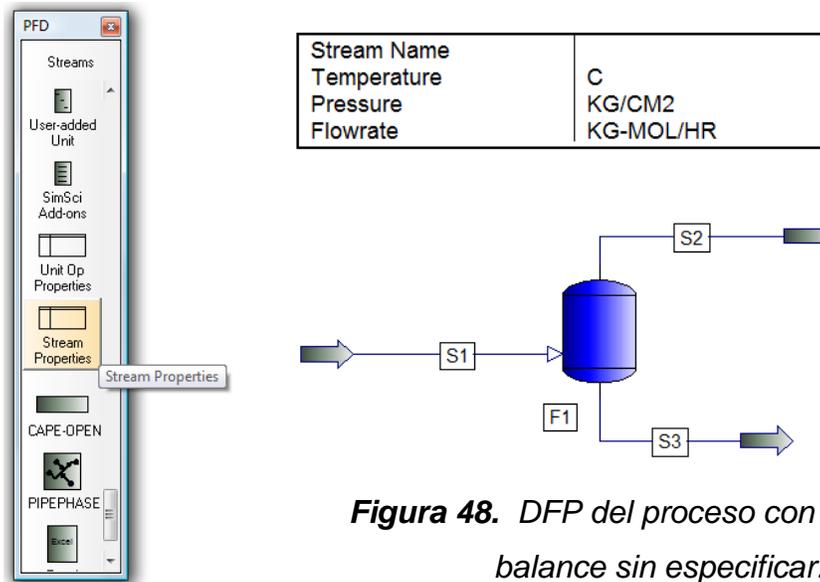


Figura 48. DFP del proceso con la tabla de balance sin especificar.

Seleccionar la opción “Material Balance List” y después dar clic en el botón “Add All” para que nos muestre todas las corrientes en los resultados.

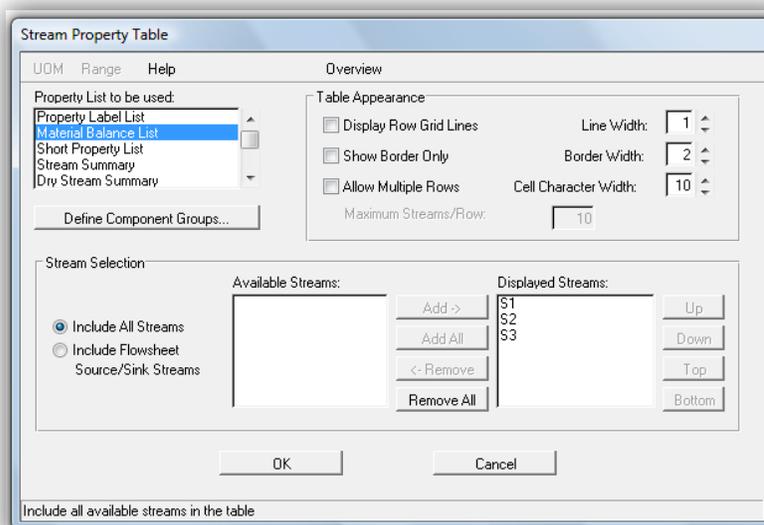


Figura 49. Especificación de contenido de la tabla de balance.

- h. Finalmente se puede ejecutar el ejercicio. Dando clic a la opción 'run' de la barra de herramientas.



Stream Name		S1	S2	S3
Stream Description				
Phase		Liquid	Unknown	Liquid
Temperature	C	100.000	n/a	97.222
Pressure	KG/CM2	2.000	n/a	2.000
Flowrate	KG-MOL/HR	450.000	n/a	450.000
Composition				
BENZENE		0.360	n/a	0.360
TOLUENE		0.640	n/a	0.640

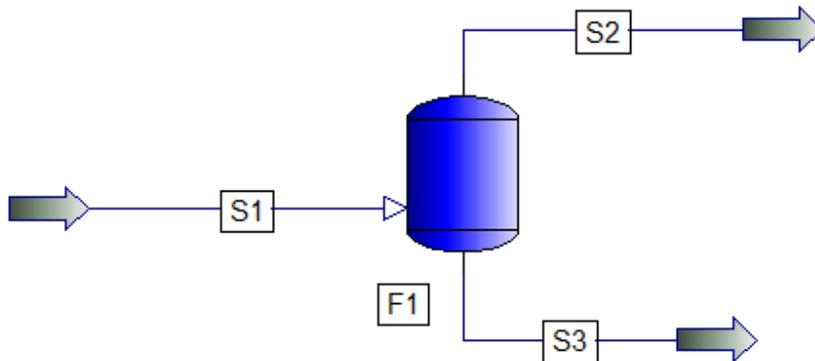


Figura 50. Proceso finalizado con DFP y tabla de propiedades.
 ***F1 se refiere a Flash 1 (tanque Flash 1).

¿Qué es lo que ha pasado de acuerdo a las condiciones con las que inició el proceso? Analizando la tabla de propiedades, se puede observar que no existen datos para la corriente dos. Esto se debe a que a la temperatura de 100 °C no existe separación entre los componentes de la mezcla, en este caso sí es importante conocer datos termodinámicos como por ejemplo la temperatura de ebullición de cada componente, ya que el simulador opera a partir de un banco de datos con toda esa información, y es por eso que en una separación es de suma importancia conocer las temperaturas y presiones a las que se debe llevar a cabo la operación, para obtener los resultados más óptimos.

A continuación se explica el uso de una nueva herramienta (Gráfica T-xy) que nos ofrece el simulador, para poder resolver este tipo de problemas que se pueden presentar en un proceso de separación.



Ahora ir a la barra de herramientas a la opción Display BVLE, seleccionar como primer componente a nuestro componente menos pesado que es el benceno y al tolueno como segundo componente (ver Figura 51), especificar nuestra presión que son 2 Kg/cm². Y pedimos que nos calcule:

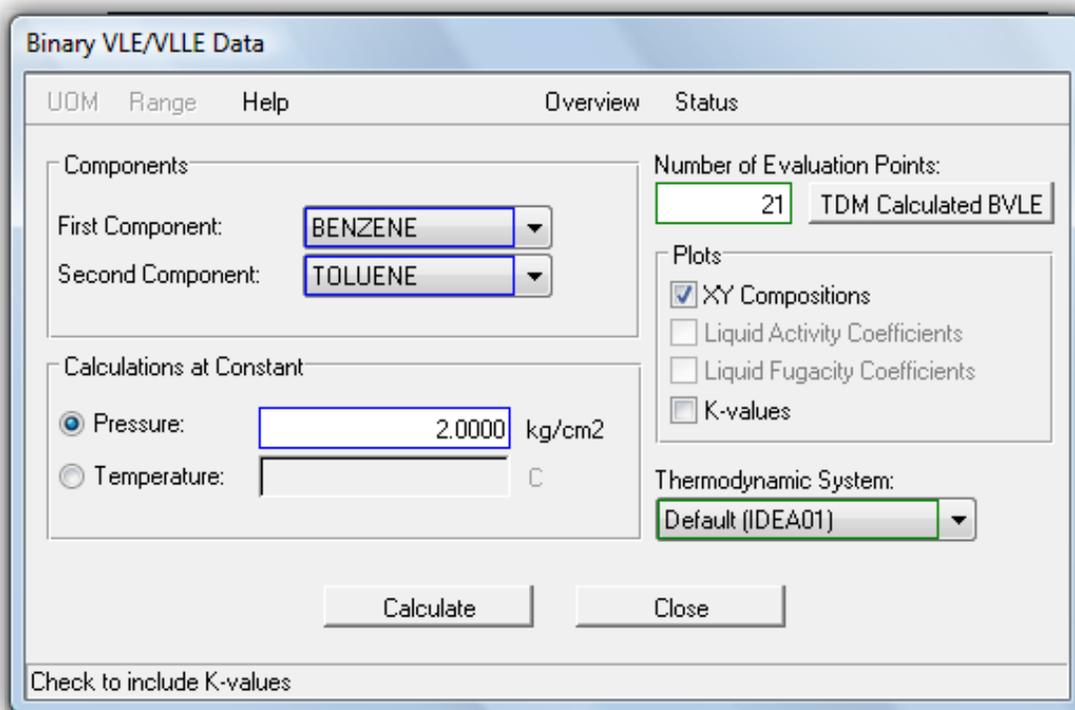


Figura 51. Obtención de la gráfica T-xy.

Se obtendrá una gráfica como ésta:

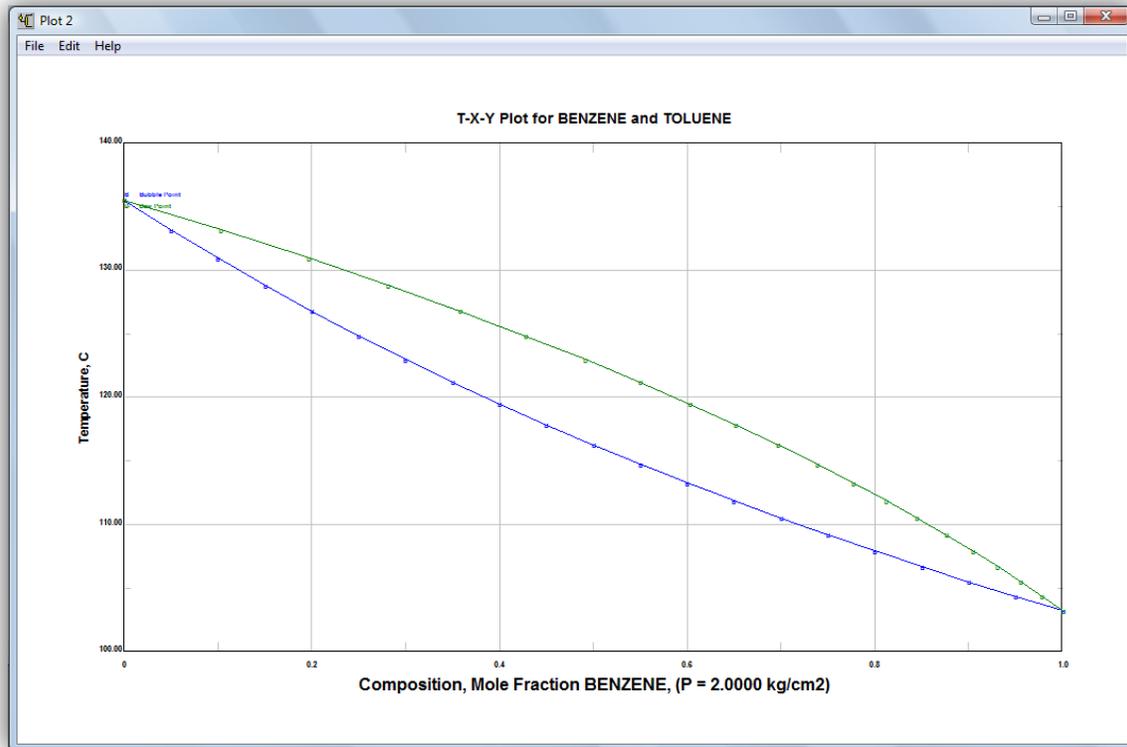


Figura 52. Grafica T-xy para la mezcla Benceno-Tolueno

La grafica (ver Figura 52) nos muestra la separación de los componentes en un rango específico de temperatura, entonces: Si se toma por ejemplo la temperatura de 125°C,

The image shows the 'PRO/II - Flash Drum' specification dialog box. The 'Unit Specification' radio button is selected, and the temperature is set to 125 C. The 'Pressure Drop' is set to 0.00000 kg/cm². The 'Thermodynamic System' is set to 'Default (IDEA01)'. The 'Temperature Estimate' field is empty, and the 'Pressure Estimate' field is empty. The 'Pseudostream Flowrate' is 0.00000 kg-mol/hr. The 'Product Phases...' button is highlighted.

Figura 53. Especificación de las condiciones de operación del equipo.

Pasa esto:

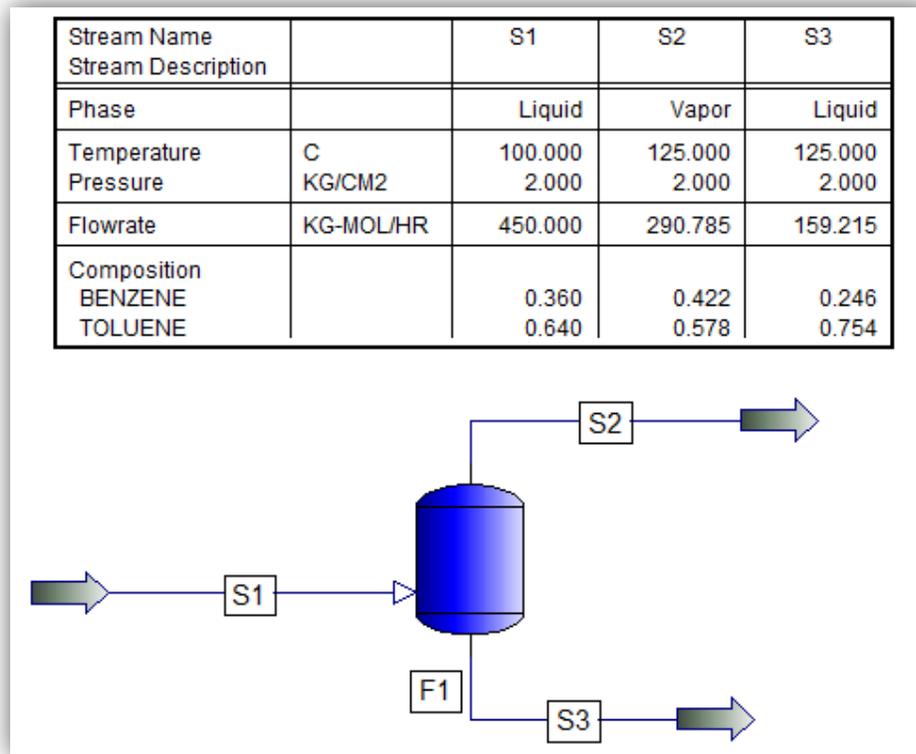


Figura 54. Obtención de datos en la corriente 2.

Como puede observar, ya existe una separación de componentes con esas condiciones; pero no es la separación más óptima,

Para lograr encontrar la Temperatura que nos da una mejor separación de los componentes, se debe de modificar esa variable cuantas veces sea necesario, hasta ver que los componentes se hayan separado adecuadamente, en este caso; las concentraciones quedaron así: para el vapor, C_6H_6 0.556 y C_7H_8 0.444; para la salida del líquido, C_6H_6 0.356 y C_7H_8 0.644. La temperatura que nos da la separación más óptima es $121^\circ C$.

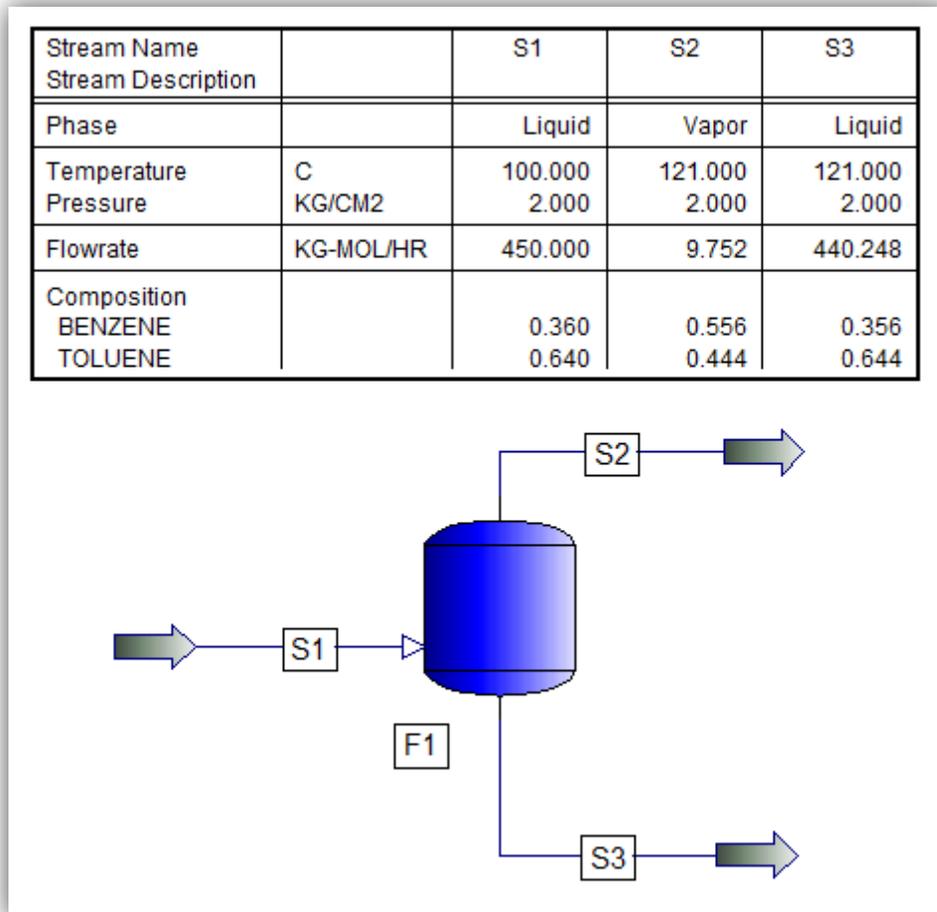


Figura 55. Proceso finalizado con DFP y tabla de propiedades.

4. El ejemplo cuatro indica que el flujo de alimentación a una unidad que consiste en dos columnas contiene 30% de Benceno (B), 55% de Tolueno (T) y 15% de Xileno (X). Se analiza el vapor del destilado de la primera columna y se encuentra que contiene 74.9% de B y 49% de T. Los fondos de la primera columna se alimentan a la segunda columna. En esta segunda columna se planea que el 10% del B original cargado a la unidad, se recupere en la corriente destilada, se planea además que 75% del X cargado a la unidad se recupere en los fondos de esta columna y que el X constituya el 30% de dicha corriente, además que obtenga 41% de T alimentado en el residuo. Si se cumplen estas condiciones, calcular: el análisis de todas las corrientes que salen de la unidad.
- a) Primeramente como ya se explicó en los capítulos anteriores, se va a dibujar el DFP del proceso con sus correspondientes entradas y salidas.

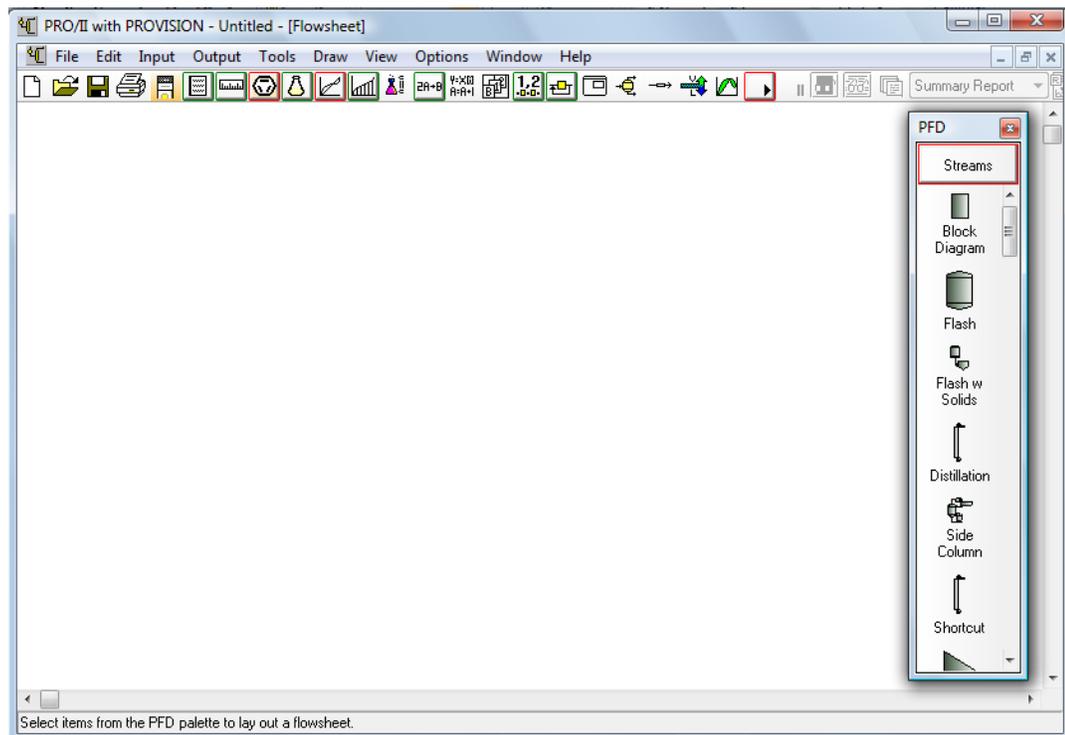


Figura 56. Ventana de inicio, para iniciar una simulación.

- b) Se seleccionan los equipos, y se incluyen todas las corrientes que participan en el proceso.

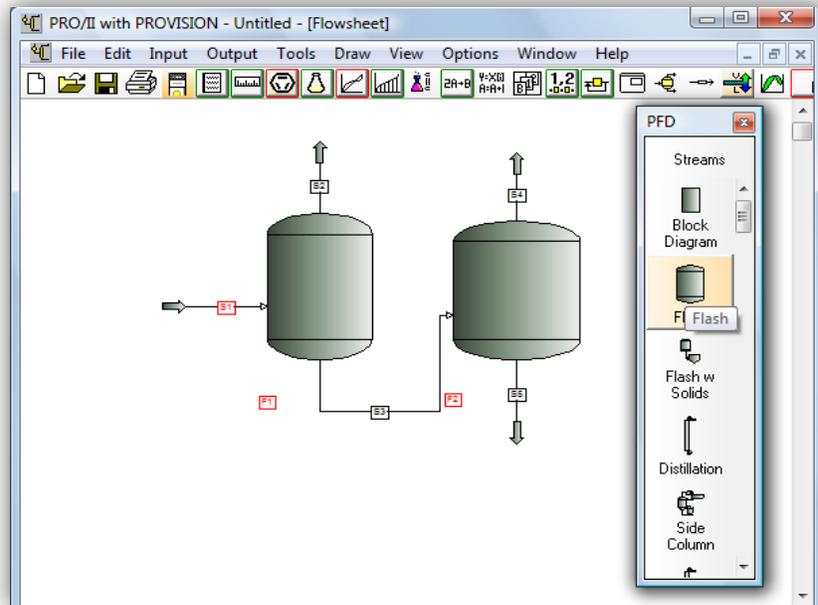


Figura 57. DFP del ejemplo cuatro.

- c) Ahora se van a seleccionar los componentes que participan en el proceso (Figura 58). Utilizando la opción “Component Selection” de la barra de herramientas.

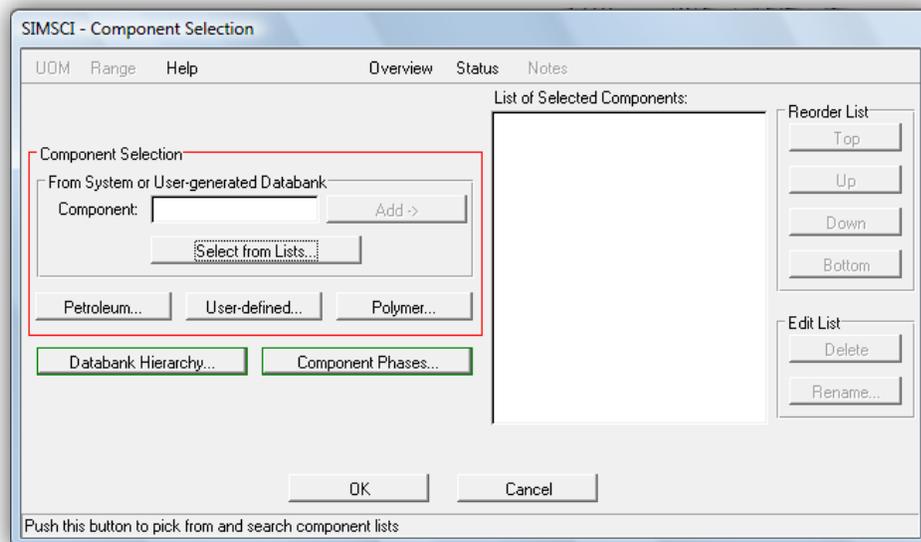


Figura 58. Selección de los componentes.

- d) Se da clic en la opción “Select from Lists” para realizar la búsqueda de los componentes en la opción “Most Commonly Used” (ver Figuras 59, 60 y 61).

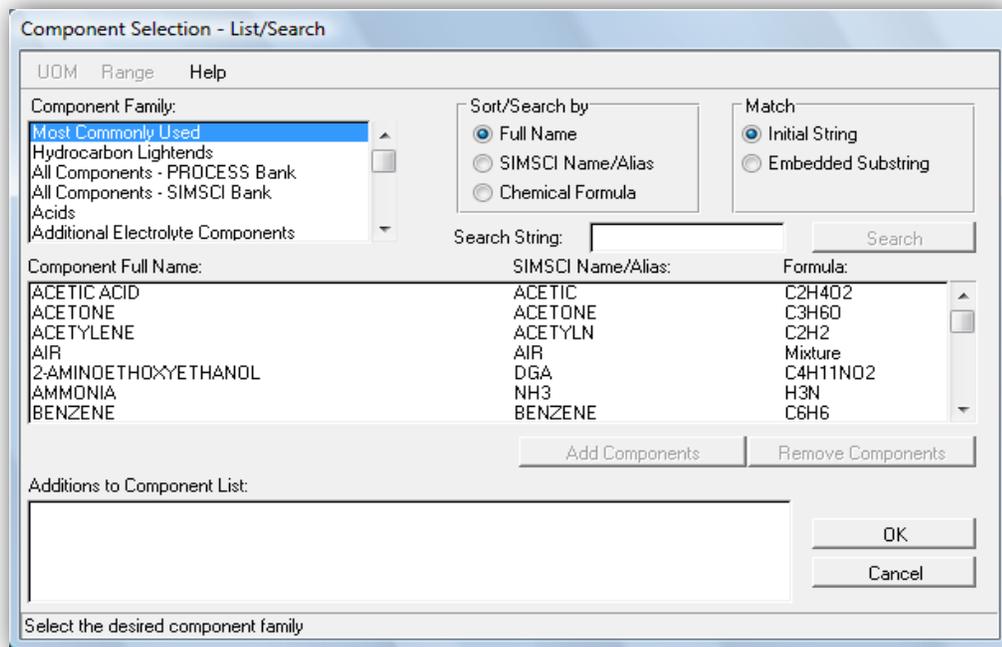


Figura 59. Selección de los componentes a partir de una lista de búsqueda.

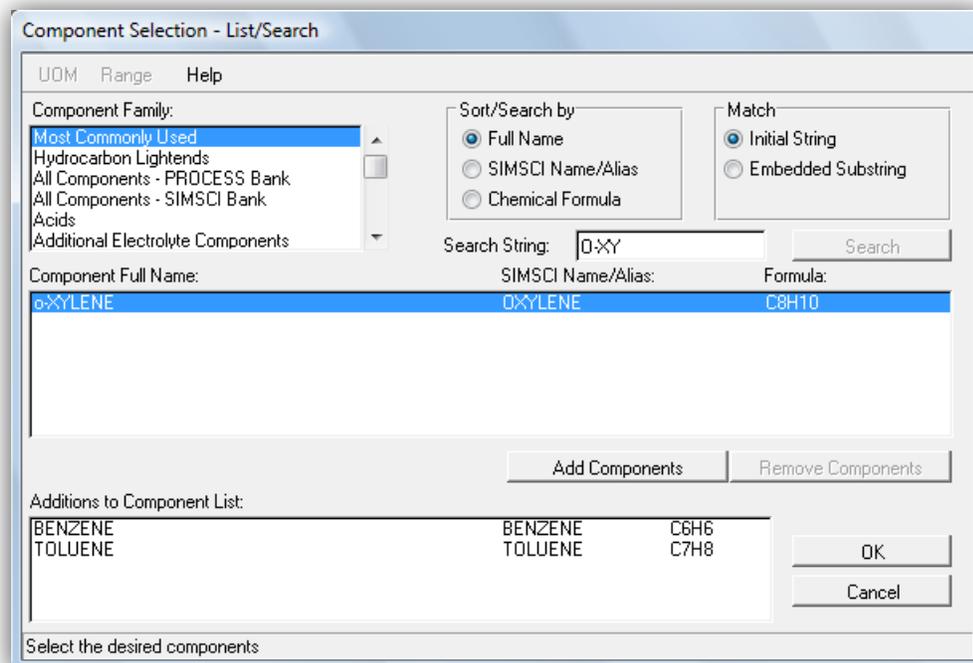


Figura 60. Selección de los componentes.

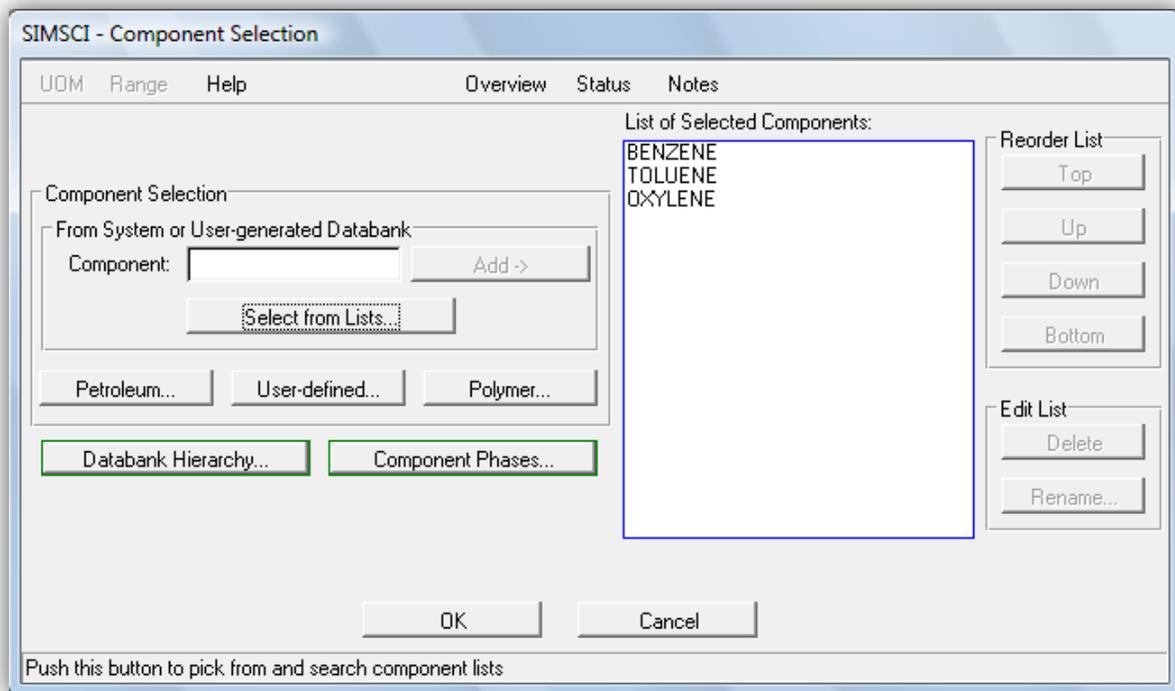


Figura 61. Componentes del ejemplo cuatro, seleccionados correctamente.

- e) Ahora se selecciona el modelo termodinámico con el que se va a simular, en este caso también es el ideal, con ayuda de la opción Thermodynamic Data de la barra de herramientas.

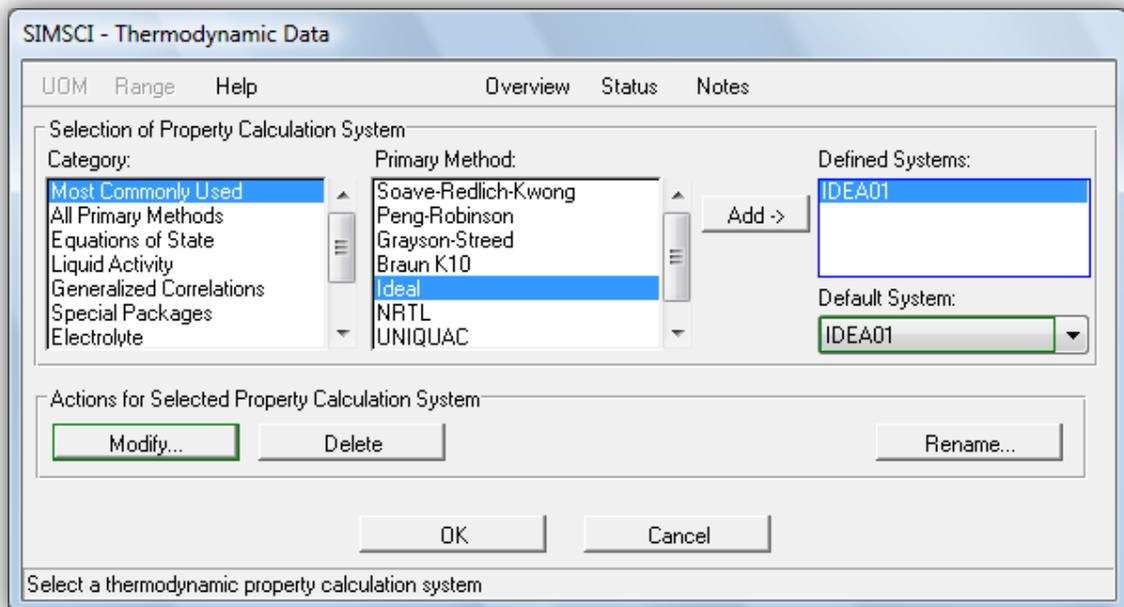


Figura 62. Selección del modelo termodinámico.

- f) Como siguiente paso se va a especificar el sistema de unidades que se van a utilizar, dando clic en la opción de Unidades de medición “Units of measure” de la barra de herramientas.

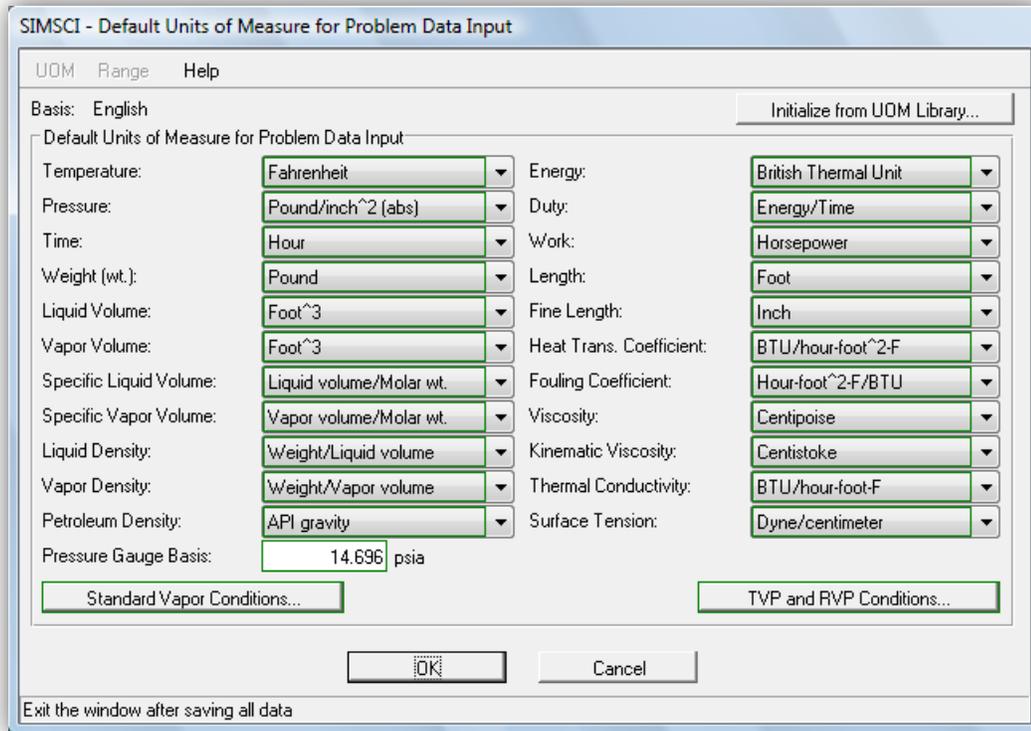


Figura 63. Selección del sistema de medición.

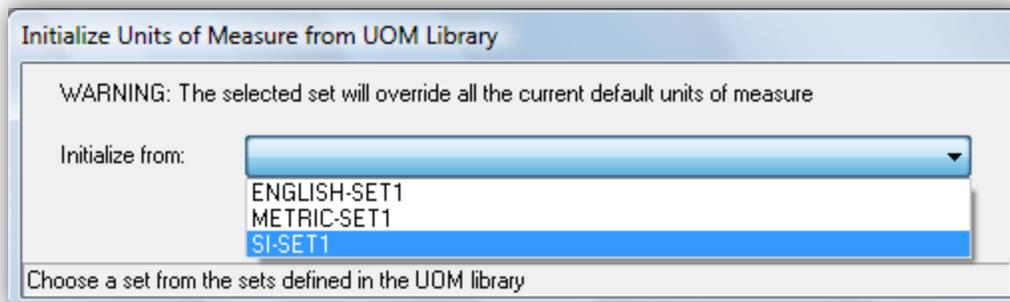


Figura 64. Selección del Sistema Internacional de Unidades.

- g) Ahora se van a especificar las condiciones iniciales del proceso, como se puede observar en las líneas de las corrientes se localizan recuadros rojos con el numero de la corriente, se dan dos clics en ese recuadro para abrir la ventana de datos de la corriente, “Stream Data”.

Como el enunciado no indica datos de temperatura, presión o flujo; se puede suponer que son 1000 Kgmol/hr, 10 KPa y 400 °K respectivamente.

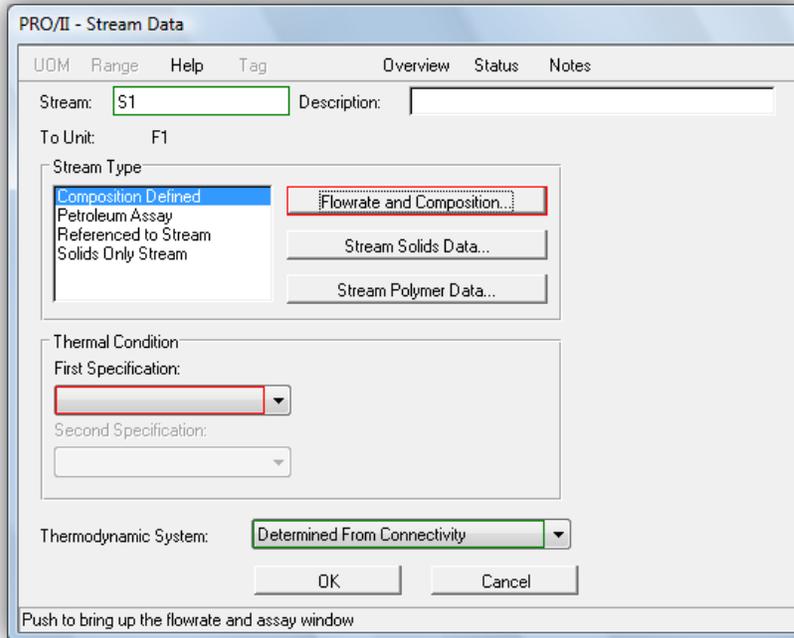


Figura 65. Especificación de las condiciones iniciales.

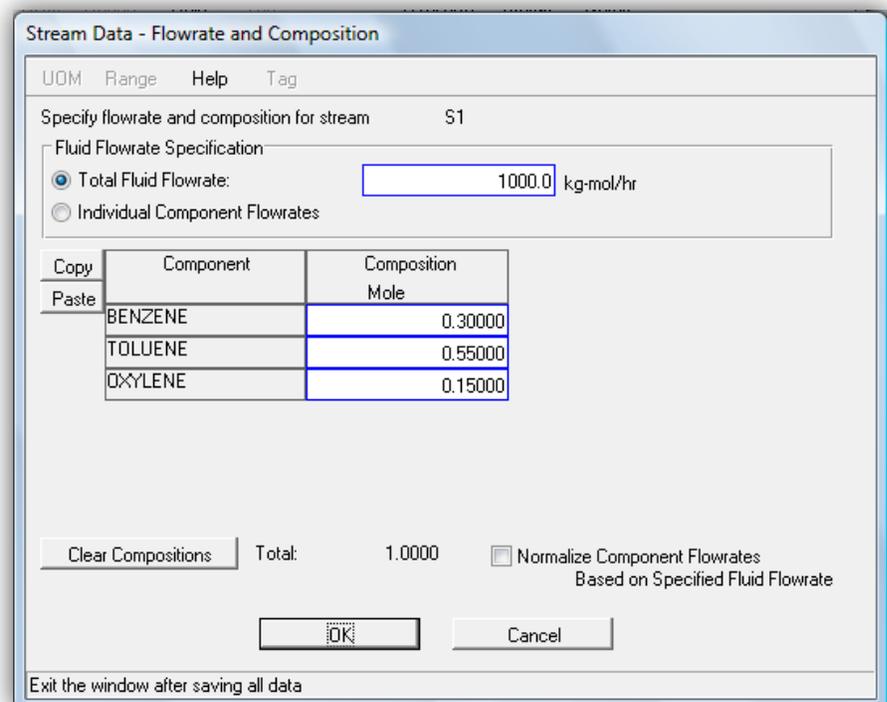


Figura 66. Especificación del flujo y concentración de los componentes de la corriente uno.

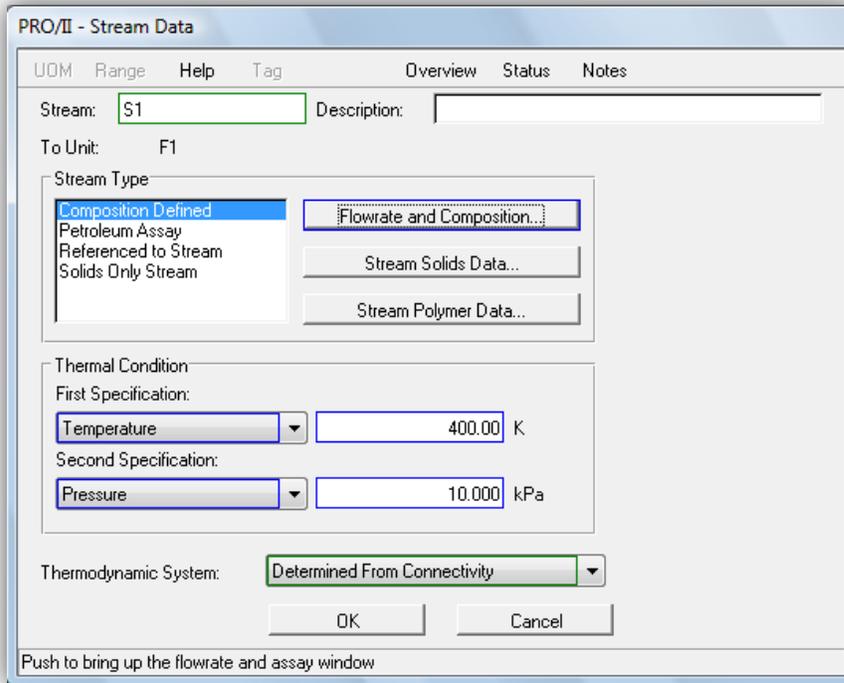


Figura 67. Especificación de la presión y temperatura de la corriente uno.

Dando doble clic en el recuadro rojo F1 (Flash 1), se abre una ventana como la siguiente (Figura 68) para poder especificar las condiciones de operación del equipo.

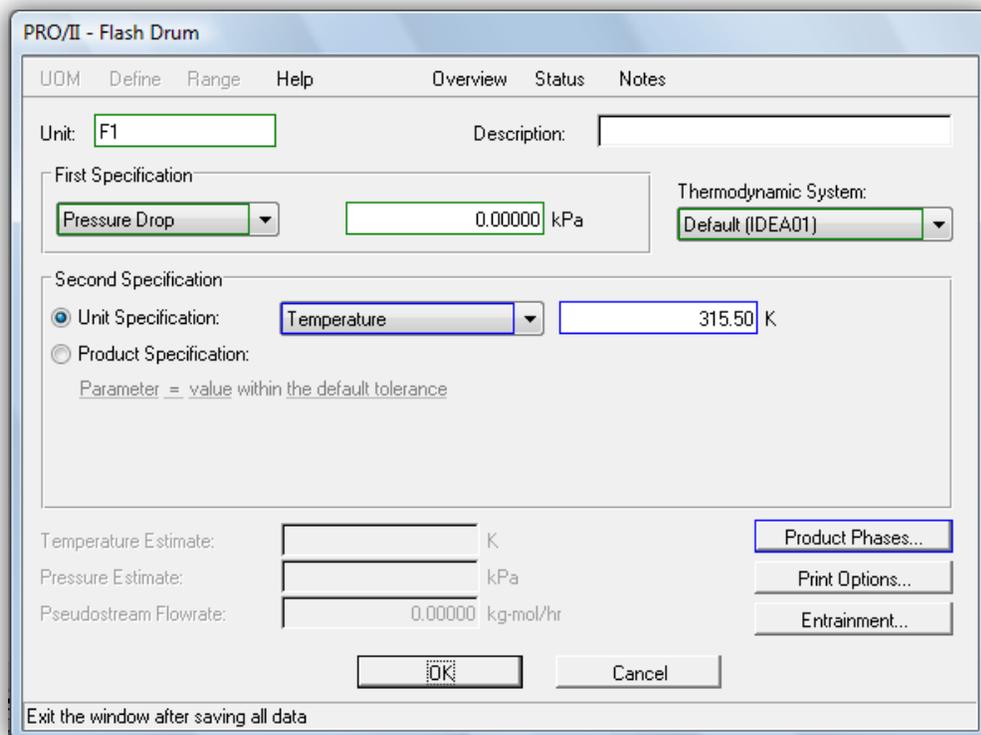


Figura 68. Especificación de las condiciones de operación del equipo (Flash 1).

Haciendo exactamente lo mismo de la indicación anterior pero ahora con el tanque numero dos (Flash 2), y variando un poco la temperatura tenemos: (ver Figura 69)

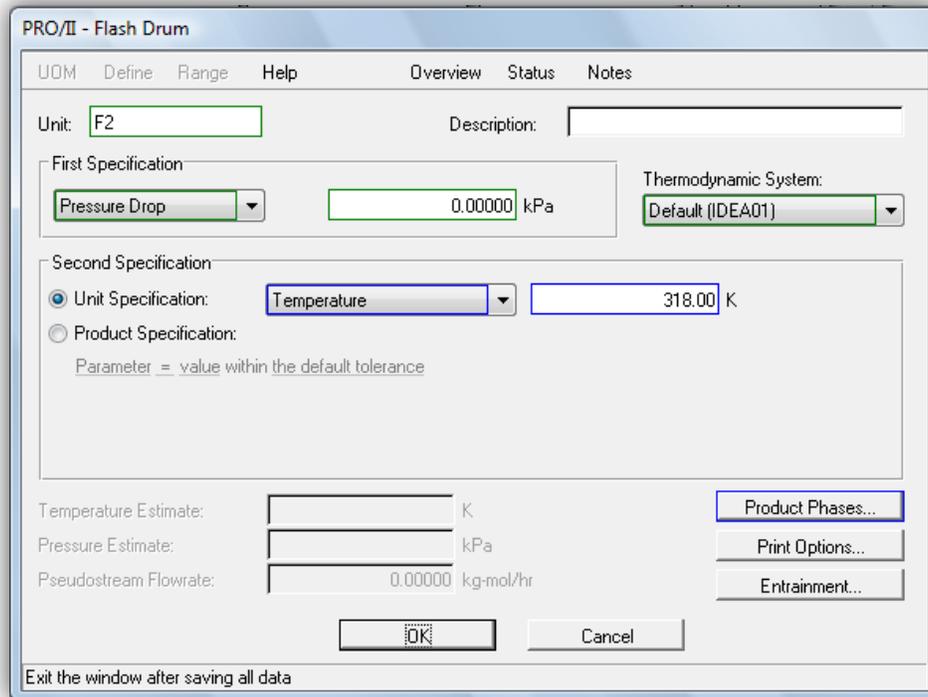


Figura 69. Especificación de las condiciones de operación del equipo (Flash 1).

h) Utilizando la herramienta “PDF” se agrega una tabla de propiedades, para después especificar que esa tabla debe contener el balance de materia de toda la unidad del proceso, dando doble clic en la tabla que se agregó, se obtiene una tabla como la de la Figura 70.

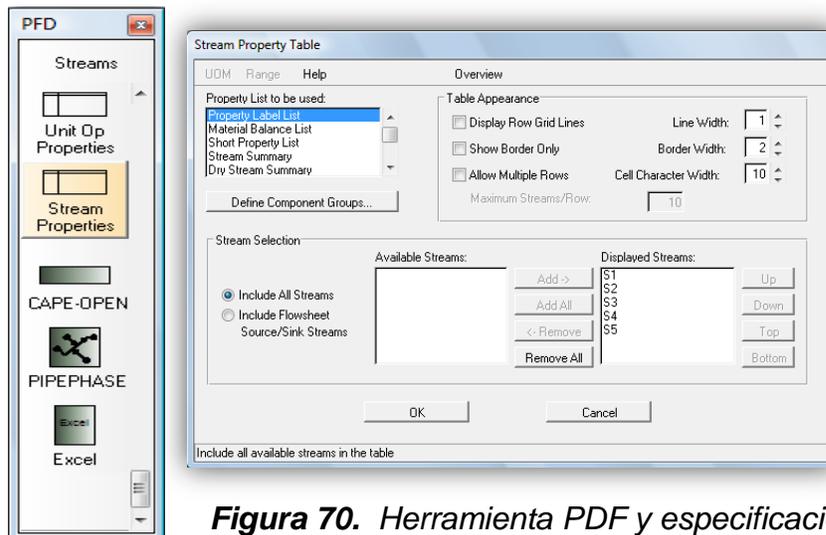


Figura 70. Herramienta PDF y especificación del contenido de la tabla de balance.

Se debe seleccionar la opción “Material Balance List” de las herramientas que se encuentran a la izquierda y se debe dar clic. Después se debe seleccionar la opción “Add All” para que se realice el balance en todas las composiciones (Figura 70).

Finalmente podemos dar clic en la opción “run” de la barra de herramientas y concluir con la simulación de este proceso.

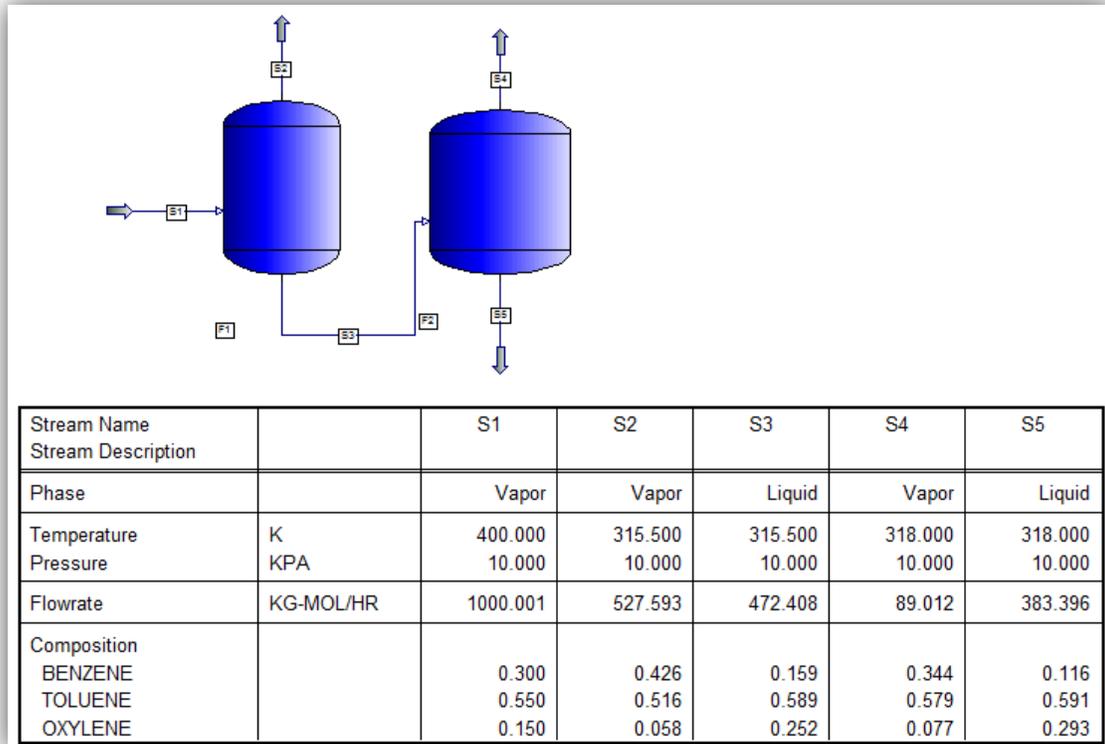


Figura 71. DFP y Tabla de balance de materia.

5. Como quinto y último ejemplo se tiene un diagrama de flujo para un proceso de destilación en régimen permanente de dos unidades. Cada flujo contiene dos componentes A y B, en diferentes proporciones. Calcular las cantidades de flujo desconocidas y las composiciones de los flujos etiquetados.

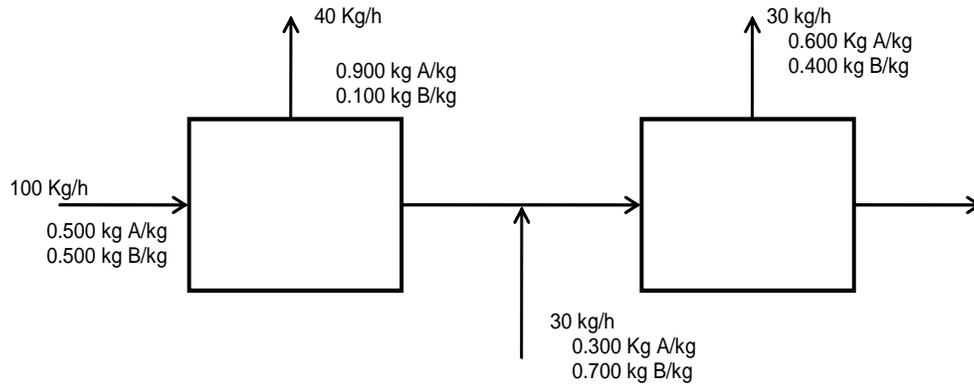


Figura 72. Diagrama de flujo para el ejemplo cinco.

- a) Primeramente como ya se explicó en los procesos anteriores, se va a dibujar el DFP del proceso con sus correspondientes entradas y salidas.

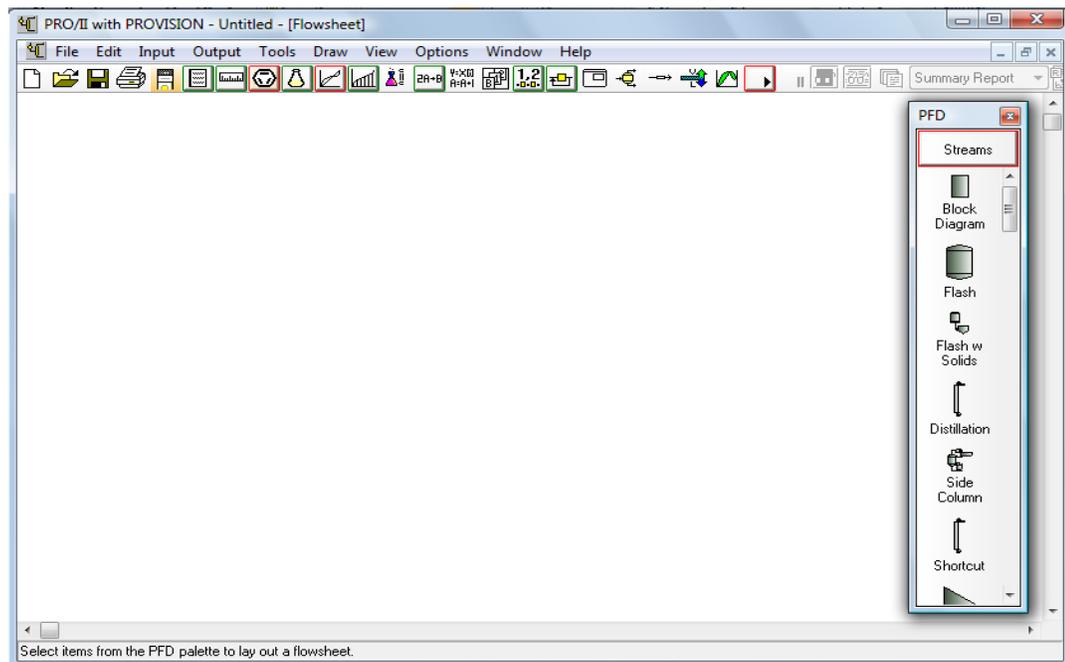


Figura 73. Ventana para iniciar una simulación.

b) Partiendo de lo que dice el enunciado y lo que se muestra en el diagrama de flujo, se entiende que primeramente se lleva a cabo una separación de componentes, después una mezcla y finalmente otra separación. Entonces se seleccionan los equipos, y se agregan todas las corrientes que participan en el proceso.

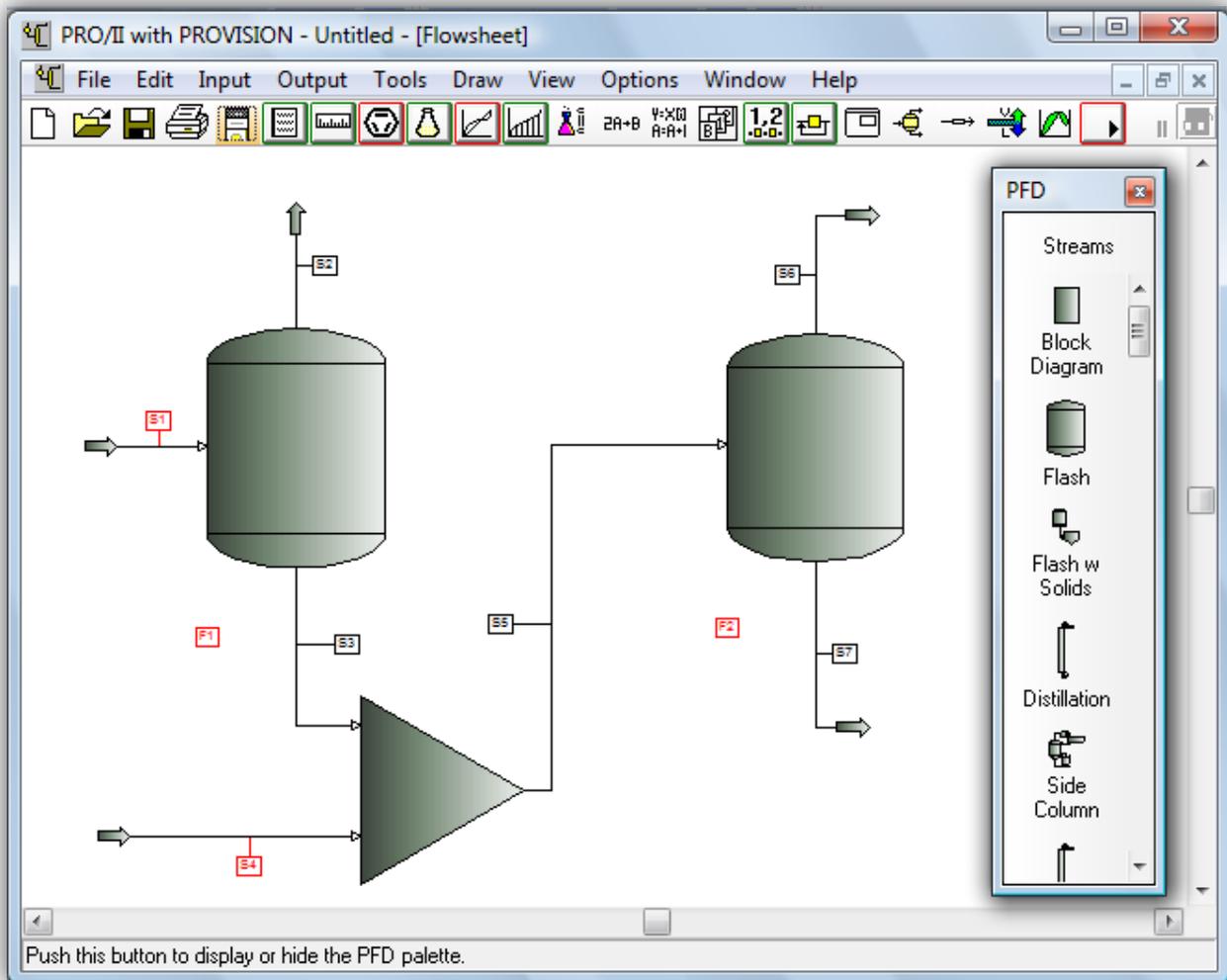


Figura 74. DFP del ejemplo cinco, dos tanques flash y un mezclador.

- c) Ahora se van a seleccionar los componentes que participan en el proceso (Figura 75). Utilizando la opción “Component Selection” de la barra de herramientas.

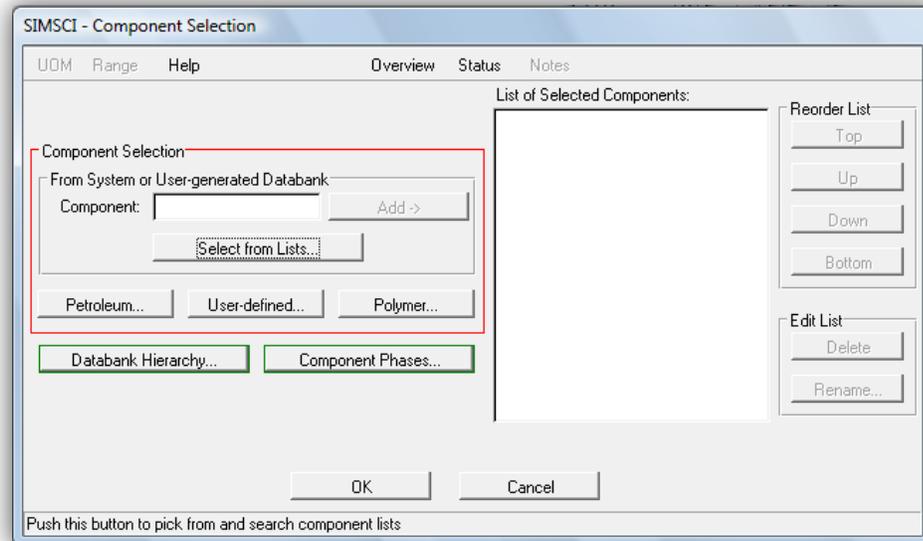


Figura 75. Selección de los componentes.

- d) Damos clic en la opción “Select from Lists” para realizar la búsqueda de los componentes en la opción “Most Commonly Used” (ver Figuras 76, 77 y 78). El enunciado no especifica que componentes participan en el proceso, se sugieren utilizar Acetona y Etanol.

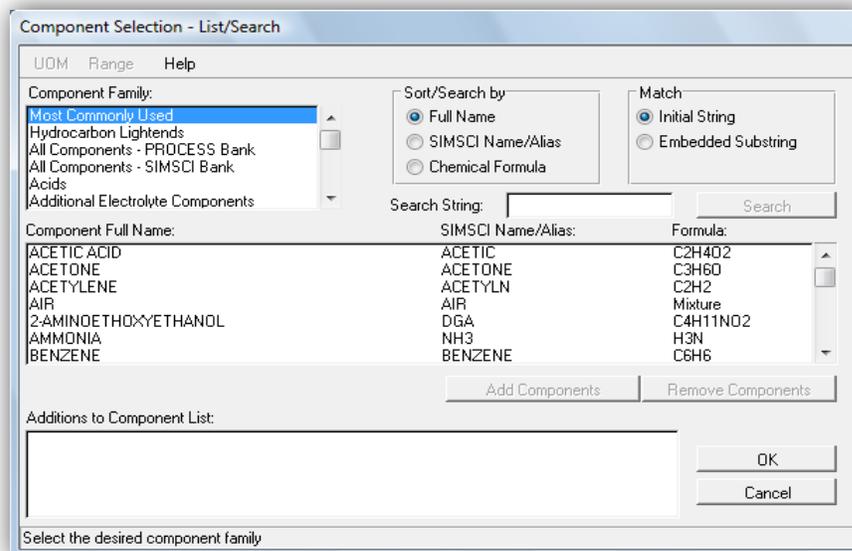


Figura 76. Selección de los componentes a partir de una lista de búsqueda.

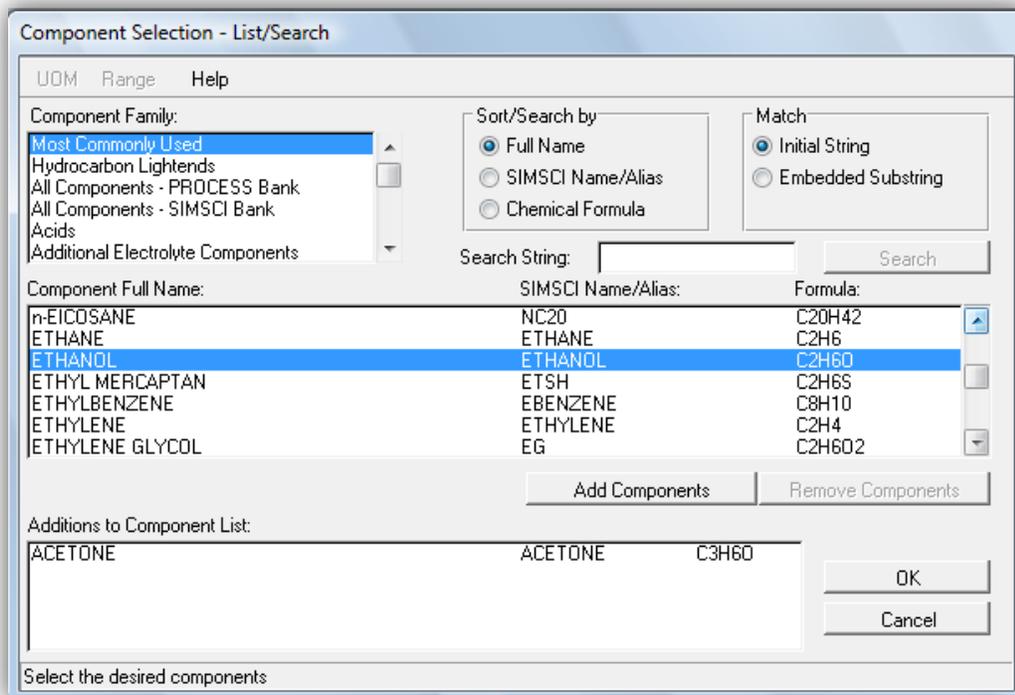


Figura 77. Selección de los componentes.

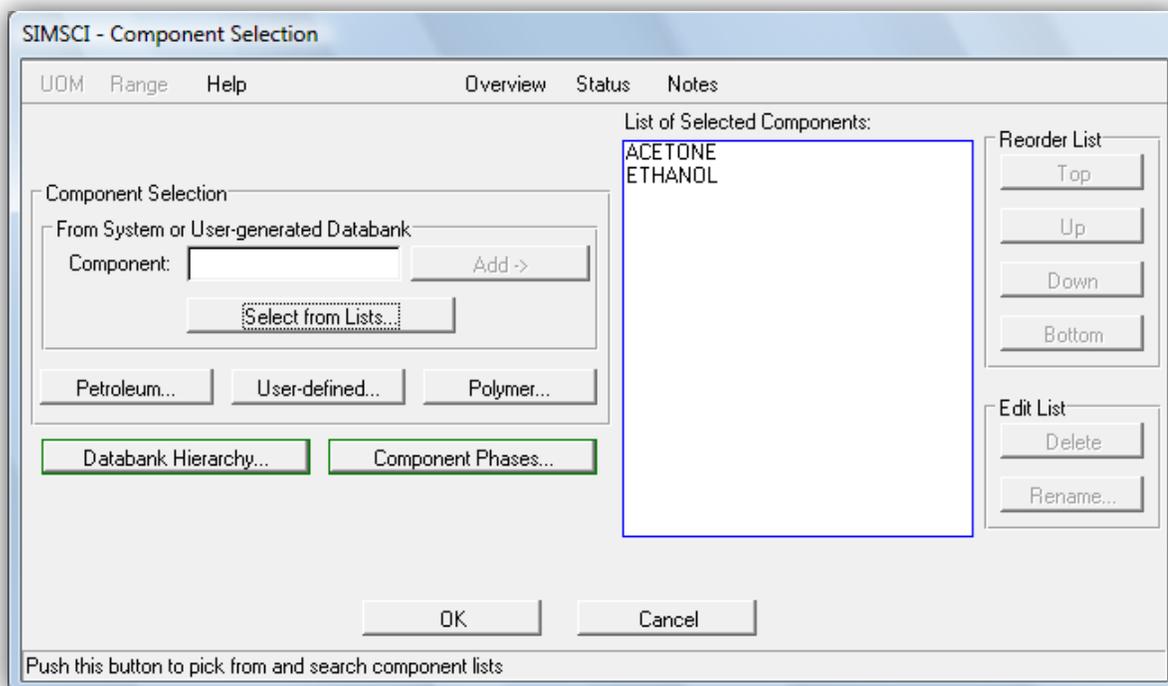


Figura 78. Componentes del ejemplo cinco, seleccionados correctamente.

- e) Ahora se selecciona el modelo termodinámico con el que se va a simular, en este caso también es el ideal, con ayuda de la opción “Thermodynamic Data” de la barra de herramientas.

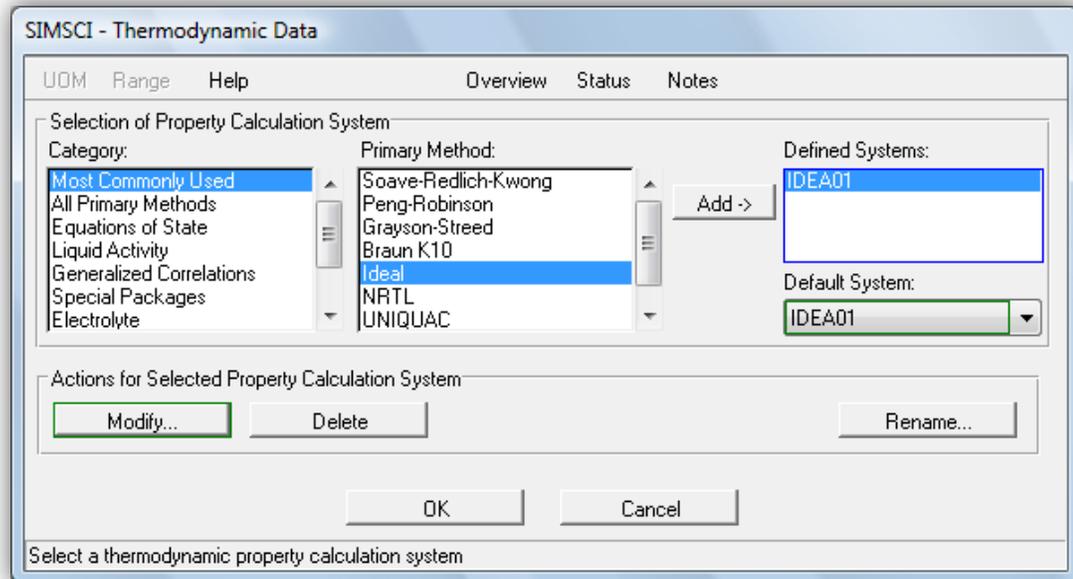


Figura 79. Selección del modelo termodinámico.

Como siguiente paso se va a especificar el sistema de unidades que se van a utilizar, dando clic en la opción de Unidades de medición “Units of measure” de la barra de herramientas.

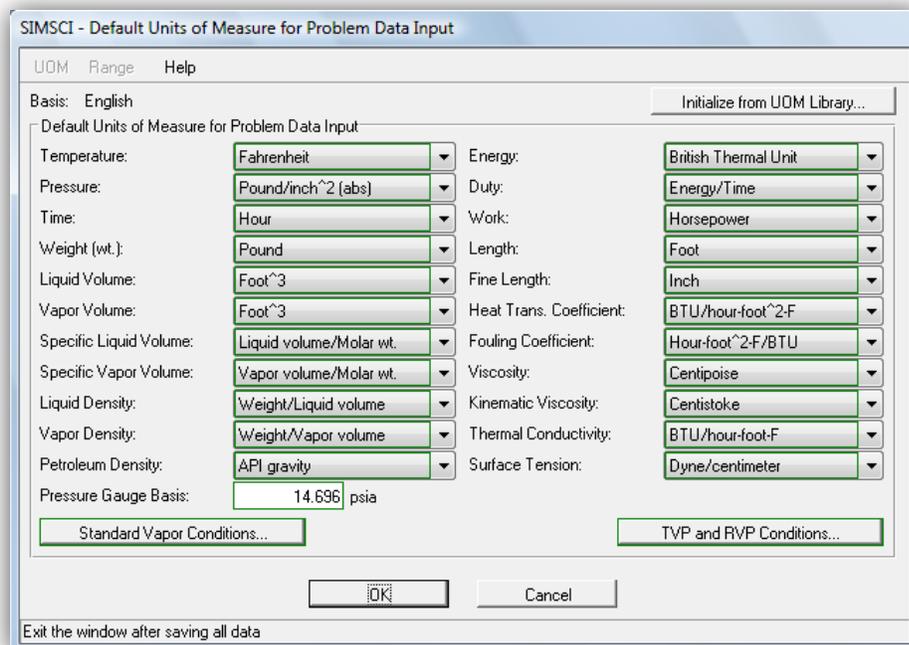


Figura 80. Selección del sistema de unidades.

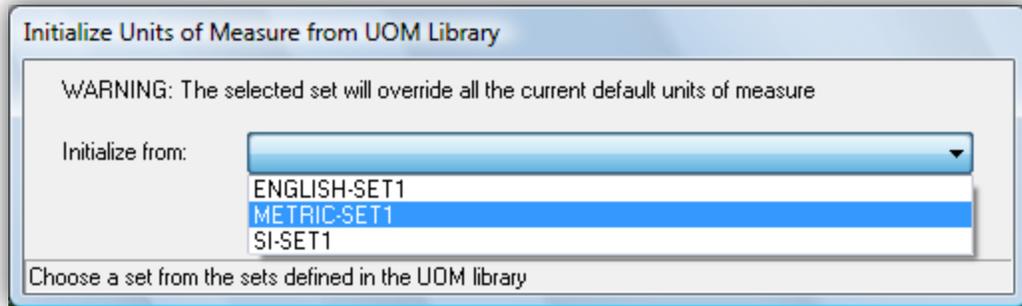


Figura 81. Selección del Sistema Métrico.

- f) Ahora se van a especificar las condiciones iniciales del proceso, como se puede observar en las líneas de las corrientes se localizan recuadros rojos con el numero de la corriente, se dan dos clics en ese recuadro para abrir la ventana de datos de la corriente, “Stream Data”.

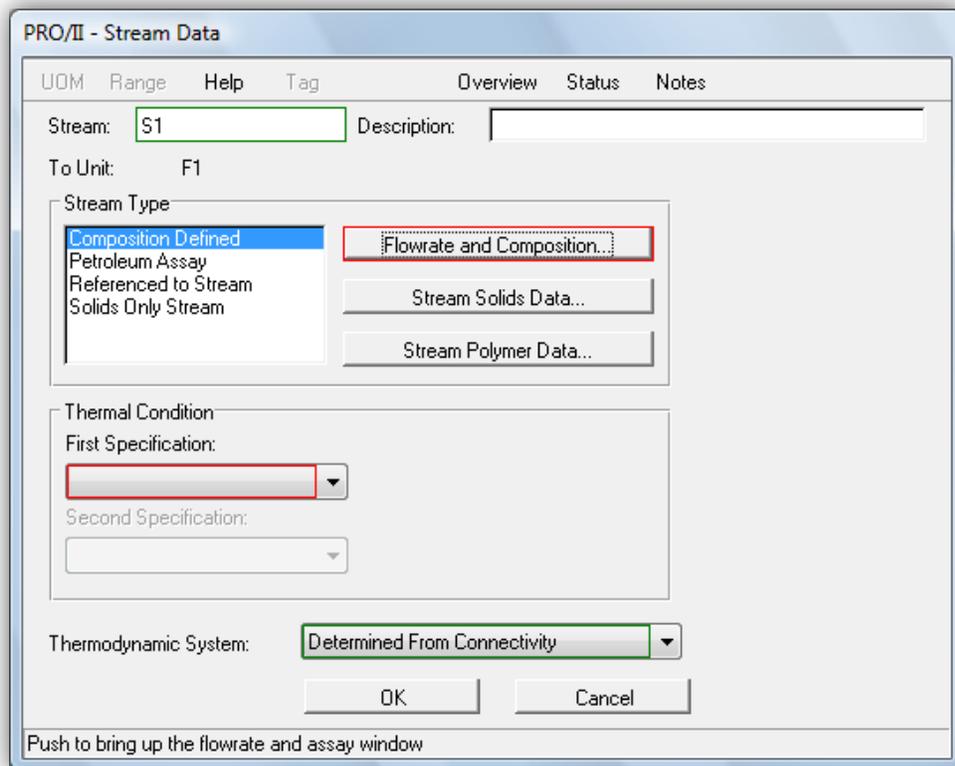


Figura 82. Especificación de las condiciones iniciales.

Stream Data - Flowrate and Composition

UOM Range Help Tag

Specify flowrate and composition for stream S1

Fluid Flowrate Specification

Total Fluid Flowrate: kg-mol/hr

Individual Component Flowrates

Copy	Component	Composition Mole
Paste	ACETONE	0.50000
	ETHANOL	0.5

Clear Compositions Total: 0.50000 Normalize Component Flowrates Based on Specified Fluid Flowrate

OK Cancel

Enter the composition

Figura 83.
Especificación del flujo y concentración de los componentes de la corriente uno.

PRO/II - Stream Data

UOM Range Help Tag Overview Status Notes

Stream: Description:

To Unit: F1

Stream Type

Composition Defined

Petroleum Assay

Referenced to Stream

Solids Only Stream

Thermal Condition

First Specification: C

Second Specification: kg/cm²

Thermodynamic System:

OK Cancel

Enter stream pressure

Figura 84.
Especificación de la presión y temperatura de la corriente uno.

Dando doble clic en el recuadro rojo F1 (Flash 1), se abre una ventana como la siguiente (Figura 85) para poder especificar las condiciones de operación del equipo, en este caso se deben interpolar las temperaturas hasta encontrar la que nos dé una separación en la cual se obtengan en el destilado 40 Kgmol/h, como se indica en el diagrama de flujo; entonces esa temperatura es 67 °C.

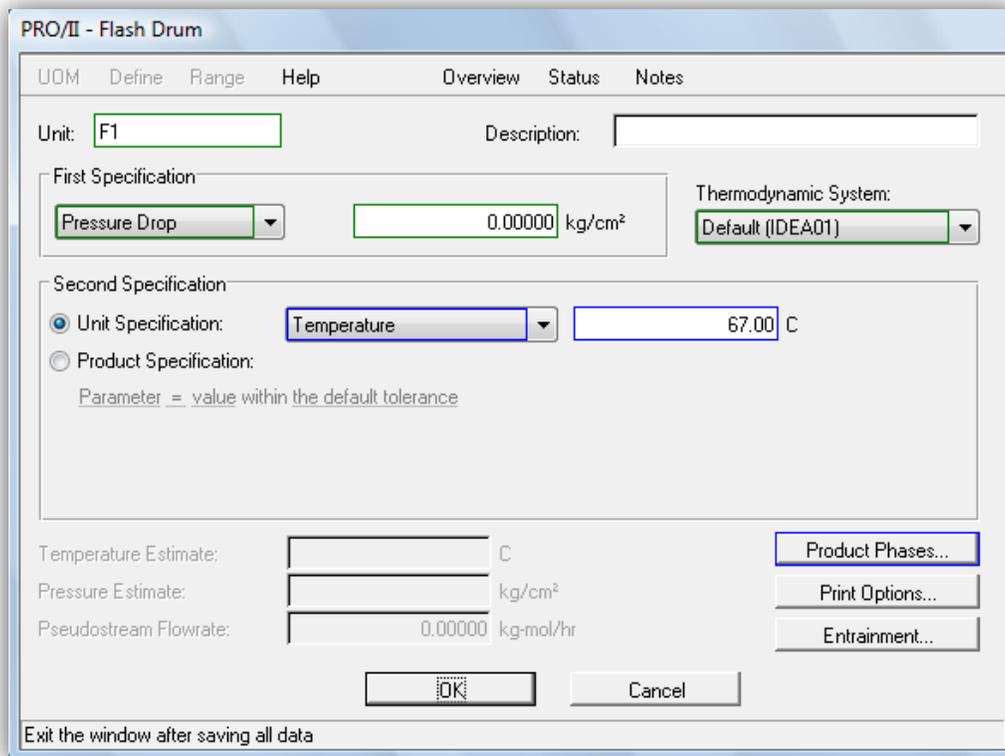


Figura 85. Especificación de las condiciones de operación del equipo (Flash 1).

- g) Ya que se tiene especificado el primer equipo se continua con el segundo, en este caso en un mezclador en el cual, una de las alimentaciones es la salida del primer tanque flash y la segunda corriente es una mezcla al 30% del componente A (Acetona). Como se vio anteriormente la corriente 4 que en este caso es la corriente que entra al mezclador se especifica dando doble clic al recuadro rojo que dice S4. Entonces la corriente cuatro está formada por un flujo de 30 Kg/h, la especificación de esa línea queda así :

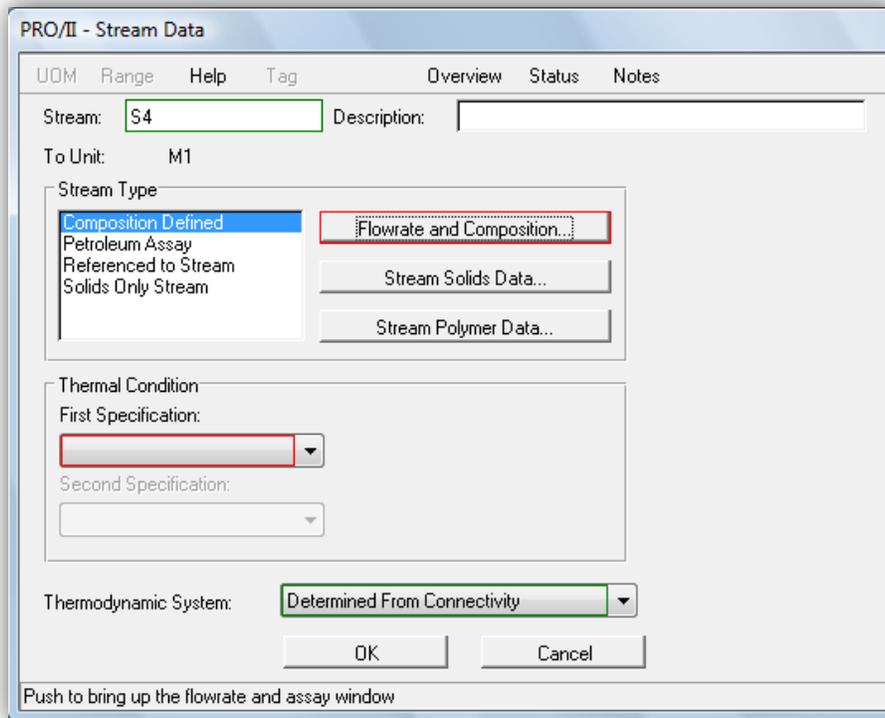


Figura 86. Especificación de las condiciones iniciales de la corriente cuatro.

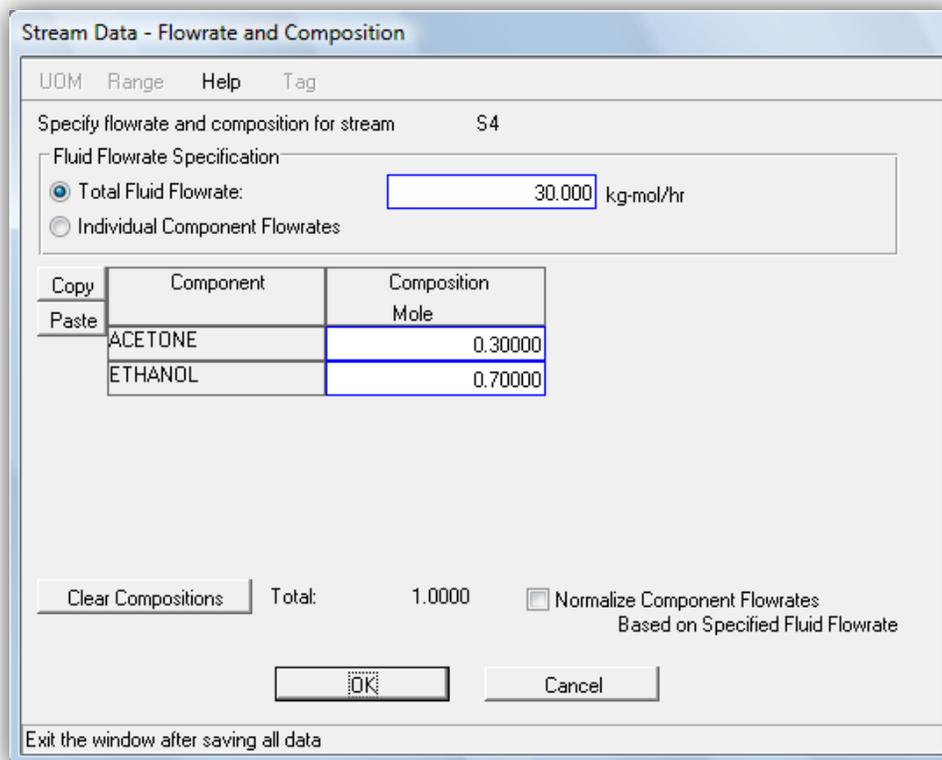


Figura 87. Especificación de las condiciones de flujo y composición de la corriente cuatro.

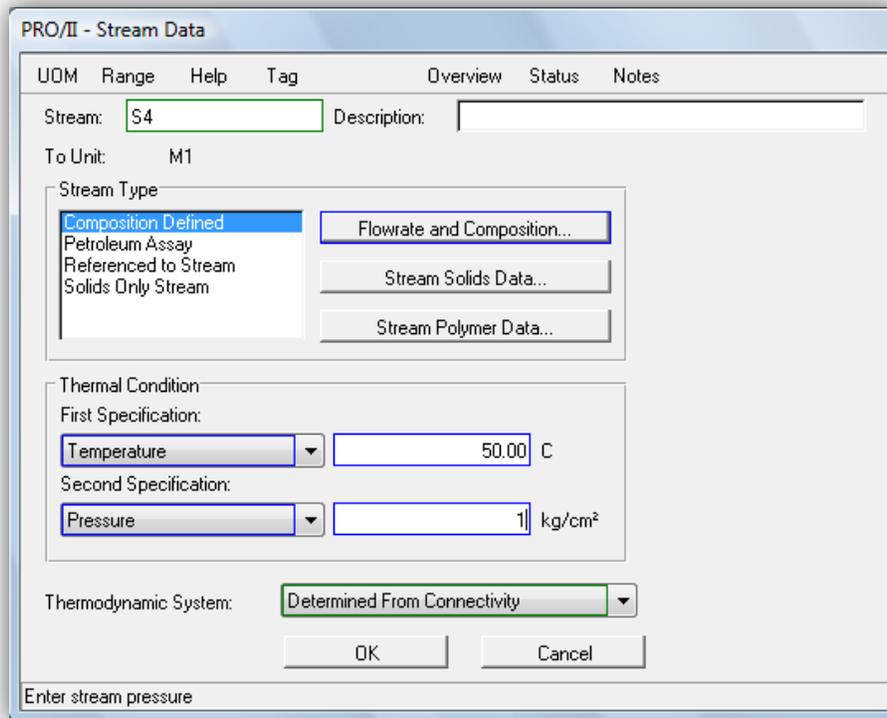


Figura 88. Especificación de las condiciones de temperatura y presión de la corriente cuatro.

h) Ya que se tiene la salida del mezclador ahora conectamos esa salida al tanque flash dos y dando doble clic en el recuadro rojo F2 se especifican las condiciones de operación del tanque F2 (ver Figura 89) con una temperatura de 69.4 °C.

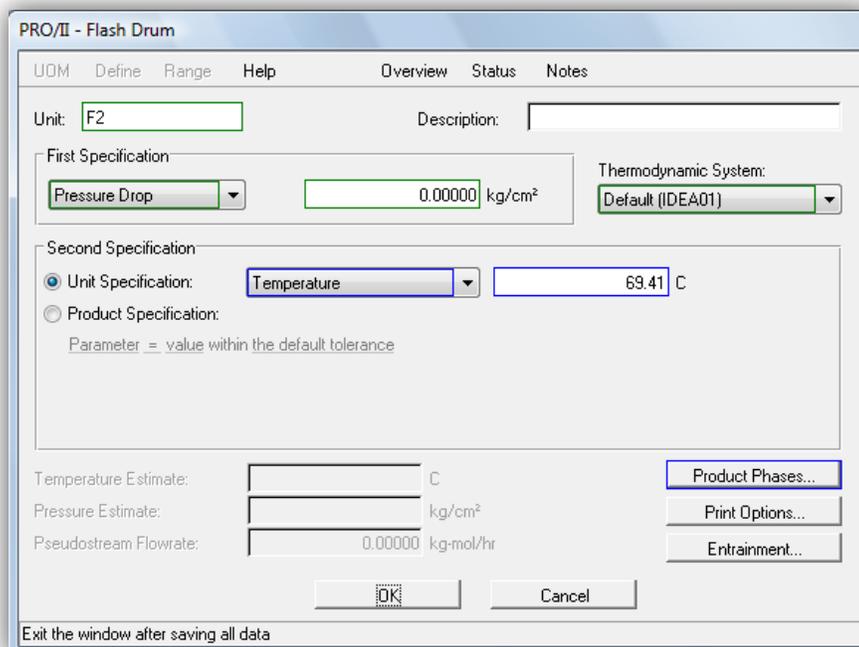


Figura 89. Especificación de las condiciones de operación del equipo (Flash 2.)

- i) Utilizando la herramienta “PDF o PFD” agregamos una tabla de propiedades, para después especificar que esa tabla debe contener el balance de materia de toda la unidad del proceso, dando doble clic en la tabla que se agregó, se obtiene una tabla como la de la Figura 90.

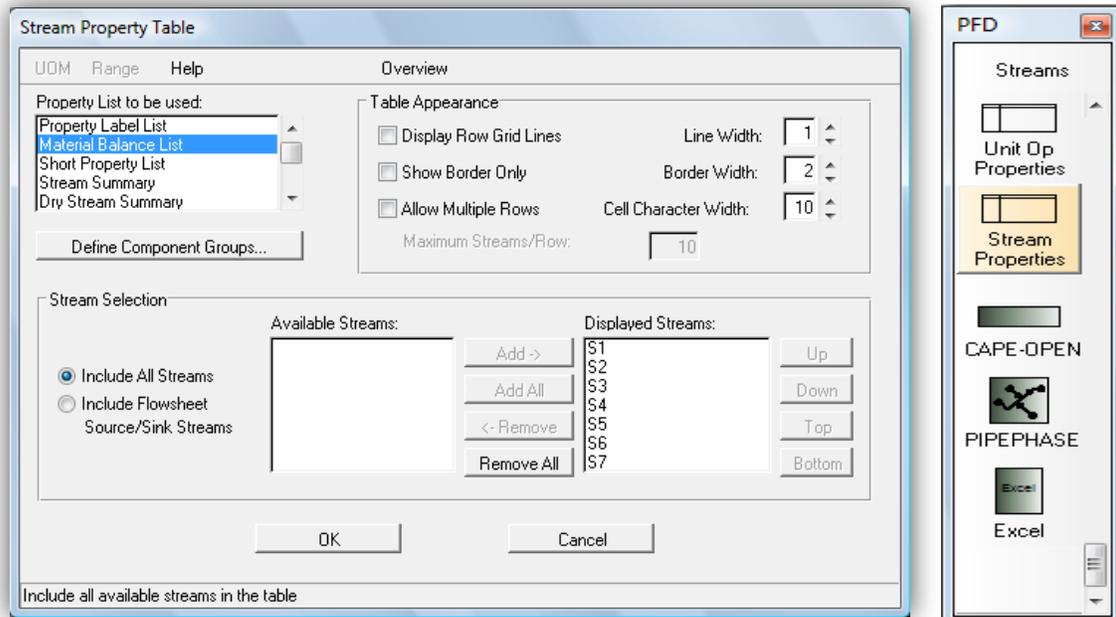


Figura 90. Herramienta PFD y Tabla de balance de materia para el ejemplo cinco.

Se debe seleccionar la opción “Material Balance List” de las herramientas que se encuentran a la izquierda y se debe dar clic. Después se debe seleccionar la opción “Add All” para que se realice el balance en todas las composiciones (Figura 90).

Finalmente podemos dar clic en la opción “run” de la barra de herramientas y concluir con la simulación de este proceso.

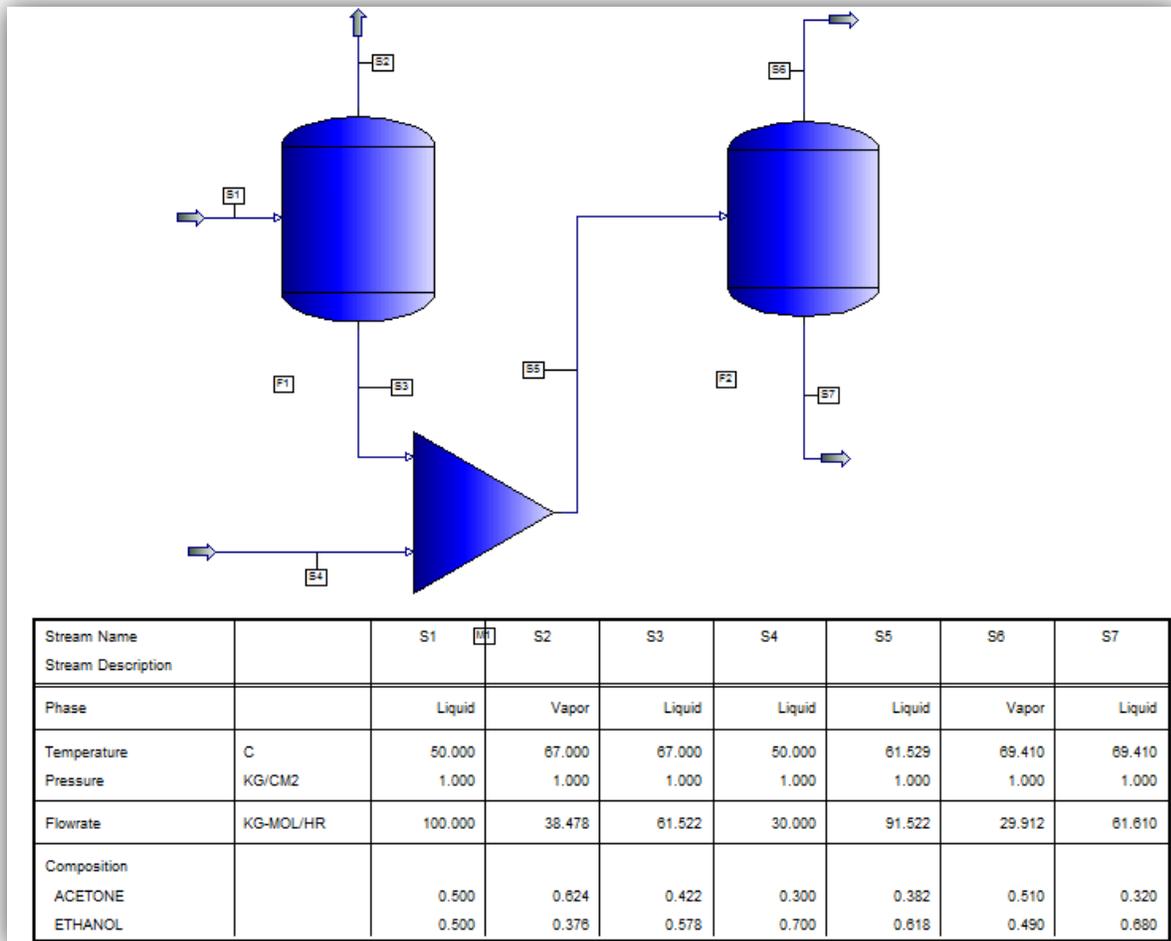


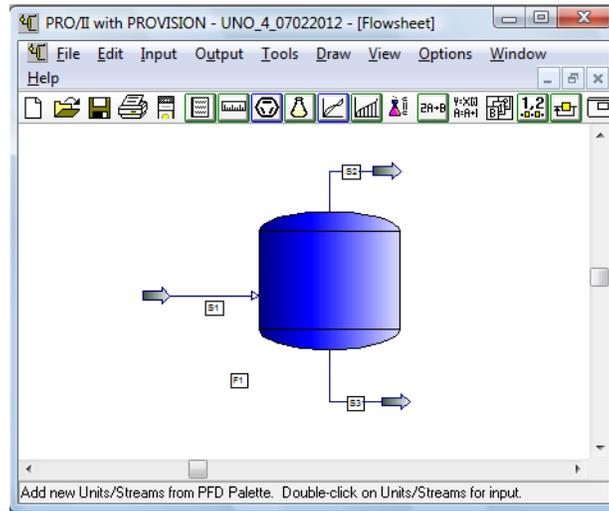
Figura 91. Proceso finalizado con DFP y tabla de propiedades.

En el capítulo tres se describen veinte procesos divididos de la siguiente manera, del 1 al 15 corresponden a unidades simples y del 16 al 20 corresponden a unidades múltiples. Los cuales se sugieren como ejercicios de práctica para ser desarrollados en el simulador de procesos, PRO II.

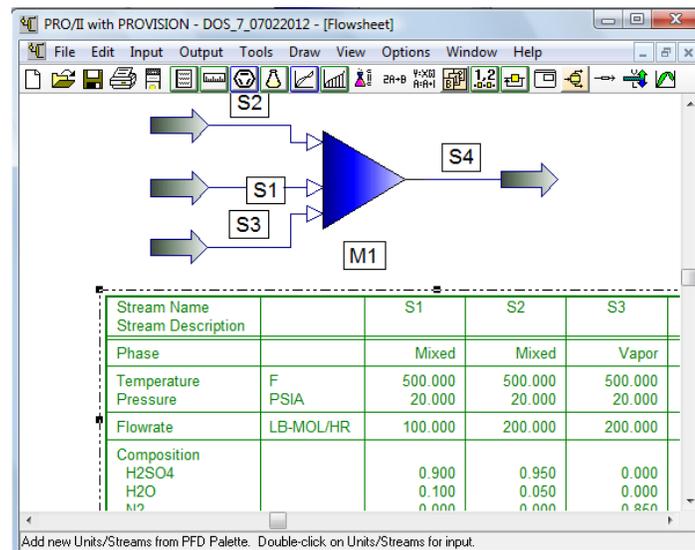
3. Rutinas de simulación para unidades simples.

PROCESOS BÁSICOS

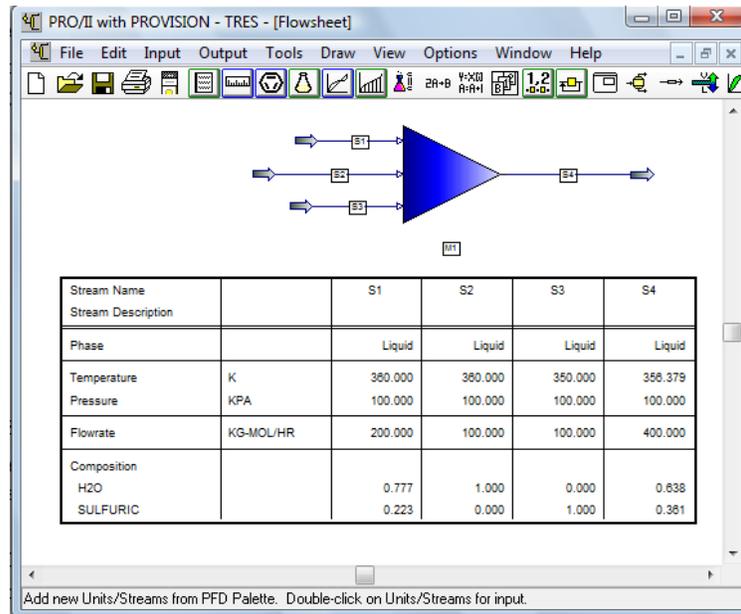
1. Se necesita separar una mezcla equimolar de Etanol, Propanol y Butanol de 1000 lbmol/hr a una temperatura inicial de 25 °F y una presión de 14 PSIA. Obtener las composiciones de cada componente en el destilado y residuos.



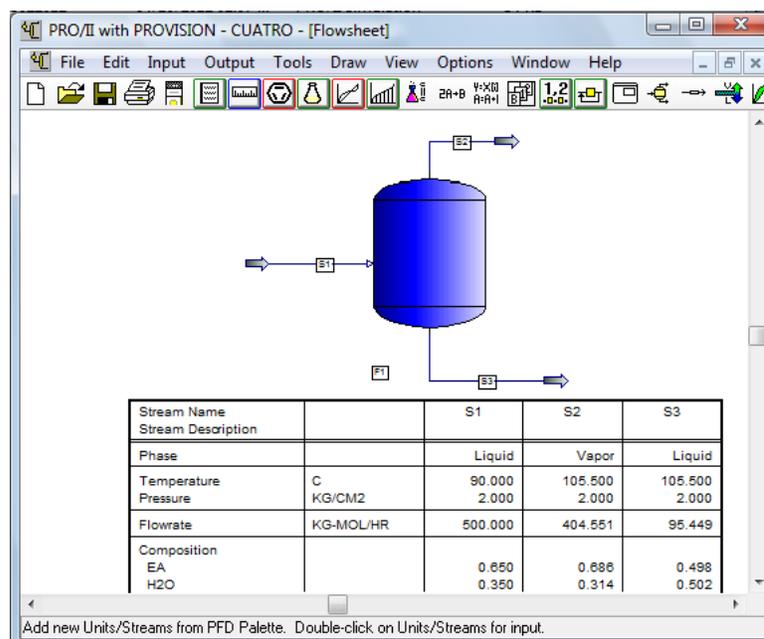
2. Para obtener una corriente combinada (vapor-liquido) de 500 lbmol/hr con una concentración de 56% de H_2SO_4 y 34% de N_2 , se necesitan mezclar corrientes diversas, la primera de 100 lbmol/hr formada por 90% de H_2SO_4 y el resto de agua; una segunda corriente de 200 lbmol/hr con 5% de agua y el resto de H_2SO_4 y una tercera corriente formada por 85% de N_2 y 15% de SO_3 . Calcula las composiciones finales de cada uno de los componentes.



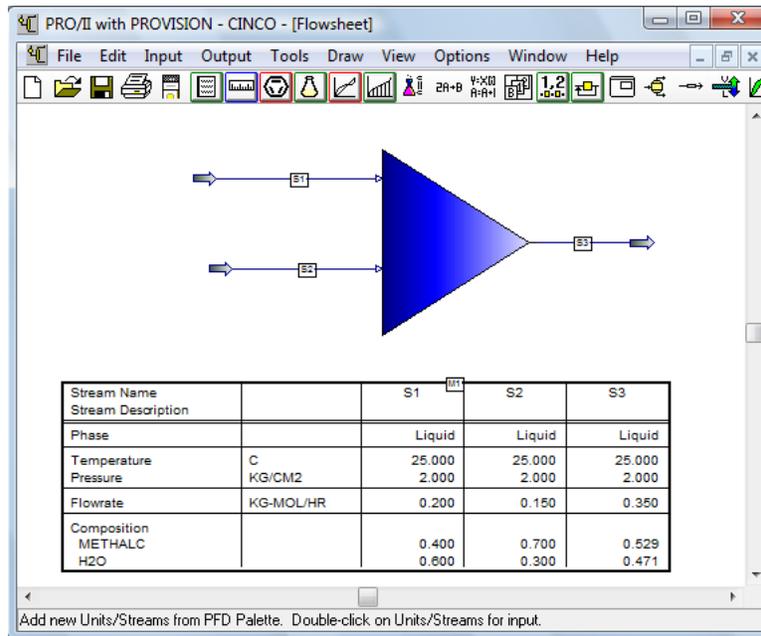
3. A partir una alimentación de 200 Kgmol/hr de Ácido Sulfúrico al 22.3% y dos corrientes más de 100 Kgmol/hr cada una, una de agua y otra de puro ácido. Calcula la cantidad de ácido diluido a la salida del mezclador, si su concentración es al 36%.



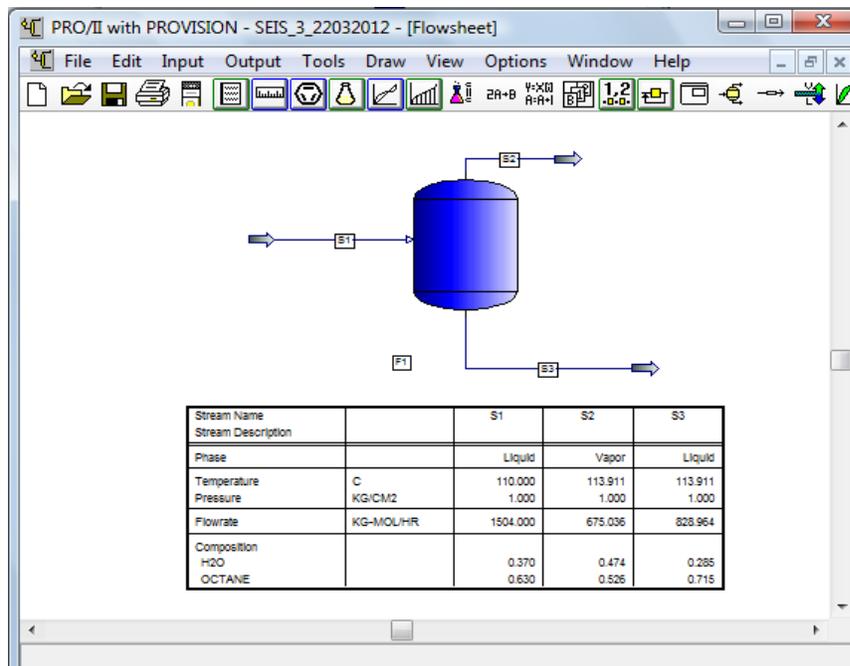
4. Se alimenta a un tanque flash una corriente de 500 Kgmol/hr formada por 65% de Etanol y Agua a 100°C y una presión de 2 Kg/cm², ¿A qué temperatura se obtendrá 85% de Etanol alimentado en el destilado y 85% de agua en el residuo?



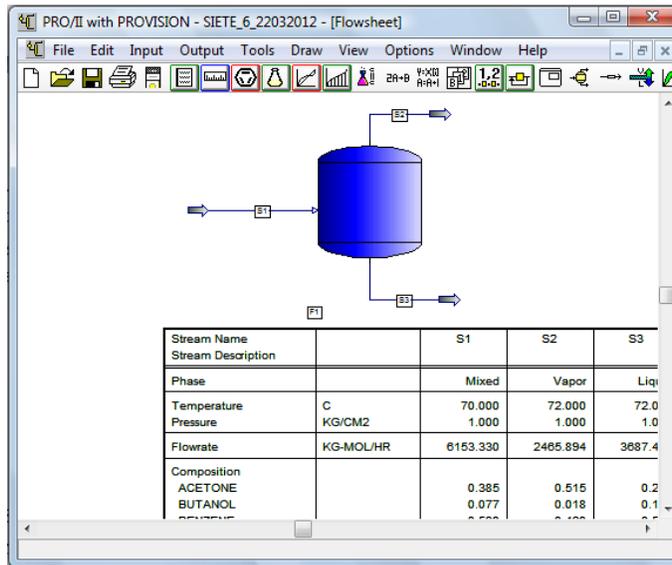
5. Dos mezclas metanol-agua se encuentran en dos matraces separados. La primera mezcla contiene 40% en peso de metanol, y la segunda contiene 70% en peso del mismo. Si se combinan 200g de la primera mezcla con 150g de la segunda, ¿Cuál es la masa y la composición del producto?



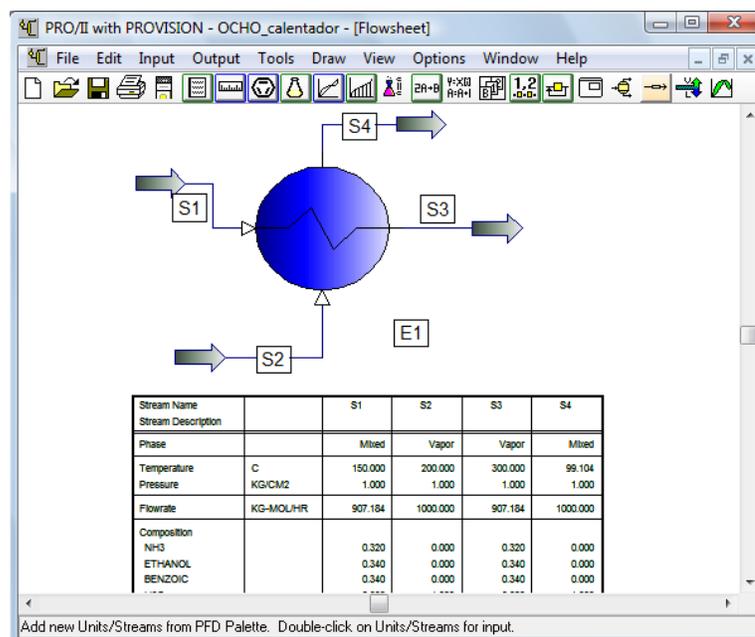
6. Entra a un tanque flash una mezcla de 1504 Kgmol/hr a 110°C y una presión igual a 1 Kg/cm², compuesta por 63% de octano y el resto de agua. ¿A qué temperatura se obtendrá el 78% de Octano alimentado en el residuo?



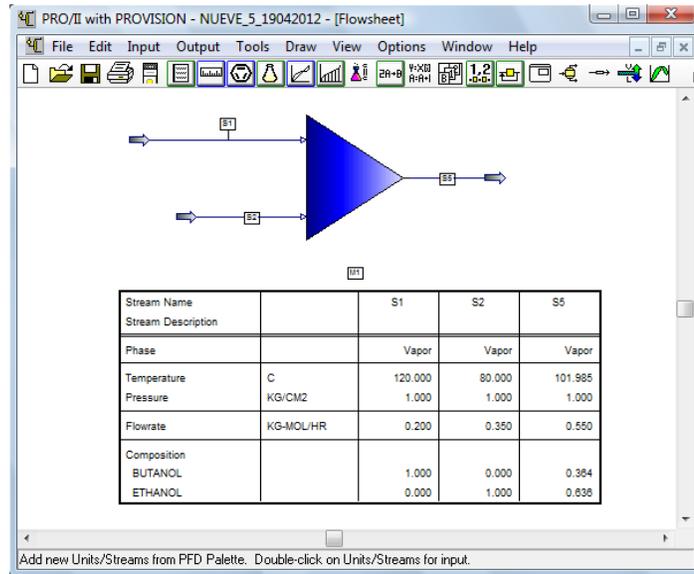
7. Una mezcla formada por 6153.33 Kgmol/hr de Acetona al 38%, Butanol y Benceno al 53%; es alimentada a un tanque flash a una temperatura inicial de 70°C y una presión de 1 Kg/cm², ¿Cuál es la temperatura óptima para obtener en el destilado 53% de Acetona alimentada, 65% del benceno alimentado y 73% de butanol?



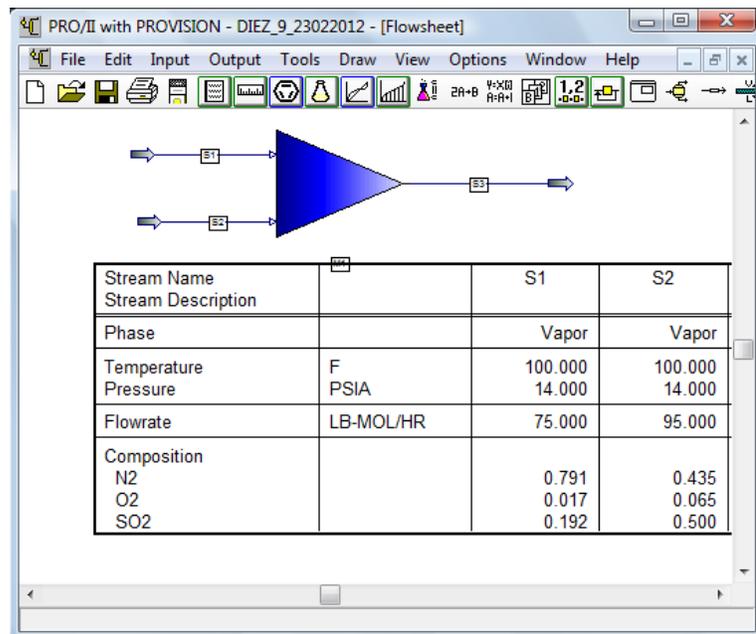
8. Se tiene un intercambiador de calor al cual entra una corriente de 907.184 Kgmol/hr compuesta por 32% de NH₃, 34% de Etanol y el resto de Ácido Benzoico; y a contra corriente entran 1000 Kgmol/hr de vapor de agua a 200°C. La corriente de vapor calienta la mezcla, de amoniaco, etanol y acido benzoico. ¿Cuál será la temperatura de salida de la corriente de entrada?



9. Se tienen dos corrientes que entran a un mezclador a diferente temperatura, Butanol (0.20 Kgmol/hr) y Etanol (con una concentración de 63% a la salida), se necesita obtener una mezcla como producto de 0.550 Kgmol/hr y que tenga una temperatura igual a 101.98°C. Encuentra las temperaturas y los flujos de entrada de cada una de esas corrientes.

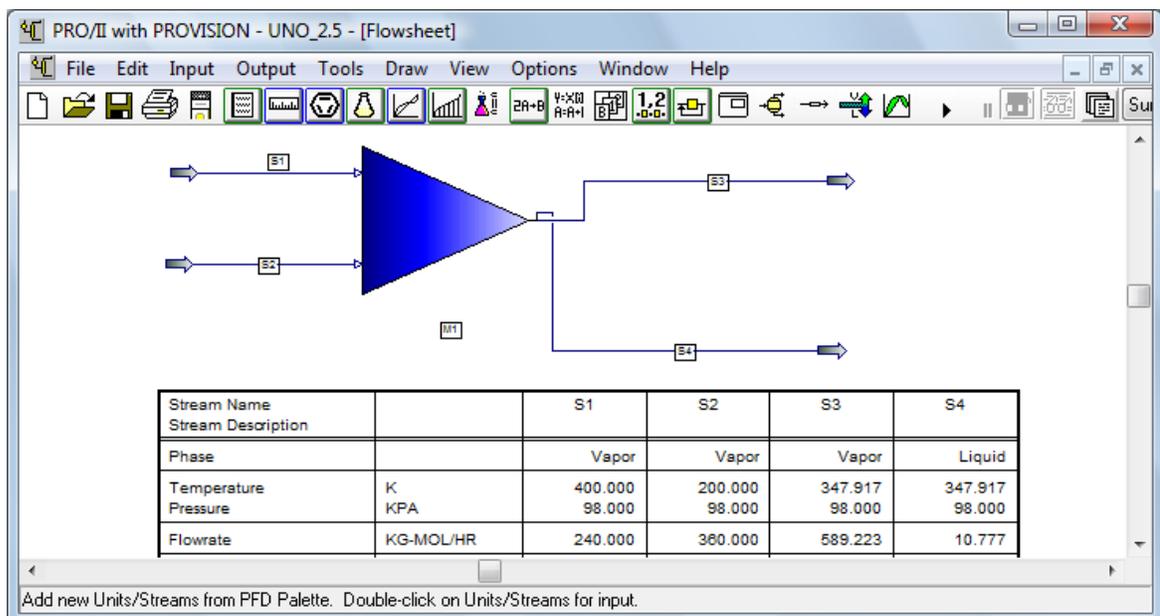


10. En una planta en la que se utilizan gases, necesitan una línea que distribuya una corriente de 170 lbmol/hr formada por N₂, O₂ y SO₂. La primera corriente de 75 lbmol/hr contiene 79% de N₂ y 19.2% de SO₂; la segunda contiene 43.47% de N₂ y 50% de SO₂. ¿Cuáles son las composiciones de dicha corriente?



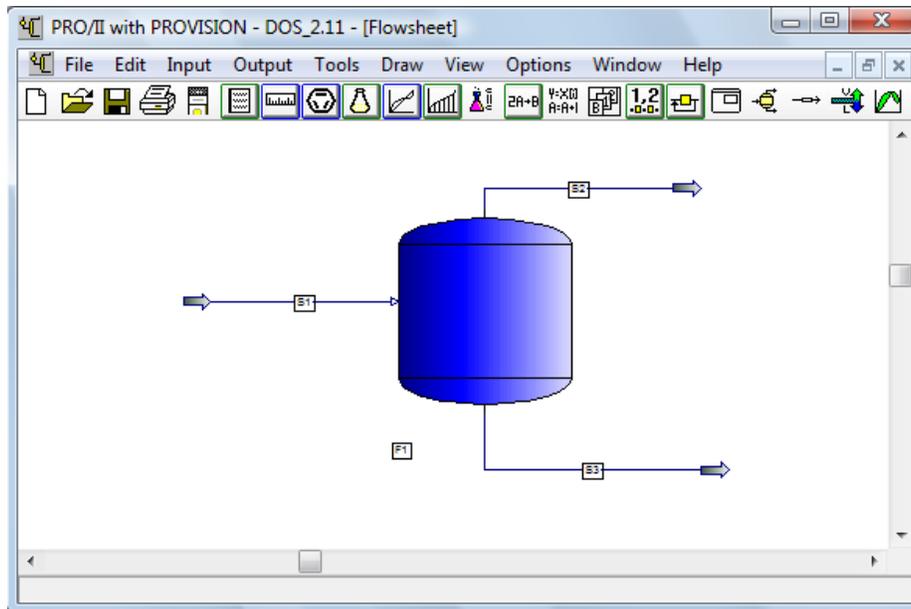
11. A un proceso de producción de metano a partir de gas de síntesis y vapor de agua, se alimentan 6 Kgmol/min de un gas que contiene 50% de H_2 , 33% de CO_2 y el resto de CH_4 (todos en base molar) así como 72Kg/min de vapor de agua. Los productos son dos corrientes; una de agua líquida y otra de un gas que contiene CH_4 , CO_2 , H_2 y H_2O .

Determine los flujos de las corrientes de salida, así como las concentraciones de todos los componentes.



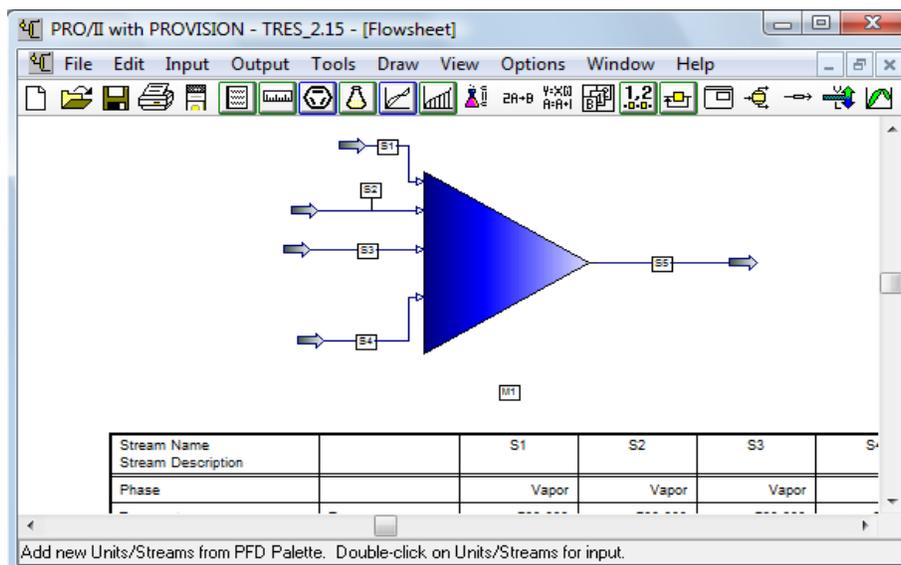
12. En una columna de destilación se separa en cantidades iguales una mezcla equimolar de etanol, propanol y butanol, en una corriente de destilado que contiene sólo 22% de etanol, y una corriente de fondos que contiene 22.5% de butanol. Calcular las cantidades y composiciones de las corrientes de destilado y fondos para una alimentación de 1000 Kgmol/h. La presión en el sistema es de 137.90 KPa.

Encontrar la temperatura adecuada para que se lleve a cabo la mejor separación, así como las concentraciones de los componentes en el destilado y fondos.

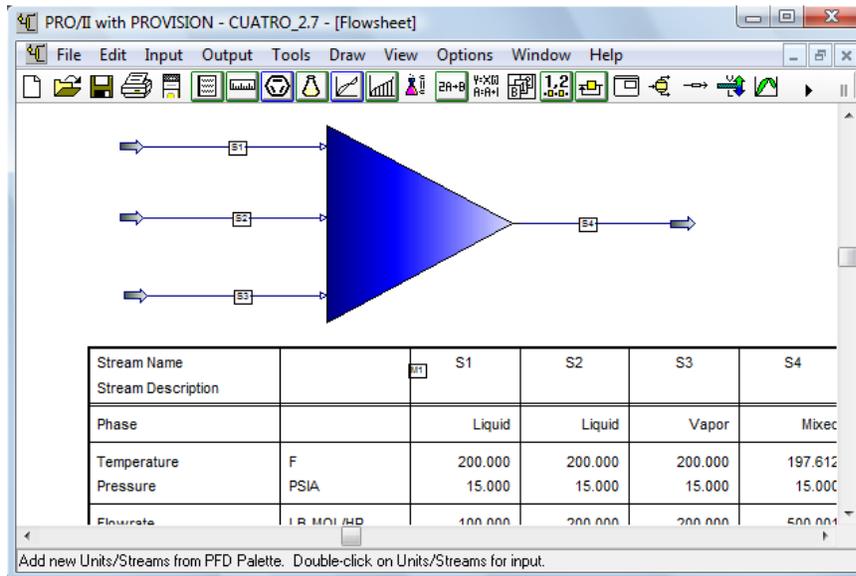


13. En una planta se mezclan cuatro corrientes de proceso para dar una corriente única de 2000 lbmol/h. Las composiciones de las cuatro corrientes de entrada y la corriente de salida se muestran en la tabla siguiente:

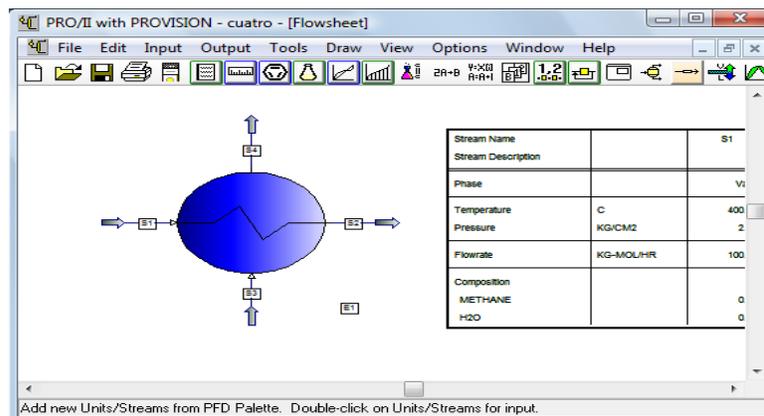
Corrientes de salida					
% en peso	1	2	3	4	Corrientes de salida
H ₂ SO ₄	80	0	30	10	40
HNO ₃	0	80	10	10	27
H ₂ O	16	20	60	72	31
Inertes	4	0	0	8	2



14. Una corriente de 1000 Kgmol/hr disponible con la siguiente composición (todos los porcentajes en mol), 20% Propano (C_3), 30% Isobutano ($i-C_4$), 20% Isopentano ($i-C_5$) y 30% Pentano normal (C_5), se va a separar por destilación en dos fracciones. Se desea que el destilado contenga aproximadamente 70% del propano que entra en la unidad, así como 45.6% de isobutano y 17.5% de isopentano. La corriente de residuo deberá contener más del 85% de pentano normal que se alimenta a la unidad. Calcular los análisis completos de destilado y residuo.



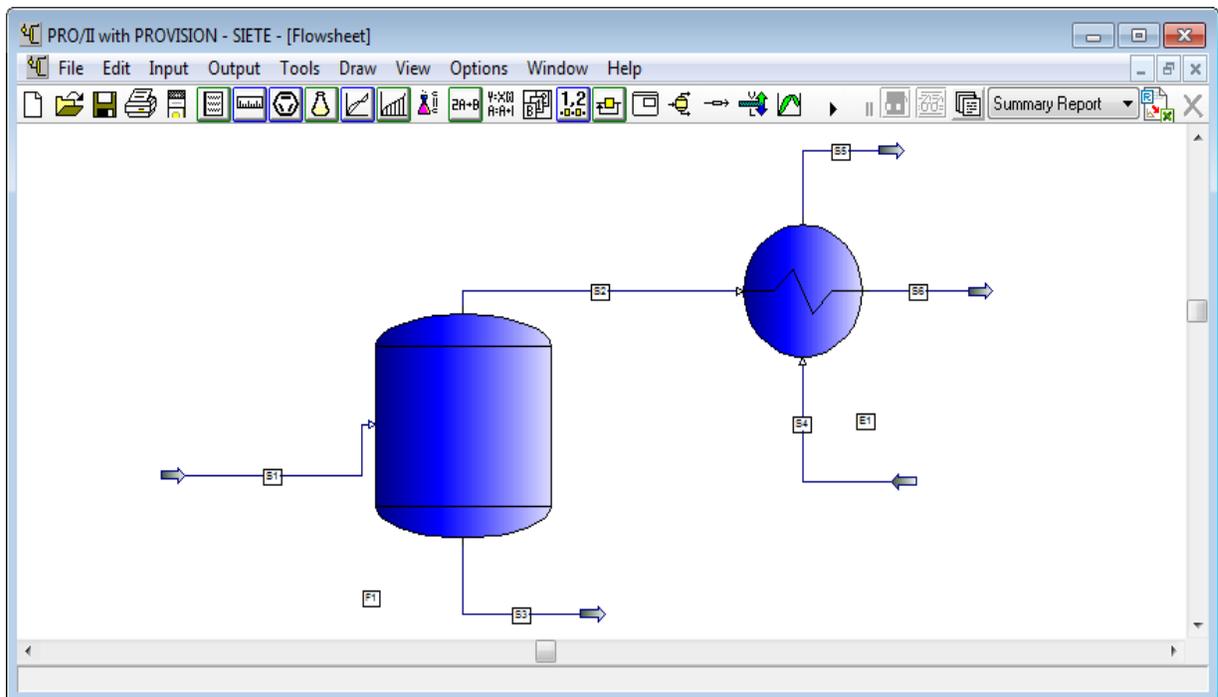
15. Suponga que 100 mol/h de un gas que contiene 60% en mol de CH_4 y 40% de H_2O a $400^\circ C$ pasa a través de un intercambiador de calor y se enfría a $120^\circ C$, y que entran 10 mol/h de agua al intercambiador de calor como un líquido a $25^\circ C$, y sale como vapor saturado a 1 atm. Calcula la temperatura y el flujo del vapor saturado de salida.



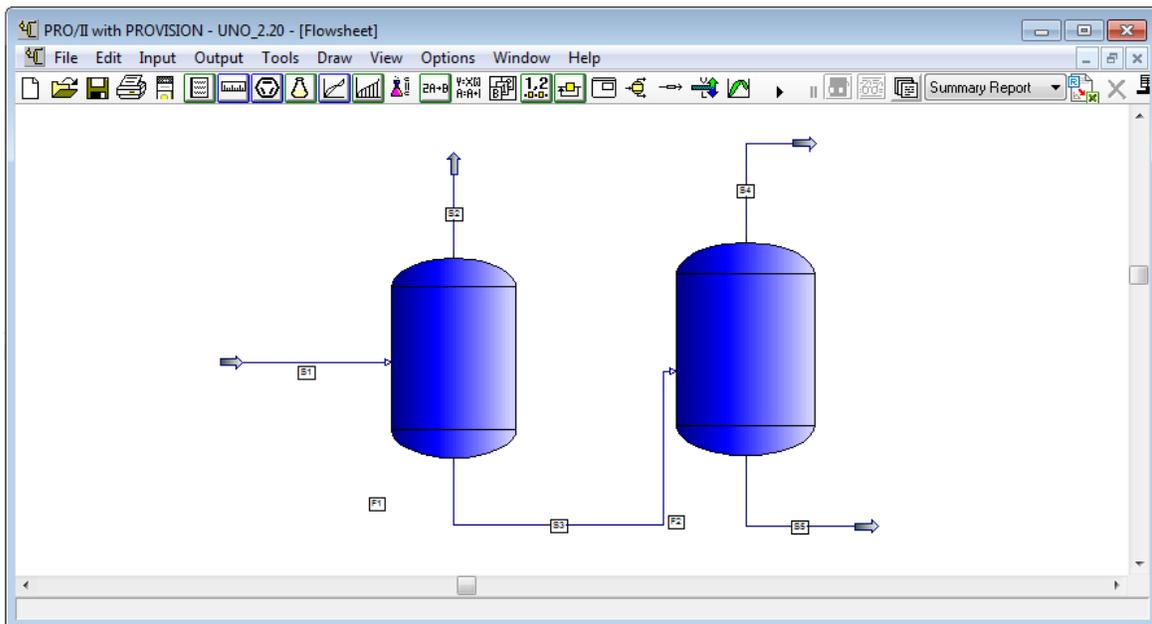
4. Rutinas de simulación para unidades múltiples.

¡Bien! ya que se han explicado cómo se resuelve la simulación de algunas de las operaciones básicas y se han resuelto procesos para unidades simples, ahora se debe resolver simulación para unidades múltiples, partiendo de los mismos principios como por ejemplo dibujar correctamente el diagrama de flujo del proceso en el programa. Se describen a continuación cinco procesos detalladamente para así poder especificar las condiciones de entrada de cada una de las materias, al equipo.

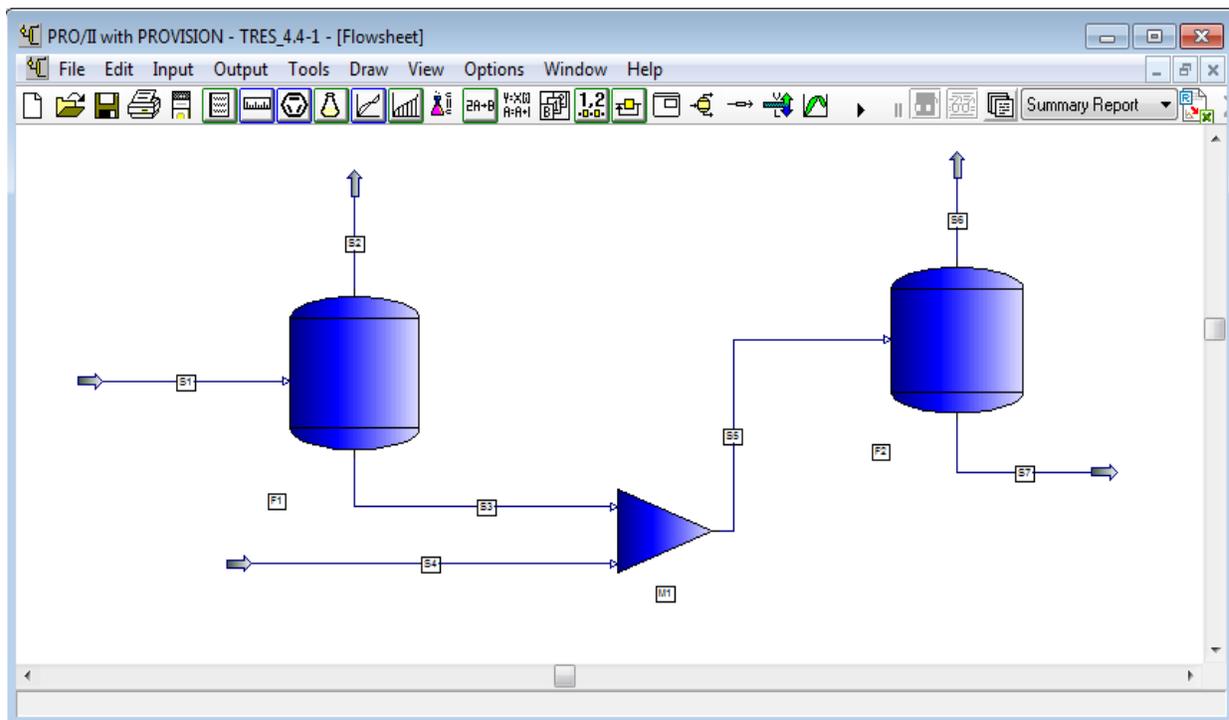
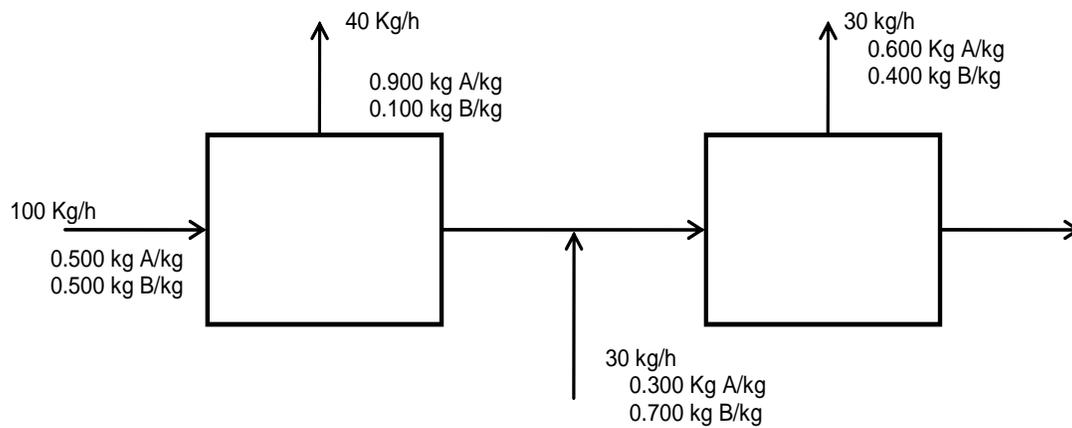
16. En un proceso de producción de Ácido Sulfúrico se tiene una corriente de 1000 Kgmol/hr formada por 75% de agua y 25% de H_2SO_4 , de la cual se necesita obtener en el destilado una corriente de agua de 500.23 Kgmol/hr a una temperatura de 119°C. Determinar la temperatura y el flujo del agua de enfriamiento.



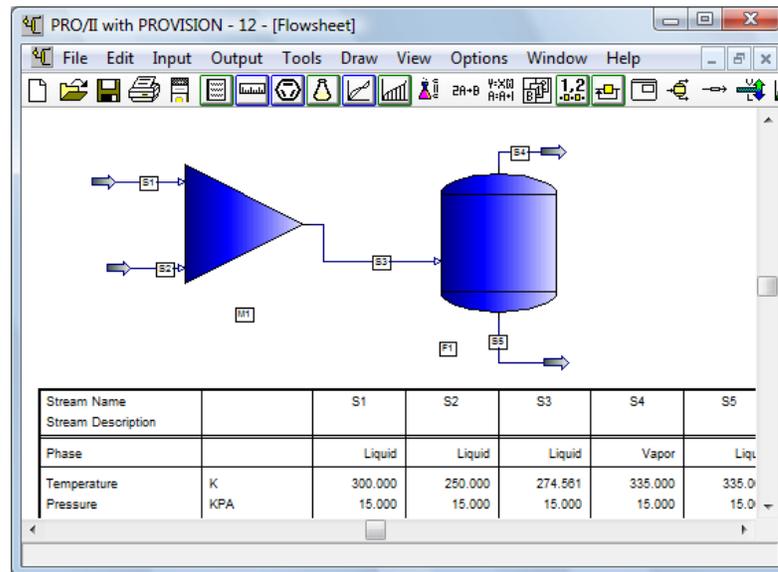
17. El flujo de alimentación a una unidad que consiste en dos columnas que contiene 30% de Benceno (B), 55% de Tolueno (T) y 15% de Xileno (X). Se analiza el vapor de destilado de la primera columna y se encuentra que contiene 74.9% de B y 49% de T. Los fondos de la primera columna se alimentan a la segunda columna. En esta segunda columna se planea que 10% del B original cargado a la unidad, se recupere en la corriente destilada, se planea además que 75% del X cargado a la unidad se recupere en los fondos de esta columna y que el X constituya el 30% de dicha corriente, además que obtenga 41% de T alimentado en el residuo. Si se cumplen estas condiciones, calcular: El análisis de todas las corrientes que salen de la unidad.



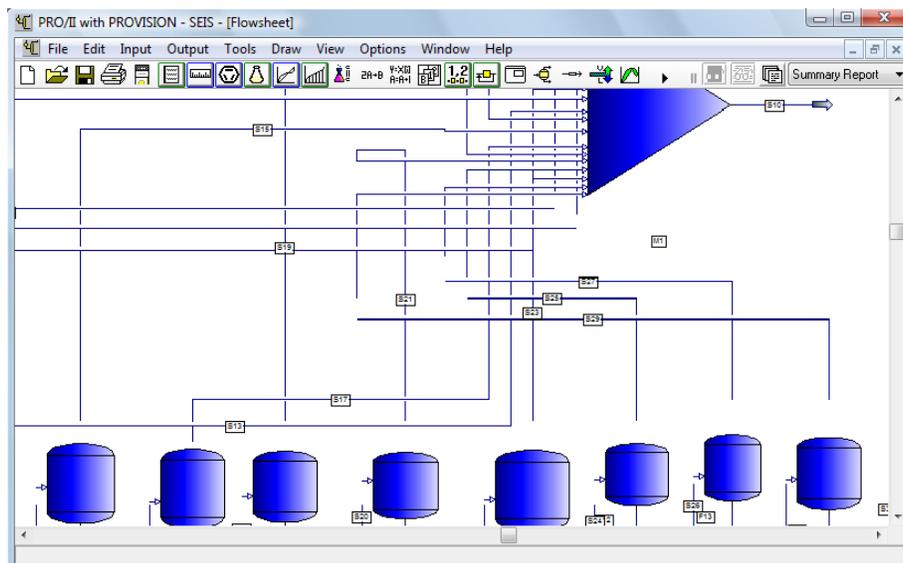
18. A continuación se muestra el diagrama de flujo etiquetado para un proceso de destilación continua en régimen permanente de dos unidades. Cada flujo contiene dos componentes, A y B, en diferentes proporciones. Los tres flujos cuyas velocidades de flujo y/o composiciones se desconocen. Calcula las cantidades de flujo desconocidas y las composiciones de los flujos etiquetados, indica además a que temperaturas se desarrolla este proceso. ¿Se cumplen las composiciones requeridas? (ver capítulo 5 Tablas de resultados, proceso 18).



19. Se tienen dos corrientes formadas por heptano y etilbenceno a una temperatura de 300 °K y una $P=15$ KPa, la primera contiene 30% volumen de etilbenceno mientras que la segunda contiene 80%. ¿A qué composición entra la mezcla de 1361 Kg/h al separador, para obtener en el residuo una mezcla con aproximadamente 600 Kg/h de etilbenceno?



20. Se necesita separar una mezcla equimolar de Cloro y Agua, de 1000 Kgmol/h a una temperatura inicial de 240 °K y 50Kpa, necesito proponer un tren de separación de hasta 15 tanques flash hasta obtener por separado los flujos iniciales de cada componente, con los flujos obtenidos ¿Qué composición obtienes de cada corriente?



5. Tablas de Resultados

En esta sección se incluyen todas las tablas de balance que se obtienen de la simulación de cada uno de los veinte procesos sugeridos, cada una de ellas indica la temperatura, la fase, la presión, el flujo y la composición de cada una de las corrientes, en relación los componentes que participan en el proceso.

Unidades simples.

PROCESO 1.

Stream Name		S1	S2	S3
Stream Description				
Phase		Mixed	Vapor	Liquid
Temperature	°F	205.0000	205.0000	205.0000
Pressure	PSIA	14.0000	14.0000	14.0000
Flowrate	LB- MOL/HR	1000.0000	441.3548	558.6452
Composition				
ETHANOL		0.3333	0.4654	0.2290
PROPANOL		0.3333	0.3345	0.3324
BUTANOL		0.3333	0.2001	0.4386

PROCESO 2.

Stream Name		S1	S2	S3	S4
Stream Description					
Phase		Mixed	Mixed	Vapor	Mixed
Temperature	°F	500	500	500	453.15
Pressure	PSIA	20.00	20.00	20.00	20.00
Flowrate	LB- MOL/HR	100	200	200	500
Composition					
H2SO4		0.9000	0.9500	0.0000	0.5600
H2O		0.1000	0.0500	0.0000	0.0400
N2		0.0000	0.0000	0.8500	0.3400
SO3		0.0000	0.0000	0.1500	0.0600

PROCESO 3.

Stream Name		S1	S2	S3	S4
Stream Description					
Phase		Liquid	Liquid	Liquid	Liquid
Temperature	°K	360	360	350	356.38
Pressure	KPA	100.00	100.00	100.00	100.00
Flowrate	KG- MOL/HR	200	100	100	400
Composition					
H2O		0.7770	1.0000	0.0000	0.6385
SULFURIC		0.2230	0.0000	1.0000	0.3615

PROCESO 4.

Stream Name		S1	S2	S3
Stream Description				
Phase		Liquid	Vapor	Liquid
Temperature	°C	90	105.5	105.5
Pressure	KG/CM2	2.00	2.00	2.00
Flowrate	KG- MOL/HR	500.0000	404.5511	95.4489
Composition				
EA		0.6500	0.6858	0.4982
H2O		0.3500	0.3142	0.5018

PROCESO 5.

Stream Name		S1	S2	S3
Stream Description				
Phase		Liquid	Liquid	Liquid
Temperature	°C	25.00	25.00	25.00
Pressure	KG/CM2	2.00	2.00	2.00
Flowrate	KG- MOL/HR	0.2000	0.1500	0.3500
Composition				
METHALC		0.4000	0.7000	0.5286
H2O		0.6000	0.3000	0.4714

PROCESO 6.

Stream Name		S1	S2	S3
Stream Description				
Phase		Liquid	Vapor	Liquid
Temperature	°C	110.00	113.00	113.00
Pressure	KG/CM2	1.00	1.00	1.00
Flowrate	KG- MOL/HR	1504.0000	413.2821	1090.7178
Composition				
H2O		0.3700	0.5107	0.3167
OCTANE		0.6300	0.4893	0.6833

PROCESO 7.

Stream Name		S1	S2	S3
Stream Description				
Phase		Mixed	Vapor	Liquid
Temperature	°C	70.00	72.00	72.00
Pressure	KG/CM2	1.00	1.00	1.00
Flowrate	KG- MOL/HR	6153.3301	2465.8940	3687.4358
Composition				
ACETONE		0.3846	0.5145	0.2978
BUTANOL		0.0769	0.0177	0.1165
BENZENE		0.53845	0.46778	0.58571

PROCESO 8.

Stream Name		S1	S2	S3	S4
Stream Description					
Phase		Mixed	Vapor	Vapor	Mixed
Temperature	°C	150.00	200.00	300.00	99.10
Pressure	KG/CM2	1.00	1.00	1.00	1
Flowrate	KG- MOL/HR	907.18	1000.00	907.18	1000.00
Composition					
NH3		0.3200	0.0000	0.3200	0
ETHANOL		0.3400	0.0000	0.3400	0
BENZOIC		0.3400	0.0000	0.3400	0
H2O		0	1	0	1

PROCESO 9.

Stream Name		S1	S2	S3	S4	S5
Stream Description						
Phase		Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor
Temperature	°C	120.00	80.00	120.00	80.00	101.99
Pressure	KG/CM2	1.00	1.00	1.00	1	1
Flowrate	KG- MOL/HR	0.20	0.35	0.20	0.35	0.5500
Composition						
BUTANOL		1.0000	0.0000	1.0000	0	0.3636
ETHANOL		0.0000	1.0000	0.0000	1	0.6364

PROCESO 10.

Stream Name		S1	S2	S3
Stream Description				
Phase		Vapor	Vapor	Vapor
Temperature	°F	100.00	100.00	100.00
Pressure	PSIA	14.00	14.00	14.00
Flowrate	LB- MOL/HR	75.0000	95.0000	170.0000
Composition				
N2		0.7910	0.4347	0.5919
O2		0.0170	0.0653	0.0440
SO2		0.192	0.5	0.3641

PROCESO 11.

Stream Name		S1	S2	S3	S4
Stream Description					
Phase		Vapor	Vapor	Vapor	Liquid
Temperature	°K	400	200.0000	347.9171	347.9171
Pressure	KPA	98	98.0000	98.0000	98.0000
Flowrate	KG- MOL/HR	240.000	360.0000	589.2233	10.7768
Composition					
METHANE		0	0.1667	0.1018	0.0002
CO2		0	0.3333	0.2036	0.0012
H2		0	0.5000	0.3055	0.0003
H2O		1	0.0000	0.3891	0.9984

PROCESO 12.

Stream Name		S1	S2	S3
Stream Description				
Phase		Liquid	Vapor	Liquid
Temperature	°K	366.4833	379.5500	379.5500
Pressure	KPA	137.9	137.9	137.9
Flowrate	KG- MOL/HR	1000.00	500.0217	499.9784
Composition				
ETHANOL		0.3333	0.4457	0.2210
PROPANOL		0.3333	0.3379	0.3287
BUTANOL		0.3333	0.2164	0.4503

PROCESO 13.

Stream Name		S1	S2	S3	S4	S5
Stream Description						
Phase		Vapor	Vapor	Vapor	Vapor	Vapor
Temperature	°F	699.9999	699.9999	699.9999	699.9999	699.9999
Pressure	PSIA	15.0000	15.0000	15.0000	15.0000	15.0000
Flowrate	LB- MOL/HR	283.7400	790.6976	567.4420	358.1345	2000.0140
Composition						
H2SO4		0.8000	0.0000	0.3000	0.1000	0.2165
HNO3		0.0000	0.8000	0.1000	0.1000	0.3626
H2O		0.1600	0.2000	0.6000	0.7200	0.4009
AR		0.0400	0.0000	0.0000	0.0800	0.0200

PROCESO 14.

Stream Name		S1	S2	S3
Stream Description				
Phase		Mixed	Vapor	Liquid
Temperature	°C	25	19.9821167	19.9821167
Pressure	KG/CM2	2	2	2
Flowrate	KG-MOL/HR	1000.00	353.462	646.538
Composition				
PROPANE		0.200	0.396	0.093
IBUTANE		0.300	0.389	0.251
IPENTANE		0.200	0.100	0.255
PENTANE		0.300	0.116	0.401

PROCESO 15.

Stream Name		S1	S2	S3	S4
Stream Description					
Phase		Vapor	Vapor	Liquid	Mixed
Temperature	°C	400.000031	120	25.0000	99.1037293
Pressure	KG/CM2	2	2	1	1
Flowrate	KG- MOL/HR	100.00	100.00	10.00	10
Composition					
METHANE		0.60	0.60	0	0
H2O		0.40	0.40	1	1

Unidades múltiples.

PROCESO 16.

Stream Name		S1	S2	S3	S4	S5	S6
Stream Description							
Phase		Liquid	Vapor	Liquid	Liquid	Liquid	Mixed
Temperature	°C	100.00	142.95	25.00	70.00	142.95	119.75
Pressure	KG/CM2	2.0000	2.0000	1.0000	1.0000	2	2
Flowrate	KG-MOL/HR	1000.00	500.24	1000.00	1000.00	499.76	500.24
Composition							
H2O		0.7500	0.9995	1.0000	1.0000	0.5002	0.9995
H2SO4		0.2500	0.0005	0.0000	0.0000	0.4998	0.0005

PROCESO 17.

Stream Name		S1	S2	S3	S4	S5
Stream Description						
Phase		Vapor	Vapor	Liquid	Vapor	Liquid
Temperature	°K	400	315.5	315.5	318	318
Pressure	KPA	10	10	10	10	10
Flowrate	KG-MOL/HR	1000.00	527.593	472.408	89.0121	383.3955
Composition						
BENZENE		0.300	0.426	0.159	0.3440	0.1164
TOLUENE		0.550	0.516	0.589	0.5788	0.5908
OXYLENE		0.150	0.058	0.252	0.0772	0.2928

PROCESO 18.

Stream Name		S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7
Stream Description								
Phase		Liquid	Vapor	Liquid	Liquid	Liquid	Vapor	Liquid
Temperature	°C	50	67	67	50	61.5287	69.4136	69.4136
Pressure	KG/CM2	1	1	1	1	1	1	1
Flowrate	KG-MOL/HR	100.0001	38.4779	61.5221	30.0000	91.5221	30.0000	61.5221
Composition								
ACETONE		0.5	0.6242	0.4223	0.3000	0.3822	0.5101	0.3199
ETHANOL		0.5	0.3758	0.5777	0.7000	0.6178	0.4899	0.6801

PROCESO 19.

Stream Name		S1	S2	S3	S4	S5
Stream Description						
Phase		Liquid	Liquid	Liquid	Vapor	Liquid
Temperature	°K	300	300	300	335	335
Pressure	KPA	15	15	15	15	15
Flowrate	KG-MOL/HR	620	741	1361	474.4039	886.5961
Composition						
HEPTANE		0.7000	0.2000	0.4278	0.6343	0.3173
EBENZENE		0.3000	0.8000	0.5722	0.3657	0.6827

PROCESO 20.

Stream Name		S1	S2	S3	S4	S5	S6	S7	S8	S9	S10
Stream Description											
Phase		Mixed	Vapor	Liquid	Vapor	Liquid	Vapor	Liquid	Vapor	Liquid	Mixed
Temperature	°K	240.000	240.000	240.000	241.000	241.000	241.500	241.500	242.000	242.000	275.055
Pressure	KPA	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000
Flowrate	KG-MOL/HR	1000.000	47.020	952.980	35.551	917.430	16.159	901.271	15.204	886.067	500.532
Composition											
CHLORINE		0.5000	0.9996	0.4754	0.9995	0.4550	0.9995	0.4453	0.9995	0.4358	0.9799
H2O		0.5000	0.0004	0.5246	0.0005	0.5450	0.0005	0.5547	0.0005	0.5642	0.0201

Stream Name		S11	S12	S13	S14	S15	S16	S17	S18	S19	S20
Stream Description											
Phase		Vapor	Liquid								
Temperature	°K	251.000	251.000	256.000	256.000	262.000	262.000	265.000	265.000	272.000	272.000
Pressure	KPA	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000
Flowrate	KG-MOL/HR	171.975	714.092	50.570	663.522	41.153	622.370	15.403	606.966	27.302	579.664
Composition											
CHLORINE		0.9985	0.3002	0.9976	0.2471	0.9958	0.1976	0.9946	0.1774	0.9903	0.1391
H2O		0.0015	0.6998	0.0024	0.7529	0.0042	0.8024	0.0054	0.8226	0.0097	0.8609

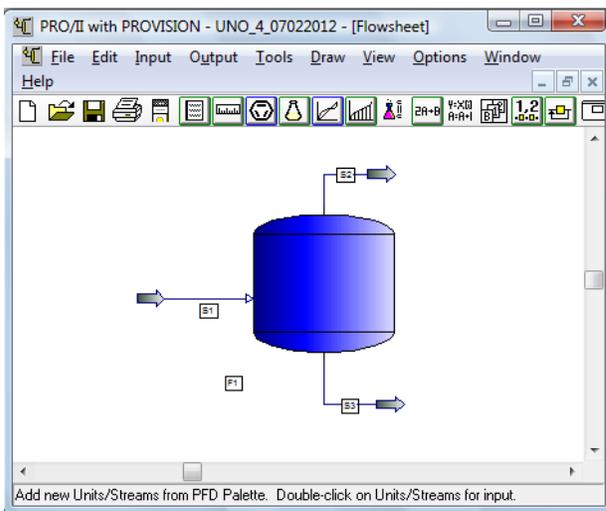
Stream Name		S21	S22	S23	S24	S25	S26	S27	S28	S29	S30
Stream Description											
Phase		Vapor	Liquid								
Temperature	°K	275.000	275.000	279.000	279.000	286.000	286.000	297.000	297.000	312.000	312.000
Pressure	KPA	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000	50.000
Flowrate	KG- MOL/HR	8.973	570.691	10.146	560.545	14.042	546.503	15.860	530.643	15.166	515.477
Composition											
CHLORINE		0.9878	0.1257	0.9835	0.1102	0.9730	0.0880	0.9445	0.0624	0.8665	0.0388
H2O		0.0122	0.8743	0.0165	0.8898	0.0270	0.9120	0.0555	0.9376	0.1335	0.9612

Stream Name	S31	S32
Stream Description		
Phase	Vapor	Liquid
Temperature	330.5	330.5
Pressure	50	50
Flowrate	16.0083466	499.468475
Composition		
CHLORINE	0.6543	0.0190
H2O	0.3457	0.9810

6. Análisis de resultados

Para el análisis de resultados se seleccionaron sólo diez procesos de los veinte propuestos; en los cuales además del análisis se muestra nuevamente la interfaz grafiza del DFP, la tabla de balance arrojada por el simulador y la tabla de balance de los cálculos realizados a mano, para hacer una comparación de resultados de ambas. Los criterios de aceptación o rechazo para los resultados obtenidos, es que se deben cumplir los requerimientos solicitados en el enunciado de cada proceso.

PROCESO UNO.

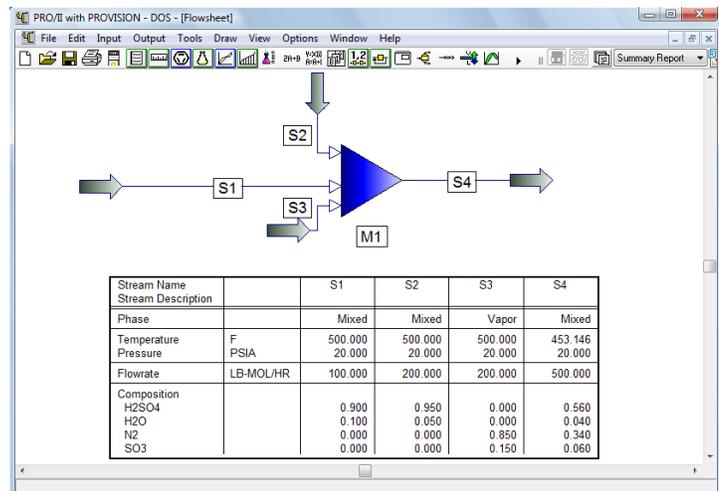


En la descripción solo nos dan los tres componentes que participan, el flujo de alimentación al tanque y la temperatura y presión a la cual se desarrolla el proceso, como no nos piden concentraciones específicas para alguno de ellos en el destilado o en el residuo, solo es necesario introducir los datos correctamente en el programa para que se realice la

simulación de la separación. No se pueden realizar cálculos a mano por falta de especificaciones a la salida del equipo.

PROCESO DOS.

El proceso consta de una mezcla de cuatro componentes diversos, de los cuales se tienen ciertas especificaciones, se deben calcular las composiciones finales de cada uno, entonces tenemos:



Datos obtenidos en el simulador:

Stream Name		S1	S2	S3	S4
Phase		Mixed	Mixed	Vapor	Mixed
Temperature	°F	500	500	500	453.15
Pressure	PSIA	20.00	20.00	20.00	20.00
Flowrate	LB- MOL/HR	100	200	200	500
Composition					
H2SO4		0.9000	0.9500	0.0000	0.5600
H2O		0.1000	0.0500	0.0000	0.0400
N2		0.0000	0.0000	0.8500	0.3400
SO3		0.0000	0.0000	0.1500	0.0600

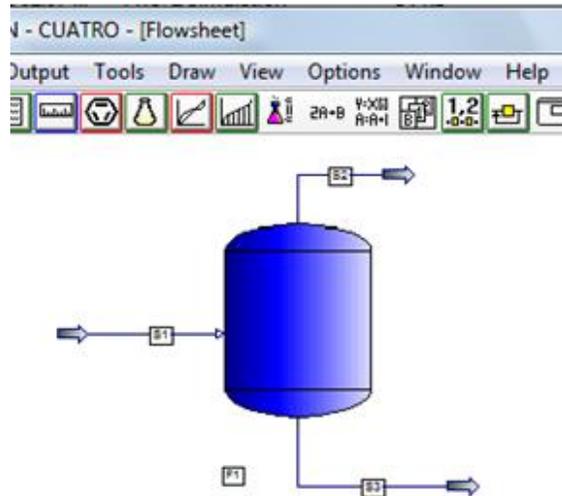
Datos calculados manualmente:

Corriente	S1		S2		S3		S4	
	Composición	Flujo lbmol/hr	Composición	Flujo lbmol/hr	Composición	Flujo lbmol/hr	Composición	Flujo lbmol/hr
H ₂ SO ₄	0.9		0.95		-	-	0.56	280
H ₂ O	0.1		0.05		-	-	0.04	20
N ₂	-	-	-	-	0.85	170	0.34	170
SO ₃	-	-	-	-	0.15	30	0.06	30
Σ=	1	100	1	200	1	200	1	500

Como se puede observar en los datos contenidos en las tablas, las cantidades de los flujos y las concentraciones de cada componente son idénticas, esto es porque se trata tan solo de una operación de mezclado, independientemente del número de alimentaciones y de salidas; las cantidades solo deberán sumarse y al final solo se hace una relación de fracciones por componente.

PROCESO CUATRO.

Se tiene una corriente formada por Etanol al 65% y Agua; se necesita obtener 85% de alcohol alimentado, en el destilado, entonces:



Datos obtenidos en el simulador:

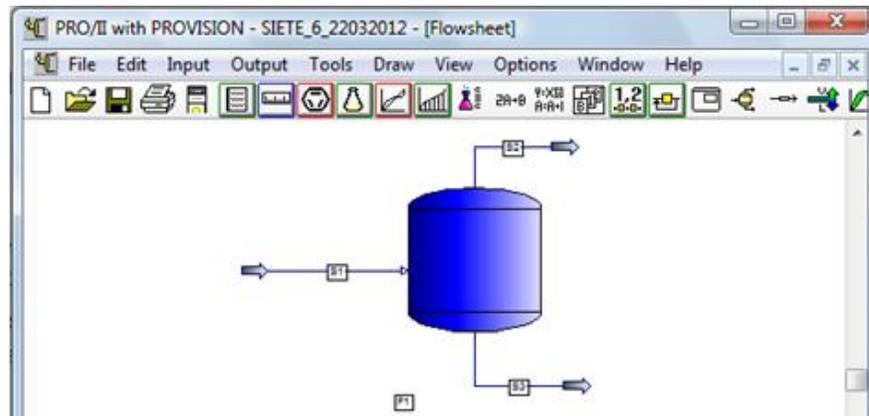
Stream Name		S1	S2	S3
Stream Description				
Phase		Liquid	Vapor	Liquid
Temperature	°C	90	105.5	105.5
Pressure	KG/CM2	2.00	2.00	2.00
Flowrate	KG-MOL/HR	500.0000	404.5511	95.4489
Composition				
EA		0.6500	0.6858	0.4982
H2O		0.3500	0.3142	0.5018

Datos calculados manualmente:

Corriente	S1		S2		S3	
	Composición	Flujo lbmol/hr	Composición	Flujo lbmol/hr	Composición	Flujo lbmol/hr
ETOH	0.65	325	0.9132	276.25	0.2468	48.75
H2O	0.35	175	0.0867	26.25	0.7531	148.75
$\Sigma=$	1	500	1	302.5	1	197.5

En este proceso nos piden que bajo esas condiciones, se logren obtener al menos 276.25 Kgmol/hr de etanol en el destilado. Lo que efectivamente se logra aunque otra vez los flujos totales y las composiciones de ambas tablas no sea la misma (existe una pequeña variación), el objetivo que se pretende alcanzar en esta separación, se cumple.

PROCESO SIETE.



Datos obtenidos en el simulador:

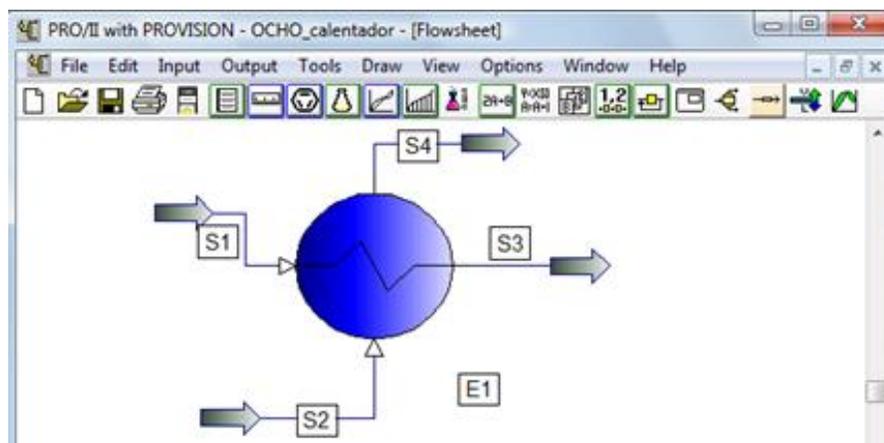
Stream Name		S1	S2	S3
Stream Description				
Phase		Mixed	Vapor	Liquid
Temperature	°C	70.00	72.00	72.00
Pressure	KG/CM2	1.00	1.00	1.00
Flowrate	KG-MOL/HR	6153.3301	2465.8940	3687.4358
Composition				
ACETONE		0.3846	0.5145	0.2978
BUTANOL		0.0769	0.0177	0.1165
BENZENE		0.53845	0.46778	0.58571

Datos calculados manualmente:

Corriente	S1		S2		S3	
	Composición	Flujo lbmol/hr	Composición	Flujo lbmol/hr	Composición	Flujo lbmol/hr
Acetona	0.3799	2338.26	0.3587	1268.70	0.4087	1069.55
Butanol	0.0899	553.79	0.0418	148.18	0.1550	405.61
Benceno	0.5299	3261.26	0.5993	2119.81	0.4362	1141.44
$\Sigma=$	0.9997	6153.33	0.9998	3536.69	0.9999	2616.60

En el balance de este proceso se observa que similar al caso anterior, los flujos de destilado y fondo, así como las concentraciones varía, pero los requerimientos del enunciado se cumplen.

PROCESO OCHO.



Como el objetivo de este proyecto es realizar balances de materia, y este proceso consta de tan solo un intercambiador de calor, el balance realmente quedaría así:

Datos calculados manualmente:

Corriente	S1		S2	
	Composición	Flujo Kgmol/hr	Composición	Flujo Kgmol/hr
NH ₃	0.32	290.29	-	-
Etanol	0.34	308.44	-	-
Ac. Benzoico	0.34	308.44	-	-
Agua	-	-	1	1000
Σ=	1	6153.33	1	1000

Datos obtenidos en el simulador:

Stream Name		S1	S2	S3	S4
Stream Description					
Phase		Mixed	Vapor	Vapor	Mixed
Temperature	°C	150.00	200.00	300.00	99.10
Pressure	KG/CM2	1.00	1.00	1.00	1
Flowrate	KG- MOL/HR	907.18	1000.00	907.18	1000.00
Composition					
NH3		0.3200	0.0000	0.3200	0
ETHANOL		0.3400	0.0000	0.3400	0
BENZOIC		0.3400	0.0000	0.3400	0
H2O		0	1	0	1

Como se trata solo de un equipo, en el cual realmente no existe una separación o alguna mezcla; las cantidades de las alimentaciones, es la misma que las mismas de las salidas.

PROCESO DOCE.

En este proceso se nos pide de igual manera calcular las composiciones y concentraciones de los componentes de la mezcla los cuales se encuentran concentrados de manera equimolar, la mezcla debe separarse en partes iguales, entonces:

Datos obtenidos en el simulador:

Stream Name		S1	S2	S3
Stream Description				
Phase		Liquid	Vapor	Liquid
Temperature	°K	366.4833	379.5500	379.5500
Pressure	KPA	137.9	137.9	137.9
Flowrate	KG- MOL/HR	1000.00	500.0217	499.9784
Composition				
ETHANOL		0.3333	0.4457	0.2210
PROPANOL		0.3333	0.3379	0.3287
BUTANOL		0.3333	0.2164	0.4503

Datos calculados manualmente:

Corriente	S1		S2		S3	
	Composición	Flujo Kgmol/hr	Composición	Flujo Kgmol/hr	Composición	Flujo Kgmol/hr
Etanol	0.3333	333.33	0.44	220	0.2273	113.3
Propanol	0.3333	333.33	0.34	173.3	0.32	160
Butanol	0.3333	333.33	0.21	108.3	0.45	225
Σ=	0.9999	1000	0.99	501.6	0.9973	498.3

Partiendo de la separación en partes iguales que nos pide el enunciado, es decir 500 Kgmol/hr, y a partir de las concentraciones que ya nos dan de referencia, calcular el resto de las composiciones y el resto de los flujos; es así como se llega

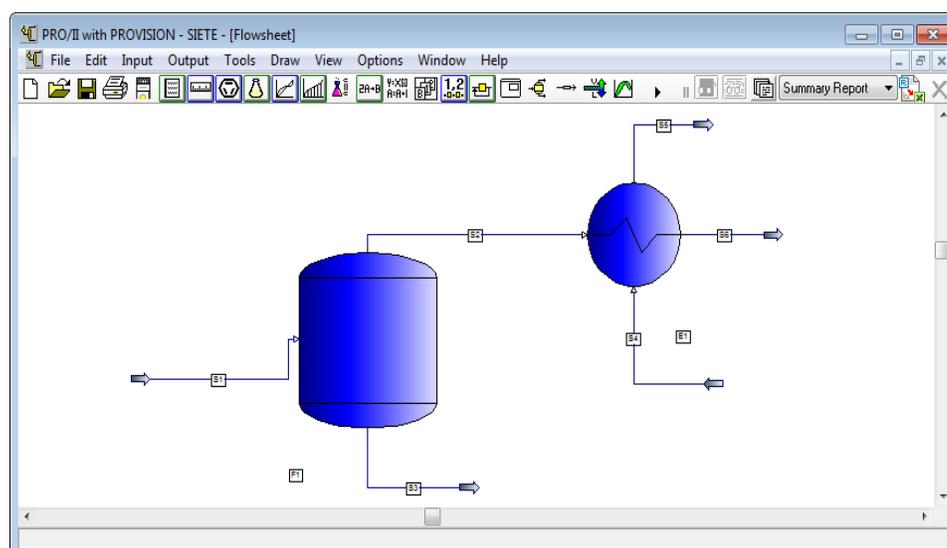
a las verdaderas cantidades de flujo para el destilado y el residuo, 501.6 y 498.3 Kgmol/hr respectivamente.

PROCESO QUINCE.

En este proceso como se trata de igual manera de un solo intercambiador de calor, no es necesario realizar un balance de materia como tal puesto que las salidas del equipo son en cantidad las mismas que las alimentaciones, entonces los resultados serían los mismos a estos:

Stream Name		S1	S2	S3	S4
Stream Description					
Phase		Vapor	Vapor	Liquid	Mixed
Temperature	°C	400.000031	120	25.0000	99.1037293
Pressure	KG/CM2	2	2	1	1
Flowrate	KG-MOL/HR	100.00	100.00	10.00	10
Composition					
METHANE		0.60	0.60	0	0
H2O		0.40	0.40	1	1

PROCESO DIECISÉIS.



En este proceso que cuenta con dos equipos, un tanque flash y un intercambiador de calor, realmente solo se necesita hacer el balance para el tanque flash, y de acuerdo a lo que nos pide el enunciado, los resultados quedarían así:

Datos calculados manualmente:

Corriente	S1		S2		S3	
	Composición	Flujo Kgmol/hr	Composición	Flujo Kgmol/hr	Composición	Flujo Kgmol/hr
H ₂ SO ₄	0.25	250	0.01	5.05	0.4948	244.05
H ₂ O	0.75	750	0.99	500	0.5052	250
Σ=	1	1000	1	505.05	1	494.95

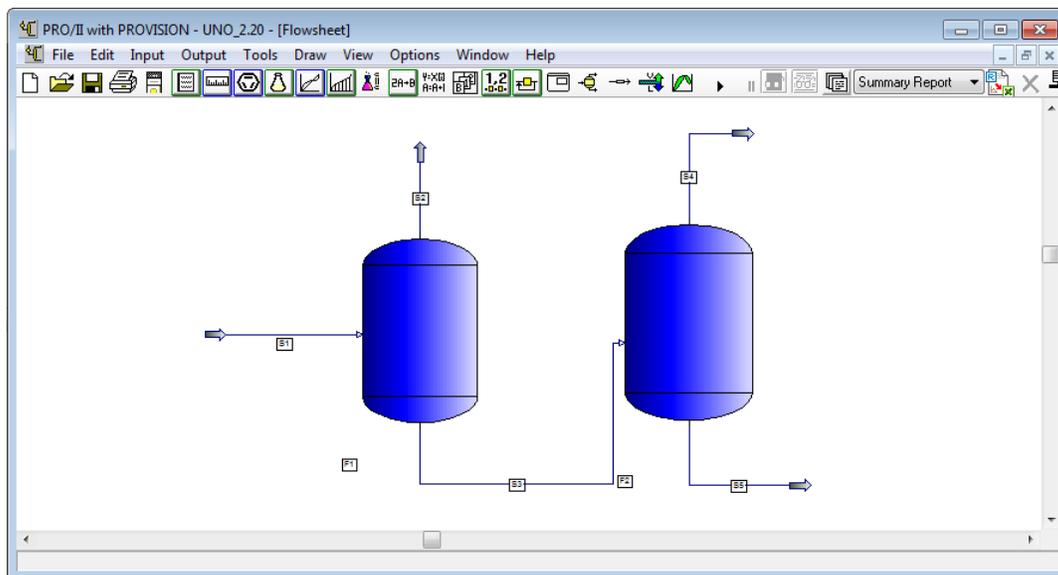
Corriente	S4		S5		S6	
	Composición	Flujo Kgmol/hr	Composición	Flujo Kgmol/hr	Composición	Flujo Kgmol/hr
H ₂ SO ₄	0	0	0	0	0.01	5.05
H ₂ O	1	1000	1	1000	0.99	500
Σ=	1	1000	1	1000	1	505.05

Datos obtenidos en el simulador:

Stream Name		S1	S2	S3	S4	S5	S6
Stream Description							
Phase		Liquid	Vapor	Liquid	Liquid	Liquid	Mixed
Temperature	°C	100.00	142.95	25.00	70.00	142.95	119.75
Pressure	KG/CM2	2.0000	2.0000	1.0000	1.0000	2	2
Flowrate	KG-MOL/HR	1000.00	500.24	1000.00	1000.00	499.76	500.24
Composition							
H ₂ O		0.7500	0.9995	1.0000	1.0000	0.5002	0.9995
H ₂ SO ₄		0.2500	0.0005	0.0000	0.0000	0.4998	0.0005

Observar que los datos de ambas tablas son los mismos, el balance realizado para el tanque nos arroja las mismas cantidades que el simulador, los resultados cumplen con los requerimientos del enunciado.

PROCESO DIECISIETE



El proceso consta de dos tanques flash; como no se conoce el dato del flujo de la alimentación partimos de que son 1000 Kgmol/hr. El residuo de la primera columna es la alimentación de la segunda, entonces se tiene que hacer el balance para cada una de las columnas, iniciando con la primera:

Corriente	S1		S2		S3	
	Composición	Flujo Kgmol/hr	Composición	Flujo Kgmol/hr	Composición	Flujo Kgmol/hr
Benceno	0.3	300	0.4281	224.7	0.1584	75.3
Tolueno	0.55	550	0.5135	269.5	0.5902	280.5
Xileno	0.15	150	0.0583	30.6	0.2512	119.39
Σ=	1	1000	0.9999	524.8	0.9998	475.19

Y para la columna dos:

Corriente	S3		S4		S5	
	Composición	Flujo Kgmol/hr	Composición	Flujo Kgmol/hr	Composición	Flujo Kgmol/hr
Benceno	0.1584	75.3	0.3423	30	0.1180	45.3
Tolueno	0.5902	280.5	0.5789	50.73	0.5888	225.97
Xileno	0.2512	119.39	0.0786	6.89	0.3	112.5
Σ=	0.9998	475.19	0.9998	87.63	1	383.77

Datos obtenidos en el simulador:

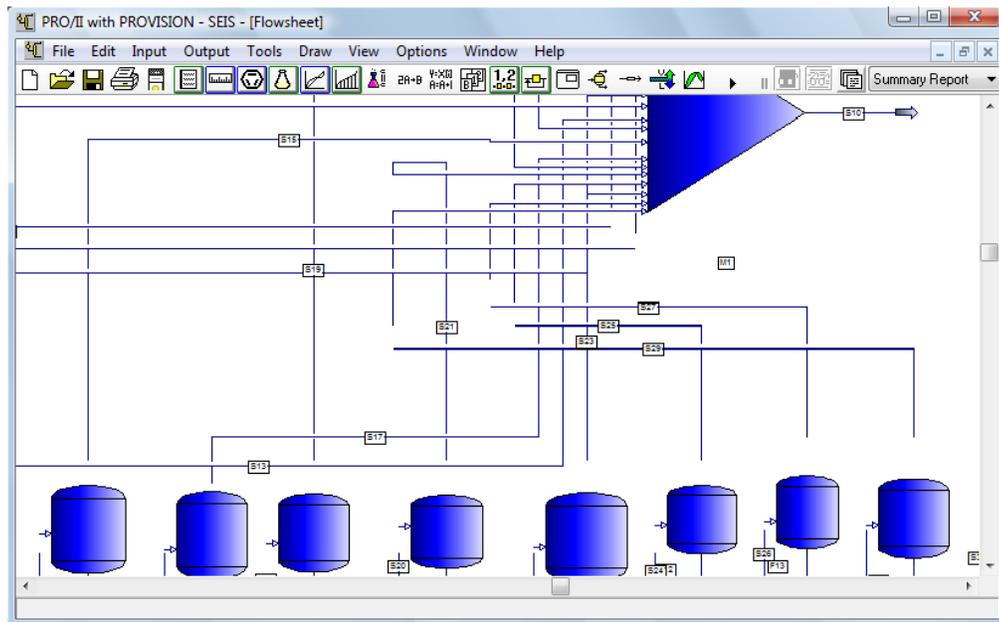
Stream Name		S1	S2	S3	S4	S5
Stream Description						
Phase		Vapor	Vapor	Liquid	Vapor	Liquid
Temperature	°K	400	315.5	315.5	318	318
Pressure	KPA	10	10	10	10	10
Flowrate	KG-MOL/HR	1000.00	527.593	472.408	89.0121	383.3955
Composition						
BENZENE		0.300	0.426	0.159	0.3440	0.1164
TOLUENE		0.550	0.516	0.589	0.5788	0.5908
OXYLENE		0.150	0.058	0.252	0.0772	0.2928

Analizando los resultados se puede comprobar que efectivamente se cumplen todos los requerimientos del enunciado, así como también que coinciden con una variación muy pequeña los datos de una tabla y la otra.

PROCESO VEINTE.

Los requerimientos del enunciado son obtener un tren de separación de hasta quince tanques en los cuales; al final, se logren obtener nuevamente las mismas

cantidades de alimentación de cada componente, es decir: 500 Kgmol/hr de Agua y 500 Kgmol/hr de Cloro. En este proceso no es posible realizar un balance de materia porque no se cuenta con los datos necesarios para desarrollar el tren de separación, este ejercicio solo debe ser realizado directamente en el programa.



Los resultados obtenidos de los balances de masa de los veinte procesos sugeridos realizados en el simulador varían en algunos casos con los resultados que se obtienen de realizar el balance de masa a mano o del resultado reportado en los libros, ya que en el simulador intervienen variables como la presión y la temperatura que pueden de alguna manera modificarlos resultados.

Es importante señalar que los DFP's que elaboren los alumnos en el momento de resolver los ejercicios no siempre van a coincidir con los DFP's con los que se obtuvieron estos resultados, respecto al orden de las corrientes. Esto no ocasionará problema si se hace la especificación correcta de cada corriente y se entiende perfectamente lo que esté sucediendo en el proceso. Sin embargo, siempre y cuando el número de las corrientes y las condiciones de cada una de ellas sea correcto, los resultados van a coincidir en todos los casos.

En algunos casos particulares donde se lleve a cabo una separación, puede que la separación se dé a una composición de 0.998 y 0.002 por componente respectivamente, sin embargo en un aumento de grado de temperatura, el flujo para esa corriente aumenta significativamente manteniéndose hasta cierta temperatura la misma composición, por ello es importante entender cuál es el problema a resolver y cuáles son las condiciones de lo que se quiere obtener como producto, para que así sea más fácil la manipulación de las condiciones de operación y más fácilmente se obtenga el resultado más óptimo.

Algunas recomendaciones que se consideran importantes para la realización de simulaciones como las que se presentan en este trabajo son:

- ✓ Revisar siempre las composiciones iniciales de cada ejercicio, si es una mezcla o una separación, observar detalladamente cómo es que cambia la concentración.
- ✓ Miscellaneos es la base que contiene a la mayoría de los compuestos. O al menos a algunos de los que no aparecen en los más usados comúnmente.
- ✓ Para los ejercicios que sean de separación, como por ejemplo un tanque flash, el simulador de procesos posee una herramienta (Display BVLE) que nos muestra en una gráfica (T-xy) el comportamiento de las concentraciones de los componentes a una presión dada, ésta se puede utilizar como apoyo en la obtención de la temperatura adecuada para lograr una óptima separación.
- ✓ Después de que se haya elaborado el DFP del proceso o de la operación, al momento de que selecciones los componentes que participarán, no se debe olvidar ordenarlos por sus respectivos pesos moleculares.

7. Conclusiones

Día a día se puede observar el acelerado crecimiento de la tecnología aplicada a diversas disciplinas, en Ingeniería Química no es la excepción, ya que el inmenso mundo de la computación nos ofrece herramientas que sirven de apoyo en la toma de decisiones que tienen que ver directamente con el diseño de procesos. La simulación es de gran importancia ya que en una simple corrida del programa se puede predecir cualquier comportamiento del proceso.

El presente trabajo es una herramienta de mucho apoyo que debe de estar al alcance de los alumnos que cursan a partir del cuarto semestre, ya que ayuda de una manera muy práctica a la comprensión de la resolución de balances de materia, incluye una breve pero suficiente metodología de cómo se realiza un balance de masa en el simulador desde el diseño del DFP hasta la obtención de resultados, usando el simulador de procesos para la resolución de los problemas propuestos.

Se desarrollaron en total 23 procesos con equipos iguales a los que se resuelven en la materia de Balance de masa y energía, de los cuales, cinco se explican paso a paso para poder comenzar a utilizar el simulador de procesos; tres procesos básicos y dos complejos. Después se sugiere la resolución de quince procesos en unidades simples, para posteriormente finalizar con la resolución de cinco procesos los cuales constan de más de un equipo, esto es, con un grado de complejidad un poco mayor.

Cabe señalar que el desarrollo de este trabajo se limitó al uso de sólo los equipos que ofrece el programa y que además coinciden con los que el alumno utiliza en clase, ya que por ejemplo aunque en la materia se contemplen balances en equipos como por ejemplo una columna de absorción o una columna de destilación; el alumno para poder ejecutar los procesos en el simulador, deberá aplicar conceptos de Diseño de equipo de separación o de Transferencia de masa, los cuales no adquiere hasta a partir de séptimo semestre, o como también, en clase se realizan balances de materia con reacción química, este tipo de procesos solo se resuelven en reactores químicos, y como comento los alumnos no podrán utilizar este tipo de equipos sin aplicar conceptos que aprenderán más adelante. Respecto a lo anterior, es importante señalar que si se realizan procesos en los que los componentes reaccionan, esto no lo detectará el programa si no se realiza la simulación en alguno de los tipos de reactores que ofrece el simulador; es decir, si se ponen en contacto en un mezclador dos componentes que de antemano sabemos que reaccionan, el programa no detectará la reacción, realizara la operación como si fueran componentes que no reaccionan.

De acuerdo a los objetivos planteados al inicio de este proyecto se puede concluir que exitosamente se cumplieron los tres primeros, en el presente trabajo se han descrito los fundamentos del balance de materia, así como se ha establecido una amplia metodología para hacer uso del simulador de procesos, la cual consta de cinco procesos de diferente complejidad, desarrollados paso a paso para facilitar la comprensión de la resolución de problemas de balance empleando un simulador de procesos. Se seleccionaron veinte procesos de diferente grado de complejidad para que sean modelados en el simulador PRO II, se presentan los resultados obtenidos y la interfaz gráfica de cada uno.

Respecto a las limitantes que se puedan presentar al emplear un simulador de procesos, no se pueden conocer a ciencia cierta hasta que se haya aplicado el material que se propone; sin embargo, algunas de ellas pueden ser que no todos los alumnos comprendan rápidamente el uso del simulador a algunos les costará un poco más de esfuerzo, además de que es el único simulador con que cuenta la Facultad, después de un tiempo la demanda de conocimientos obligará a adquirir otro software más

A pesar de las limitantes, se considera que la información presentada es suficiente para introducir al alumno en el mundo de la simulación. Respecto a la obtención de resultados se observa que existe una variación mínima en los resultados de los procesos resueltos a mano con los que arroja el simulador, ya que como se explicó, el simulador reconoce aspectos tales como temperaturas y presión lo cual de alguna manera pueden intervenir en la obtención de valores de los balances de masa.

APÉNDICE A

Tabla de algunas equivalencias utilizadas en Ingeniería.

Longitud	cm	metro	km	in	ft	mi
1 centímetro	1	10^{-2}	10^{-5}	0.3937	3.281×10^{-2}	6.214×10^{-6}
1 metro	100	1	10^{-3}	39.37	3.281	6.214×10^{-4}
1 kilómetro	10^5	1000	1	3.937×10^4	3281	0.6214
1 pulgada	2.540	2.540×10^{-2}	2.540×10^{-5}	1	8.333×10^{-2}	1.578×10^{-5}
1 pie	30.48	0.3048	3.048×10^{-4}	12	1	1.894×10^{-4}
1 milla	1.609×10^5	1609	1.609	6.336×10^4	5280	1

Área	metro ²	cm ²	ft ²	in ²
1 metro cuadrado	1	10^4	10.76	1550
1 centímetro cuadrado	10^{-4}	1	1.076×10^{-3}	0.1550
1 pie cuadrado	9.290×10^{-2}	929.0	1	144
1 pulgada cuadrada	6.452×10^{-4}	6.452	6.994×10^{-3}	1

Volumen	m ³	cm ³	L	ft ³	in ³
1 metro cúbico	1	10^6	1000	35.31	6.102×10^4
1 centímetro cúbico	10^{-6}	1	1.000×10^{-3}	3.351×10^{-5}	6.102×10^{-2}
1 litro	1.000×10^{-3}	1000	1	3.351×10^{-2}	61.02
1 pie cúbico	2.832×10^{-2}	2.832×10^{-4}	28.32	1	1728
1 pulgada cúbica	1.639×10^{-5}	16.39	1.639×10^{-2}	5.787×10^{-4}	1

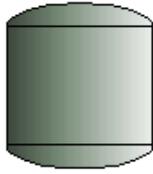
Masa	g	kilogramo	slug	u	oz	lb	ton
1 gramo	1	0.001	6.852×10^{-5}	6.022×10^{23}	3.527×10^{-2}	2.205×10^{-3}	1.102×10^{-6}
1 kilogramo	1000	1	6.852×10^{-2}	6.022×10^{26}	35.27	2.205	1.1022×10^{-3}
1 slug	1.459×10^4	14.59	1	8.786×10^{27}	514.8	32.07	1.609×10^{-2}
1 u	1.661×10^{-24}	1.661×10^{-27}	1.138×10^{-28}	1	5.857×10^{-26}	3.662×10^{-27}	1.830×10^{-30}
1 onza	28.35	2.835×10^{-2}	1.943×10^{-3}	1.718×10^{25}	1	6.250×10^{-2}	3.125×10^{-5}
1 libra	453.6	0.4536	3.108×10^{-2}	2.732×10^{26}	16	1	0.0005
1 ton	9.072×10^5	907.2	62.16	5.463×10^{29}	3.2×10^4	2000	1

Presión	atm	dina/cm2	inH2O	cmHg	pascal	lb/in2	lb/2
1 atmósfera	1	1.013×10^6	406.8	76	1.013×10^5	14.7	2116
1 dina por cm2	9.869×10^7	1	4.015×10^{-4}	7.501×10^{-5}	0.1	1.405×10^{-5}	2.089×10^{-3}
1 in de agua 4°C	2.458×10^{-3}	2491	1	0.1868	249.1	3.613×10^{-2}	5.202
1 cmHg a 0°C	1.316×10^{-2}	1.333×10^4	5.353	1	13333	0.1934	27.85
1 pascal	9.869×10^{-6}	10	4.015×10^{-3}	7.501×10^{-4}	1	1.450×10^{-4}	2.089×10^{-2}
1 libra por in2	6.805×10^{-2}	6.985×10^4	27.68	5.171	6.985×10^3	1	144
1 libra por ft2	4.725×10^{-4}	478.8	0.1922	3.591×10^{-2}	47.88	6.944×10^{-3}	1

Fuerza	dina	newton	lb	pdl	gf	kgf
1 dina	1	10^{-5}	2.248×10^{-6}	7.233×10^{-5}	1.020×10^{-3}	1.020×10^{-6}
1 newton	10^5	1	0.2248	7.233	102.0	0.1020
1 libra	4.448×10^5	4.448	1	32.17	453.6	0.4536
1 poundal	1.383×10^4	0.1383	3.108×10^{-2}	1	14.10	1.410×10^{-2}
1 gramo fuerza	980.7	9.807×10^{-3}	2.205×10^{-3}	7.093×10^{-2}	1	
1 kilogramo fuerza	9.807×10^5	9.807	2.205	70.93	1000	0.001

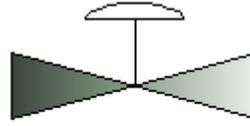
APÉNDICE B

Equipos que nos ofrece el simulador de procesos PRO II.



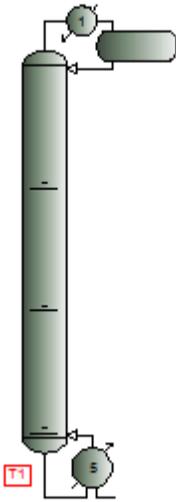
F1

Flash



V1

Valve



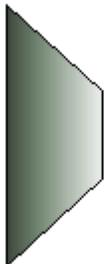
T1

Distillation



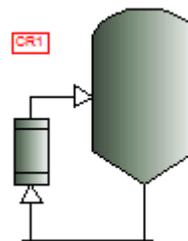
P1

Pipe



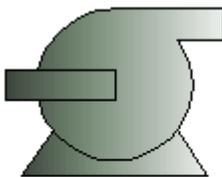
C1

Compressor



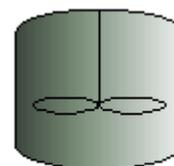
CR1

Crystallizer



P1

Pump

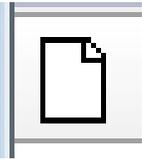
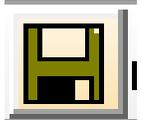
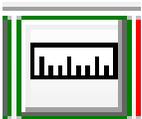
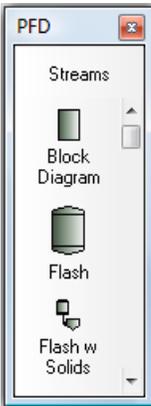


R1

CST
Reactor

APÉNDICE C

Opciones de apoyo disponibles en la barra de herramientas.

	Nuevo		Propiedades de los componentes
	Abrir		Modelo termodinámico
	Guardar		Gráficas para mezclas binarias
	Imprimir		Ejecuta la simulación
	Muestra la herramienta DFP		Elimina equipos o corrientes
	Unidades de medición		Herramienta DFP
	Selección de Componentes		

Para poder cubrir los objetivos antes descritos, se consultaron las siguientes referencias bibliográficas:

1. De la Peña Manrique Ramón (1979); *“Análisis ingenieril de los procesos químicos”*; México, Editorial Limusa.
2. Felder Richard M. (1986), *“Principios elementales de los procesos químicos”*; Nueva York, USA; Editorial Addison-Wesley Iberoamericana.
3. Lewis Rhys, (1976) *“Magnitudes en Ingeniería y sistemas de unidades”*; México; Editorial El Manual Moderno S.A.
4. Reklaitis G. V., *“Balances de material y energía”*; Editorial McGraw-Hill.
5. SIMSCI. (1994), *“PRO VISION” Tutorial Guide*, USA; SIMSCI Simulation Sciences Inc.
6. Valiente Barderas Antonio (1991), *“Problemas de balances de materia y energía”*; México, Editorial Universidad.
7. Henley Ernest J. (2008), *“Cálculo de Balances de Materia y Energía”*; España, Editorial Reverté.
8. Himmelblau David M. (1997), *“Principios Básicos y Cálculos en Ingeniería Química”*; México, Editorial Prentice Hall Iberoamericana, S.A.

9. Hougén O. A. (2008), "Principios de los Procesos Químicos, Balances de Materia y Energía"; España, Editorial Reverté.
10. <http://es.scribd.com/doc/51104349/Simuladores-ASPEN-PLUS-HYSYS-DESIGN-PRO-II-BASES-DE-DATOS>, *Simuladores ASPEN-PLUS. HYSYS. DESIGN. PRO-II. BASES DE DATOS*, (29 de Marzo 2013).
11. http://www.virtual.unal.edu.co/cursos/ingenieria/ana_sim/mod_1/html/contenido10.html, *Análisis y simulación de procesos en estado estable y dinámico. Universidad Nacional de Colombia*, (18 de Octubre 2013)
12. http://iom.invensys.com/LA/pages/SimSci_ProcessEngSuite_PROII.aspx, *PRO II Simulación Integral de Procesos*, (20 de Septiembre 2013).
13. <http://www.itescam.edu.mx/principal/sylabus/fpdb/recursos/r93848.PDF>, *Simulación de Procesos*, (17 de Octubre 2013)
14. <http://www.uaz.edu.mx/cippublicaciones/ricvol4num2tom1/Ciencias%20de%20la%20Salud/LASIMULACION.pdf>, (16 de noviembre 2013)