



**GOBIERNO DE
MÉXICO**

EDUCACIÓN
SECRETARÍA DE EDUCACIÓN PÚBLICA



DEPARTAMENTO DE INGENIERÍA QUÍMICA Y BIOQUÍMICA

B.1.2 ELABORACIÓN DE APUNTES DE ASIGNATURA

Simulación de Procesos

Plan de estudios: 2015

Clave Asignatura: IQD-1023

Dr. Manuel Antonio Borja Salín

No dictamen.

AS-2-043/2023

Revisores

VoBo.

Dra. María del Carmen Carreño de León

VoBo

Dra. Hilda Moreno Saavedra

VoBo

Dr. Vicente Vallejo Puerta

Agosto-2024

Contribución académica:

Si partimos de la pregunta: ¿Cuál es el lenguaje más importante en el mundo que ha impactado tanto en el siglo XX como en el XXI y sigue trascendiendo en nuestras vidas día a día?

¿El esperanto ?, ¿El Inglés ?, ¿El Chino Mandarín, ?, ¿El Ruso?

Definitivamente los “Lenguajes de Programación” son la “Llave Maestra” del desarrollo tecnológico y la interacción entre las organizaciones y los seres vivos.

No podríamos entender la vida de todos los días sin la programación del celular, el refrigerador, el automóvil, la domótica en casa, la televisión, la plancha, la lavadora, la salud, la escuela, el quirófano, robots industriales, líneas de producción acceso a bases de datos, la bio-informática , los viajes espaciales, la poesía, las pinturas y libros hechos con inteligencia artificial y podríamos seguir con esa cotidianidad y así ir descubriendo que se está inmerso en un mundo que se mueve con algo tan sutil y permanente como es **"LA PROGRAMACION"**

Estas herramientas actuales y emergentes seguirán debatiéndose entre lenguajes de programación cada vez más potentes y más simples, paradójicamente.

Dentro de la ciencia de la **Programación** se encuentra la materia de **SIMULACION DE PROCESOS** siendo esta una herramienta que permite emular el comportamiento real mediante un modelo matemático o no.

Esto es valioso porque permite predecir situaciones o eventos que serían "costosos" o inviables reproducirlos en la vida real, permitiendo tomar las decisiones adecuadas con menos incertidumbre., lo ideal sería acceder a laboratorio solo para comprobar que el “Modelo Matemático”, o; cualquier otro modelo propuesto, es verdadero o bien corregirlo para mejorar su grado de aproximación a la solución, o minimizar el grado de desviación. Esto redundaría en optimizar la canalización de recursos al "experimentar" solo el conjunto de experimentos viables, únicamente aquellos con las mejores condiciones de éxito.

En la "Línea de producción" nos permite conocer las características del producto antes de que entre una “gota” de materia prima, por ejemplo, en la industria Automotriz el automóvil es ‘modelado y simulado tanto de forma mecánica, como aerodinámica, eléctrica y económica permitiendo predecir su comportamiento sin haberlo construido.

En Ingeniería Química “Predecir” las mejores variables de operación permite al operario hacer los ajustes necesarios antes de que entre una gota de materia prima.

ANTECEDENTES

Análisis de la contribución de la(s) asignatura(s) de los objetivos educativos del programa educativo al que pertenece la asignatura. (mínimo una cuartilla):

El "Software Libre" tras décadas de desarrollo tanto técnica como filosóficamente ha logrado conjuntar a las mentes más brillante del planeta para realizar su labor altruista de compartir el conocimiento y difundirlo en esas, sus cinco libertades.

Los países del "Primer mundo" en su gran mayoría no compran software lo desarrollan, actualmente se tienen las herramientas suficientes para el desarrollo de aplicaciones con un alto contenido visual y de conocimiento teórico-practico, producto tanto de la experiencia docente, como la práctica de campo e industrial la cual puede ser traducido en aplicaciones de alto contenido tecnico-cientifico como parte de su valor agregado al desarrollo tanto del conocimiento como a la tecnología.

Es en este punto es donde el desarrollo y actualización de la materia de Simulación de Procesos Químicos dentro de la carrera de Ingeniería Química, cobra relevancia, al incorporarse herramientas de última generación al programa de estudio dándole un enfoque práctico y aplicativo en la vida. profesional del estudiante y pensando que estas herramientas le permitirán el emprendimiento de sus propias ideas y desarrollos.

Si se observa las perspectivas de trabajo para un Ingeniero Químico como Desarrollador de Sistemas de Información en los procesos químicos, o productivos en general, no se tiene competencia operativa. es un área casi olvidada, pero fundamental para el desarrollo de una empresa o para crear su propio emprendimiento en beneficio del país.

CAMBIO DE PARADIGMAS.

En la carrera de Ingeniería Química ha pasado por la etapa de encontrar "Soluciones Únicas", es decir la altura de una columna, el área de un intercambiador, el volumen de un reactor es decir ha encontrado la "**SOLUCION UNICA**"

Romper el paradigma consiste en encontrar "METODOS" que nos permiten encontrar **ESCENARIOS DE SOLUCION**" con el método aprendido y si en vez de encontrar arreglos de números se presenta "**VISUALMENTE**", las respuestas serian mucho más atractivas y dinámicas

La propuesta para este trabajo consta en aplicar la Triada "**Software Libre-Programación-Visualización**" Aplicado en Ingeniería Química, en la materia de "Simulación de Procesos" Esta propuesta abona al perfil de egreso del programa educativo de ingeniería Química contribuyendo la materia de Simulación de Procesos al disponer de una herramienta de alta productividad de carácter libre y gratuita a su disponibilidad en cualquier momento en apoyo permanente a su desempeño profesional. o como emprendedor independiente

CONOCIMIENTOS PREVIOS.

Asignatura	Simulación de Procesos
Clave oficial de la asignatura	IQD-1023
Programa educativo al que impacta	Ingeniería Química

La materia de "Simulación de Procesos" se imparte en los últimos semestres de la carrera de Ingeniería Química, los alumnos disponen del "Bagaje" necesario para emprender el camino hacia la "Ingeniería" sin embargo su conocimiento es "Parcial" es decir solo conocen equipos aislados, en el mejor de los casos "experimentos únicos" con variables absolutamente controladas, es muy complejo para ellos, en este nivel de aprendizaje, manejar escenarios productivos con más de un equipo de proceso y más de dos componentes.

Tabla 1 Temario de la materia de Simulación de Procesos

Tema y subtemas	Complementos Educativos	Herramienta tecnológica
Tema 1: Fundamentos de Simulación 1.1 Conceptos Básicos 1.2 Balances Simples 1.3 Balances simultáneos de masa y calor 1.4 Algoritmos de solución de modelos en Ingeniería Química: Método: Modular-Secuencial Método: Orientado a Ecuaciones	Estudio de casos Aprendizaje basado en problemas Proyecto Integrador	Infografías Secuencias Didácticas Presentaciones Cuestionarios de evaluación
Tema 2: Simulación Modular 2.1 Desarrollo de módulos de simulación para la solución de modelos en Ingeniería Química 2.2 Construcción de un simulador usando los módulos vistos. 2.3 Interpretación de resultados	Estudios de Casos Aprendizaje basado en problemas Proyecto integrador	Posters Presentaciones Cuestionarios de evaluación
Tema 3: Simulación comercial	Estudio de casos	Infografías Presentaciones

3.1 Manejo de un simulador comercial	Aprendizaje basado en problemas	Cuestionarios de evaluación
3.2 Solución de casos de estudio de diseño, análisis y optimización de procesos en Ingeniería Química	Proyecto integrador	
3.3 Interpretación de resultados		

Este proyecto se basa principalmente en encontrar “Métodos” que permitan dar soluciones a problemas de ingeniería, la mayoría de los libros o artículos publicados muestran problemas complejos de ingeniería, pero es difícil encontrar los métodos de solución, es común encontrar la solución sin decir el método o forma de cómo hacerlo, en este documento encontraras los diferentes métodos para encontrar soluciones a problemas complejos.

1.- Fundamentos de Simulación.

1.1 Conceptos básicos.

La simulación de procesos se podría resumir como “**Una aproximación a la realidad**” que intenta establecer relaciones biunívocas entre el mundo real y los modelos matemáticos que lo sustentan.

La aproximación se da al comparar la solución del modelo matemático con los resultados reales, experimentales, esa convergencia permite establecer con mejor claridad el conocimiento de los diferentes tipos de fenómenos que están involucrados y su impacto en el proceso global.

Los modelos matemáticos en ingeniería química emanan de los balances de materia y energía, y los atributos específicos de cada sustancia involucrada y su rol en el proceso de transformación tanto físico, químico, físico, biológico, eléctrico, cantidad de movimiento (momentum), entre otros, tomando en consideración el tiempo o sin él.

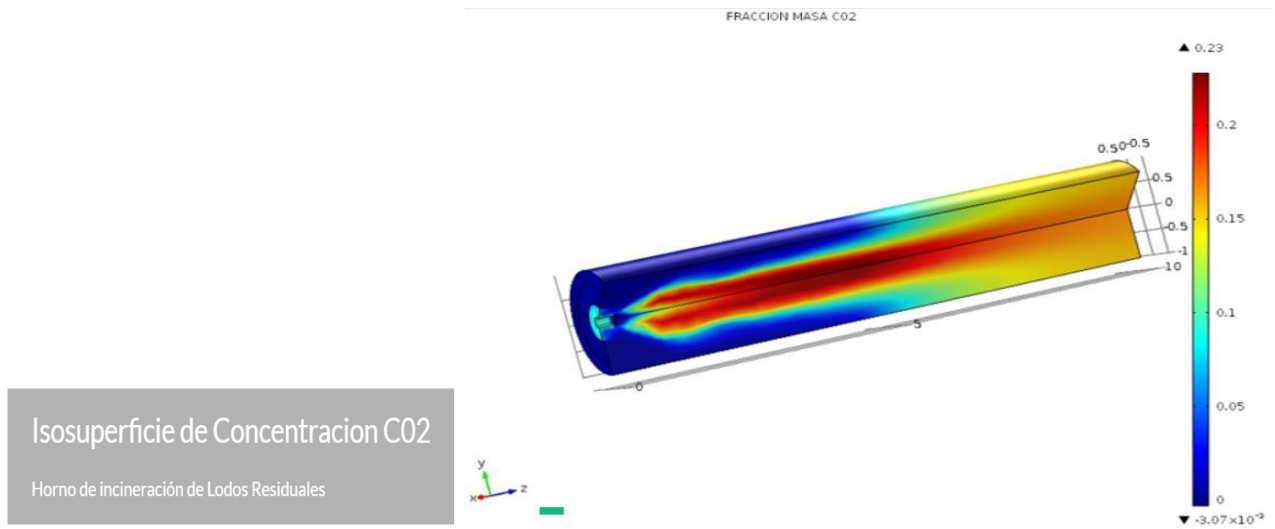


Fig 1.1. Simulación del comportamiento de un horno giratorio

Los diagramas de flujo de un proceso reflejan la manera en que fluye la información contenida en una transformación química en general contiene las entradas, salidas y reflujos de un equipo a otro.

Los diagramas de proceso se emplean para interpretar y analizar la viabilidad técnico-económica, así como el estado del arte de la transformación Físico-Química-Biológica.

Analizar el proceso de transformación se basa en un modelo matemático cuyos atributos son las variables de proceso, como son temperatura, presión, caudal, composiciones, áreas superficiales, geometrías entre otras muchas, las etapas son las siguientes:

1.-Definición del Problema a Simular.

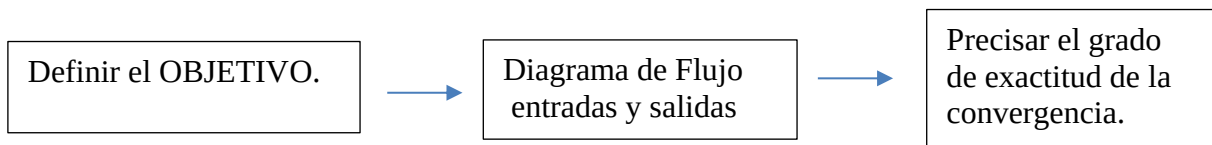


Fig 1.2. Definición del problema a simular

2.-Distinguir los factores y fenómenos controlantes del proceso.

Es fundamental tener una estrategia de inicio, es común comenzar por los equipos y procesos críticos, así como identificar los fenómenos, principalmente termodinámicos, que limitan y condicionan el proceso y a su vez los mecanismos limitantes del proceso crítico, e iniciar la simulación a partir de ese elemento.

3.- Evaluar los datos obtenidos en la experimentación y determinar su reproductibilidad y exactitud

4.- Construir el modelo matemático, basado en principios termodinámicos, transferencia de calor, masa, cantidad de movimiento y propiedades específicas de los componentes involucrados.

5.- Corroborar que el modelo matemático propuesto se aproxima con mayor exactitud a los datos experimentales, tomando en cuenta los balances de conservación de la materia, energía y cantidad de movimiento

6. Verificar la consistencia del modelo tomando en cuenta las restricciones del proceso como son los sistemas de control o de operación.

La simulación se puede clasificar por medio de su funcionalidad, por ejemplo.

1.- Por el tipo de proceso.

Procesos continuos, como en refinación y petroquímica, batch, industria farmacéutica.

2.- Por su aplicación específica.

Simuladores de proceso para la reformación catalítica, producción de amoníaco, metanol, etano-etileno entre otros

3.-Por su complejidad

Simulaciones basadas nanotecnología, estructuras moleculares, caracterización de ADN, hemato-dinámica, dinámicas geológicas vuelos espaciales, entre otros

4.- Por su aplicación.

Simuladores de proceso basados en estado estacionario, dinámico, de transporte, bioquímicos, alimentos, termodinámicos

5.- Multifísicos asociados a su geometría, toma en consideración la competencia de diferentes fenomenologías dentro de un proceso y cada uno de ellos asociado a la geometría del equipo.

6.- Por el tipo de industria a la que apoyan.

Biotecnología, farmacéutica, alimenticia, bebidas, polímeros, energía, medio ambiente, minería, metalurgia investigación y desarrollo, semiconductores...

En casi todos los casos la simulación comprende la solución de las ecuaciones de balance de materia, energía y cantidad de movimiento tanto en estado estacionario como dinámico y el dimensionamiento se lleva a cabo para lograr la eficiencia operativa y la obtención de costos de los equipos que conforman el proceso.

Para lograr este objetivo es necesario hacer un análisis detallado de los métodos para encontrar las diferentes soluciones numéricas y visuales de ecuaciones algebraicas o diferenciales al modelo del proceso, operaciones unitarias y fenómenos de transporte, estimación de propiedades fisicoquímicas entre otras.

Simuladores de proceso.

Se podrían clasificar como.

1.- Simuladores de uso general los cuales pueden tener incluido los modelos de cada equipo de proceso además de disponer de una variedad de operaciones unitarias que se interrelacionan entre sí para abarcar todo el proceso de producción.

2.- Simuladores de uso específico, desarrollados para un equipo específico o bien una operación unitaria específica, algunas veces en un rango específico de operación.

3.- Simuladores en estado dinámico, sus propiedades varían con el tiempo, y por lo contrario los de estado estacionario, no varían con el tiempo

4.- La gran mayoría de los simuladores dispone de una base de datos de propiedades termodinámicas de componentes, así como sus cálculos de propiedades

Los simuladores de proceso también se pueden clasificar según el modelo matemático que emplean por ejemplo los simuladores orientados a ecuaciones, secuenciales modulares, se llaman así por ser módulos independientes apoyados por la operación unitaria específica de cada equipo, o bien los híbridos que combinan estas dos características simultáneamente

Simuladores orientados a ecuaciones

Los equipos se calculan en función de las ecuaciones que lo representan y lo modelan

La solución del sistema se obtiene resolviendo simultáneamente el conjunto de ecuaciones lineales o no lineales o ecuaciones diferenciales que provienen de los balances de materia, energía y cantidad de movimiento incluyendo sus propiedades termodinámicas

Siendo:

$$\frac{dx}{dt} = f(in_{out}, E, Geometria, R)$$

donde:

in_out = Variable de entrada o salida

E =variables, temperatura, presión, concentración, etc.

Geometría = Altura, Volumen, Diámetro, área de intercambio de calor, etc.

R = Variables Físico-Químicas, como entalpías, valores de K, etc.

Simuladores modulares secuenciales

En este caso los simuladores modulares-secuenciales son modelados por medio de modelos específicos para cada equipo y la información fluye en el sentido del diagrama de flujo específico de la planta, topología del proceso, es decir cada reactor, evaporador, columna, separador se modelan de forma aislada y luego se integran uno a uno, hasta completar la planta.

En todos los casos se parte del balance de masa, energía, cantidad de movimiento y propiedades termodinámicas dando como resultado un sistema de ecuaciones lineales o no o bien un sistema de ecuaciones diferenciales. La secuencia de cálculo es uno-a-uno equipo por equipo.

Los reciclos se resuelven de manera independiente hasta lograr la convergencia y posteriormente se integran al proceso general. El elemento básico de modelado corresponde a la operación unitaria específica del equipo fundamentada en los balances de masa, energía y cantidad de movimiento.

Es necesario disponer de un bagaje de conocimientos de fenómenos de transporte, termodinámica y operaciones unitarias para poder validar los resultados obtenidos por el simulador

1.2 Balances Simples.

La mayoría de los problemas de balance de materiales, que incluyen masa, energía y cantidad de movimiento generalmente dan por resultado un arreglo de un sistema de ecuaciones lineales o no lineales, de $N \times M$ dimensiones, Python dispone de un método relativamente muy simple para resolver y visualizar soluciones numéricas para arreglos matriciales de complejos a muy complejos.

EJEMPLO:

Una empresa licorera tiene una columna de destilación fraccionada en donde la corriente inicial de 100 Kg esta compuesta por etanol, metanol y agua en proporciones de 10 %, 30 % y 60 % respectivamente, con el objetivo de obtener los productos destilados 1,2 y la corriente de fondo, en proporciones diferentes de salida.

En base a lo anterior tome la información de la figura 1.3

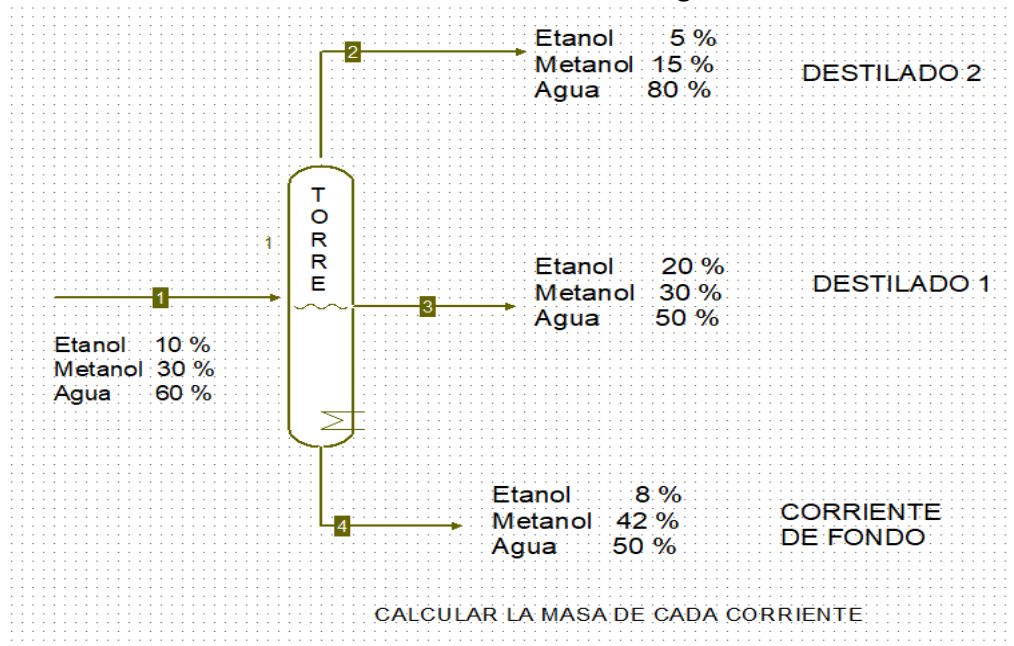


Fig 1.3 Ejemplo de un balance simple

Solución Tradicional:

BALANCE DE ETANOL

$$C_1 \cdot \frac{1}{10} = C_2 \cdot \frac{1}{20} + C_3 \cdot \frac{1}{5} + C_4 \cdot \frac{2}{25}$$

$$10 = \frac{C_2}{20} + \frac{C_3}{5} + \frac{2C_4}{25}$$

BALANCE DE METANOL

$$C_1 \cdot \frac{3}{10} = C_2 \cdot \frac{3}{20} + C_3 \cdot \frac{3}{10} + C_4 \cdot \frac{21}{50}$$

$$30 = \frac{3C_2}{20} + \frac{3C_3}{10} + \frac{21C_4}{50}$$

BALANCE DE AGUA

$$C_1 \cdot \frac{3}{5} = C_2 \cdot \frac{4}{5} + C_3 \cdot \frac{1}{2} + C_4 \cdot \frac{1}{2}$$

$$60 = \frac{4C_2}{5} + \frac{C_3}{2} + \frac{C_4}{2}$$

Se Multiplica todo por 100.

Se establece el sistema de Ecuaciones Lineales:

$$\frac{1}{20}C_2 + \frac{1}{5}C_3 + \frac{2}{25}C_4 = 10$$

$$\frac{3}{20}C_2 + \frac{3}{10}C_3 + \frac{21}{50}C_4 = 30$$

$$\frac{4}{5}C_2 + \frac{1}{2}C_3 + \frac{1}{2}C_4 = 60$$

Respuesta:

$$C_2 = \frac{\Delta C_2}{\Delta} = \frac{6/5}{9/250} = \frac{100}{3} = 33,333 \text{ Kg.}$$

$$C_3 = \frac{\Delta C_3}{\Delta} = \frac{9/10}{9/250} = 25 = 25 \text{ Kg.}$$

$$C_4 = \frac{\Delta C_4}{\Delta} = \frac{3/2}{9/250} = \frac{125}{3} = 41,667 \text{ Kg.}$$

Python dispone de la libreria **Scipy** que tiene el modulo para solucionar sistemas de ecuaciones lineales **linalg**.

Siendo: `from scipy import linalg`

El resolovedor solo contiene dos argumentos:

- A Matriz de Coeficientes
- b Matriz de igualdad

Siendo:

`Solucion=np.linalg.solve(A,b)`

Como se muestra en el código siguiente:

```
12 @author: BORJA
13 Solucionar:Sistema Ecuaciones Lineales
14 1/20C2 + 1/5C3 + 2/25C4= 10
15 3/20C2 + 3/10C3 + 21/50C4= 30
16 4/5C2 + 3/10C3 + 21/50C4= 60
17 """
18 import numpy as np          #Libreria
19 from scipy import linalg    #Libreria Ecuaciones Lineales
20 A=np.array([[1/20,1/5,2/25],[3/20,3/10,21/50],[4/5,1/2,1/2]])
21                               #Matriz de Coeficientes
22 b=np.array([10,30,60])      #Matriz de solucion
23 sol=np.linalg.solve(A,b)    #Resolvedor Lineal
24
25 print("La solucion del sistema LINEAL ES ",sol)
```

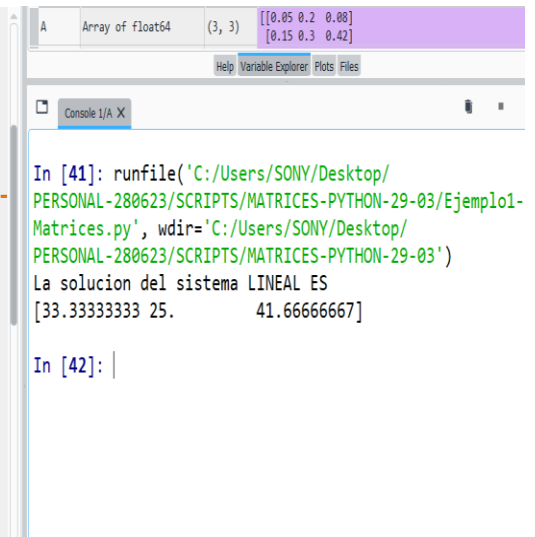


Fig 1.4 Solución numérica a ecuaciones lineales

Las soluciones son idénticas.

Se puede representar visualmente el comportamiento de la solución de tres ecuaciones lineales como, por ejemplo:

Encontrar la solución visual de un sistema de ecuaciones Lineales con Python.

$$\begin{aligned}4X + 4Y + 6Z &= 22 \\3X + 8Y + 5Z &= 27 \\-X + Y + 2Z &= 20\end{aligned}$$

Código explicado:

```

5 @author: Borja
6 Representar visualmente
7  $4X + 4Y + 6Z = 22$ 
8  $3X + 8Y + 5Z = 27$ 
9  $-X + Y + 2Z = 20$ 
10 """
11 import numpy as np
12 import matplotlib.pyplot as plt
13 from matplotlib import cm #mapa de colores
14 from mpl_toolkits.mplot3d import Axes3D #Generacion graficas 3D
15 A=np.array([[4,4,6],[3,8,5],[-1,1,20]]) #Matriz de Coeficientes
16 b=np.array([22,27,20]) #Matriz de Igualdad
17 sol=np.linalg.solve(A,b) #Solucionador
18 print('EL VALOR DE LA SOLUCION del sistema LINEAL ES',sol)
19
20 x=np.linspace(0,10,10) #Transformado lineas en planos, X
21 y=np.linspace(0,10,10) #Transformado lineas en planos Y
22 X,Y=np.meshgrid(x,y) #Ecuacion Parametrica X,Y
23 #meshgrid: Mallado 3D
24
25
29 Z1=(22-2*X-4*Y)/6 #En funcion de dos variables
30 Z2=(27-3*X-8*Y)/5 #En funcion de dos variables
31 Z3=(2+X-Y)/2 #En funcion de dos variables
32 #GRAFICAS
33 #mapas de colores
34 #https://mplotLib.org/examples/colormaps\_refeence.html
35 fig=plt.figure()
36 #Graficando una superficie
37 ax=fig.add_subplot(111,projection='3d')
38 ax.plot_surface(X,Y,Z1,alpha=0.5,cmap=cm.Accent,rstride=100,cstride=100)
39 ax.plot_surface(X,Y,Z2,alpha=0.5,cmap=cm.Paired,rstride=100,cstride=100)
40 ax.plot_surface(X,Y,Z3,alpha=0.5,cmap=cm.Pastel1,rstride=100,cstride=100)
41 #Colocabdo la solucion con una marca y color
42 ax.plot((sol[0],),(sol[1],),(sol[2],),lw=2,c='k',marker='o',markersize=20,
43         markeredgecolor='b',
44         markerfacecolor='white')
45
46 #Nombre ejes
47
48 ax.set_xlabel('EJE X');ax.set_ylabel('EJE Y');ax.set_zlabel('EJE Z')
49 plt.show()

```

Fig 1.5 Código explicado a una solución gráfica y numérica a un sistema de ecuaciones lineales

Representacion visual:

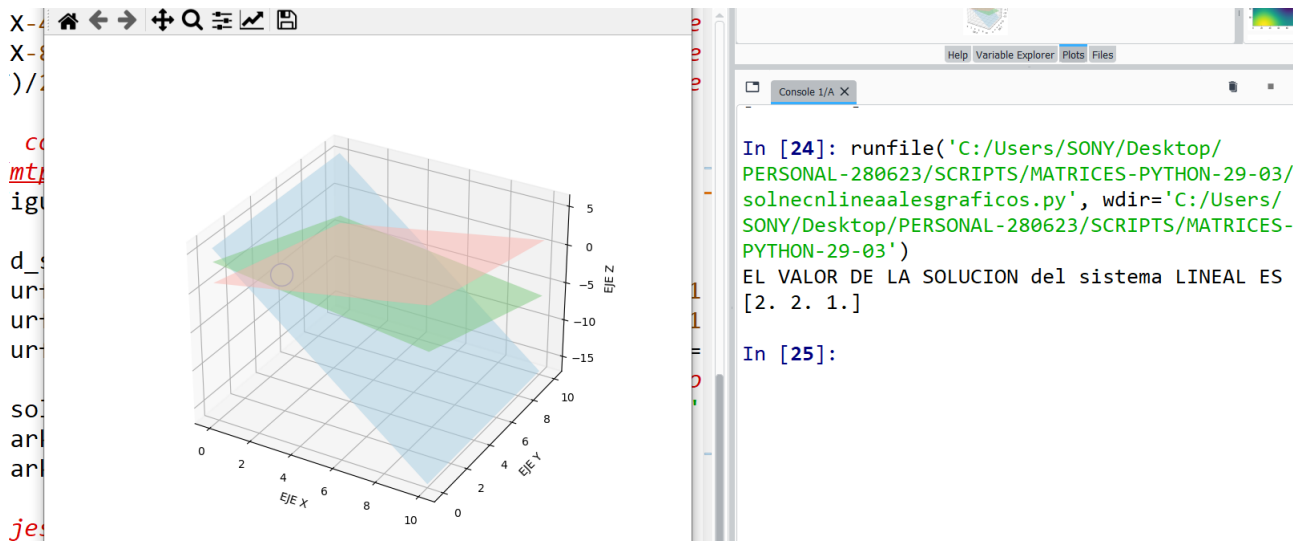


Fig 1.6 Representación visual a un sistema de ecuaciones lineales

1.3 Balances simultáneos de masa y calor.

Los balances de materia y energía se utilizan para contabilizar los flujos de materia y energía de un proceso industrial y sus límites de batería y su impacto entre los procesos colindantes. permiten conocer los flujos masicos de todas las corrientes del proceso, y sus requerimientos energéticos

La ecuación general del balance de materia y energía se podría resumir en la figura 1.7 en la que la materia/energía que entra al sistema es igual a la materia/energía que sale más lo que se genera más lo que se acumula menos lo que se consume

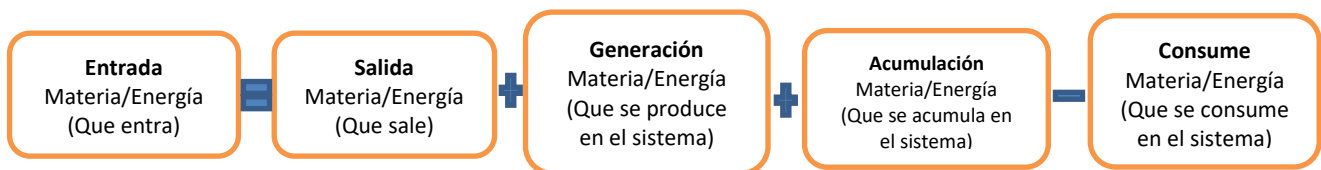


Fig 1.7 Balance general materia y energía

Los diferentes tipos de energía en cualquier balance son. trabajo, calor, energía cinética, energía potencial, energía interna y entalpía.

Trabajo:

El trabajo hecho o realizado por el sistema sobre los alrededores es positivo, Para una fuerza mecánica, el trabajo se hace cuando dicha fuerza actúa a través de una distancia, o bien como producto del cambio de presión o de volumen:

$$W = \int_{\text{estado 1}}^{\text{estado 2}} F dx$$

Donde F es la fuerza y x la distancia.

$$W = \int_{\text{estado 1}}^{\text{estado 2}} P dv$$

Donde P es la presión y V es el volumen.

Calor

Desde un punto de vista termodinámico la cantidad de **calor (Q)** que intercambia una sustancia de masa “**m**”, es proporcional a la variación de temperatura “**Δt**”, la constante que lo asocia para ser una igualdad se llama capacidad calorífica, (**Cp**), siendo.

$$Q = m \cdot C_p \cdot \Delta t.$$

Energía cinética

La energía que posee un sistema debido a su velocidad relativa con respecto a los alrededores.

$$E_c = \frac{1}{2} m v^2$$

Donde m es la masa y v es su velocidad relativa

Energía potencial

La energía debida a su posición física con respecto a un estado de referencia

$$E_p = mgh$$

Donde m es la masa g es la gravedad y h su altura relativa

Energía Interna

Es la suma de las energías molecular, atómica y subatómica debidas a su movimiento, siempre se calcula con respecto a un estado de referencia de Presión, Temperatura o Composición.

Entalpía

La cantidad de energía que un cuerpo absorbe o libera a su entorno a presión constante, puede ser entalpia de formación, de descomposición, de combustión, de neutralización, de cambio de fase, de disolución entre otras propiedades.

La diferencia de calor o cambio de entalpía que se da en una reacción se obtiene mediante:

$$\Delta H_r = \Sigma n \cdot \Delta H (\text{productos}) - \Sigma n \cdot \Delta H (\text{reactivos})$$

Si $\Delta H > 0$ significa que ha suministrado calor al sistema.

Si $\Delta H < 0$ significa que el sistema desprende calor

Si la variación de entalpía tiene un valor negativo, significa que el proceso es exotérmico, es decir libera energía.

Si el proceso es endotérmico se caracteriza porque absorbe energía y poseerá un valor de entalpía positivo.

$$\Delta H = \Delta E + P\Delta V$$

$$\int \Delta H = \int m C_p \Delta t$$

CASO DE ESTUDIO.

Para la plata $C_p = 23,43 + 0,00628T$ [J/°K_mol], calcúlese ΔH si se calientan 3 moles de plata desde 25°C hasta su punto de fusión de 961°C bajo una presión de 1 atmósfera.

Datos:

- $C_p = 23,43 + 0,00628T$ [J/°K_mol]
- $n = 3$ mol.
- $T_1 = 25^\circ\text{C} = 298^\circ\text{K}$
- $T_2 = 961^\circ\text{C} = 1234^\circ\text{K}$
- $P = 1 \text{ atm} \rightarrow dz.$

Entalpia $H = f(T, P)$

$$dH = nC_p dT + \left(\frac{\partial H}{\partial P}\right) dP$$

$$\Delta H = \int_{T_1}^{T_2} 3(23,43 + 0,00628T) dT$$

$$\Delta H = 3 \left[23,43T \Big|_{T_1}^{T_2} + 0,00628 \frac{T^2}{2} \Big|_{T_1}^{T_2} \right]$$

$$\Delta H = 3 \left[23,43(1234 - 298) + \frac{0,00628}{2} (1234^2 - 298^2) \right]$$

$\Delta H = 79299 \text{ [J]}$

Fig 1.8 Calculo de la entalpia manualmente

En Python se obtiene:

```

5 @author: BORJA
6 """
7 from sympy import *      #Matematicas simbolicas
8 T=symbols("T")           #Variable a integrar
9 T0=298                    #°K
10 Tf=1234                  #°K
11 R=8.314                  #L/mol °K
12 c=-2.164e-06 *T**2
13 b =0.00628*T
14 a=23.43
15 m= 3
16
17 Q=m*(a+b)
18
19 AH=integrate((Q),(T,T0,Tf))#Limites Integral
20 print("El valor de la entalpia es\n",AH,"[Joules]")
21

```

In [11]: runfile('C:/Users/S/PYTHON-29-03/untitled1.py',
SCRIPTS/MATRICES-PYTHON-29-0
El valor de la entalpia es
79299.2678400000 [Joules]

In [12]:

Fig 1.9 Código explicado para el calculo de la entalpia

También se puede resolver la integral definida por medio **scipy** con la librería **integrate**

LIBRERÍAS: `from scipy import integrate`

SINTAXIS: `v, err = integrate.quad(f, a, b)`

Donde:

V: Solucion

err: error

integrate: Solucionador

f: La función

#Métodos para la función de integración dada una función objetivo.

quad Método de propósito general.

dblquad Propósito general para doble integración.

tplquad Propósito general triple integración.

fixed_quad Integración de una func(x) usando el método de la cuadratura de Gauss

Se pueden presentar dos opciones principales en la que se solicita resolver una integral definida la primera de ellas es por medio de una función y la segunda por medio datos de entrada.

Se da el código explicado para cada una de ellas.

1.- Función conocida

```
5 @author: BORJA
6 """
7
8 from scipy import integrate
9 def f(T):
10     return m*(a+b*T)
11 T0=298                                #°K
12 Tf=1234                              #°K
13 #R=8.314                             #L/mol °K
14 c=-2.164e-06
15 b =0.00628
16 a=23.43
17 m= 3
18 v, err = integrate.quad(f, T0, Tf)
19 print ("La solución de la integral es:"
20        , v, "\n y el error es" , err)
```

In [16]: runfile('C:/Users/SONY/Desktop/PERSONAL-
PYTHON-29-03/untitled2.py', wdir='C:/Users/SONY/D
SCRIPTS/MATRICES-PYTHON-29-03')
La solución de la integral es: 79299.26783999999
y el error es 8.803987299188518e-10

In [17]:

Figura 1.10 Solución numérica a una integral por medio de una función conocida

2.- Datos de entrada

Integrar: $\sqrt{x}$ que expresa la relación entre temperatura y calor.

Existen 100 datos asociados a esta función, en este caso la función no es $f(x) = x$, pero si el correspondiente a (x_i, y_i) .

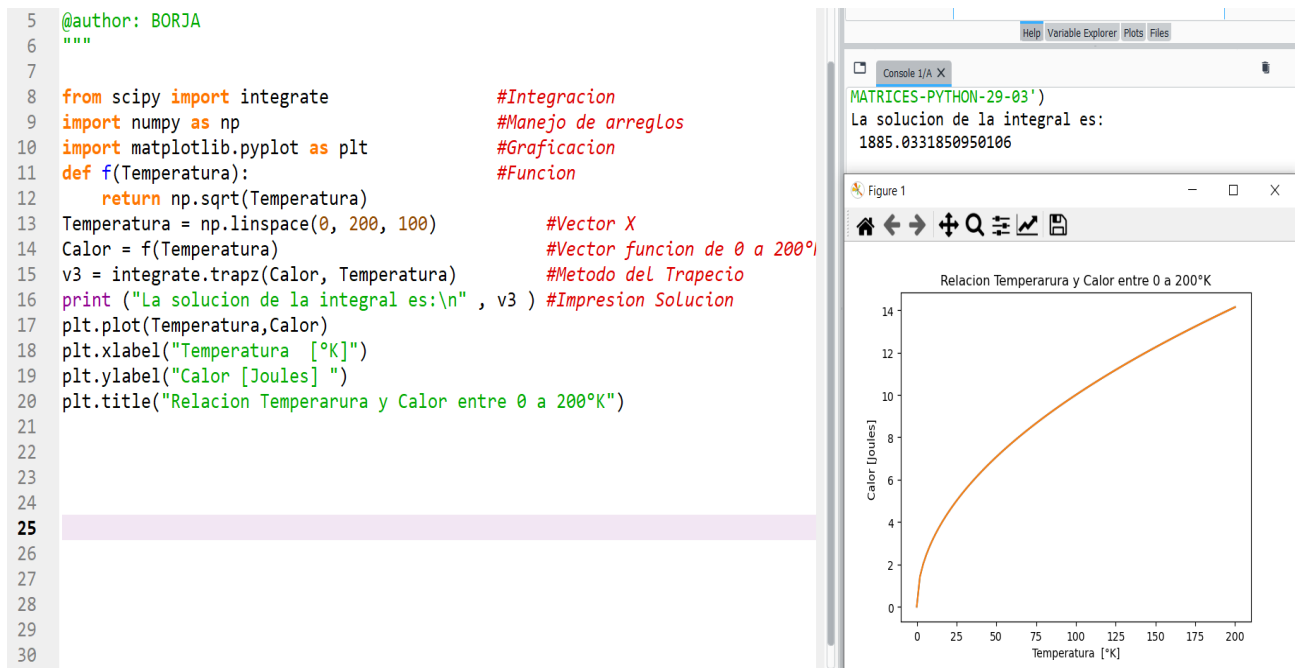


Figura 1.11 Solución explicada a una integral por medio de datos de entrada

1.3 Balances simultáneos de masa y calor

Llevar a cabo balances simultáneos de “Energía y Materia” es una de las actividades importantes para un Ingeniero Químico, tanto a nivel equipo como a nivel de todo un proceso de transformación esta actividad permite conocer al detalle los flujos entrantes y salientes cuantificables de cada uno de los equipos que conforman el proceso.

Los balances tanto de energía como de materia permiten conocer las necesidades de cada uno de los equipos, así como lo que se entrega fuera del límite de batería, permite discernir los requerimientos energéticos dentro y fuera del proceso de transformación, así como detectar las deficiencias en la producción.

Los balances de “Energía y Materia” cuando existe una reacción química se debe tomar en cuenta la generación o consumo de energético de cada uno de los compuestos que intervienen en el proceso por unidad de tiempo ya sea como materia prima o como producto considerando su masa, entalpia y el calor que intercambia con el entorno.

Tomando en cuenta si esa reacción es exotérmica o endotérmica.

En sentido general podemos plantear, para una reacción típica



El calor de la reacción será la diferencia de las entalpías de la materia prima menos la entalpía de los productos.

$$\Delta H^{\circ}_{Reaccion} = \Delta H^{\circ}_{(Productos)} - \Delta H^{\circ}_{(Reactivos)}$$

Si se deriva y se pone en función de los Calores Específicos, ΔC_p

$$\frac{d(\Delta H)_{Reaccion}}{dT} = \frac{d(\Delta H)_{Productos}}{dT} - \frac{d(\Delta H)_{Reactivos}}{dT}$$

Pero:

$$\frac{d(\Delta H)}{dT} = C_p$$

Siendo:

$$\frac{d(\Delta H)}{dT} = C_{p(Productos)} - C_{p(Reactivos)}$$

O bien:

$$\int d\Delta H = \int [C_p(Productos) - C_p(Reactivos)] dT$$

Tomando en cuenta la reacción:

$$\Delta H_T - \Delta H_{T0} = \int_{T0}^T [dC_p(D) + eC_p(E) - aC_p(A) - bC_p(B) - cC_p(C)]$$

Y la entalpía total sería:

$$\Delta H_T = \Delta H_{T0} + \int_{T0}^T [\Delta C_p dT]$$

En Python se tiene un resolutor de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) llamado, ODEINT que pertenece a una gran librería llamada SciPy en la que se encuentran algoritmos fundamentales para el computo científico en Python.



Fig 1.12 Página de inicio de SciPy, Computo científico
Dentro de esta librería se encuentra el método “**ODEINT**” que es un resolutor de Ecuaciones Diferenciales Ordinarias (ODE’s) con la siguiente sintaxis:

“ODEINT” Es una función que integra numéricamente un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias dado un valor inicial:

$$dy / dt = f(t, y)$$

$$y(t_0) = y_0$$

t variable independiente en 1-D, generalmente tiempo,
y(t) función (estado) valorada por un vector
y función **f (t, y)** valorada como un vector el cual determina las soluciones a las ecuaciones diferenciales.

El objetivo es encontrar **y(t)** que satisfaga aproximadamente las ecuaciones diferenciales, dado un valor inicial **y(t₀)=y₀**.

Sintaxis: `scipy.integrate.solve_ivp`

Parámetros:

*(fun, t_span, y0, method='RK45' t_eval=None, dense_output=False, events=None, vectorized=False, args=None **options)*

fun: Función que define los sistemas de ecuaciones diferencial. **fun(t,y)**

t_span: Es el intervalo de integración **(t0,tf)**, el resolvedor inicia con **t=t0** y lo integra mientras busca **t=tf**

y0: Estado inicial

method='RK45' Método de integración predeterminado Runge-Kutta de orden 5

RK23 Runge-Kutta orden 3

DOP853 Método Runge-Kutta de orden 8 ,

Python implementa el algoritmo original escrito en fortran.

Entre otros métodos de solución y otros parámetros

Ejemplo:

@author: BORJA

#Ecuaciones diferenciales Ordinarias (odeint)

Primer Orden de una Ecuación Diferencial Ordinaria:

$$dx/dy=f(y,t)$$

##LIBRERIAS

Numpy,Scipy y Matplotlib

from scipy.integrate import odeint

SINTAXIS ODEINT

Requiere tres entradas

$y = \text{odeint}(\text{funcion}, y0, t)$

odeint	solucionador de ODE's (dy/dt)
func	La función a resolver
y0	Valor inicial de Y
t	espacio donde vive la derivada

EJEMPLO:

#SOLUCIONAR **$\frac{dy(t)}{dt} = -ky(t)$**

```

25 #@author: BORJA
26 import numpy as np
27 from scipy.integrate import odeint
28 import matplotlib.pyplot as plt
29 #Funcion que retorna dy/dt
30 def RXA(y,t):
31     k=0.3
32     dydt=-k*y
33     return dydt
34                                     #condiciones iniciales
35 y0=15
36 k=0.3
37 t=np.linspace(0,20,100)           #Puntos en el tiempo
38 y=odeint(RXA,y0,t)                #solucionador ODEINT
39 #graficando resultados
40 plt.plot(t,y)
41 plt.xlabel('TIEMPO')
42 plt.ylabel('y(t)')
43 plt.title("dy(t)/dt=-ky(t), Y0=15, K=0.3")

```

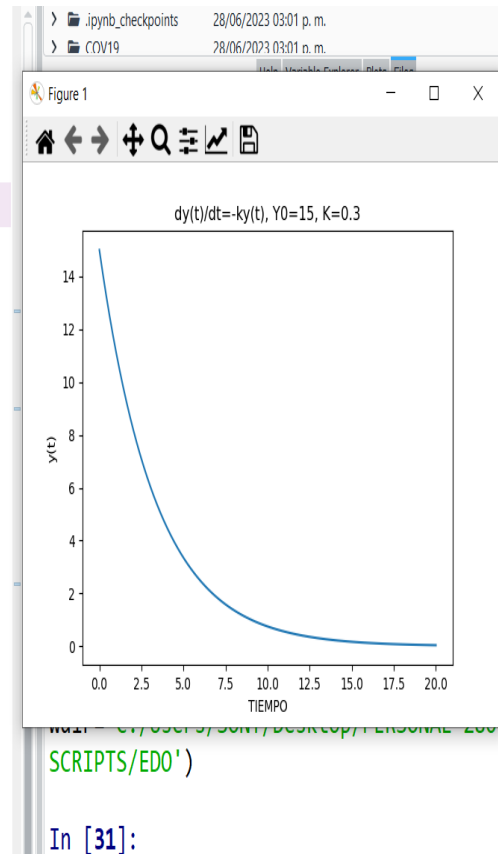


Fig 1.13 Código explicado de la solución numérica y visual de una ecuación diferencial ordinaria

Solución visual con tres diferentes constantes de velocidad:

```

5 @author: BORJA
6 """                                ##con diferentes argumentos de K
7 import numpy as np
8 from scipy.integrate import odeint
9 import matplotlib.pyplot as plt
10 k=0.3
11 def RXK1K2K3(y,t,k):              #Funcion que retorna dy/dt
12     dydt=-k*y
13     return dydt
14 y0=.5                             #condiciones iniciales
15 t=np.linspace(0,20,50)            #Vector en el tiempo
16 k=0.1
17 y1=odeint(RXK1K2K3,y0,t,args=(k,)) #solucionador ODE's para y1
18 k=0.5
19 y2=odeint(RXK1K2K3,y0,t,args=(k,)) #solucionador ODE's para y2
20 k=0.7
21 y3=odeint(RXK1K2K3,y0,t,args=(k,)) #solucionador ODE's para y3
22                                     #GRAFICANDO
23 plt.plot(t,y1,'r-',linewidth=2,label='k1=0.1')
24 plt.plot(t,y2,'b--',linewidth=2,label='k2=0.5')
25 plt.plot(t,y3,'g:',linewidth=2,label='k3=0.7')
26 plt.xlabel('TIEMPO')
27 plt.ylabel('y(t)')

```

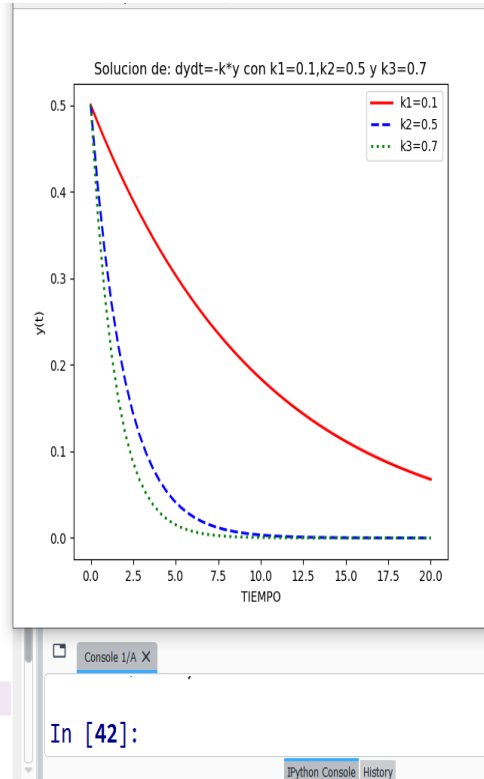


Fig 1.14 Código explicado a una EDO con tres constantes de velocidad diferentes

EJEMPLO: Solucionar dos EDO's de $A \rightarrow B$

@author: BORJA

SOLUCIONAR:

Ecuación de Primer Orden

$A \rightarrow B$

Para la concentración de A en el tiempo

$A_0=1.0$

velocidad de reacción esta dado por: $dCA/dt = -KCa$; $dCB/dt = KCa$

Parte 1:

Grafique CA , y CB VS tiempo

Parte 2:

CALCULE LA COMPOSICION DEL PRODUCTO

CB(t) solucionando

$dCB/dt = KCA$

```

25 #@author: BORJA
26 import numpy as np
27 from scipy.integrate import odeint #Libreria ODE's
28 import matplotlib.pyplot as plt #Libreria Graficacion
29 C0=0 #Vector de Condiciones iniciales
30 def RXab(C,t): #Funcion de Ca y Cb y t
31     Ca = C[0] #Vector "C" en posicion 0 esta Ca
32     Cb = C[1] #Vector "C" en posicion 1 esta Cb
33     ka= 2.0 #Constante Velocidad para Ka
34     Kb= 3.5 #Constante Velocidad para Kb
35     dAdt=-ka * Ca #Expresiones de velocidad
36     dBdt=Kb * Ca
37     return [dAdt, dBdt]
38 # return [dAdt]
39 print(RXab([0.1,0.5],0.5))
40 t=np.linspace(0,5,100) #Vector Tiempo
41 C0=[1,0] #Condiciones iniciales para Ca y Cb
42 C=odeint(RXab,C0,t) #Solucionador para Las dos ODE's
43 #GRAFICACION-----
44 plt.plot(t,C[:,0], 'r--*',linewidth=2.0)
45 plt.plot(t,C[:,1], 'b-.',linewidth=2.0)
46 plt.xlabel('TIEMPO Seg')
47 plt.ylabel('CONCENTRACION')
48 plt.title("Reaccion: A--->B ")
49 plt.legend(['Ca', 'Cb'])

```

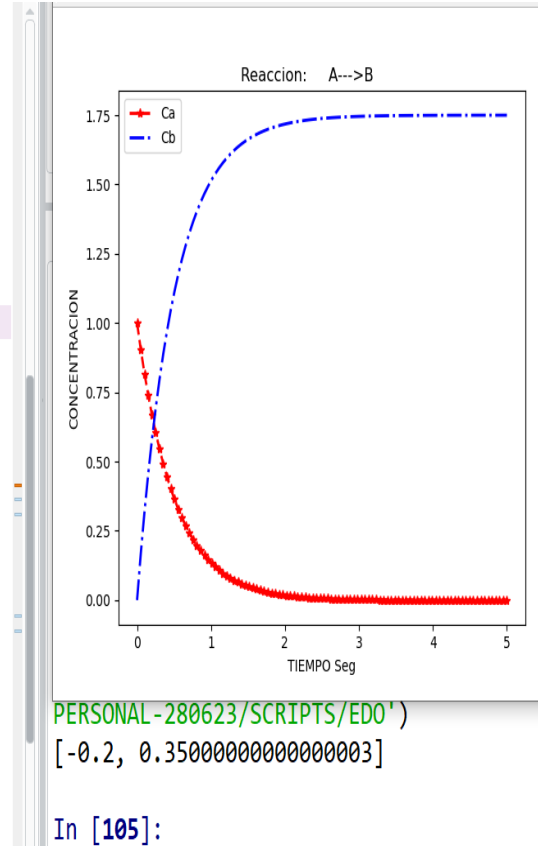


Fig 1.15 Código explicado de la solución de $A \rightarrow B$

EJEMPLO: SIENDO: $A+B \rightarrow C+D$

Resuelva numérica y visualmente

$$\begin{aligned}
 dA/dt &= -K_1CACB \\
 dB/dt &= -K_1CACB - K_2CBCC \\
 dC/dt &= +K_1CACB - K_2CBCC \\
 dD/dt &= +K_2CBCC
 \end{aligned}$$

A,B,C,D [mol/L]

condiciones Iniciales:

$A_0=1$

B0=1
C0=0
D0=0

K1=1L/mol*s
K2=1.5L/mol*s

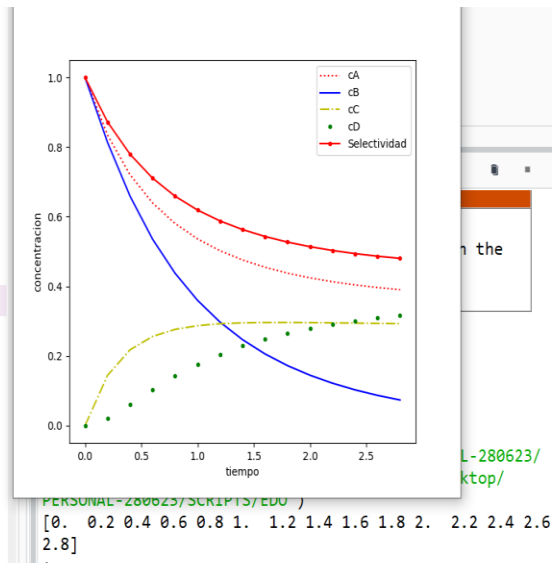
RESUELVA:

- 1.- Variación de la concentración de A, B, C y D con respecto al tiempo en un intervalo de solución de 0.2 seg y solución con un tiempo final t= 3Seg
- 2.- Grafique la SELECTIVIDAD ($S=C/(C+D)$) con respecto al tiempo considerando que en el tiempo t0 la selectividad es uno, S=1
- 3.- Grafique A, B, C, D y S como una función del tiempo en la misma grafica.

```

5  #@author: BORJA
6  import numpy as np
7  from scipy.integrate import odeint
8  import matplotlib.pyplot as plt
9  def rxn (Z,t):#Z es un vector que contiene Ca,Cb,Cc,Cd
10     K1=1.0          #Constantes de Reaccion 1
11     K2=1.5          #Constantes de Reaccion 2
12     r1=K1*Z[0]*Z[1] #Expresiones de velocidad en 1
13     r2=K2*Z[1]*Z[2] #Expresiones de velocidad en 2
14     dAdt=-r1        #Expresiones de Velocidad Reaccion
15     dBdt=-r1-r2
16     dCdt=r1-r2
17     dDdt=r2
18     return (dAdt,dBdt,dCdt,dDdt)
19  t = np.arange(0,3,0.2)      #Vector tiempo
20  print(t)
21  Z0 =[1,1,0,0]#Condiciones iniciales Ca,Cb y Cc, Cd
22  Conc=odeint(rxn,Z0,t)      #Resolvidor de las ODE's

```



```

23         #Extraccion de Los resultados en Conc
24 cA = Conc[:,0]         #Soluciones para Ca
25 cB = Conc[:,1]         #Soluciones para Cb
26 cC = Conc[:,2]         #Soluciones para Cc
27 cD = Conc[:,3]         #Soluciones para Cd
28         #Selectividad
29 S = np.empty(len(cC))
30 for i in range(len(cC)):
31     if abs(cC[i]+cD[i]>1e-10):
32         S[i] = cC[i] / (cC[i]+cD[i])
33     else:
34         S[i] = 1.0
35         #GRAFICANDO
36 plt.plot(t,cA,'r-',label='cA')
37 plt.plot(t,cB,'b-',label='cB')
38 plt.plot(t,cC,'y-.',label='cC')
39 plt.plot(t,cD,'g.',label='cD')
40 plt.plot(t,S,'r.-',label='Selectividad')
41 plt.ylabel('concentracion')
42 plt.xlabel('tiempo')
43 plt.legend(loc='best')
44 plt.show()
45 #plt.savefig('RXNabcd.png')

```

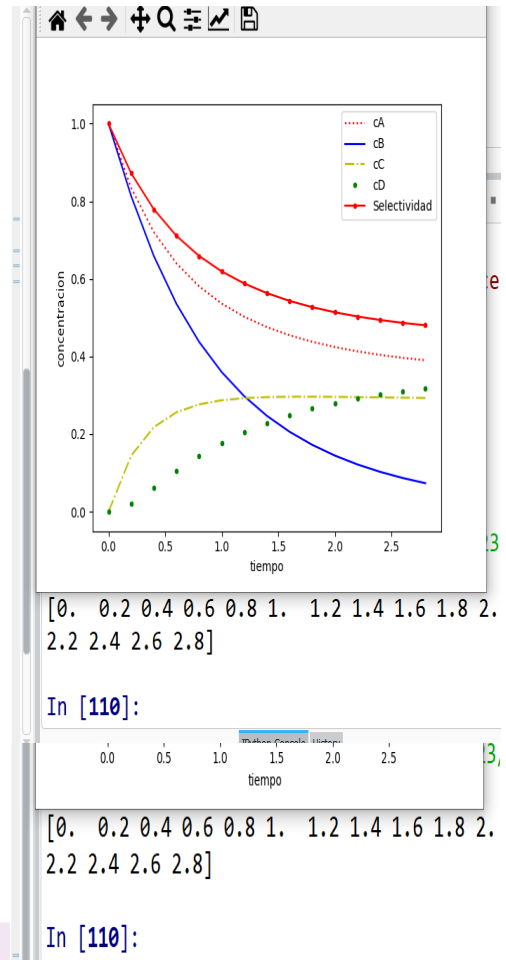


Fig 1.16 Código explicado de la solución de $A + B \rightarrow C + D$

1.4 Algoritmos de solución de modelos en Ingeniería Química.

Los modelos matemáticos en ingeniería química tienen como objetivo representar mediante ecuaciones matemáticas el comportamiento de un proceso de transformación, generalmente mediante un conjunto de variables, preferentemente valores termodinámicos y constantes específicas, parámetros, que representan el comportamiento de un proceso de transformación.

Estos modelos matemáticos tienden a representar lo más cercanos posibles el comportamiento real de un proceso, basado en principios elementales de la conservación de la masa, la energía y la cantidad de movimiento. Acotados por medio de la experimentación y la identificación los mecanismos predominantes ajustándolos teórica o empíricamente.

Un modelo se construye para conocer o predecir el comportamiento o propiedades de un objeto de estudio real.

Los modelos matemáticos son útiles al permitir estudiar y analizar un objeto o sistema sin disponer de él físicamente y permite tomar decisiones con un menor grado de incertidumbre.

En ingeniería química es de suma importancia la identificación tanto a nivel proceso industrial como a nivel laboratorio los factores y mecanismos que limitan o controlan el proceso de transformación, esto permite simplificar las etapas de inicio del modelado matemático.

Un modelo matemático es un proceso cognitivo para interpretar el mundo real.

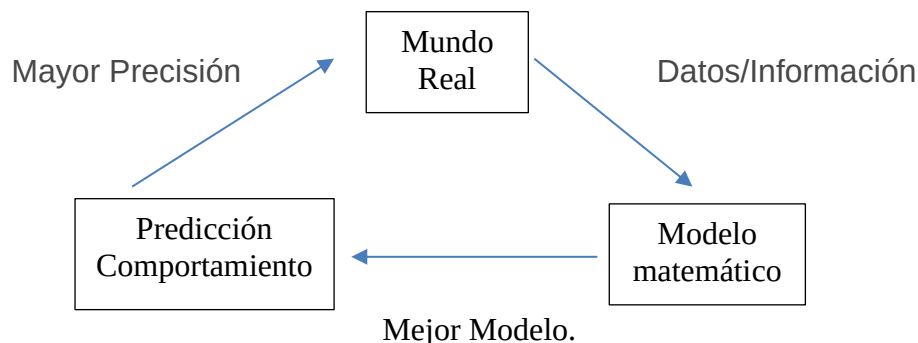


Fig 1.17 Modelo matemático

Ejemplos de modelos:

De reacción química, de difusión de masa, conducción de calor, Transferencia de masa, Evaporación, Mezcla Turbulenta, Flujo de Fluidos.

Realmente todo nuestro conocimiento está fundamentado en un "supuesto", hasta que se demuestre lo contrario.

Ese supuesto nos permite conocer y predecir la naturaleza en su más íntima expresión, salvo lo contrario.

Ejemplos:

Se tiene un intercambiador de calor de tubos concéntricos en contracorriente y sin cambio de fase.

Los siguientes modelos matemáticos describen aproximadamente el comportamiento del intercambiador de calor.

$$\frac{dT_{Caliente}}{dx} = 0.03(T_{Caliente} - T_{Frio})$$

$$\frac{dT_{Frio}}{dx} = -0.04(T_{Caliente} - T_{Frio})$$

Se pide:

Visualizar a lo largo de los tubos su perfil de temperatura:

Temperatura Salida Fluido Caliente: $T_{Caliente}$
 Temperatura Salida Fluido Frio: T_{Frio}

Si el intercambiador de calor tiene una longitud de tres metros y la Temperatura del Fluido Caliente a la entrada es: $T=100^{\circ}\text{C}$ y la del Fluido Frio inicial es de $T=20^{\circ}\text{C}$

```

10 #@author: BORJA
11 from scipy.integrate import odeint #Resolver EDO's (2)
12 import numpy as np               #Arreglos
13 import matplotlib.pyplot as plt  #Graficacion
14
15 def f(Temp_,x):                  #Funcion Temperatura, Longitud X
16     t_cal,t_frio=Temp_           #T_Cal y T_Frio  Temperaturas Fluido Caliente/Frio
17     dtbdx=0.03*(t_frio-t_cal)    #Ecuaciones Diferenciales Fluido Caliente/Frio
18     dtsdx=-0.04*(t_frio-t_cal)
19     return np.array([dtbdx,dtsdx])
20
21 x0=0
22 xn=3
23 longitud=np.linspace(x0,15,xn)  #Distancia 3 Metros
24 t0=[20,100]                    #Rango de Temperaturas °C
25 Solucion_edo=odeint(f,t0,longitud) #Solucion de las dos ODE's
26 plt.plot(Solucion_edo)
27
28 import plotly.express as px
29 fig=px.scatter(x=longitud,y=Solucion_edo[:,0]) #Extraccion primer vector
30 fig.add_scatter(x=longitud,y=Solucion_edo[:,1])#Extraccion segundo vector
31 plt.xlabel("LONGITUD")
32 plt.ylabel("TEMPERATURA")
33 plt.title("Diferencial de Temperatura Caliente/Frio ")
34 fig.show()

```

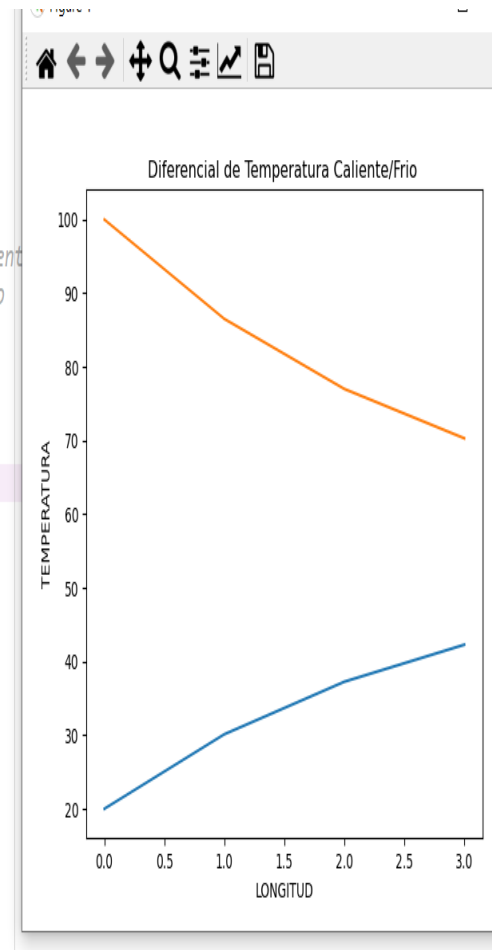


Fig 1.18 Código explicado y visualización de la variación de Temperatura en un intercambiador de calor

Tema 2: Simulación Modular

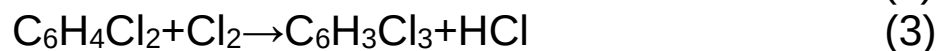
2.1 Desarrollo de módulos de simulación para la solución de modelos en Ingeniería Química

Python dispone de herramientas que permiten crear “módulos de simulación” para resolver modelos matemáticos.

1.- Visualización de reacciones complejas.

Ejemplos:

En el interior de un reactor el cloro (Cl_2), gas, reacciona con el benceno (C_6H_6), líquido a 75°C , llevándose a cabo las siguientes reacciones:



Visualizar el comportamiento de las reacciones en diferentes escenarios con la siguiente información.

#Constantes de velocidad de reacción

$k_1 = 1.4$ mol/L/s

$k_2 = 2.8$ mol/L/s

$k_3 = 3.3$ mol/L/s

#Concentraciones iniciales de reactivos y productos

Benceno Inicial 1,0 g/L

Reacción 1 0.1 g/L

Reacción 2 0.2 g/L

Reacción 3 0.3 g/L

Solución Visual y numérica

```

6 #@BORJA"""
7 from scipy.integrate import odeint #Resolver EDO's (4)
8 import numpy as np #Arreglos
9 import matplotlib.pyplot as plt #Graficacion
10
11 def f(CONV,t): #FUNCION CONVERSIONES CONTRA TIEMPO
12     x1,x2,x3,x4=CONV #VECTOR QUE CONTIENE LAS CONVERSIONES
13     k1=1.4 #Constantes de velocidad de reaccion
14     k2=2.8
15     k3=3.3
16     dx1dt=-k1*x1 #Expresiones de Velocidad de reaccion
17     dx2dt=k1*x1-k2*x2
18     dx3dt=k2*x2-k3*x3
19     dx4dt=k3*x3
20     return np.array([dx1dt,dx2dt,dx3dt,dx4dt])#Arreglo velocidades de reaccion
21 t0=0 #tiempo inicial
22 tn=2 #Tiempo final
23 tiempo_R=np.linspace(t0,tn) #Arreglo de Tiempos
24 X0=[1,0,1,0,2,0,3] #Concentraciones iniciales de reactivos y productos
25 Vector_Sol=odeint(f,X0,tiempo_R)#Vector solucion
26 #Extraccion de vectores solucion y graficacion
27 plt.plot(tiempo_R,Vector_Sol[:,0],'r--*',linewidth=2.0)
28 plt.plot(tiempo_R,Vector_Sol[:,1],'b-.',linewidth=2.0)
29 plt.plot(tiempo_R,Vector_Sol[:,2],'y--',linewidth=2.0)
30 plt.plot(tiempo_R,Vector_Sol[:,3],'g-.',linewidth=2.0)
31 #Etiquetas
32 plt.xlabel('TIEMPO Seg')
33 plt.ylabel('CONCENTRACION')
34 plt.legend(['C6H6+Cl2-->', '-->C6H5Cl+HCl', '-->C6H4Cl+HCl', '-->C6H3Cl+HCl'])
35 plt.title("CLORACION BENZENO: C6H6+Cl2->C6H5Cl+C6H4Cl+C6H3Cl+3HCl")
36 plt.show()

```

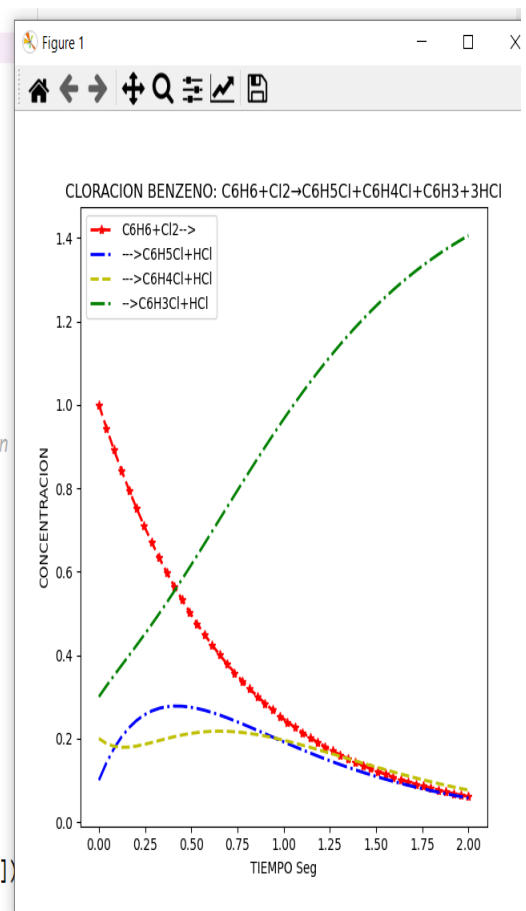


Fig 2.1 Código explicado y visualización de una reacción química compleja

Ejemplo:

El tanque 1 contiene 50 galones de solución salina en la que están disueltas 25 libras de sal; el tanque 2 contiene 50 galones de agua pura, el tanque 3 contiene una solución amoniacal ; se bombea líquido hacia y desde los tanques en las cantidades indicadas.

Calcular el cambio de la masa de sal disuelta en cada tanque, con respecto al tiempo.

para el tanque 1 se tiene:

$$dx_1/dt = -2/25 \cdot x_1 + x_2/50 + x_3/70$$

para el tanque 2 se tiene:

$$dx_2dt = 2/25 \cdot x_1 - 2/25 \cdot x_2 + x_3/80$$

para el tanque 3 se tiene:

$$dx_3dt = 1/18 \cdot x_1 - 2/17 \cdot x_2 + x_3/90$$

```
5 @author: BORJA
6 """
7 from scipy.integrate import odeint #Resolver EDO's (3)
8 import numpy as np                #Arreglos
9 import matplotlib.pyplot as plt   #Graficacion
10
11 def f(C,t):
12     x1,x2,x3=C
13     dx1dt=-2/25*x1+x2/50 +x3/70
14     dx2dt=2/25*x1-2/25*x2+x3/80
15     dx3dt=1/18*x1-2/17*x2+x3/90
16     return np.array([dx1dt,dx2dt,dx3dt])
17 t0 =0 # valor inicial de tiempo
18 C0 =[25,0,0.1] # condiciones iniciales Tanques
19 t1 =50 # valor final del tiempo [Seg]
20 tiempo =np.linspace (t0,t1) #11 es para 10 pasos
21 # llamada a la funcion odeint
22 solucion = odeint(f,C0,tiempo )
23 print(solucion)
24 plt.plot(solucion)
25 import plotly.express as px
26 #GRAFICACION
27 plt.xlabel("TIEMPO [Seg]")
28 plt.ylabel("TANQUE 1,2 y 3")
29 plt.legend(['Tanque 1','Tanque 2','Tanque 3'])
30 plt.title("Diluciones en Tanque 1,2 y 3")
```

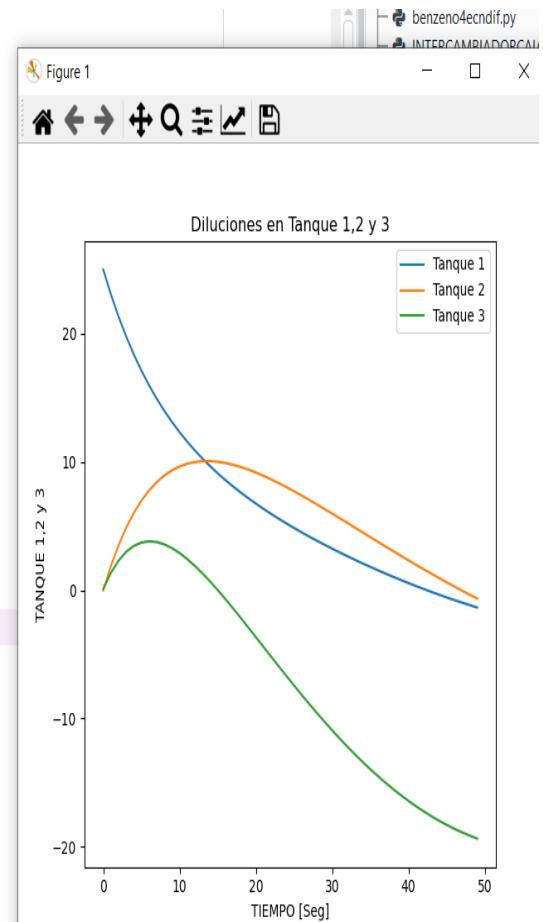


Fig 2.2 Diluciones en tres tanques de una solución salina

Correlaciones Lineales y No-lineales.

Todo Ingeniero Químico y estudiante de la carrera debe disponer de herramientas que le permitan parametrizar el comportamiento de sus variables en condiciones de operación y fuera de ella.

Tres de las correlaciones más utilizadas en ingeniería están disponibles en las librerías: **SciPy**, **Pandas** y **Pingouin**.

SciPy proporciona funciones para minimizar (o maximizar) funciones, Incluye solucionadores de problemas no lineales, programación lineal, mínimos cuadrados lineales como no lineales, búsqueda de raíces y ajuste de curvas.

Pandas es una biblioteca de Python dedicada a la manipulación y el análisis de datos es potente, flexible y fácil de usar

Ajuste de Curvas:

Para una interpolación lineal 1D solo se necesitan dos conjuntos de datos para interpolar, X ,Y y un tercer conjunto, Xnew de puntos para evaluar la interpolación:

Los datos pueden ser incorporados no solo como un arreglo Python, también pueden ser incorporados desde excel, o bien como un archivo plano, o en tiempo “Real” desde Arduino por ejemplo.

1. Las presiones de vapor del hexano y del heptano a distintas temperaturas son las siguientes:

T °C	P6, mmHg	P7, mm Hg
69	760	295
70	780	302
75	915	348
80	1020	426
85	1225	498
90	1405	588
95	1577	675
99.2	1765	760

Tomado de: <https://esmeraldavidal.files.wordpress.com/2012/01/bloque-1-flash.pdf>

Fig 2.3 Interpolación lineal usando Pandas

```

20 #@author: BURJA
21 #Datos Presion de Vapor HEXANO
22 import numpy as np
23 x = np.array([69.,70.,75.,80.,85.,90.,95.,99.2])
24 y = np.array([760.,780.,915.,1020.,1225.,1405.,1577.,1765.])
25 #Archivos planos/ o con excel
26 """
27 import pandas as pd
28 x=pd.read_csv('Datos_experimentales_T°C_data.csv')-Archivo plano
29 y=pd.read_excel('Datos_experimentales_PmmHg_data.xlsx')-Excel
30 """
31 #Construccion de la interpolacion
32 xnew = np.linspace(69, 99, num=99)
33 ynew = np.interp(xnew, x, y)
34 #Graficando
35 import matplotlib.pyplot as plt
36 plt.plot(xnew, ynew, '-', label='interpolacion lineal ')
37 plt.plot(x, y, 'o', label='datos')
38 plt.title('PRESION DE VAPOR DEL HEXANO')
39 plt.xlabel('TEMPERATURA °C')
40 plt.ylabel('PRESION mm Hg')
41 plt.legend(loc='best')

```

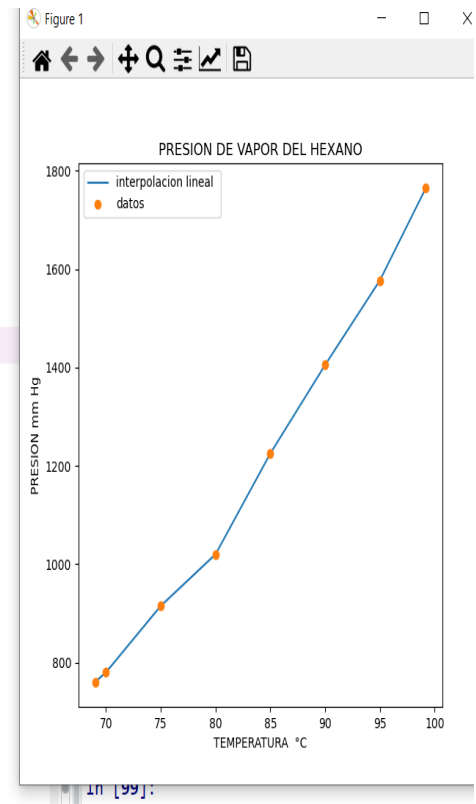


Fig 2.4 Interpolación Lineal usando Pandas desde Excel

Ajuste por polinomios.

Sintaxis:

`z= numpy.polyfit(x, y, deg, ... cov=False)[source]`

Parámetros:

x:	Variable Independiente	(x[i])
y:	Variable Dependiente	(y[i])
deg:	Grado del polinomio	
rcondfloat,	opcional. Error relativo valor predeterminado es: 2e-16 .	
cov=False	Determina la Covarianza si es True, Verdadero.	

Tabla 3-11b. CAPACIDADES CALORÍFICAS MEDIAS
 c_p en unidades molares consistentes. Temperatura de referencia: 25 °C

T, °C	CH ₄	C ₂ H ₆	C ₃ H ₈	n-C ₄ H ₁₀	C ₂ H ₄	C ₃ H ₆	C ₄ H ₈
26.85	8.445	12.611	17.608	23.351	10.432	15.305	20.522
50	8.595	12.950	18.188	24.070	10.720	15.736	21.167
100	8.902	13.701	19.409	25.63 i	11.340	16.676	22.548
150	9.219	14.464	20.614	27.174	11.949	17.612	23.897
200	9.551	15.225	21.790	28.674	12.540	18.530	25.200
250	9.895	15.973	22.925	30.130	13,110	19.421	26.452
300	10.243	16.704	24.017	31.527	13.657	20.281	27.649
350	10.594	17.413	25.062	32.864	14.180	21.107	28.790
400	10.942	18.099	26.063	34.143	14.681	21.899	29.878
450	11.286	18.759	27.018	35.364	15,159	22.657	30.915
500	11.624	19.396	27.932	36.530	15.616	23.382	31.902
550	11.954	20.007	28.804	37.642	16.052	24.075	32.843
600	12.276	20.595	29.613	38.704	16.469	24.738	33.740
650	12.590	21.160	30.433	39.718	16.868	25.372	34.597
700	12.894	21.703	31.195	40.688	17.249	25.979	35.414
750	13.190	22.225	31.924	41.615	17.614	26.560	36.196
800	13.476	22.727	32.622	42.503	17.965	27.116	36.943
850	13.754	23.209	33.292	43.354	18.300	27.650	37,660
900	14.022	23.673	33.933	44,169	18.623	28.161	38.346
950	14.283	24.120	34.550	44.951	18.932	28.653	39.004
1000	14.535	24.551	35.142	45.702	19.230	29.126	39.637
1050	14.79	24.967	35.711	46.424	19.517	29.580	40.244
1100	15.015	25.367	36.260	47,119	19.793	30.017	40.829
1150	15.244	25.754	36.788	47.788	20.059	30.438	41.392
1200	15.466	26.127	37,297	48.432	20.316	30.844	41.934

Tomado de:

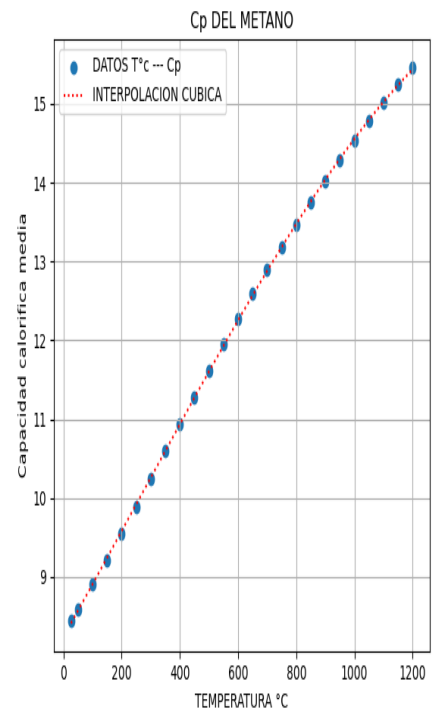
<https://www.modeloingenieria.edu.ar/images/IntegracionIII/Material-ext/20102BT24022421824010402121073.pdf>

Fig 2.5 Información de las capacidades caloríficas de diferentes compuestos

```

5 @author: BORJA
6 """
7 import numpy as np
8 import matplotlib.pyplot as plt
9 #DATOS T°C CAPACIDAD CALORIFICA
10 x = np.array([26.85,50.0,100.0,150.0,200.0,250.0,300.0,350.0,
11              400.0,450.0,500.0,550.0,600.0,650.0,700.0,750.0,
12              800.0,850.0,900.0,950.0,1000.0,1050.0,1100.0,1150.0,1200.0])
13
14 y = np.array([8.445,8.595,8.902,9.219,9.551,9.895,10.243,10.594,10.942,11.286,
15              11.624,11.954,12.276,12.590,12.894,13.190,13.476,13.754,14.022,
16              14.283,14.535,14.79,15.015,15.244,15.466])
17
18 TC=np.linspace(26,1200,1000) #Vector Temperatura
19
20 polinomio=np.polyfit(x,y,3) #Ajuste a polinomio de grado 3
21 print('Los valores de los coeficientes son\n',polinomio)
22 #Graficacion
23 plt.scatter(x, y,label='DATOS T°C --- Cp')
24 plt.plot(TC, np.polyval(polinomio,TC), ':r',label='INTERPOLACION CUBICA')
25 plt.xlabel('TEMPERATURA °C')
26 plt.ylabel('Capacidad calorifica media')
27 plt.legend()
28 plt.title('Cp DEL METANO')
29 plt.grid()
30 plt.show()

```



Los valores de los coeficientes son
 $[-1.10681462 \times 10^{-9} \quad 8.38113659 \times 10^{-7} \quad 6.58481876 \times 10^{-3} \quad 8.24080423 \times 10^{+00}]$

In [139]:

Fig 2.6 Ajuste de la Capacidad Calorífica por medio de polinomios

```

5 @author: BORJA
6 """
7 import numpy as np
8 from scipy import interpolate
9 import matplotlib.pyplot as plt
10 from matplotlib import cm
11 from matplotlib.ticker import LinearLocator, FormatStrFormatter
12 x=np.array([300,350,400,450,500]) #TEMPERATURA
13 y=np.array([150,200,250,300]) #PRESION
14 z=np.array([[3073.3,3174.7,3277.5,3381.7,3487.6],
15             [3072.1,3173.8,3276.7,3381.1,3487.0], #ENTALPIA
16             [3070.9,3172.8,3275.9,3380.4,3486.5],
17             [3069.7,3171.9,3275.2,3379.8,3486.0]])
18 f=interpolate.interp2d(x,y,z,'cubic') #INTERPOLACION 2D
19 zi=f(420,190)
20 print(zi)
21 X, Y = np.meshgrid(x, y) #MALLADO
22 fig = plt.figure() #VARIABLE FIG DONDE VIVE LA GRAFICA
23 ax = fig.add_subplot(111, projection = '3d')#NOMBRE GRAFICA AX EN 3D
24 #GRAFICACION Y ETIQUETAS
25 ax.view_init(10,35)
26 ax.set_xlabel('Temperatura (K)')
27 ax.set_ylabel('Presion (kPa)')
28 ax.set_zlabel('Entalpia (kJ/Kg)')
29 ax.set_title('Entalpia de vapor sobrecalentado')
30 surf=ax.plot_surface(X, Y, z, cmap=cm.coolwarm,
31                     linewidth=0, antialiased=False)
32 ax.set_zlim(3000, 3500)
33 ax.zaxis.set_major_locator(LinearLocator(10))
34 ax.zaxis.set_major_formatter(FormatStrFormatter('%0f'))
35 fig.colorbar(surf, shrink=.3, aspect=7) #BARRA DE COLOR

```

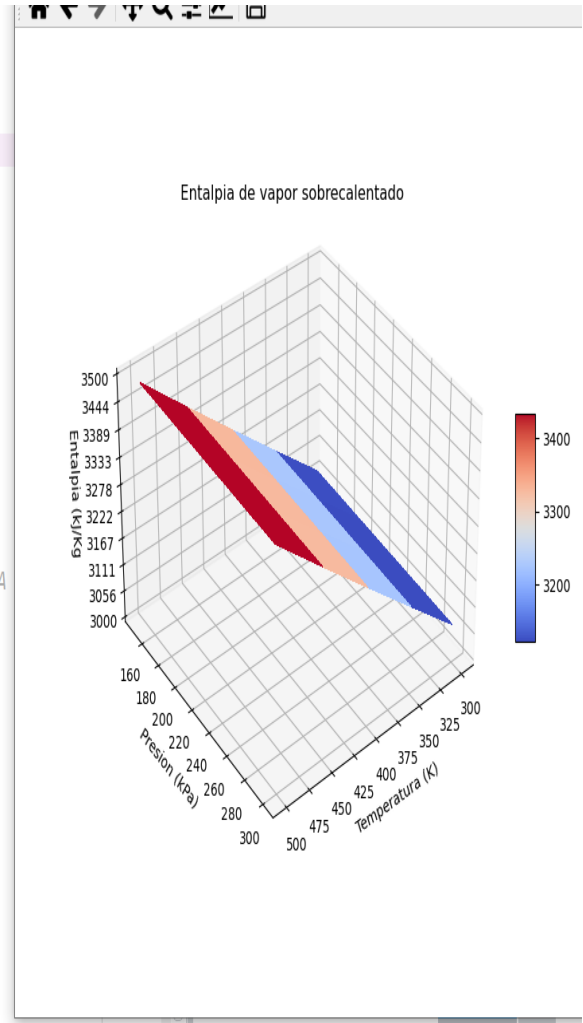


Fig 2.7 Interpolación lineal en grafico de 3D Temperatura-Presión-Entalpia

```

5 @author: BORJA
6 """
7 import numpy as np
8 from scipy.optimize import curve_fit
9 import matplotlib.pyplot as plt
10
11 x = np.array([[15,16,24,13,21,16,22,18,20,16],\
12              [70,65,71,64,84,86,72,84,71,75]])
13 z = np.array([156,157,177,145,197,184,172,187,157,169])
14 def f(x,a,b,c):
15     return a+b*x[0]+c*x[1]
16 param,_=curve_fit(f,x,z)
17 print(param)
18 X=x[0,:]
19 Y=x[1,:]
20 fig = plt.figure()#VARIABLE FIG DONDE VIVE LA GRAFICA
21 ax = fig.add_subplot(111, projection = '3d')#NOMBRE GRAFICA AX
22 #fig = plt.figure()
23 #ax = fig.gca(projection='3d')
24 ax.view_init(15,60)
25 ax.scatter(X, Y, z)
26 ax.set_xlabel('Temperatura')
27 ax.set_ylabel('Humedad')
28 ax.set_zlabel('Crecimiento')
29 plt.title('Crecimiento de microorganismos')
30 X = np.arange(13,24,0.5)
31 Y = np.arange(60, 85, 0.5)
32 X, Y = np.meshgrid(X, Y)
33 Z=f(np.array([X,Y]),*param)
34 surf = ax.plot_surface(X, Y, Z,cmap=plt.cm.coolwarm,
35 linewidth=)

```

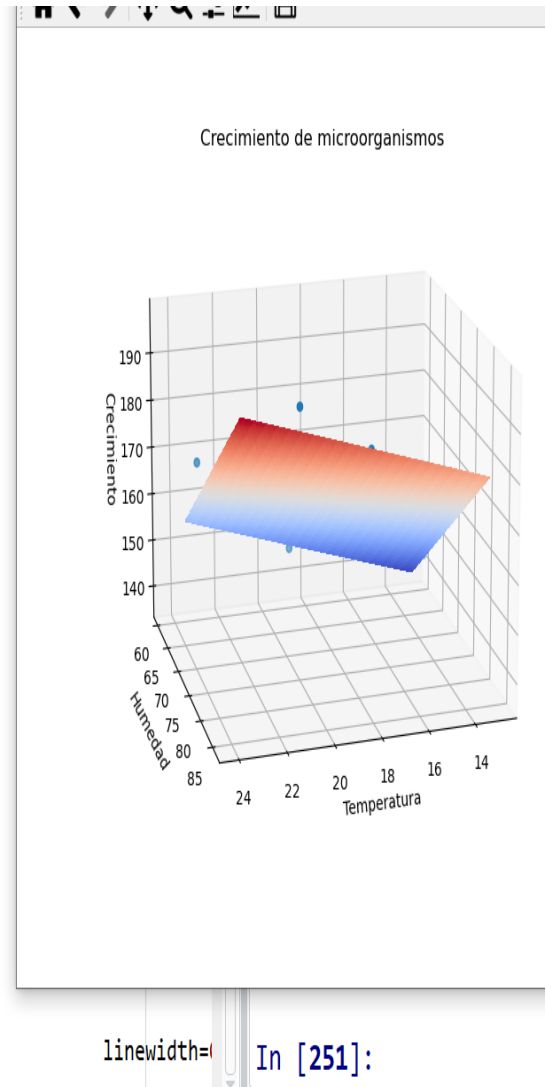


Fig 2.8 Interpolación en 3D Temperatura-Humedad-Crecimiento Microbiano

2.2 Construcción de un simulador usando los módulos vistos.

Python dispone de librerías que permiten crear aplicaciones en entorno tipo “ventanas” de una manera simple y sencilla denominada **“Tkinter”**.

“Tkinter”, permite la creación de “interfaz gráfica de usuario, (GUI) denominados **“Frames”**, los cuales son, tipo de ventanas, marcos, formularios, cada uno de ellos contienen una serie de atributos y funcionalidades que establecen una visualización, posicionamiento y control del objeto denominados **“widgets”** o objetos definidos por el usuario. El

conjunto de widgets permite diseñar aplicaciones con un alto grado de profesionalismo.

El widget es un programa diseñado para facilitar el acceso a las funciones más usadas de una aplicación informática cuya taxonomía son entre otros tipos marcos, (Frame), etiquetas, (Label), texto, (Text), botones, (Button), listas, (Listbox), barra de opciones, (Scrollbar), y la creación de menú con opciones definidas por el usuario entre otras particularidades.

Ejemplo:

Incorporando un objeto tipo ventana

```
5 @author: BORJA
6 """
7 #Creacion de un objeto tipo "Ventana"
8 from tkinter import *      #importacion de la libreria tkinter
9 Gui = Tk()                 #Se crea el objeto denominado Gui
10 mainloop()                #Se cierra el ciclo
```

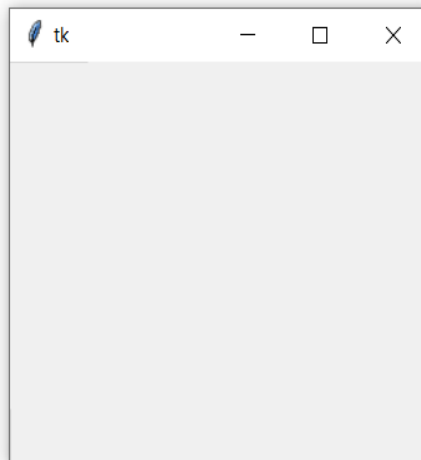


Fig 2.9 Visualización de un “Objeto” denominado “Ventana”

Propiedades o Atributos:

text =

Es una propiedad para los widgets como Label o Button entre otros, cuya finalidad es la incluir un texto dentro del widget, este texto puede contener saltos de líneas en caso de ser necesario y también se puede utilizar una variable para indicar la cadena de texto a usar.

Incorporando un objeto tipo ventana más “text”

```
5 @author: BORJA
6 """
7 from tkinter import * #Se importa todo de Tkinter
8 import tkinter as tk #Se cre alalias
9 texto = tk.Entry(font=("Algerian",15), #atributos de texto
10                  width=20).place(x=60,y=8) #tipo, grosor y lugar
11 tk.mainloop() #Notese el punto
```

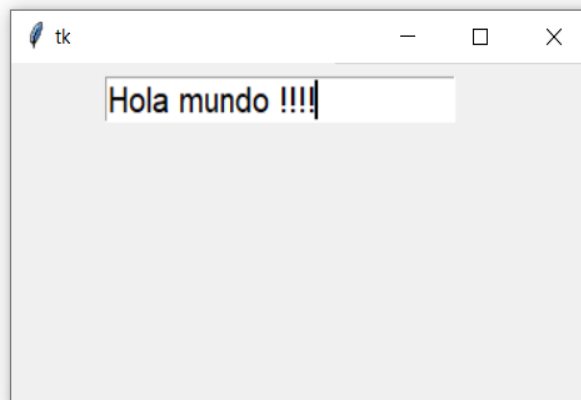


Fig 2.10 Incorporando un objeto “ventana” con edición

```

5 @author: BORJA
6 """
7 from tkinter import *
8 import tkinter as tk
9 formu=Tk()
10 ventana = Frame(formu,width=300,height=220)
11 ventana.pack()
12 titulo = tk.Label(text="CONDICIONES OPERACION",font=("Arial",18),
13                   fg="black", bg="aliceblue").place(x=5,y=8)
14 lb1 = tk.Label( text="PRESION",fg="black", bg="ivory").place(x=10,y=50)
15 texto1 = tk.Entry(font=("Algerian",15), width=10).place(x=90,y=50)
16 lb2 = tk.Label( text="TEMPERATURA",fg="black", bg="ivory").place(x=5,y=90)
17 texto2 = tk.Entry(font=("Algerian",15), width=10).place(x=90,y=90)
18 boton = tk.Button(text="GUARDAR").place(width=60,x=15,y=140)
19 tk.mainloop()

```

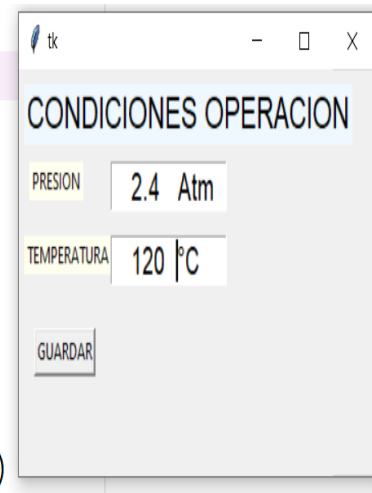


Fig 2.11 Incorporando un objeto con información de operación

```

8  #@author: BORJA
9  from tkinter import *
10 import tkinter as tk                #importamos libreria
11
12 ventana =Tk()                        #Se Crea objeto ventana
13 ventana.title("SIMULACION DE PROCESOS QUIMICOS") #agregar Titulo
14
15 ventana.geometry('500x700')          #geometria
16 ventana.configure(background='dark turquoise') #Color de fondo
17
18 image=tk.PhotoImage(file="amigos10.gif") #Incorpora una imagen
19
20 image=image.subsample(2,2)           #Dimensiones
21 Label=tk.Label(image=image)          #etiqueta
22
23 Label.place(x=0,y=0,relwidth=1.0,relheight=1.0) #Geometria
24
25 Label.pack()                         #Se empaca
26 ventana.mainloop()                  #Cerrar el ciclo
27
28
29
30
31
32

```



Fig 2.12 Incorporando una imagen dentro del objeto ventana

Widgets varios:

Deslizadores verticales y horizontales con la ejecución de la función en el botón

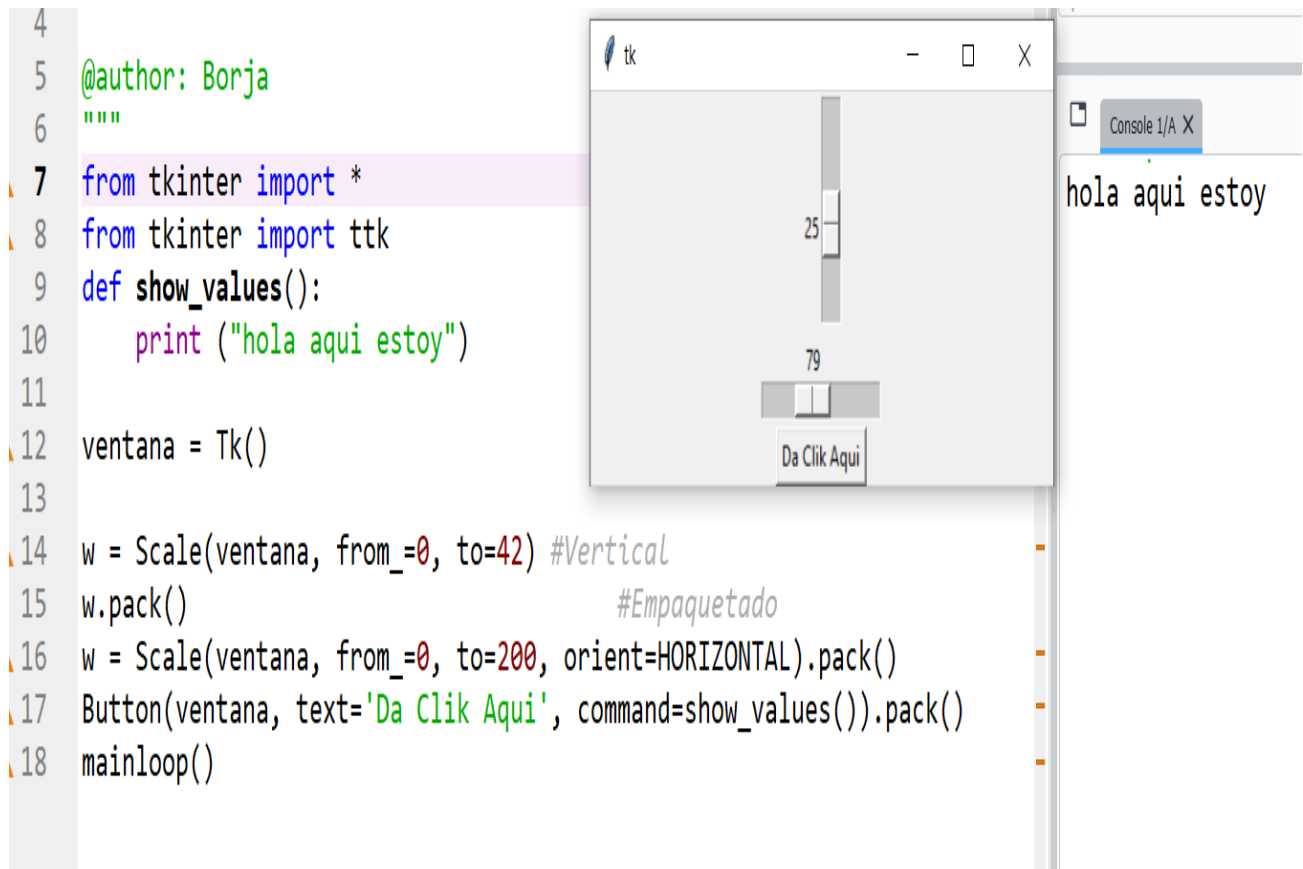


Fig 2.13 Deslizadores horizontales y verticales

Varios:

```

5 @author: Borja
6 """
7 from tkinter import * #Se importa la libreria
8 def Ver(value):        #Funcion que imprime el valor del Widget
9     print(value)
10
11 ventana = Tk()         #Se crea el objeto "ventana"
12 scl = Scale(ventana,
13     from_=-50, to=50, tickinterval=10, #Atributos del objeto
14     length=400, resolution=10, showvalue=NO,
15     orient='horizontal', command=Ver, #Ejecucion de funcion "ver"
16     label="SIMULACION DE PROCESOS") #Etiqueta
17 scl.pack(expand=YES, fill=Y)
18
19 def VerValor(): #funcion para ver el valor actual
20     print('Valor actual:', scl.get())
21
22 btn = Button(ventana,
23     text="Valor del Slider", command=VerValor)
24     #Objeto boton que ejecuta "VerValor"
25 btn.pack()
26
27 ventana.mainloop()

```

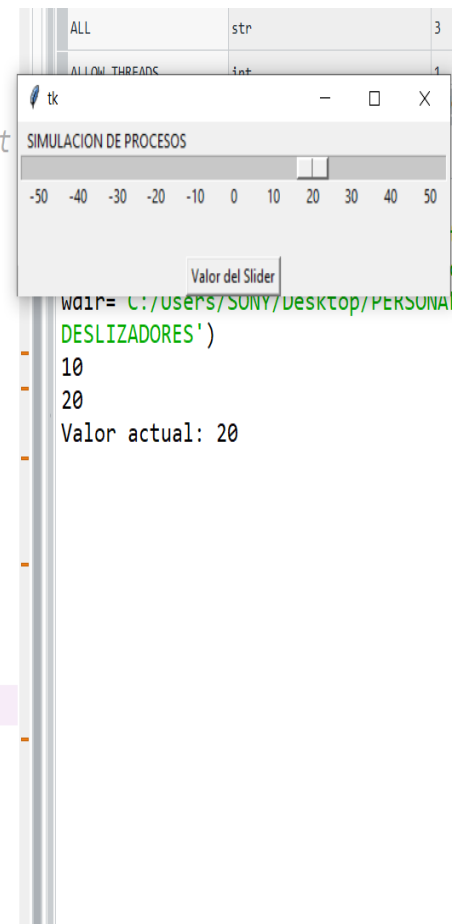


Fig 2.14 Ventanas con mensajes:

```

5  @author: BORJA
6  """
7  from tkinter import *                                #Toda la libreria Tkinter
8  from tkinter import messagebox                       #importa modulo de mensajes
9  ventana=Tk()
10 ventana.title('SIMULACION DE PROCESOS')              #Titulo
11 ventana.geometry('350x200')                          #Dimensiones
12 def clicked():
13     messagebox.showinfo('ERROR DE CALCULO!!!',
14                           'divides entre cero')
15 boton=Button(ventana,text='da click',command=clicked)#Ejecuta funcion
16 boton.grid(column=0,row=0)
17 ventana.mainloop()                                  #Cierra el ciclo
18

```

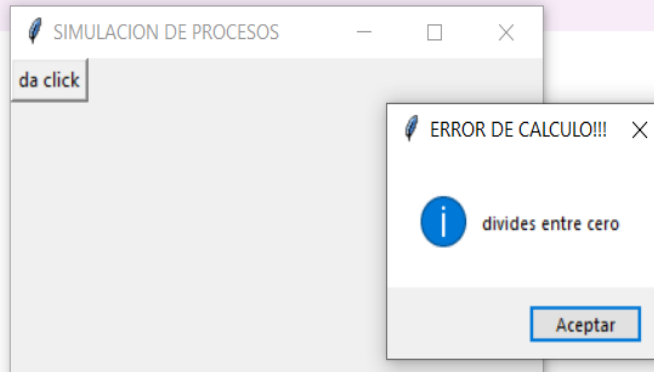


Fig 2.15 Creando mensajes interactivos con el usuario

CREANDO MENÚS INTERACTIVOS.

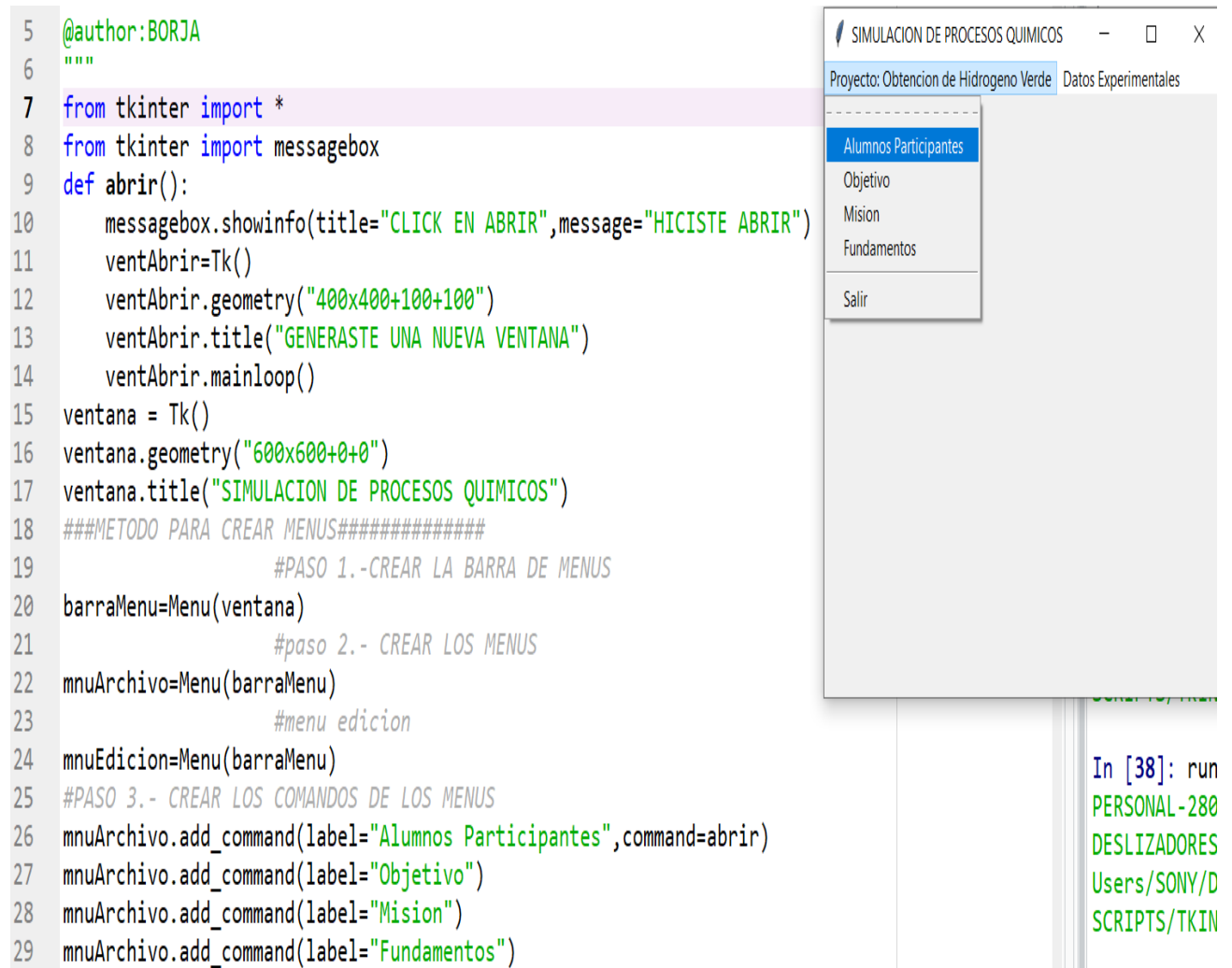


Fig 2.16 Creando Menús interactivos con el usuario

```

29 mnuArchivo.add_command(label="Fundamentos")
30 #SEPARADOR
31 mnuArchivo.add_separator()
32 ####salir y se destruye la aplicacion
33 mnuArchivo.add_command(label="Salir",command=ventana.destroy)
34 #####333
35 mnuEdicion.add_command(label="Bitacora de Trabajo")
36 mnuEdicion.add_command(label="Comportamiento-Variables")
37 mnuEdicion.add_command(label="Analisis Tecnico-Economico")
38 mnuEdicion.add_command(label="Validacion-Experimental")
39 #####
40 #PASO 4.- AGREGAR LOS MENUS A LA BARRA DE MENUS
41 barraMenu.add_cascade(label="Proyecto: Obtencion de Hidrogeno Verde"
42 menu=mnuArchivo)
43 #####3
44 barraMenu.add_cascade(label="Datos Experimentales",menu=mnuEdicion)
45 #paso 5.- INDICAMOS QUE LA BARRA DE MENUS ESTARA EN EL OBJETO "VENTANA"
46 ventana.config(menu=barraMenu)
47 ventana.mainloop()

```

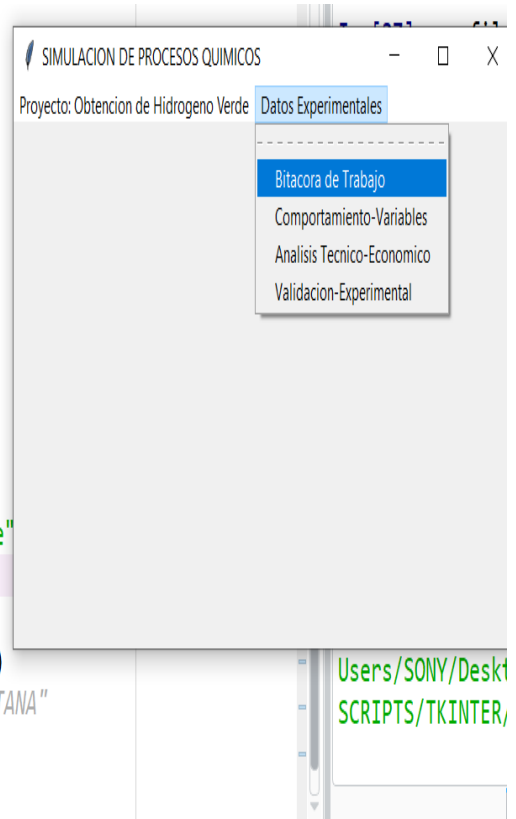


Fig 2.17 Creando Menús interactivos con el usuario II

Objeto Combo-Box

```

5 @author: BORJA
6 """
7 import tkinter.ttk as ttk
8 combobox=ttk.Combobox(values=["Entalpia", "Cp","Presion","Temperatura","Viscocidad"])
9 combobox.set("Propiedades Termodinamicas")
10 combobox.configure(width=25)
11 combobox.pack()
12 combobox.master.title("Simulacion de Procesos")
13 combobox.mainloop()
14
15

```

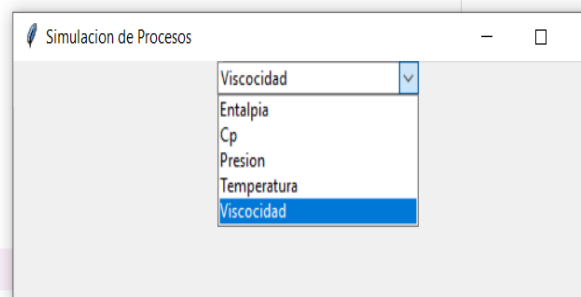


Fig 2.18 Creando un objeto tipo Combo-Box

Barra de progreso

```
8 #@author: BORJA
9
10 import tkinter.ttk as ttk           #Invocando a la libreria
11 Barra_progreso=ttk.Progressbar()     #Invocando al metodo
12 Barra_progreso.start(10)             #Valor de Inicio
13 Barra_progreso.pack(fill='x')        #Llenado
14 Barra_progreso.master.title('Procesando Algoritmo')
15 Barra_progreso.mainloop()           #Cerrar el ciclo
16
```

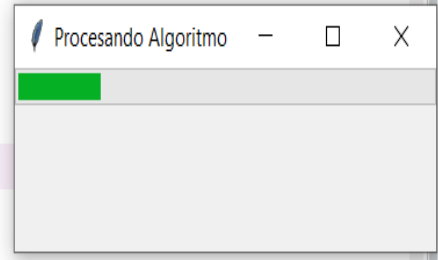
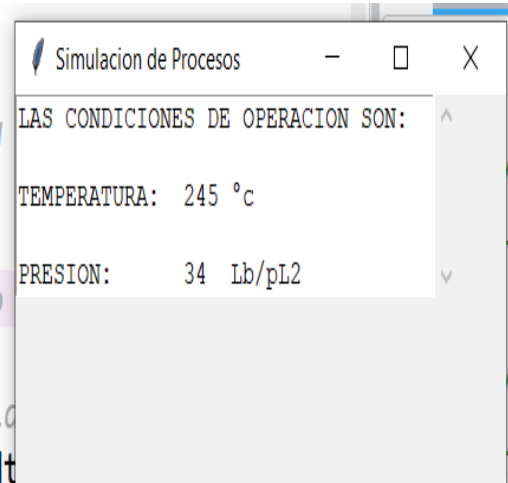


Fig 2.19 Creando una barra de progreso

Editor-Ventana para texto:

```
5 #@author: BORJA
6 """
7 from tkinter import *               #Libreria
8 from tkinter import scrolledtext   # Metodo
9
10 editor=Tk()                         #Definicion del objeto
11 editor.title("Simulacion de Procesos")
12 editor.geometry('360x200')          #Geometria
13 texto=scrolledtext.ScrolledText(editor,width=36)
14 texto.grid(column=0,row=0)
15 texto.mainloop()                   #Cerrar el ciclo
```

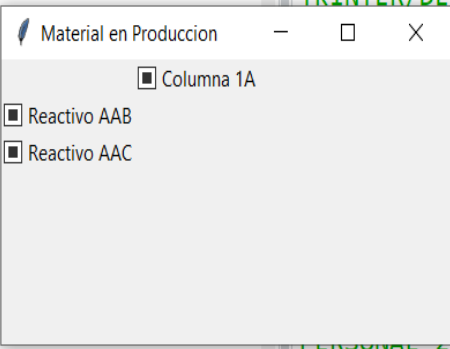


In [9]:
TKINTER/

Fig 2.20 Creando una ventana como editor

Lista de Verificación.

```
5 @author: BORJA
6 """
7 from tkinter import *           #Libreria
8 from tkinter.ttk import *      #Todo el Metodo
9
10 check =Tk()                    #Definicion del objeto
11 check.title("Material en Produccion")
12 check.geometry('360x200')      #Geometria
13 chk_state=BooleanVar()
14 chk_state.set(True)
15 chk=Checkbutton(check,text='Columna 1A')
16 chk.grid(column=20,row=30)
17 chk=Checkbutton(check,text='Reactivo AAB')
18 chk.grid(column=0,row=40)
19 chk=Checkbutton(check,text='Reactivo AAC')
20 chk.grid(column=0,row=60)
21 check.mainloop()
```



Console 1/A X

TKINTER/DES
PERSONAL-28

In [17]: ru
TKINTER/DES

Material en Produccion

Columna 1A

Reactivo AAB

Reactivo AAC

In [20]: ru
TKINTER/DES
PERSONAL-28

In [21]: ru

Fig 2.21 Creando una lista de verificación

2.3 Interpretación de resultados.

Basado en los códigos anteriores el alumno será capaz de reinterpretarlo, manipularlo y construir su propia aplicación, adecuada a sus propias necesidades o de la empresa todo esto con código abierto.

Ejemplos:



Fig 2.22 Elaboración de una “Aplicación” basada en “menús” para la producción de Bio-Carbón



Fig 2.23 Elaboración de una “Aplicación” basada en “menús” para la producción de Bio-Carbón, mostrando las variables y ecuaciones

MENU DEL PROYECTO DE SIMULACIÓN.

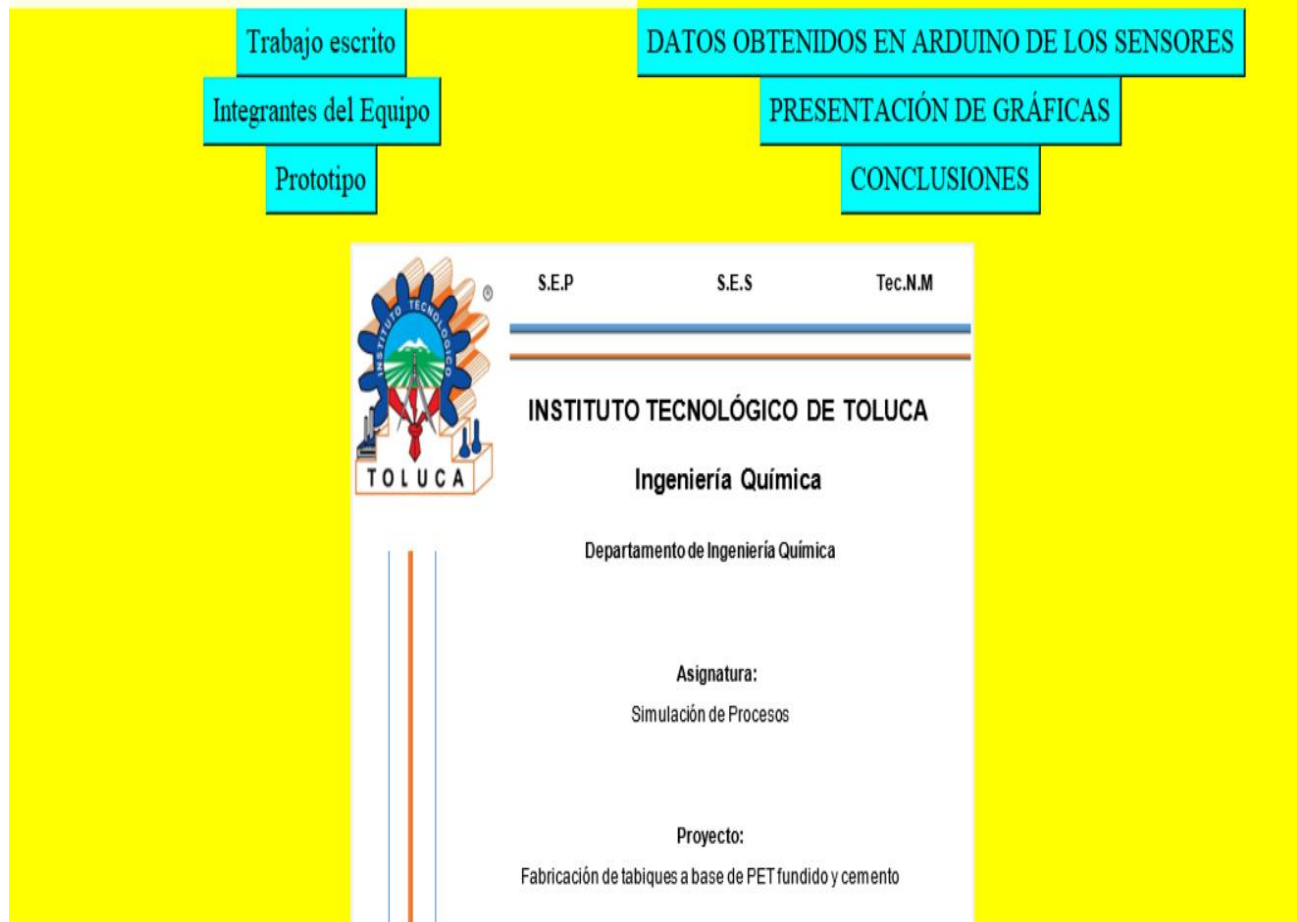


Fig 2.24 proyecto “Fabricación de tabiques de PET fundido y cemento”, con botones

SENSORES UTILIZADOS



Sensor De
Temperatura Y
Humedad Dht22



ASensor de
viscosidad
Modelo:



Modulo Sensor
De
Temperatura

Fig 2.25 Sensores dentro de la aplicación para adquirir información en tiempo "Real"



Fig 2.26 Despliegue de diferentes vertientes del proyecto “Desmaquillante natural FaceClean”

Tema 3: Simulación comercial.

3.1 Manejo de un simulador comercial.

Una visión global de las diferentes fuentes para el modelado y simulación para la destilación.

Resources for Distillation Modeling and Simulation

Here we provide some generic links to other sites related to the modeling of distillation columns and separation processes as well as pages discussing thermodynamic and physical property data, etc. that might be helpful in solving your separation processes at hand. If you have suggestions for additions or if certain links have become invalid, please e-mail us.

Process Engineering and Simulation Software

[Cape-Open Organisation](#)

ASPEN Plus, HYSYS, [Aspentech](#)

ChemCad, [ChemStations](#)

[COCO](#), [Amsterchem](#)

DESIGN II, [WinSim](#)

gProms, [Process Engineering Systems](#)

PRO/II, [SimSci \(AVEVA\)](#)

ProMax, [Bryan Research & Engineering](#)

ProSimPlus, [ProSim](#)

Symmetry (formerly VMGsim), [Schlumberger](#)

UniSim, [Honeywell](#)

Column Internals Vendors

[ACS](#)

[Envimac](#)

[Jintai](#)

[Hat](#)

[Koch-Glitsch](#)

[Lantec](#)

Separation Technology

[Fractionation Research, Inc.](#)

[Separations Research Program](#)

[EFCE Working Party on Fluid Separations \(Distillation and Absorption\)](#)

[Frank Wijn distillation pages \(from archive\)](#)

[Japan Society of Industrial Machinery \(JSIM\) manufacturers list on](#)

[Environmental Equipment](#)

[Google Index of ChemSep.Org on 'Efficiency'](#)

[Google Patent search on 'tray efficiency'](#)

[Google Scholar search on 'nonequilibrium distillation'](#)

Books/Tutorials

[Separation Process Principles](#) by [Seader](#) and Henley

[PhD Dissertations under Ross Taylor](#)

[The Art of Distillation](#) by John French

[Wikipedia: Distillation](#)

Thermodynamics

[Data and Property Calculation Websites - Mansoori](#)

[DECHEMA Detherm](#) / [Dortmund Data Bank](#) (for example [data](#))

Fig 3.1 Visión global de simuladores comerciales de modelado y simulación

Bases de Datos:

Databases

Here you will find a collection of our databases on mass transfer tests and physical properties. These databases, in text or XML format, can be loaded in **ChemSep** to generate automated reports. All data originates from published results in journals, magazines, and conference presentations and was abstracted using [ScanIt](#).

Distillation Test Data ([How to - tutorial](#) , [book](#))

[Structured Packings](#)

Random Packing

Absorption Test Data

- under construction -

LL Extraction Test Data

- under construction -

Vapor-Liquid Equilibria Data ([How to - Tutorial](#) , [book](#))

[Binary VLE](#)

Diffusivity Data

[Binary Liquid Diffusivities](#)

[Infinite dilution diffusivities](#) from [Ind.Eng.Chem.Res. 41 p. 3326-3328](#)

Viscosity Data

- under construction -

This page is under construction. Submissions are welcome.

Fig 3.2 Bases de datos comerciales y de libre acceso

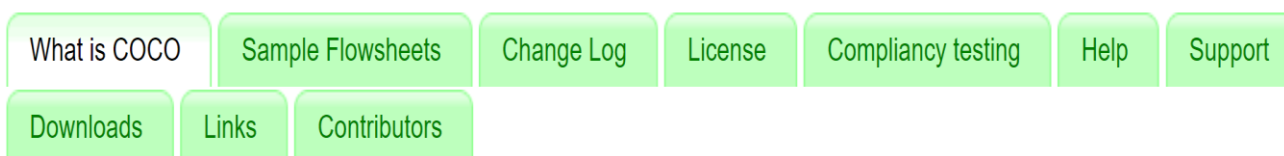
Propuesta de uno de los Simuladores de procesos con software libre para la materia de simulación de procesos de la carrera de Ingeniería Química

1.- COCO

url para descargar y licencia de uso

<https://www.cocosimulator.org/index.html>

cape open to cape open simulation environment



What is COCO?

COCO (CAPE-OPEN to CAPE-OPEN) is a free-of-charge CAPE-OPEN compliant steady-state simulation environment consisting of the following components:



COFE - the CAPE-OPEN Flowsheet Environment is an intuitive graphical user interface to chemical flowsheeting. COFE has sequential solution algorithm using automatic tear streams. COFE displays properties of streams, deals with unit-conversion and provides plotting facilities.

Fig 3.3 Página principal del software libre “COCO”

Es un simulador secuencial gratuito, y libre de estado estacionario, desarrollado por la empresa Amsterchem. Incluye un entorno para diagramas de flujo de proceso, operaciones unitarias, paquete de cinética de reacciones y un paquete termodinámico.

Dado que ha sido diseñado con estándares abiertos CAPE-OPEN, permite interoperabilidad con otras aplicaciones tales como HTRI y Prosim.

Dentro del ejecutable se incluye también un simulador de procesos de separación (destilación, extracción, absorción) llamado ChemSep, en su versión light (máximo de 150 etapas de equilibrio y 10 componentes), comprende un amplio espectro de compuestos químicos, así como una gama de reacciones en diferentes tipos de reactores

Comprende cuatro aplicaciones ligadas entre ellas que son TEA, COFE, CORN y COUS o bien COSCOUS.

TEA, Termodinámica Aplicada a la Ingeniería, (Thermodynamics Applied to Engineering), es una base de datos que contiene en su versión gratuita más

de 4000 componentes y mas de 500 métodos para el cálculo de propiedades fisicoquímicas de los compuestos químicos.

COFE, Permite la generación de diagramas de procesos químicos, así como sus corrientes de flujo, definir equipos de proceso y la termodinámica suficiente para el cálculo de las propiedades físico químicas de sus componentes.

CORN. En él se pueden modelar diferentes tipos de reactores como por ejemplo reactores de conversión, de equilibrio, de conversión fija, de Gibbs CSTR, PFR entre otros.

Solo permite simulaciones en estado estacionario, y no realiza evaluaciones económicas.

Se puede descargar de:

www.cocosimulator.org/index_download.html

Tutoriales:

http://www_chemsep.org/book/contents.html

ejemplos:

<http://www.chemsep.org/book/docs/book2.pdf#page=11>

Una somera descripción mediante imágenes de las pantallas principales:

Se puede iniciar con COFE, por ejemplo, adicionando los componentes y de ahí invocar a ChemSep, como se observa.

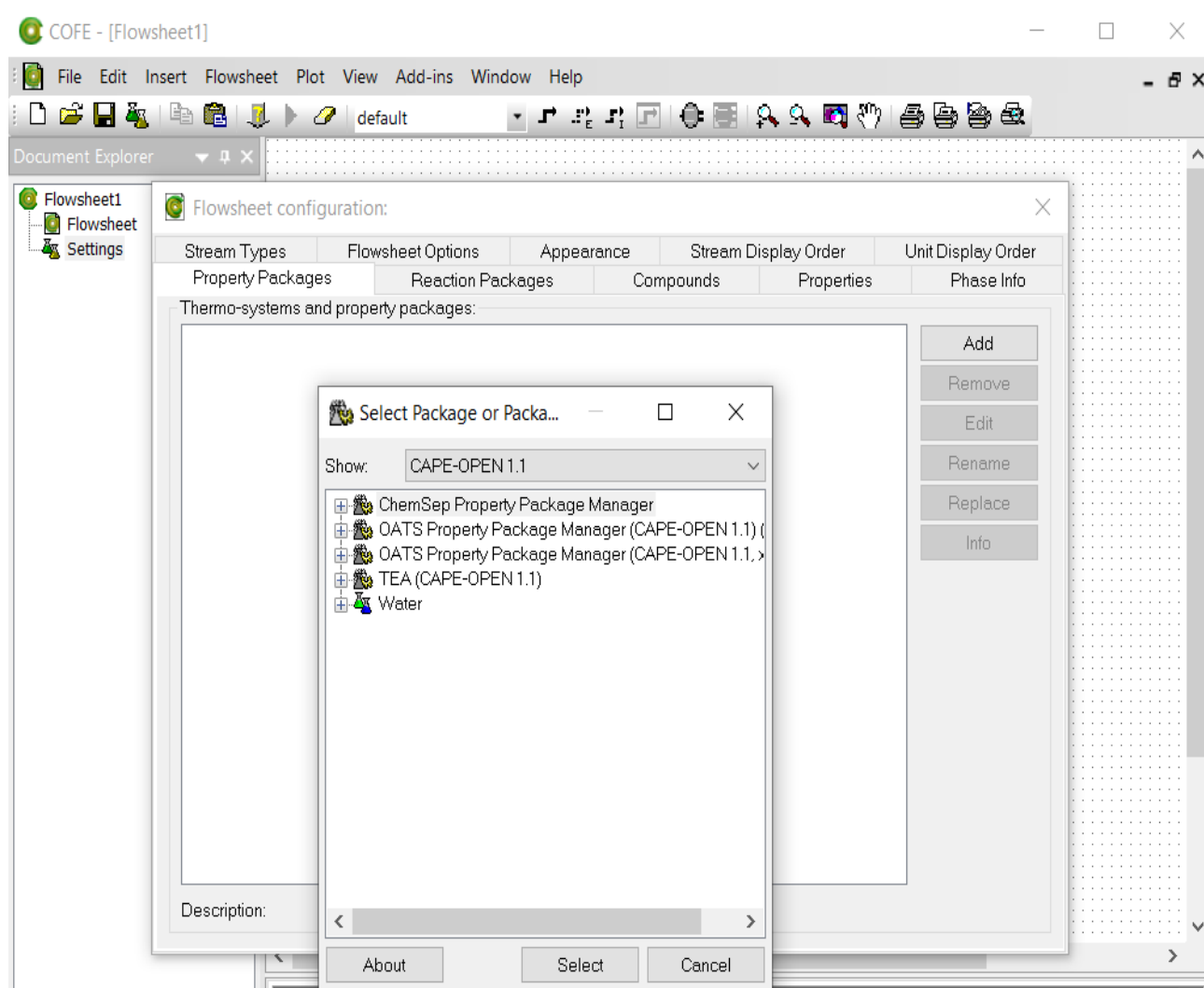


Fig 3.4 Pantallas de inicio con “cofe” y la invocación a “ChemSep”

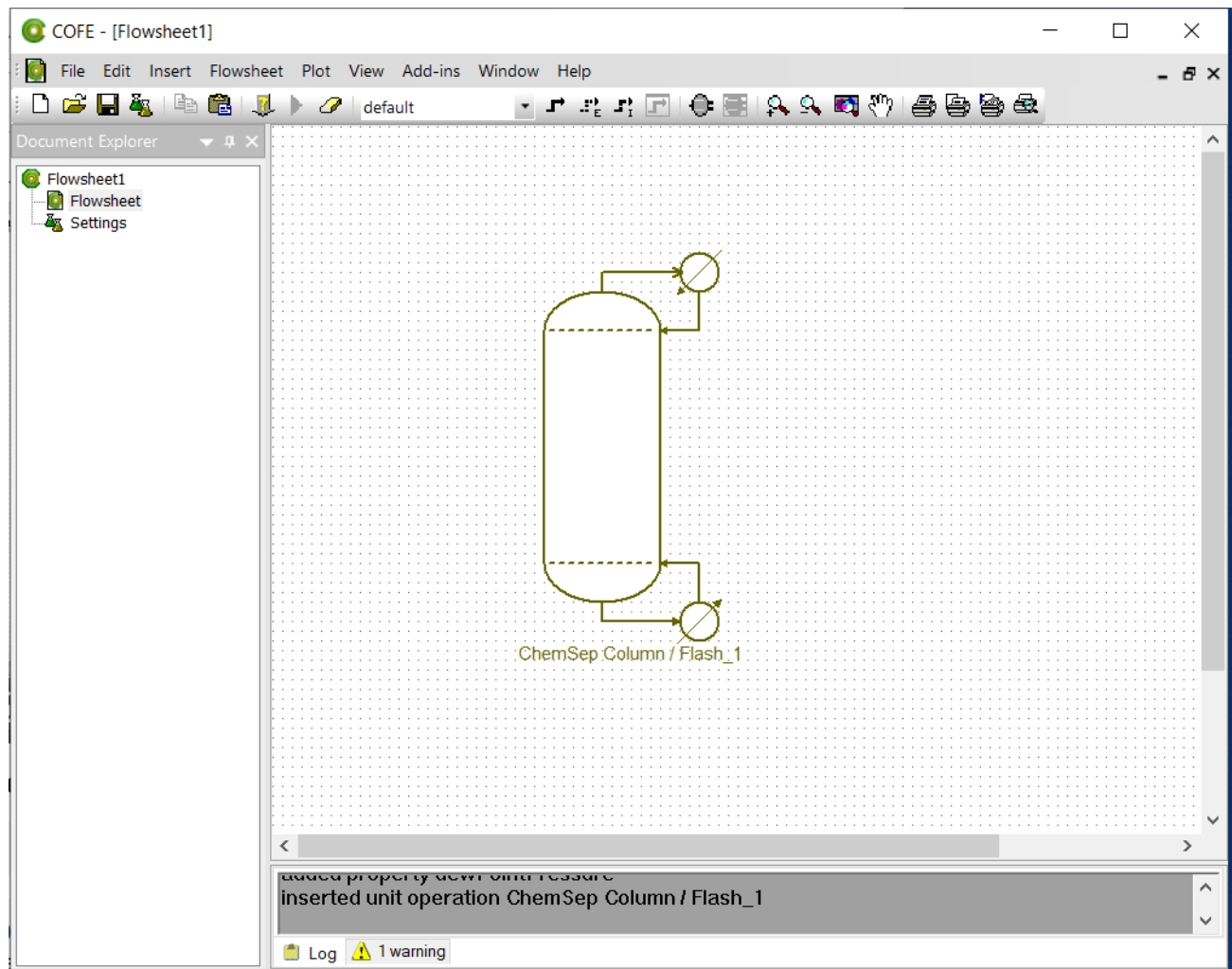


Fig 3.5 Definiendo la columna de destilación a utilizar.

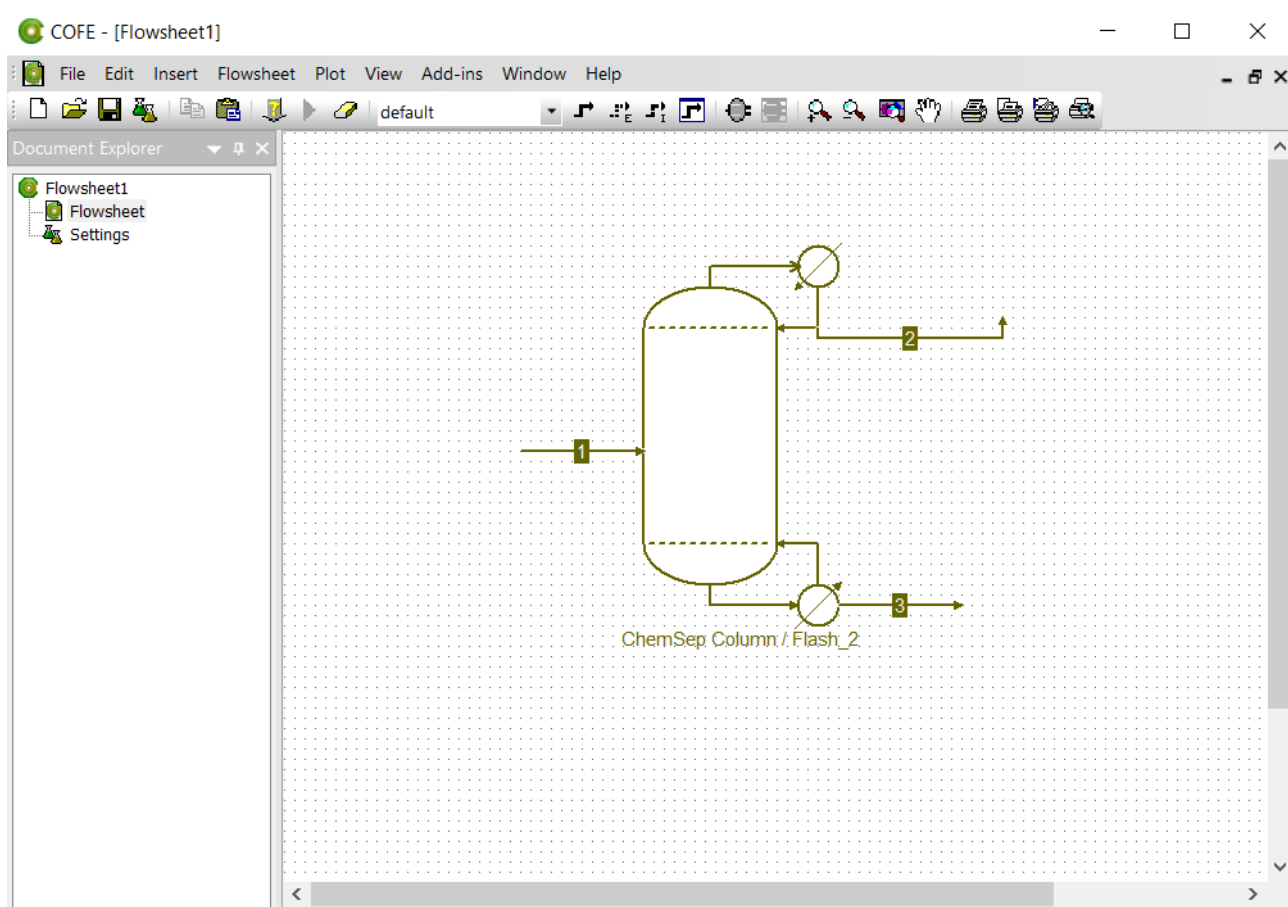


Fig 3.6 Configurando las corrientes del proceso

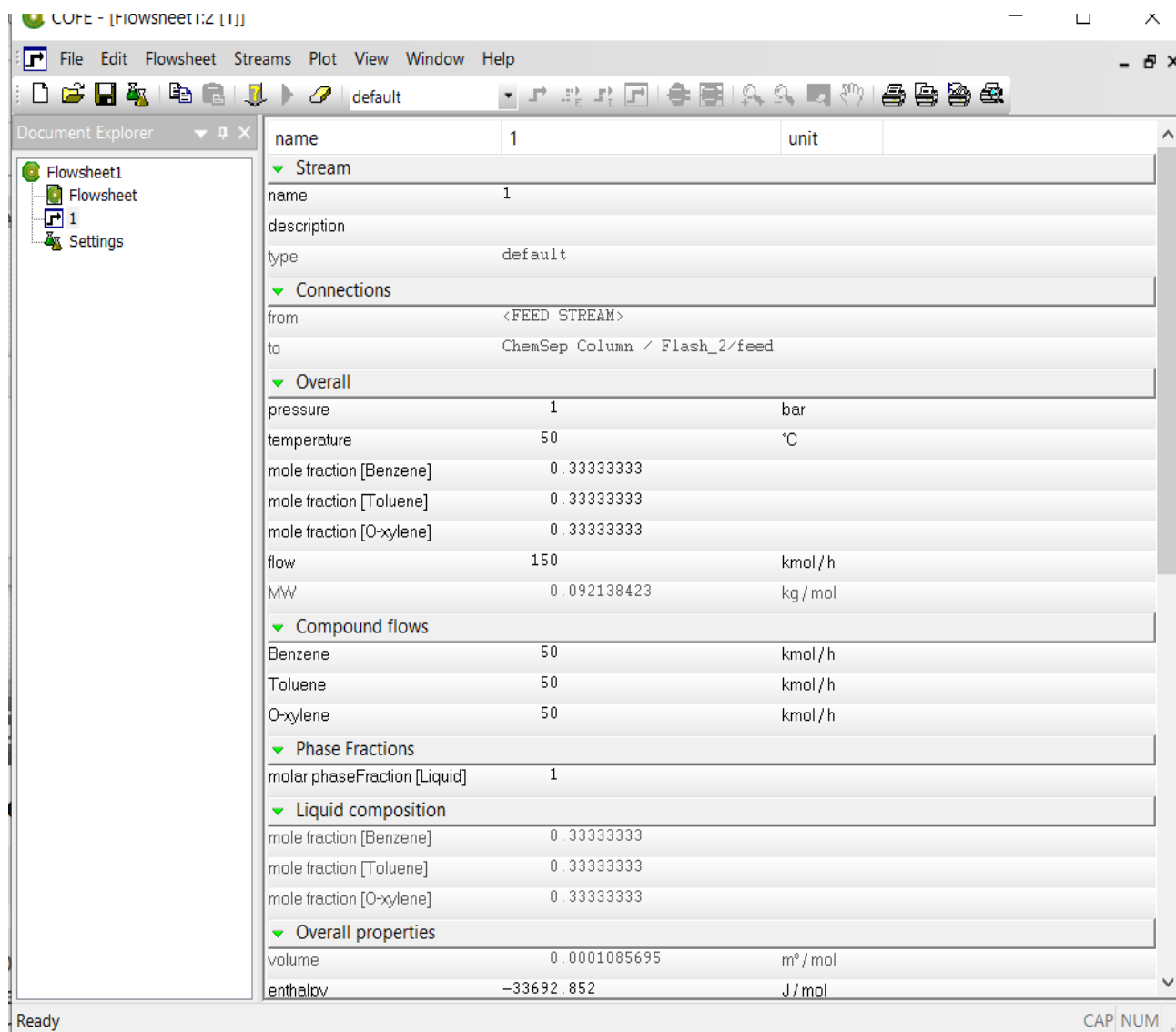


Fig 3.7 Capturando las condiciones de operación de la alimentación.

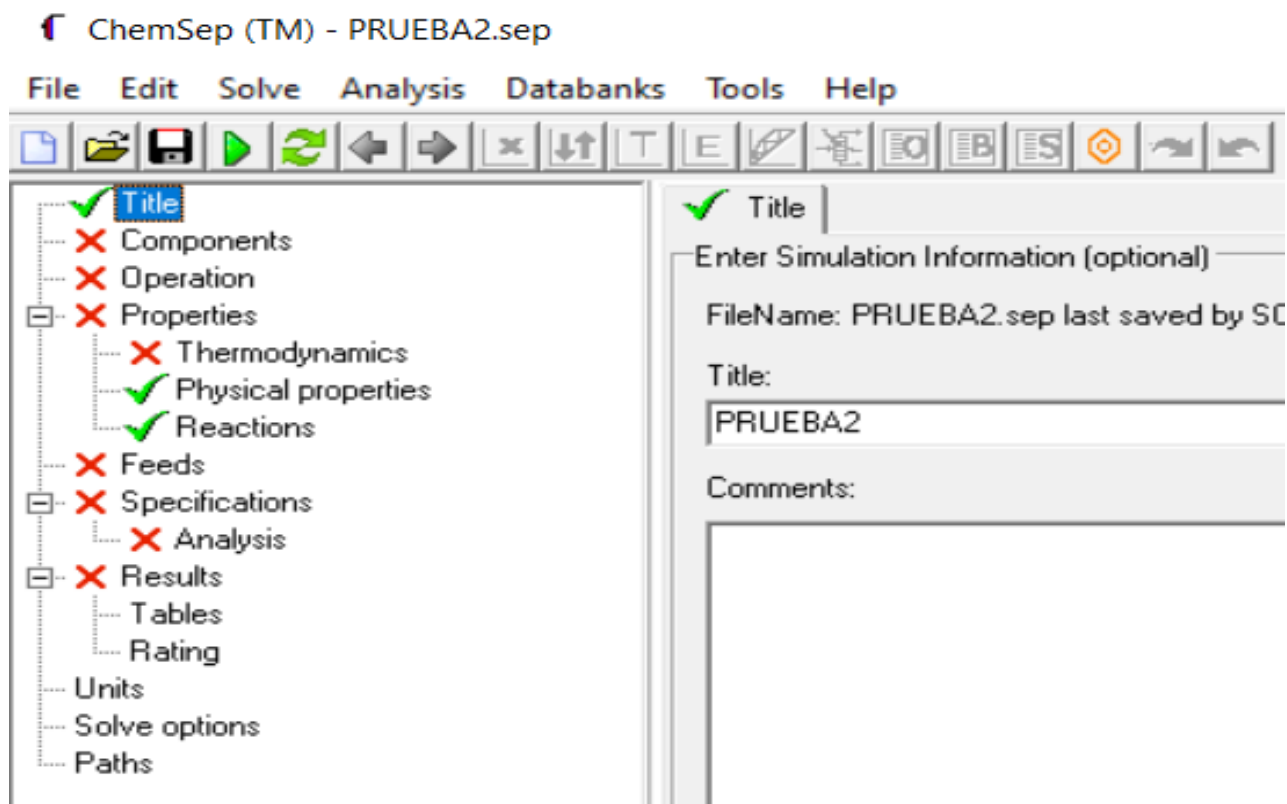


Fig 3.8 Pantalla de inicio en el que se observa el título, una descripción del proyecto y la secuencia de incorporación de información.

Título:	título del proyecto
Componentes:	Que sustancias participan en el proceso
Operación.	De que tipo de proceso se trata
Propiedades:	Es decir cómo se calcularán las propiedades de los componentes en base a la termodinámica, propiedades físicas, o si se trata de un proceso con reacción química
Feeds:	Alimentaciones al proceso, basado en un diagrama
Specifications:	Características especiales del proceso
Analysis:	Tipo de análisis a desarrollar
Results:	Como se presentarán los resultados
Units:	Unidades de trabajo
Solve options:	Opciones de solución
Paths:	Diferentes rutas en las que se almacenaran los diferentes tipos de respuestas

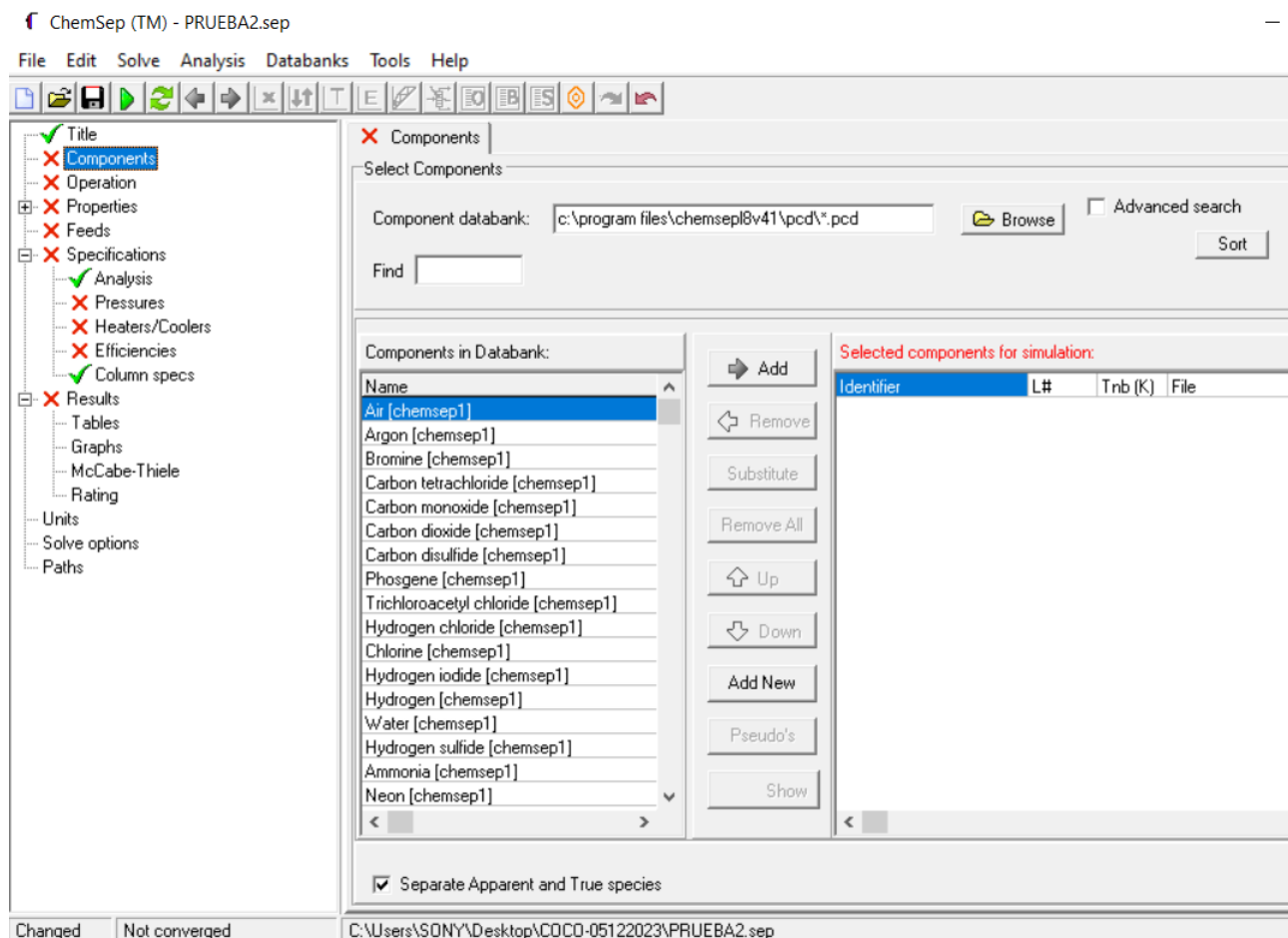


Fig 3.9 Incorporación de los componentes participantes en el proceso.

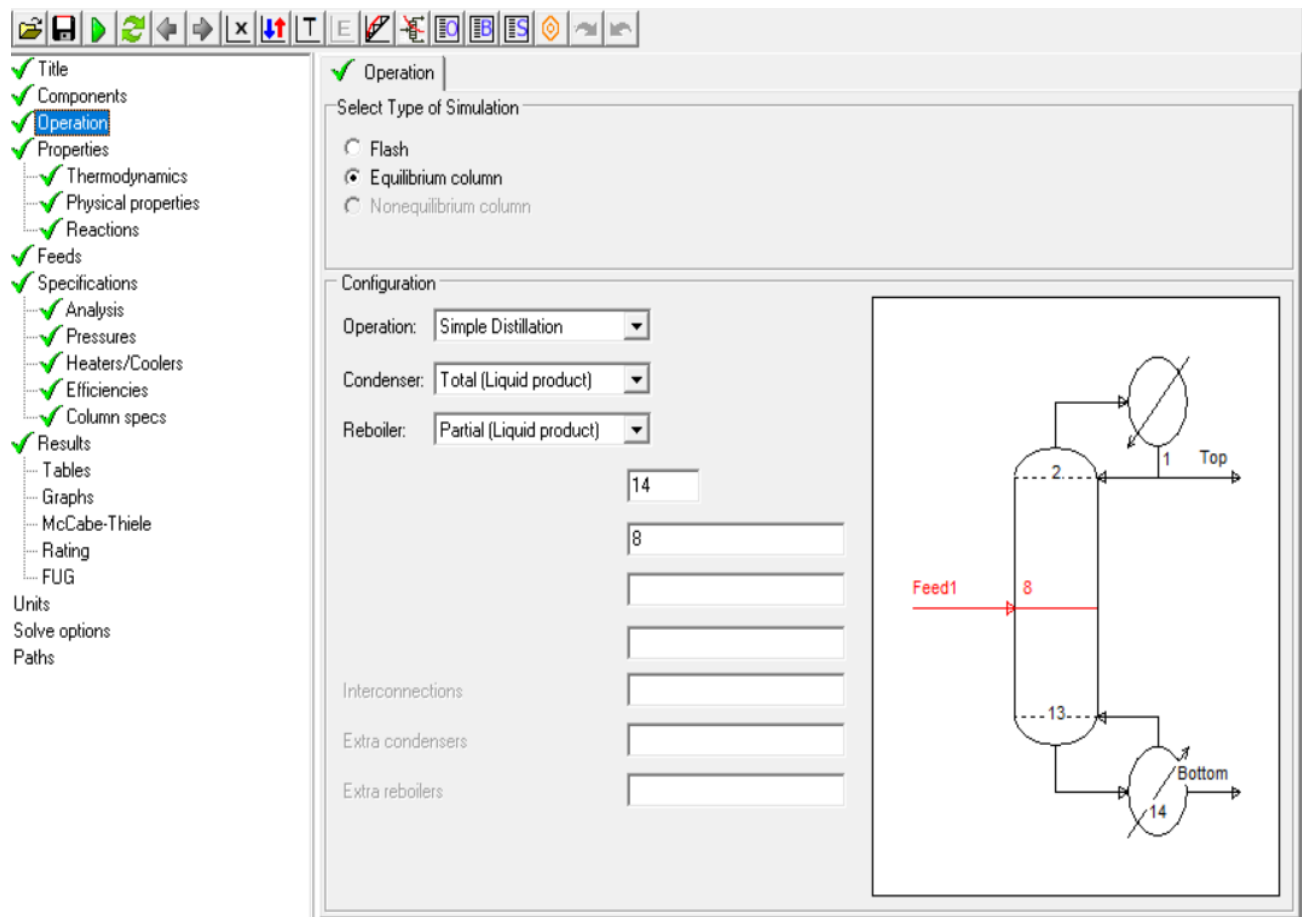


Fig 3.10 En la opción “Operation” se selecciona el tipo de simulación, por ejemplo, si es tipo “Flash”, Columna de equilibrio o fuera del equilibrio.

La configuración consta en definir el tipo de operación, características del condensador y del re-hervidor, así como el número de platos y el plato de alimentación

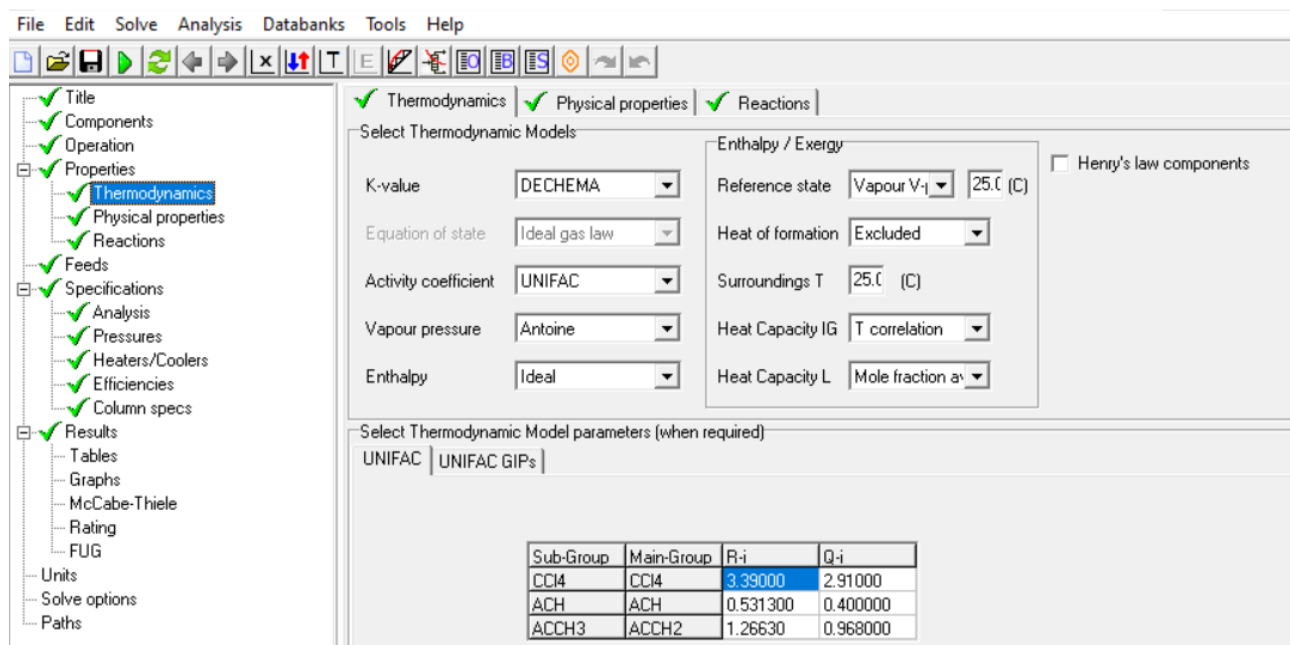


Fig 3.11 Definición de la “Termodinámica”

En la figura 3.11 Se define la “Termodinámica” con la que se resolverá el proceso como por ejemplo el valor de la Constante de equilibrio, los métodos para calcular los coeficientes de actividad, la presión de vapor, la entalpia, el calor de formación, la capacidad calorífica entre otros.

El cálculo de las propiedades físicas o el tipo de reacciones involucradas.

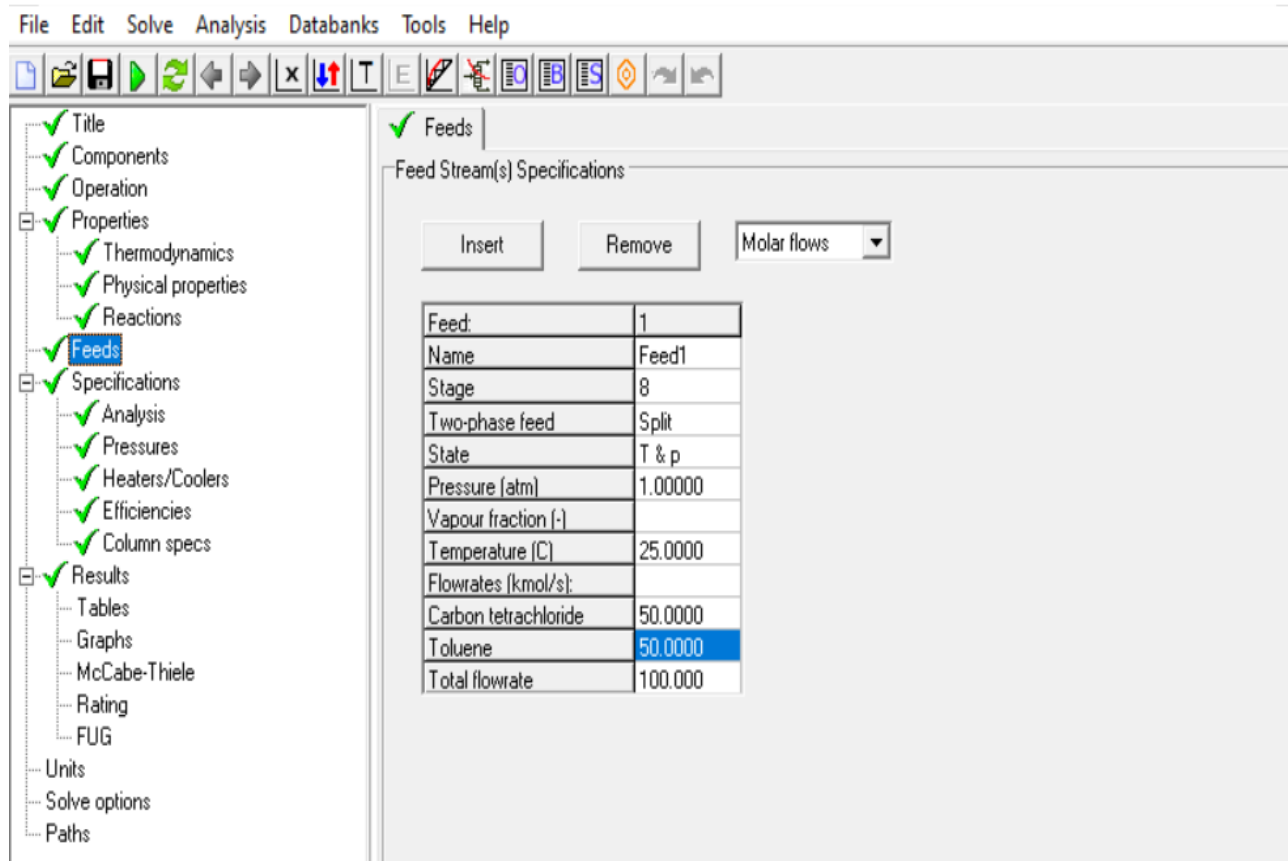


Fig 3.12 Captura de los requerimientos de la alimentación.

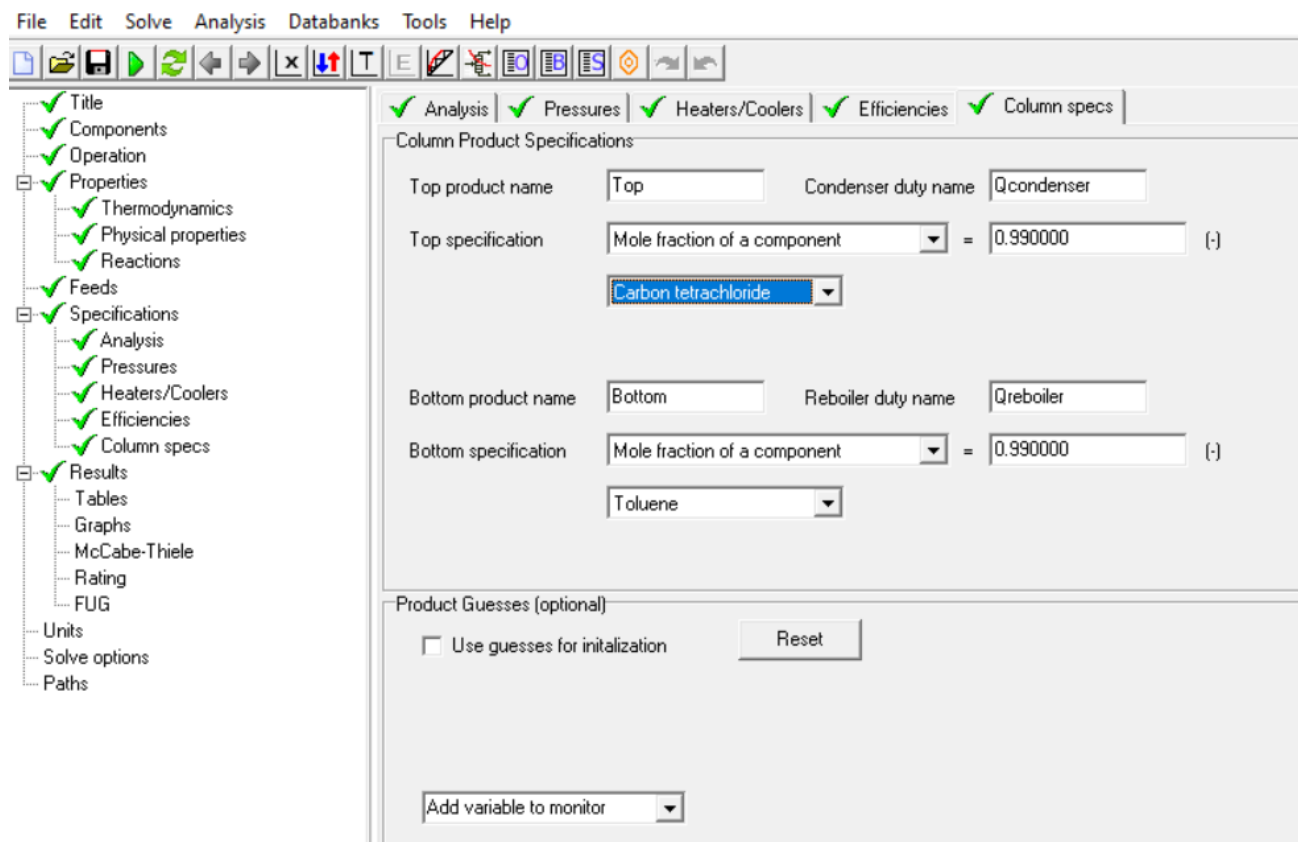


Fig 3.13 Definición de las características del re-hervidor y del condensador

Stream	Feed1	Top	Bottom
Stage	8	1	14
Pressure (atm)	1.00000	1.00000	1.00000
Vapour fraction (-)	0.000000	0.000000	0.000000
Temperature (C)	25.0000	76.9363	109.766
Enthalpy (J/kmol)	-3.526E+07	-2.527E+07	-2.308E+07
Entropy (J/kmol/K)	-88061.7	-69863.3	-57073.3
Total molar flow (kmol/s)	100.000	50.0000	50.0000
Total mass flow (kg/s)	12298.0	7660.31	4637.74
Vapour std.vol.flow (m3/s)			
Liquid std.vol.flow (m3/s)	10.1035	4.81060	5.29291
Mole flows (kmol/s)			
Carbon tetrachloride	50.0000	49.5000	0.500000
Toluene	50.0000	0.500000	49.5000
Mole fractions (-)			
Carbon tetrachloride	0.500000	0.990000	0.01000000
Toluene	0.500000	0.01000000	0.990000
Mass flows (kg/s)			
Carbon tetrachloride	7691.15	7614.24	76.9115
Toluene	4606.90	46.0690	4560.83
Mass fractions (-)			
Carbon tetrachloride	0.625396	0.993986	0.0165838
Toluene	0.374604	0.00601399	0.983416
Combined feed and product f			

Fig 3.14 Una vez definidas las especificaciones se corre el proceso

Se corre el proceso y se observan y validan los resultados tanto en forma numérica como grafica.

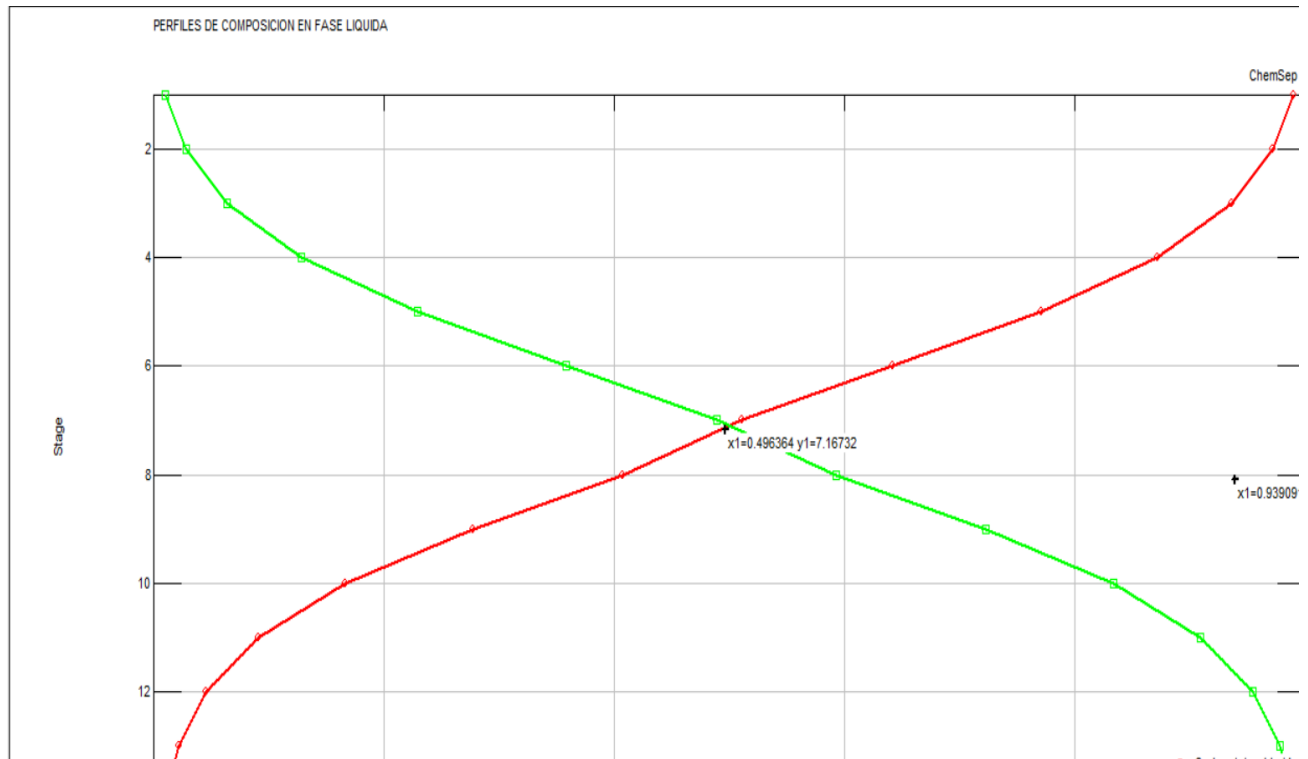


Fig 3.15 Representación gráfica de los resultados

La figura 3.14 muestra la relación entre el número de platos y la composición de los componentes.

Un grafica importante es la de McCabe-Thiele que genera la aplicación.

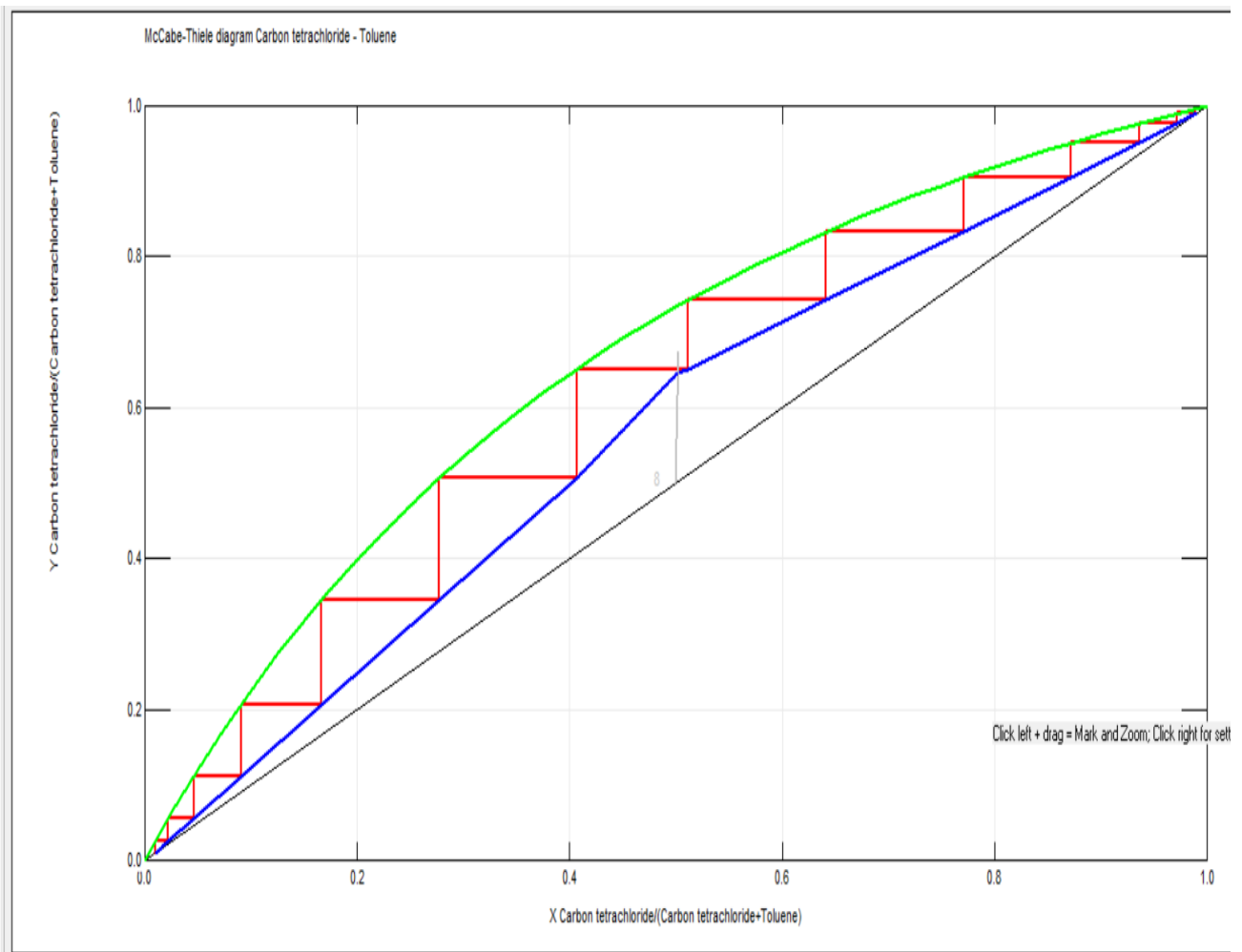


Fig 3.16 Grafica de McCabe-Thiele

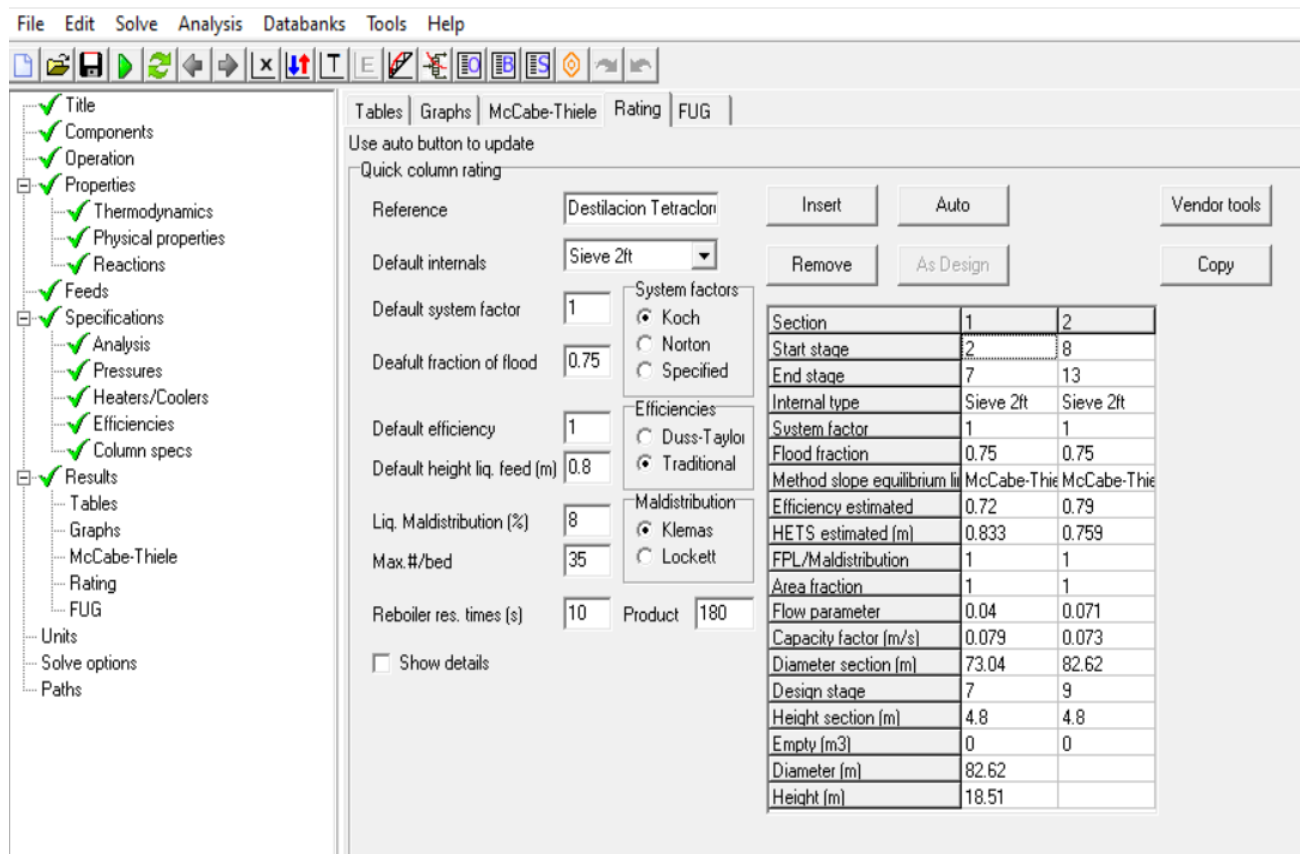


Fig 3.17 Tabla Resumen del proceso de Destilación múltiple.

3.2 Solución de casos de estudio de diseño, análisis y optimización de procesos en Ingeniería Química.

CASOS DE ESTUDIO:

Tomado de:

Perry's Chemical Engineering Handbook 7 ma Ed Chap 13 Example 3

Tabla 3.2 Información para el cálculo de la columna

Variable	Numero	Valores
Numero de etapas	1	8
Plato de alimentación 1	1	1
Composición Flujo Alimentación 1	C=6	0,0,0,0,0,250 Lbmol/hr
Presión alimentación 1	1	400 psia
Temperatura alimentación 1	1	80 °F
Plato alimentación 2	1	4
Composición Flujo Alimentación 2	C=6	13,3,4,5,5,135 lbmol/hr
Presión alimentación 2	1	400 psia
Temperatura alimentación 2	1	80 °F
Plato alimentación 3	1	8
Composición Flujo Alimentación 3	C=6	360,40,25,15,15,10 lbmol/hr
Presión alimentación 3	1	400 psia
Temperatura alimentación 3	1	80 °F
Presión cada etapa	N=8	$P_j=400$ psia, $j=1,2,3...8$
Calor Alimentación etapa	N=8	$Q_j=0, j=1,2,..8$ $Q_7= 150,000$ Btu/hr
Total	44	

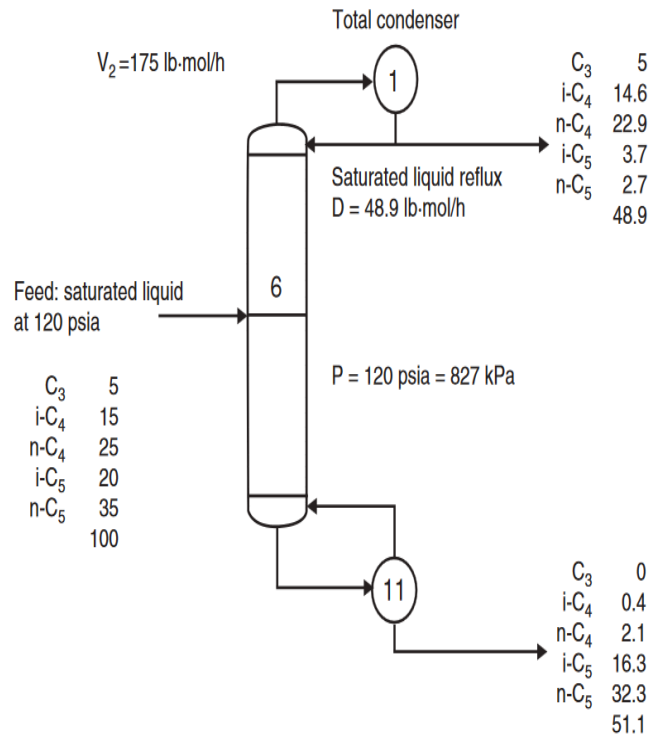


FIG. 13-34 Specifications and calculated product stream flows for butane-pentane splitter. Flows are in pound-moles per hour.

Fig 3.18 Definición de las corrientes del Caso de estudio

Perry Ejemplo 3

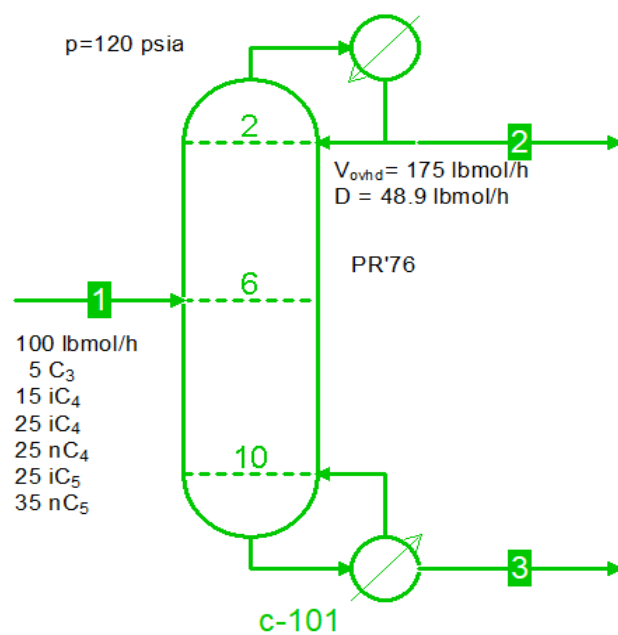


Fig 3.19 Diagrama construido con Chemsep/COFE.

COFE - [Perry_ex_03-MBorja:3 [1]]

File Edit Flowsheet Streams Plot View Window Help

Document Explorer

Perry_ex_03-MBorja

- Flowsheet
- 1, 2, 3
- 1
- Settings

name	1	unit
Stream		
Connections		
Overall		
pressure	120	psi
temperature	180.4976	°F
mass fraction [propane]	0.033849659	
mass fraction [isobutane]	0.13384881	
mass fraction [n-butane]	0.22308136	
mass fraction [isopentane]	0.22153461	
mass fraction [n-pentane]	0.38768556	
flow	100	lbmol/h
MW	65.13655	lb/lbmol
Compound flows		
propane	5	lbmol/h
isobutane	15	lbmol/h
n-butane	25	lbmol/h
isopentane	20	lbmol/h
n-pentane	35	lbmol/h
Phase Fractions		
Liquid composition		
Overall properties		
Liquid properties		

Perry Ejemplo 3

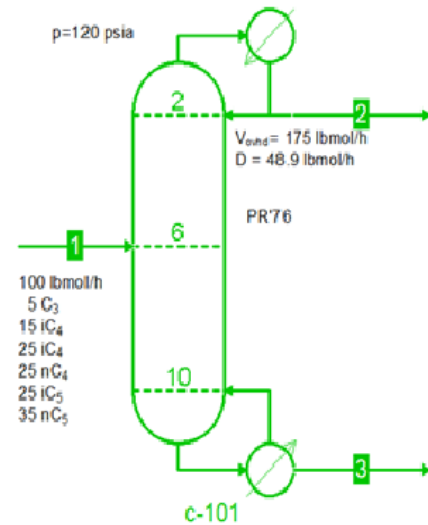


Fig 3.20 Incorporación de datos de alimentación en Chemsep/COFE.

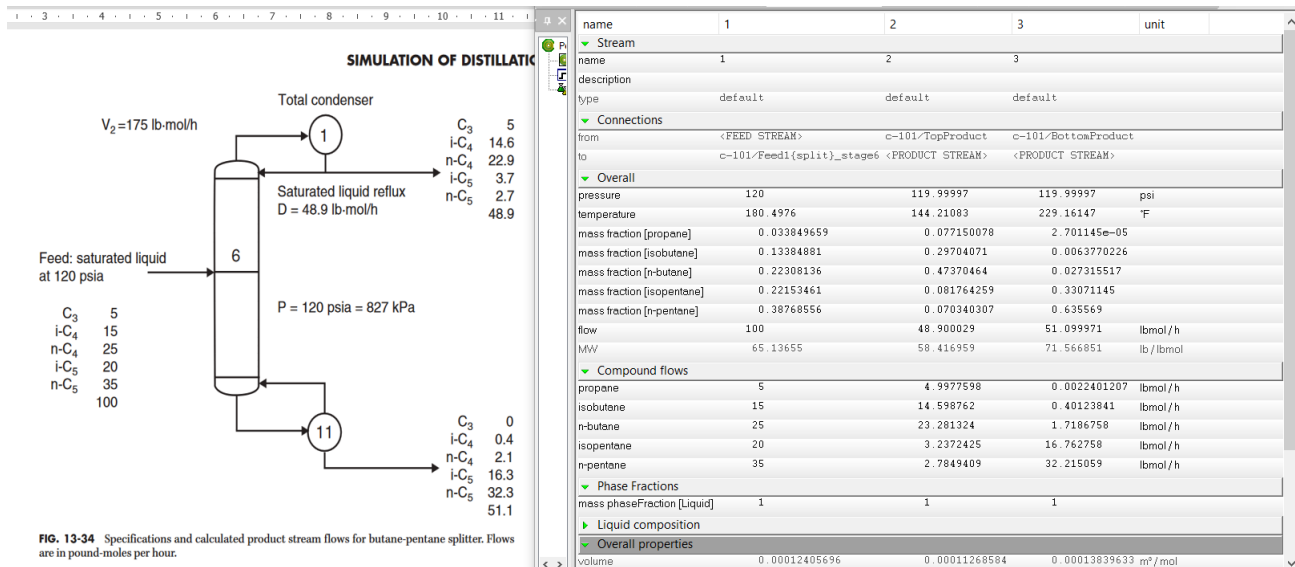


Fig 3.21 Captura de información de acuerdo a los datos del problema.

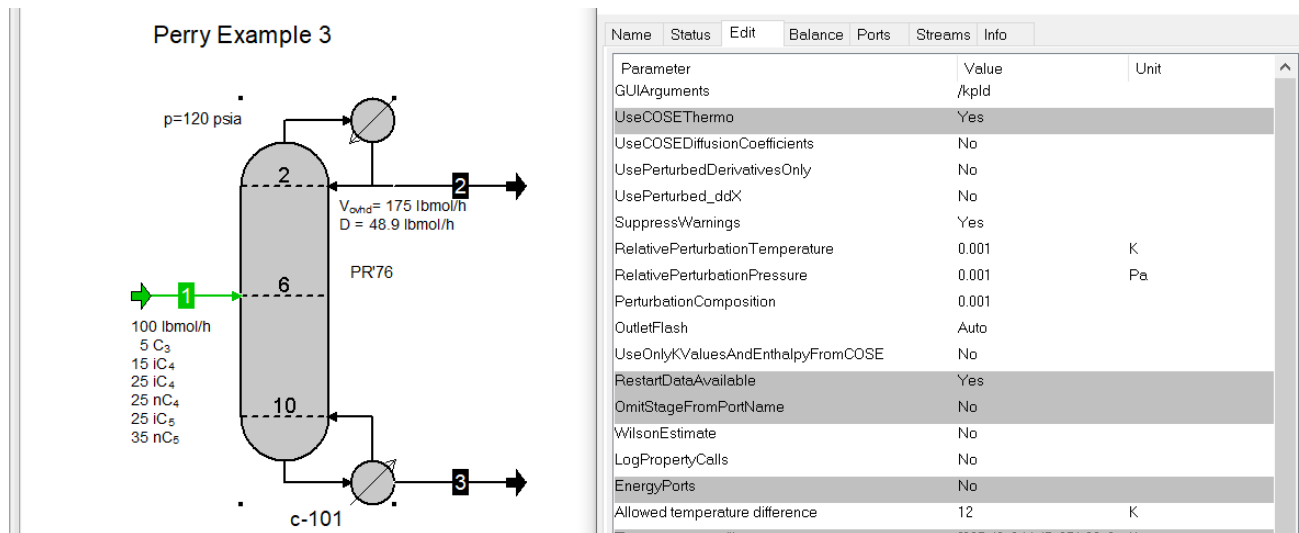


Fig 3.22 Atributos de la Columna.

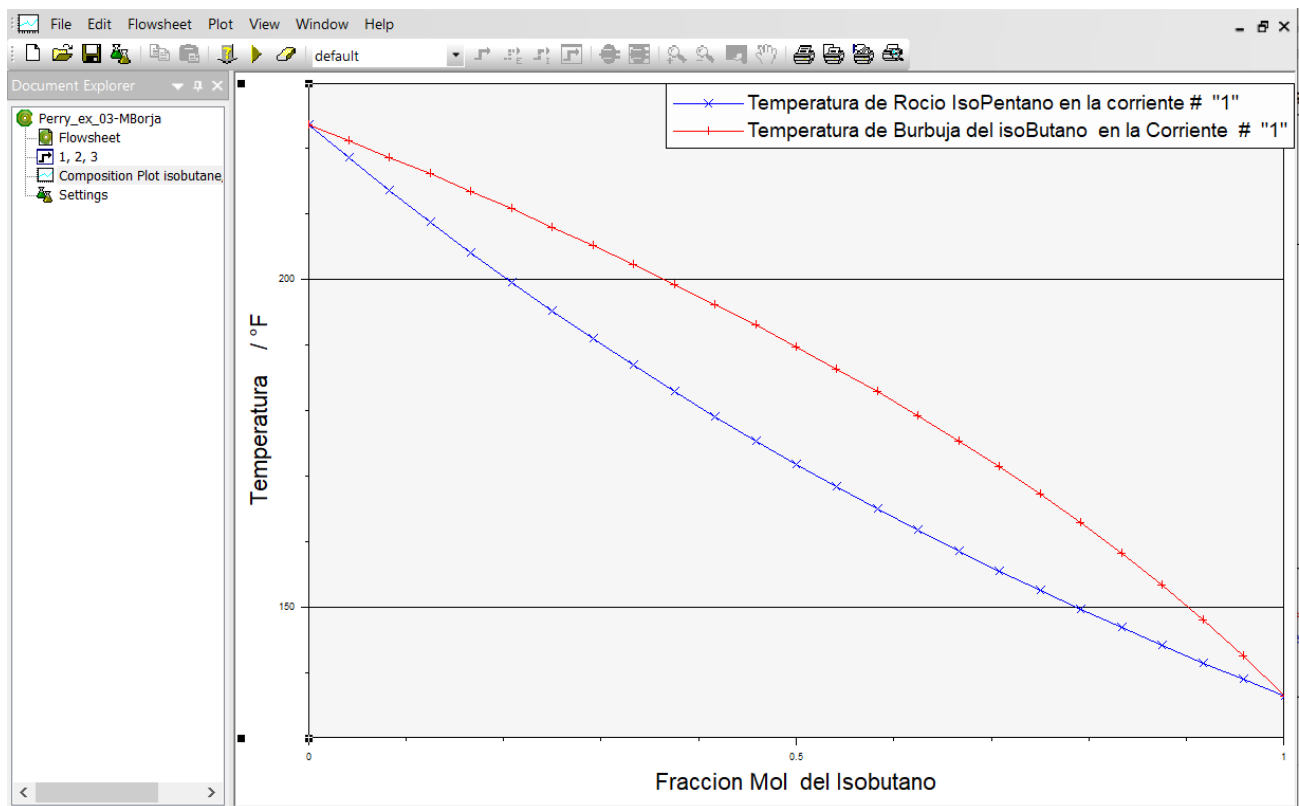


Fig 3.23 Resultados gráficos

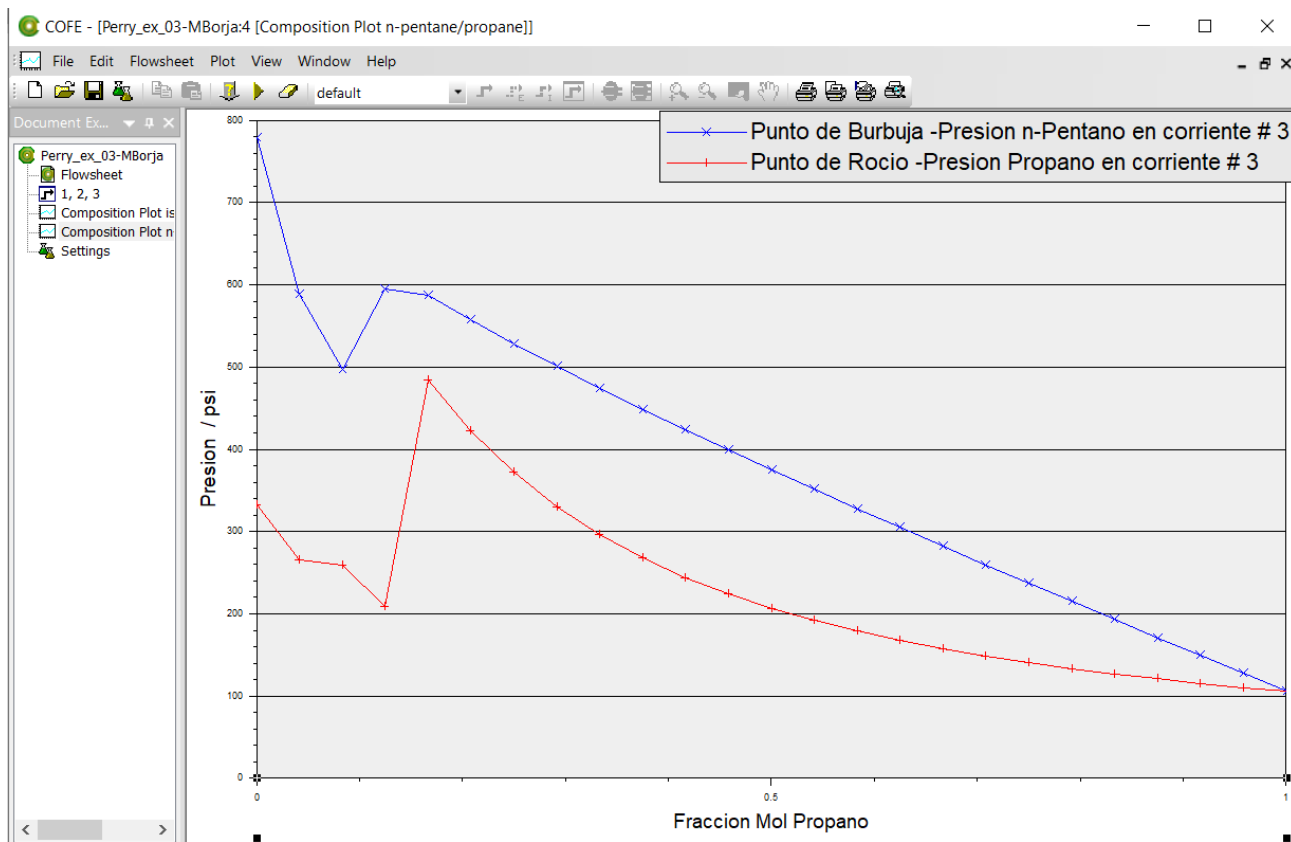


Fig 3.24 Diagramas de equilibrio por corriente de proceso

OPTIMIZACION DE LA COLUMNA:

En tabla de resultados se verifican las condiciones iniciales de la alimentación, en el re-hervidor y en el domo de los componentes claves, propano e iso-pentano.

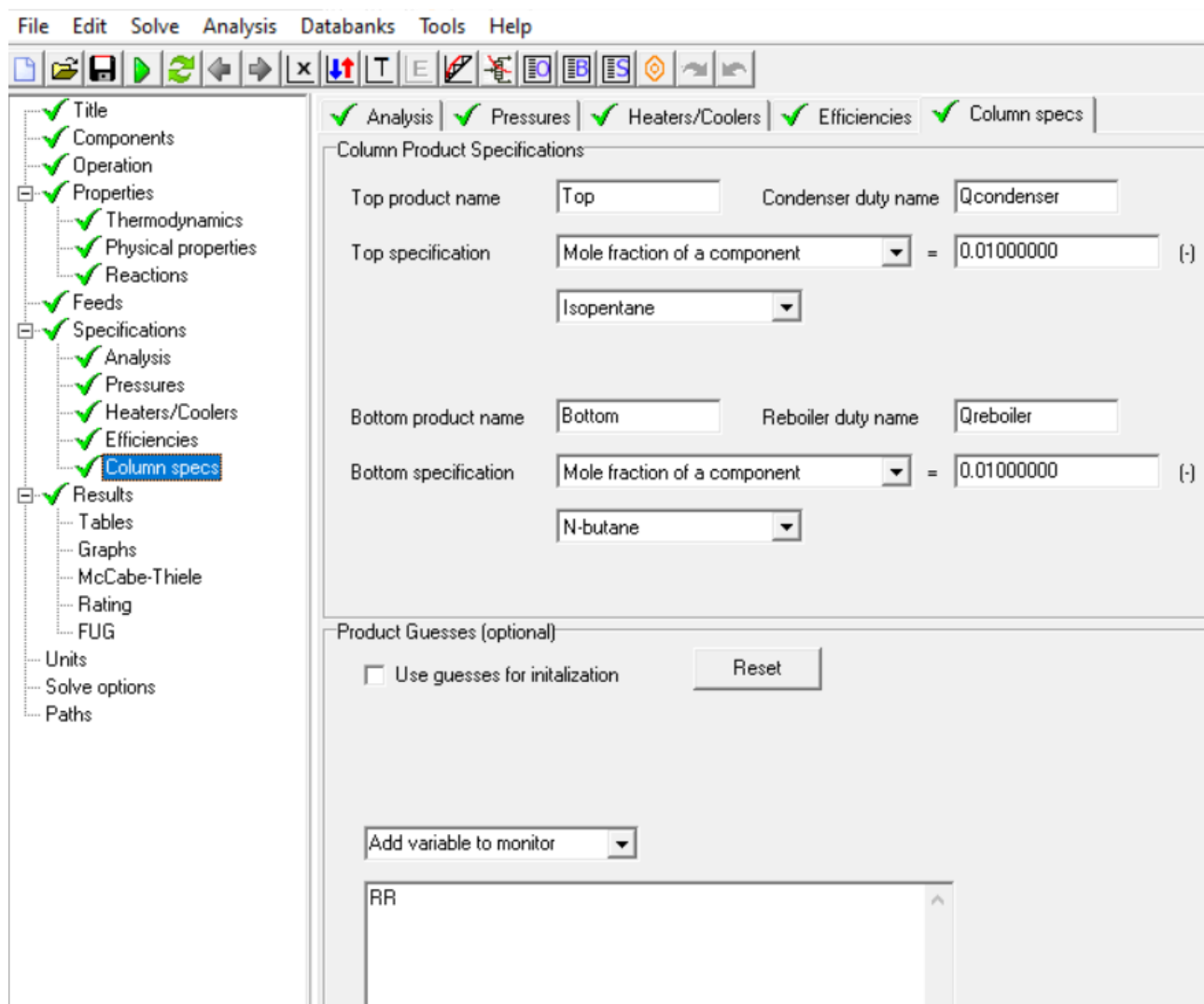


Fig 3.25 Especificaciones de la columna.

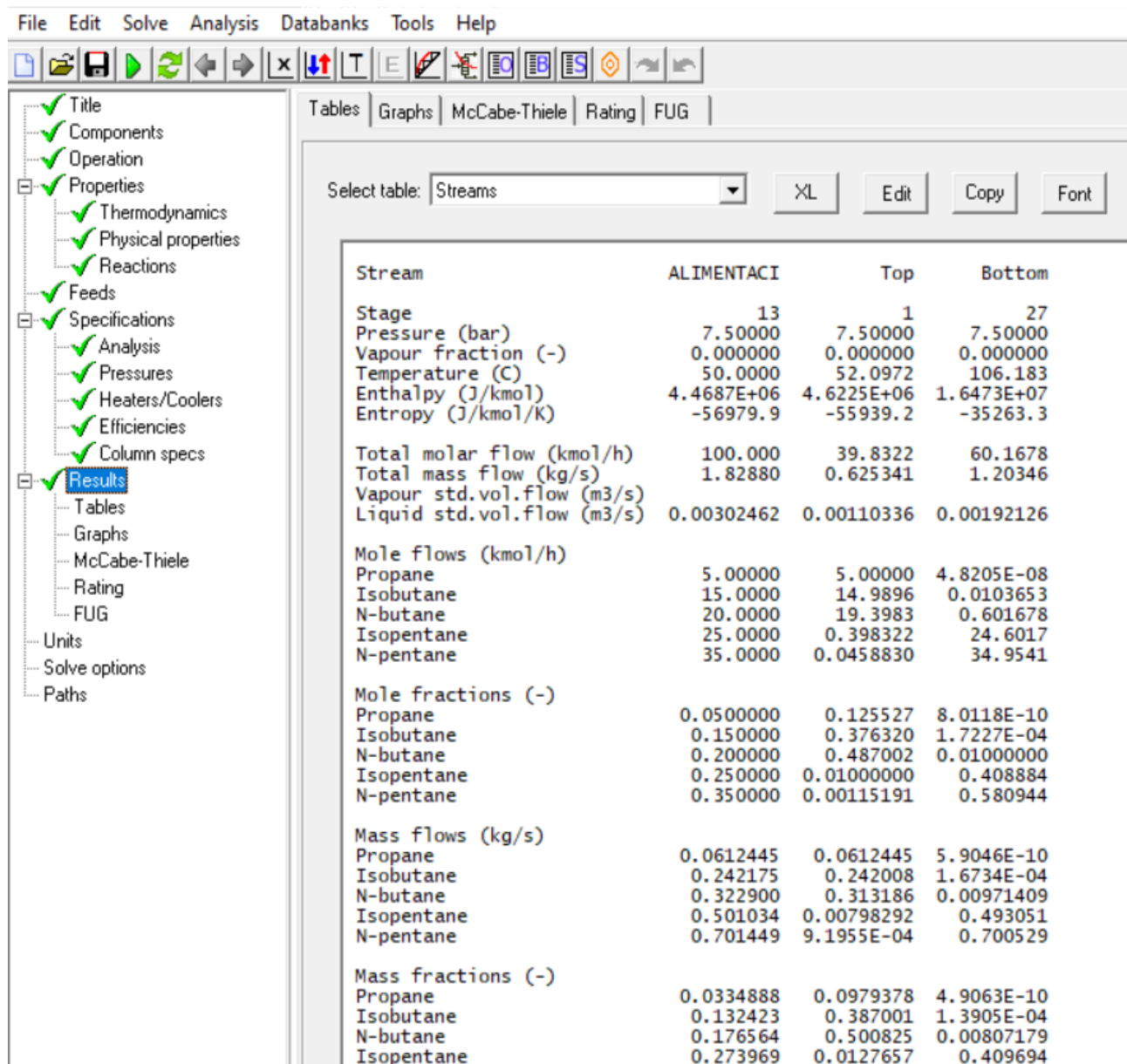


Fig 3.26 Resumen por componente-corriente

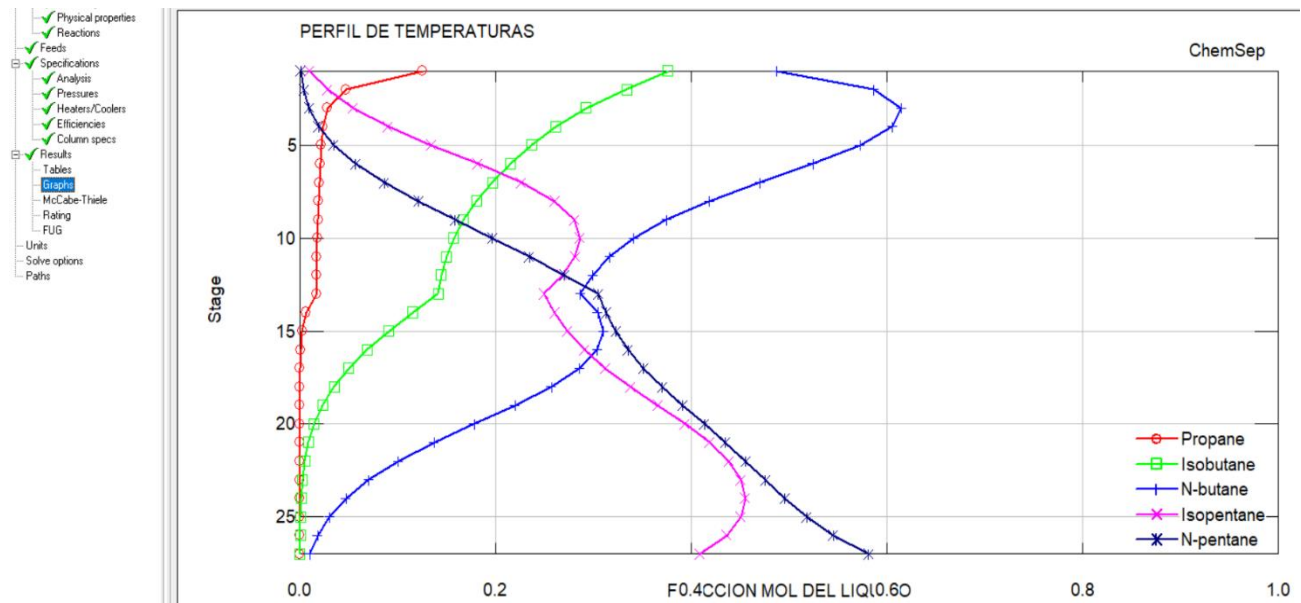


Fig 3.27 Perfil de temperaturas por componente.

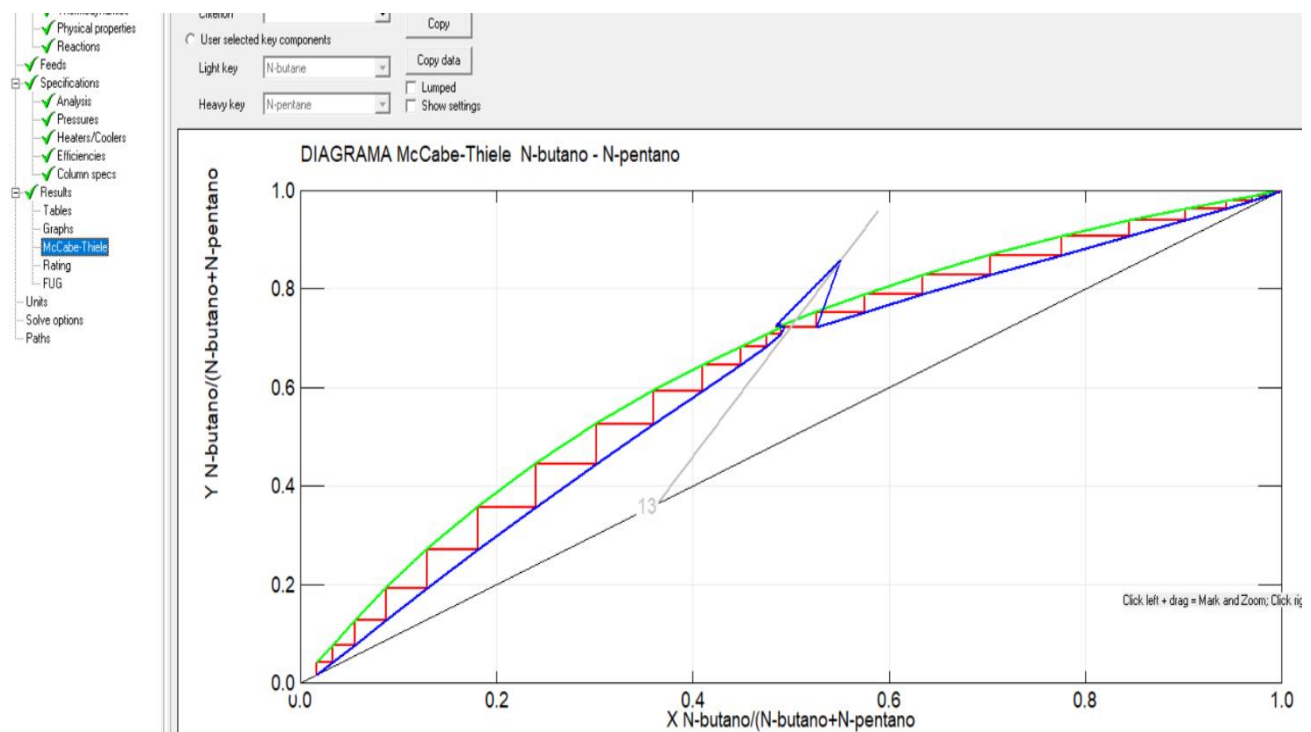


Fig 3.28 Diagrama McCabe-Thiele multicomponente

- Physical properties
- Reactions
- Feeds
- Specifications
 - Analysis
 - Pressures
 - Heaters/Coolers
 - Efficiencies
 - Column specs
- Results
 - Tables
 - Graphs
 - McCabe-Thiele
 - Rating
 - FUG
- Units
- Solve options
- Paths

Default internals: Sieve 2ft
Remove
As Design
Copy

Default system factor: 1
System factors:

- Koch
- Norton
- Specified

Default fraction of flood: 0.75
Efficiencies:

- Duss-Taylor
- Traditional

Default efficiency: 1
Maldistribution:

- Klemas
- Lockett

Default height liq. feed (m): 0.8
Max. #/bed: 35
Reboiler res. times (s): 10
Product: 180
☐ Show details

Section	1	2
Start stage	2	13
End stage	12	26
Internal type	Sieve 2ft	Sieve 2ft
System factor	1	1
Flood fraction	0.75	0.75
Method slope equilibrium li	McCabe-Thie	McCabe-Thie
Efficiency estimated	0.71	0.85
HETS estimated (m)	0.845	0.706
FPL/Maldistribution	1	1
Area fraction	1	1
Flow parameter	0.102	0.271
Capacity factor (m/s)	0.055	0.039
Diameter section (m)	0.63	0.93
Design stage	3	26
Height section (m)	9	9.6
Empty (m3)	0	0
Diameter (m)	0.93	
Height (m)	19.92	

Simple column costing
Copy

ACCR (1/year): 0.32
Uptime (hrs/year): 8016
Materials: 1 Carbon Steel
M&S Index (\$): 1600
Fuel price (\$/GJ): 12 (1 bbl oil = 6.1 GJ)

Shell TIC (k\$)	69
Internals TIC (k\$)	12
Condenser TIC (k\$)	116
Reboiler TIC (k\$)	145
Cw OPEX (k\$/yr)	5
LPS OPEX (k\$/yr)	130
Total Annual Cost (k\$/yr)	245

Fig 3.29 Resumen de atributos resultado de la corrida

Se observa las dimensiones del diámetro y la altura de la columna, Plato de alimentación, eficiencia, composiciones en el domo y en el rehervidor, Costo anual total, costo del condensador, del re-boiler entre otros muchos.

Se toman estos datos como referencia para hacer diferentes corridas y lograr que el Costo Anual total sea mínimo con las mejores condiciones de alimentación, temperatura, conservando la condición de salida

OPTIMIZACION

Tabla 3.3 Resumen por corriente:

Corriente	1	2	3	Unit
Pressure	120	120	120	psi
Temperature	180.498	144.211	229.161	°F
Flow rate	100	48.9	51.1	lbmol / h
Mole frac propane	0.05	0.102204	4.3838e-05	
Mole frac isobutane	0.15	0.298543	0.00785203	
Mole frac n-butane	0.25	0.4761	0.0336336	
Mole frac isopentane	0.20	0.0662012	0.328038	
Mole frac n-pentane	0.35	0.0569517	0.630432	

Comparación de resultados:

Stream	ALIMENTACION	Top	Bottom		Stream	ALIMENTACION	Top	Bottom
Stage	13	1	27		Stage	13	1	20
Pressure (bar)	7.5	7.5	7.5		Pressure (bar)	7.5	7.5	7.5
Vapour fraction (-)	0	0	0		Vapour fraction (-)	0	0	0
Temperature (C)	50	52.0972	106.183		Temperature (C)	50	52.0861	106.112
Enthalpy (J/kmol)	4.47E+06	4.62E+06	1.65E+07		Enthalpy (J/kmol)	4.47E+06	4.62E+06	1.65E+07
Entropy (J/kmol/K)	-56979.9	-55939.2	-35263.3		Entropy (J/kmol/K)	-56979.9	-55956.4	-35254
Total molar flow (kmol/h)	100	39.8322	60.1678		Total molar flow (kmol/h)	100	39.7727	60.2273
Total mass flow (kg/s)	1.8288	0.625341	1.20346		Total mass flow (kg/s)	1.8288	0.624337	1.20447
Vapour std.vol.flow (m3/s)					Vapour std.vol.flow (m3/s)			
Liquid std.vol.flow (m3/s)	0.00302462	0.00110336	0.00192126		Liquid std.vol.flow (m3/s)	0.00302462	0.00110162	0.001923
Mole flows (kmol/h)					Mole flows (kmol/h)			
Propane	5	5	4.82E-08		Propane	5	4.99995	5.12E-05
Isobutane	15	14.9896	0.0103653		Isobutane	15	14.9418	0.0581948
N-butane	20	19.3983	0.601678		N-butane	20	19.3977	0.602273
Isopentane	25	0.398322	24.6017		Isopentane	25	0.397727	24.6023
N-pentane	35	0.045883	34.9541		N-pentane	35	0.0354346	34.9646
Shell TIC (k\$)	72				Shell TIC (k\$)	79		
Internals TIC (k\$)	4				Internals TIC (k\$)	11		
Condenser TIC (k\$)	116				Condenser TIC (k\$)	140		
Reboiler TIC (k\$)	145				Reboiler TIC (k\$)	167		
CW OPEX (k\$/yr)	5				CW OPEX (k\$/yr)	7		
LPS OPEX (k\$/yr)	130				LPS OPEX (k\$/yr)	161		
Total Annual.Cost (k\$/yr)	243				Total Annual.Cost (k\$/yr)	295		

Fig 3.30 Comparación Económico-Operativo entre dos condiciones diferentes de proceso.

Conclusiones:

Las concentraciones obtenidas de n-Pentano y n-Butano mejoran la propuesta de solución que presenta el “Perry’s Chemical Engineering Handbook 7 ma Ed Chap 13 Example 3”

Se observa un menor **Costo Anual Total** y sus condiciones de proceso, esta optimización tiende a ser un referente para lograr las mejores condiciones de operación al menor costo posible tanto técnica como económicamente hablando.

Ejemplo 13.5 Temperaturas de la etapa de cálculo del absorbente y tasas de flujo y composiciones de vapor y líquido entre etapas para las especificaciones del absorbente mostradas en la figura. Se observa que se utiliza una segunda alimentación de aceite del absorbente además del absorbente principal.

CASOS DE ESTUDIO:

Tomado de:

Perry’s Chemical Engineering Handbook 7 ma Ed Chap 13 Example 5

Calcular las temperaturas de cada etapa del absorbedor y las tasas de flujo y composiciones de vapor y líquido entre etapas para las especificaciones del absorbedor mostradas en la figura 3.31

Observe que se utiliza una segunda alimentación de aceite al absorbedor además del absorbente principal.

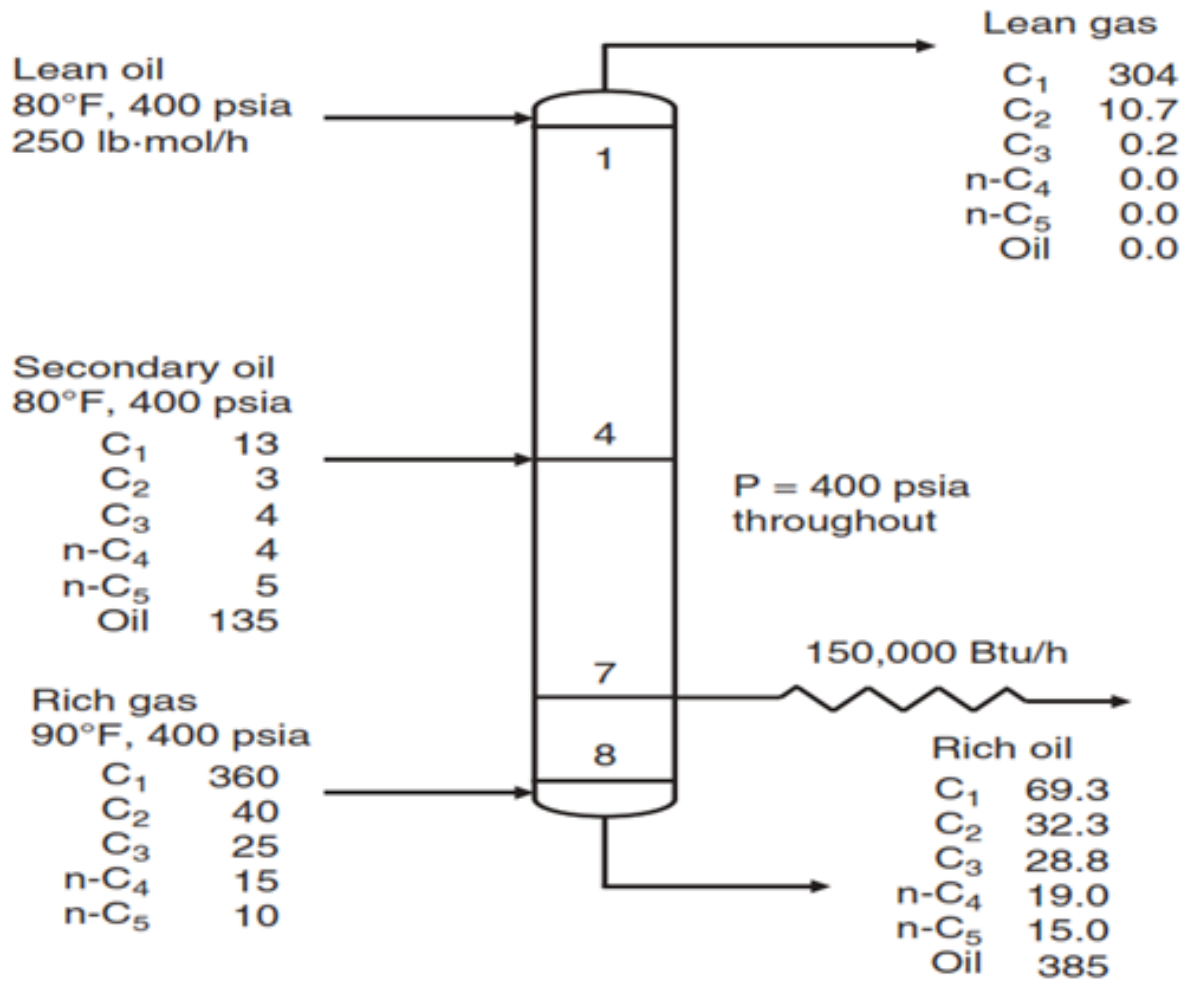


Fig 3.31 atributos del caso de estudio para el absorbedor multicomponente.

Tabla 3.4 Resumen de especificaciones para el caso de estudio

Variable	Numero	Valores
Numero de etapas	1	8
Plato de alimentación 1	1	1
Composición Flujo Alimentación 1	C=6	0,0,0,0,0,250 Lbmol/hr
Presión alimentación 1	1	400 psia
Temperatura alimentación 1	1	80 °F
Plato alimentación 2	1	4
Composición Flujo Alimentación 2	C=6	13,3,4,5,5,135 lbmol/hr
Presión alimentación 2	1	400 psia
Temperatura alimentación 2	1	80 °F

Plato alimentación 3	1	8
Composición Flujo Alimentación 3	C=6	360,40,25,15,15,10 lbmol/hr
Presión alimentación 3	1	400 psia
Temperatura alimentación 3	1	80 °F
Presión cada etapa	N=8	$P_j=400$ psia, $j=1,2,3...8$
Calor Alimentación etapa	N=8	$Q_j=0, j=1,2,...8$ $Q_7= 150,000$ Btu/hr
Total	44	

El método de solución simultánea resolvió este ejemplo en cuatro iteraciones utilizando la ecuación de estado Peng-Robinson para estimar los valores de K, así como las desviaciones de entalpía.

En el libro “Perry's Chemical Engineering Handbook 7Th ed p. 13-47”, se resolvió este problema usando el método SRW. (Soave-Redlich-Kwong), dando los siguientes resultados

Tabla 3. 5 resumen del flujo calculado del producto

Flujo Molar LbMol/h	n- Dodecano	Aceite inicial	Gas Rico	Gas residual	Aceite producido
Metano	0.0	13.0	360.0	303.7	69.3
Etano	0.0	3.0	40.0	10.7	32.3
Propano	0.0	4.0	25.0	0.2	28.8
n-Butano	0.0	4.0	15.0	0.0	19.0
n-Pentano	0.0	5.0	10.0	0.0	15.0
n- Dodecano	250.0	135.0	0.0	0.0	385.0
Total flujo Molar	250.0	164.0	450.0	314.6	549.4

La energía extraída de la etapa 7 tiene el efecto de aumentar ligeramente la absorción de las especies más volátiles en el petróleo rico

El perfil de temperatura muestra un aumento de temperatura hacia el fondo de la columna que es típico en el proceso de absorción de gas.

El fondo de la columna es donde tiene lugar la mayor parte de la absorción y el aumento de temperatura es una medida del calor de absorción.

El perfil de flujo de líquido muestra un cambio gradual debido a la alimentación de aceite secundario en el punto medio de la columna

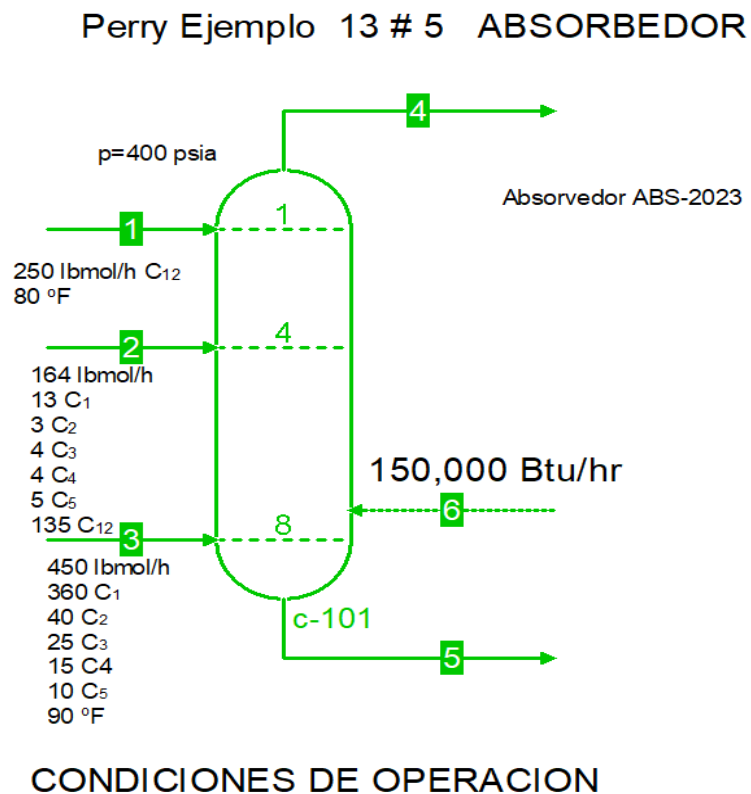


Fig 3.32 Diagrama construido para el caso de estudio del Absorbedor

Se construye el diagrama y se establecen los flujos de alimentación de cada una de las corrientes, así como las condiciones de operación utilizando el software comercial ChemSep, se debe observar que el absorbedor contiene

tres alimentaciones con tres diferentes flujos y el aceite homogeneizador es el dodecano, es decir con 12 carbonos.

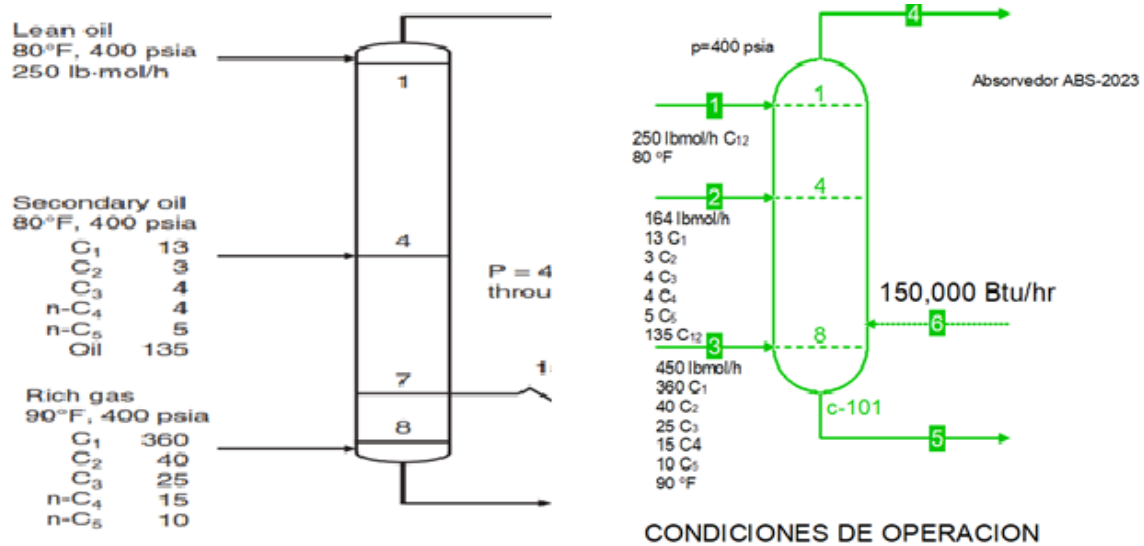


Fig 3.33 comparación entre el modelo propuesto y el caso de estudio

name	1	2	3	4	5	unit
Stream						
name	1	2	3	4	5	
description						
type	default	default	default	default	default	
Connections						
Overall						
pressure	400	400	400	N/A	N/A	psi
temperature	80	80	89	N/A	N/A	°F
mole fraction [methane]	0	0.0793	0.8	N/A	N/A	
mole fraction [ethane]	0	0.0183	0.0889	N/A	N/A	
mole fraction [propane]	0	0.0244	0.0556	N/A	N/A	
mole fraction [n-butane]	0	0.0244	0.0333	N/A	N/A	
mole fraction [n-pentane]	0	0.0305	0.0222	N/A	N/A	
mole fraction [n-dodecane]	1	0.823	0	N/A	N/A	
flow	250	164	450	N/A	N/A	lbmol/h
MW	170	147	21.5	N/A	N/A	lb/lbmol

Fig 3.34 Despliegue de los datos incorporados, por corriente.

Se establecen las condiciones operativas para cada una de las corrientes de alimentacion, las corrientes 4 y 5 sin calcular.

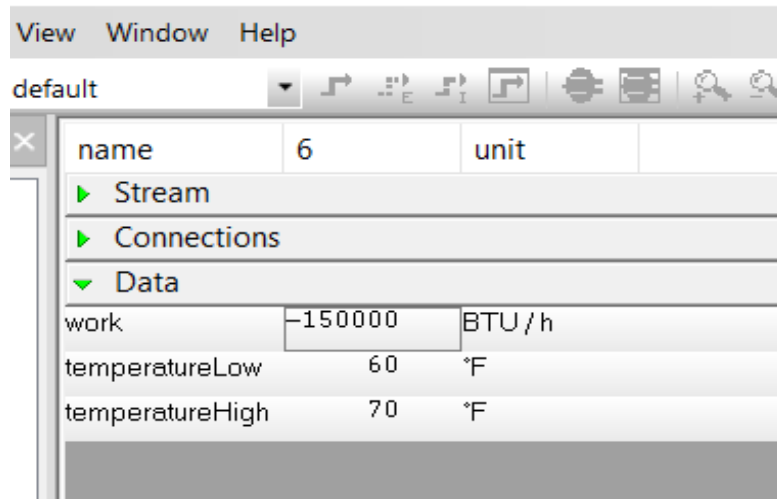


Fig 3.35 Condiciones operativas

La corriente 6 con sus -150,000 Btu/hr

Algunas graficas del proceso.

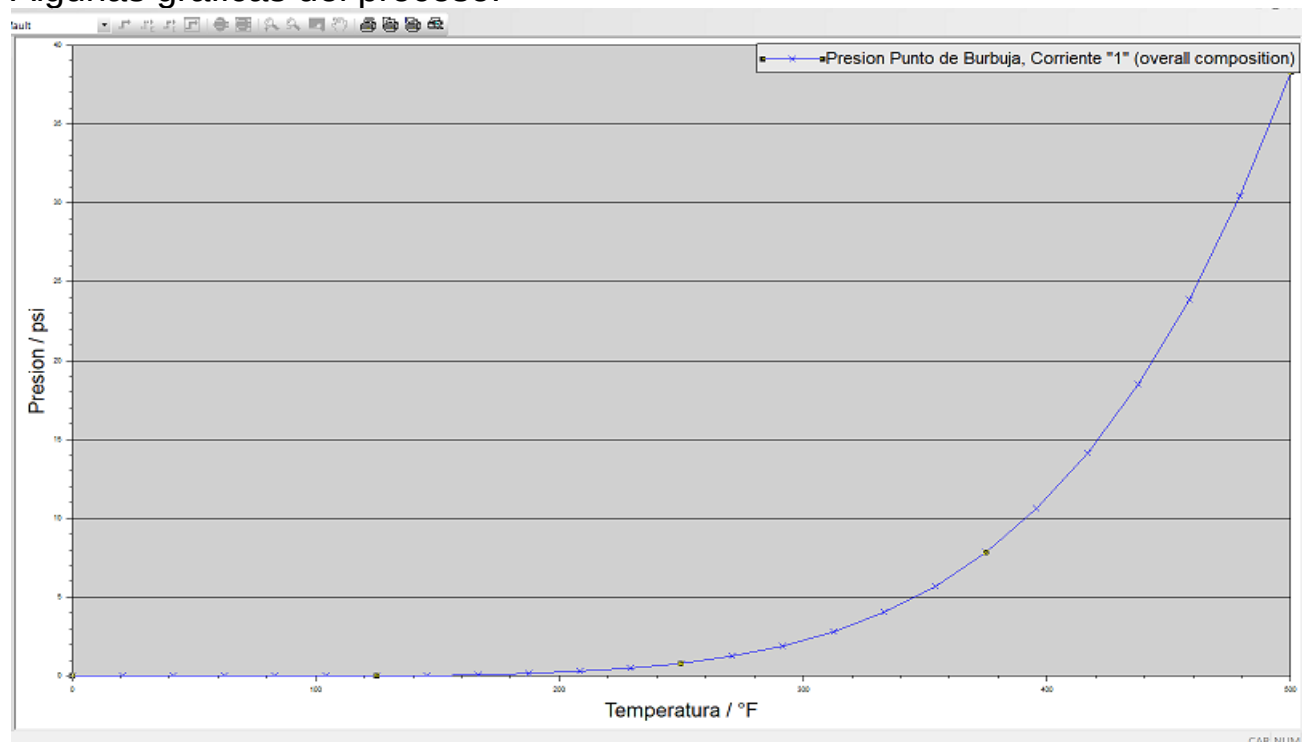


Fig 3.36 Relacion de Temperatura-Presion en la corriente 1

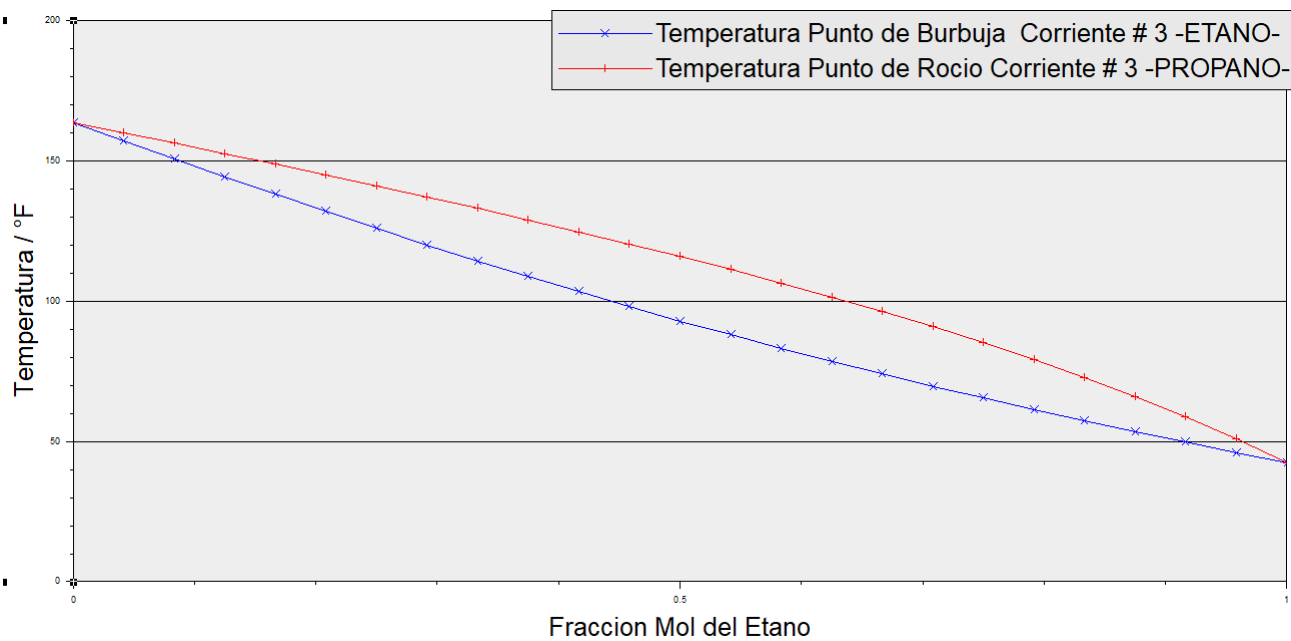


Fig 3.37 Fraccion mol del etano/propano-Temperatura en la corriente 3

RESULTADOS:

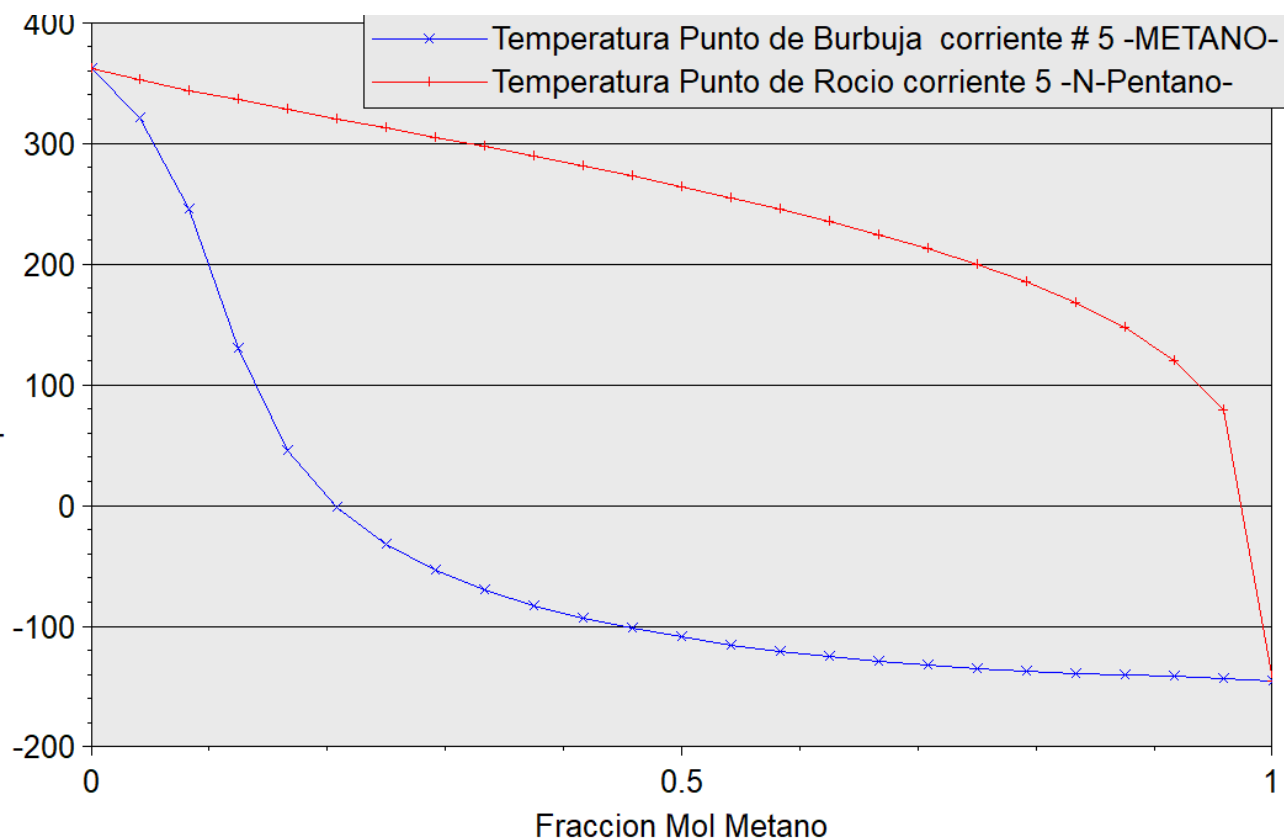


Fig 3.38 Resultados de la primera corrida con los datos propuestos.
Observa columna 4 y 5.

name	1	2	3	4	5	unit
► Stream						
► Connections						
▼ Overall						
pressure	400	400	400	399.99942	399.99942	psi
temperature	80	80	89	85.65558	93.36609	°F
mole fraction [methane]	0	0.0792682	0.8	0.96520812	0.12578621	
mole fraction [ethane]	0	0.0182927	0.088889	0.034090381	0.058759043	
mole fraction [propane]	0	0.0243903	0.0555556	0.00064859451	0.052440279	
mole fraction [n-butane]	0	0.0243903	0.0333334	8.3607493e-06	0.034596344	
mole fraction [n-pentane]	0	0.0304878	0.0222223	1.4811223e-07	0.027316609	
mole fraction [n-dodecane]	1	0.823171	0	4.4396743e-05	0.70110151	
flow	250	164	450	314.88417	549.11601	lbmol / h
MW	170.338	146.73193	21.497904	16.546592	129.5033	lb / lbmol
► Compound flows						
▼ Phase Fractions						
molar phaseFraction [Vapor]	N/A	N/A	1	1	N/A	
molar phaseFraction [Liquid]	1	1	N/A	N/A	1	
► Vapor composition						

Fig 3.39 Tabla resumen de la corrida

CONCLUSIONES:

Se observa que en las corrientes 4 y 5 las fracciones molares se asemejan a los resultados que presentados en el Perry's Chemical Engineering Handbook 7 ma Ed Chap 13 Example 5.

pressure	400	400	400	399.99942	399.99942	psi
temperature	80	80	89	85.65558	93.36609	°F
mole fraction [methane]	0	0.0792682	0.8	0.96520812	0.12578621	
mole fraction [ethane]	0	0.0182927	0.088889	0.034090381	0.058759043	
mole fraction [propane]	0	0.0243903	0.0555556	0.00064859451	0.052440279	
mole fraction [n-butane]	0	0.0243903	0.0333334	8.3607493e-06	0.034596344	
mole fraction [n-pentane]	0	0.0304878	0.0222223	1.4811223e-07	0.027316609	
mole fraction [n-dodecane]	1	0.823171	0	4.4396743e-05	0.70110151	
flow	250	164	450	314.88417	549.11601	lbmol/h
MW	170.338	146.73193	21.497904	16.546592	129.5033	lb/lbmol

Mole flows, lb·mol/h	Lean oil	oil	Rich gas	Lean gas	Rich oil
Methane	0.0	13.0	360.0	303.7	69.3
Ethane	0.0	3.0	40.0	10.7	32.3
Propane	0.0	4.0	25.0	0.2	28.8
n-Butane	0.0	4.0	15.0	0.0	19.0
n-Pentane	0.0	5.0	10.0	0.0	15.0
n-Dodecane	250.0	135.0	0.0	0.0	385.0
Total molar flow	250.0	164.0	450.0	314.6	549.4

Fig 3.40 Comparacion de resultados entre el Caso de estudio y el desarrollado

Observe que la referencia esta en lb/mol y los resultados están en fracción mol, es decir, por ejemplo. METANO $69.3/549.4 = 0.1261$ en fracción mol que es el equivalente al resultado en la corriente 5 del METANO.

CASO DE ESTUDIO:

Separar el azeótropo **metanol y acetona** a la temperatura mínima utilizando la sensibilidad a la presión y la composición azeotrópica de la mezcla. Para lograr la diferencia de presiones se operan dos columnas simultáneamente a diferentes presiones.
adaptado de Luyben et al. Ind.Eng.Chem.Res. (2008) 47 págs. 2696-2707.

Resumen.

Dos de los métodos más comunes para separar un azeótropo binario homogéneo son la destilación por cambio de presión y la destilación extractiva.

El primero es eficaz si la composición del azeótropo cambia significativamente con la presión.

El último método es eficaz si se puede encontrar un disolvente adecuado.

Este artículo compara el diseño en estado estacionario y el control dinámico de estos dos métodos cuando se aplican al sistema binario acetona-metanol.

El azeótropo de punto de ebullición mínimo a 1 atm contiene 77,6 % en moles de acetona a 328 K. A 10 atm, la composición azeotrópica es 37,5 % en moles de acetona a 408 K, por lo que la separación por cambio de presión es factible.

La destilación extractiva también es factible utilizando agua como disolvente.

Ambos sistemas requieren dos columnas de destilación.

Las purezas de ambos productos se fijan en 99,5% en moles.

Los resultados muestran que el sistema de destilación extractiva tiene un costo total anual un 15% menor.

Sin embargo, se introduce un tercer componente (agua) que aparece como trazas de impurezas tanto en los productos de acetona como en metanol.

También es mucho más difícil alcanzar purezas más altas en el sistema de destilación extractiva que en el sistema de cambio de presión debido a las limitaciones del equilibrio ternario vapor-líquido.

Los controles dinámicos de los dos procesos alternativos son bastante similares.

También se desarrollan diseños de estado estacionario y estructuras de control para los dos métodos cuando las columnas están integradas térmicamente.

La integración del calor es sencilla en el sistema de oscilación de presión porque la temperatura del condensador en la columna de alta presión es 60 °K mayor que la temperatura base en la columna de baja presión.

En el sistema de destilación extractiva, la presión en la segunda columna de recuperación de disolvente debe aumentarse de 1 a 5 atm para proporcionar la fuerza impulsora diferencial de temperatura necesaria para la extracción

Pressure Swing Distillation of Acetone-Methanol
 Ind.Eng.Chem.Res. (2008) 47 pp. 2696-2707

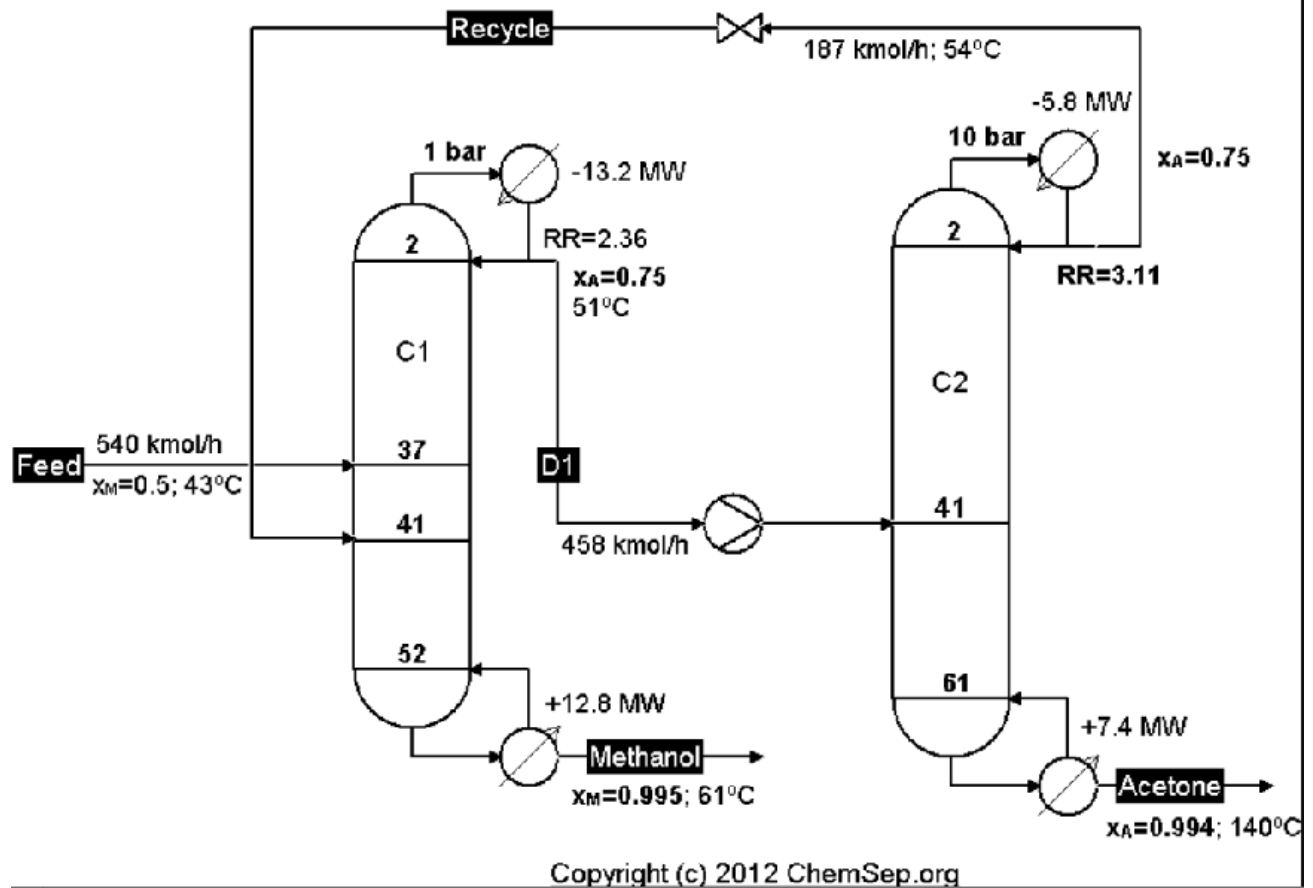


Fig 3.41 Diagrama de proceso presentado en el artículo.

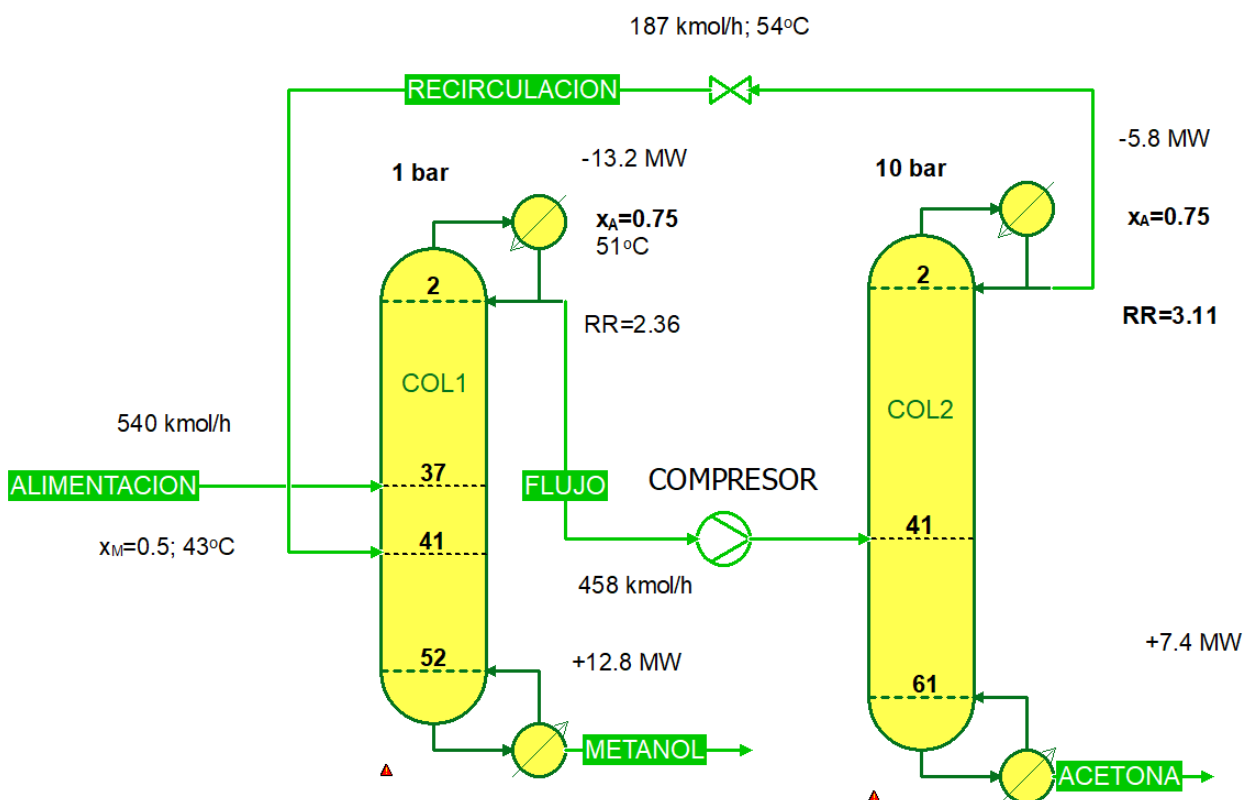


Fig 3.42 Diagrama de proceso construido con ChemSep/COFE.

name	ALIMENTACION	RECIRCULACION	FLUJO	5	6	METANOL	ACETONA	unit
▶ Stream								
▶ Connections								
▼ Overall								
pressure	1	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	atm
temperature	320	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	K
mole fraction [Methanol]	0.5	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	
mole fraction [Acetone]	0.5	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	
flow	540	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	kmol/h
MW	0.045061001	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	kg/mol
▼ Compound flows								
Methanol	270	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	kmol/h
Acetone	270	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	N/A	kmol/h
▼ Phase Fractions								
molar phaseFraction [Vapor]	N/A							
molar phaseFraction [Liquid]	1							
▼ Vapor composition								
mole fraction [Methanol]	N/A							
mole fraction [Acetone]	N/A							
▼ Liquid composition								
mole fraction [Methanol]	0.5							
mole fraction [Acetone]	0.5							
▼ Overall properties								
enthalpy	-31705.685							J/mol
enthalpyF	-240025.68							J/mol
volume	5.8036123e-05							m³/mol
bubblePointTemperature	329.2473							K
bubblePointPressure	0.7014262							atm
dewPointTemperature	330.25516							K
dewPointPressure	0.66077541							atm
▼ Liquid properties								
activity[Methanol]	0.58678757							-
activity[Acetone]	0.5849247							-
activity[Methanol]	1.1325251							-

Fig 3.43 Composición y atributos por corriente antes de la corrida inicial

name	ALIMENTACION	RECIRCULACION	FLUJO	5	6	METANOL	ACETONA	unit
Stream								
Connections								
Overall								
pressure	1	1	1	10	9.9995065	1	9.9995065	atm
temperature	320	330.47755	328.24921	328.87255	407.27841	337.61855	416.45694	K
mole fraction [Methanol]	0.5	0.60229093	0.25	0.25	0.60229093	0.995	0.006	
mole fraction [Acetone]	0.5	0.39770907	0.75	0.75	0.39770907	0.005	0.994	
flow	540	187.19361	457.4666	457.4666	187.19361	269.727	270.273	kmol/h
MW	0.045061001	0.042397549	0.051570501	0.051570501	0.042397549	0.03217219	0.057923774	kg/mol
Compound flows								
Methanol	270	112.74501	114.36665	114.36665	112.74501	268.37837	1.621638	kmol/h
Acetone	270	74.448596	343.09995	343.09995	74.448596	1.348635	268.65136	kmol/h
Phase Fractions								
molar phaseFraction [Vapor]	N/A	0.3347899	0	N/A	0	0	0	
molar phaseFraction [Liquid]	1	0.6652101	1	1	1	1	1	
Vapor composition								
mole fraction [Methanol]	N/A	0.51715157	0.23855604	N/A	0.60734937	0.98767512	0.011330015	
mole fraction [Acetone]	N/A	0.48284843	0.76144396	N/A	0.39265063	0.012324881	0.98866999	
Liquid composition								
mole fraction [Methanol]	0.5	0.64514025	0.25	0.25	0.60229093	0.995	0.006	
mole fraction [Acetone]	0.5	0.35485975	0.75	0.75	0.39770907	0.005	0.994	
Overall properties								
enthalpy	-31705.685	-20303.679	-28921.6	-28838.82	-20303.679	-33579.875	-13079.789	J/mol
enthalpyF	-240025.68	-227113.87	-240931.6	-240848.82	-227113.87	-234593.68	-228691.23	J/mol
volume	5.8036123e-05	0.0091147057	6.8081278e-05	6.814912e-05	6.43466e-05	4.2607861e-05	9.2160303e-05	m³/mol
bubblePointTemperature	329.2473	330.05338	328.24921	409.83974	407.27841	337.61855	416.45694	K
bubblePointPressure	0.7014262	1.0160338	1	1.0226597	9.9995065	1	9.9995065	atm
dewPointTemperature	330.25516	331.67408	328.27218	411.27241	407.28372	337.72861	416.58155	K
dewPointPressure	0.66077541	0.95372986	0.99916828	1.0219398	9.9982494	0.99560592	9.9741742	atm
Vapor properties								
Liquid properties								
activity[Methanol]	0.58678757	0.69878964	0.35441667	0.35422993	0.65734919	0.99501627	0.0097370016	-
activity[Acetone]	0.5849247	0.45801425	0.77910891	0.77904786	0.47791562	0.0092420707	0.99401619	-

Fig 3.44 Resultados después de varias corridas.

Si observamos con atención la composición a la salida del rehervidor de la primera columna la composición en fracción mol del metanol es **0.9876** y en el rehervidor de la segunda columna la acetona es de **0.9886** que concuerda parcialmente con lo reportado en el artículo mencionado en el epígrafe.

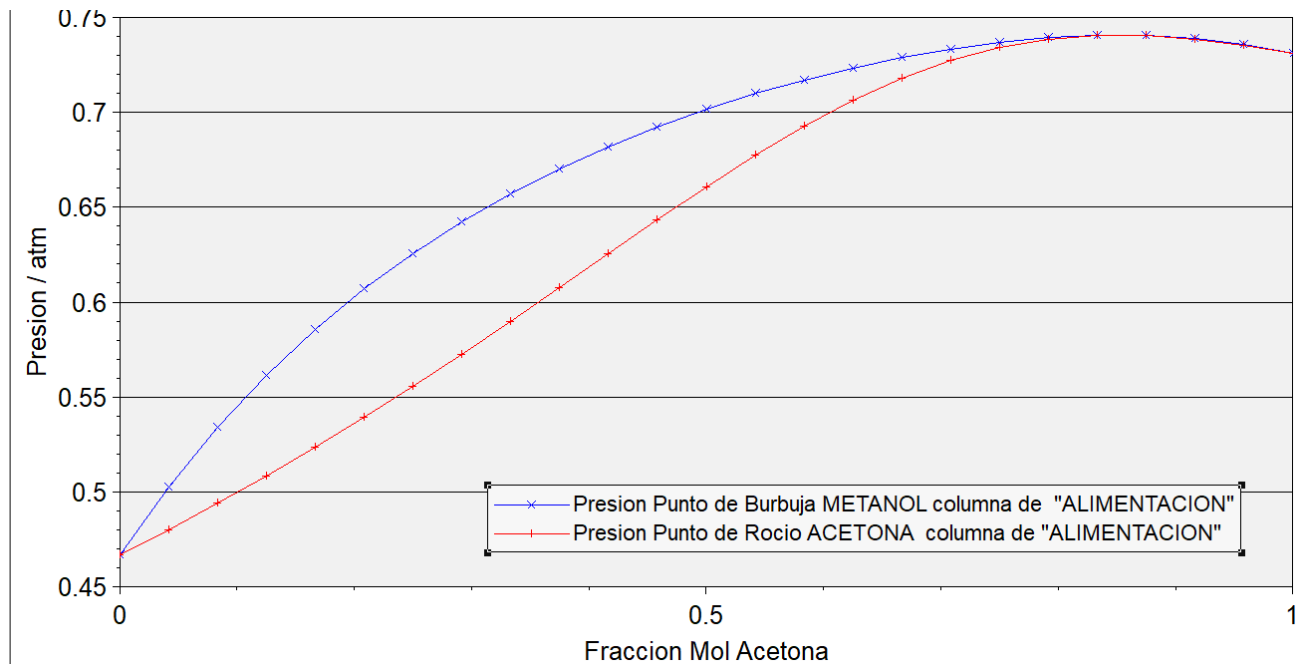


Fig 3.45 Obsérvese el “Azeótropo” en la parte superior de la gráfica.

Análisis de Resultados.

Derivado de las gráficas y las composiciones a la entrada y salida de cada una de las columnas para separar un compuesto que contiene un azeótropo es muy importante verificar la sensibilidad paramétrica en el manejo del juego de presiones para lograrlo separar y sirva como un detonante para mejorar la eficiencia energética

CASOS DE ESTUDIO: Obtención del Dietiléter a partir de metanol.

Carlos Chica Pérez, Proyecto de fin de carrera de Ingeniería Química, Facultad de Ciencias, Ingeniería Química, “Diseño de un reactor catalítico para la obtención de dimetil Eter, (DME), a partir de metanol”.

La tesis se refiere a la obtención de Dimetil Eter, (DME), a partir del metanol, sin embargo, la simulación que se presenta se basa en esta tesis para la obtención del DietilEter, (DEE), a partir del etanol.

Tanto el DME como el DEE son productos potencialmente importantes como futuros substitutos de los combustibles fósiles.

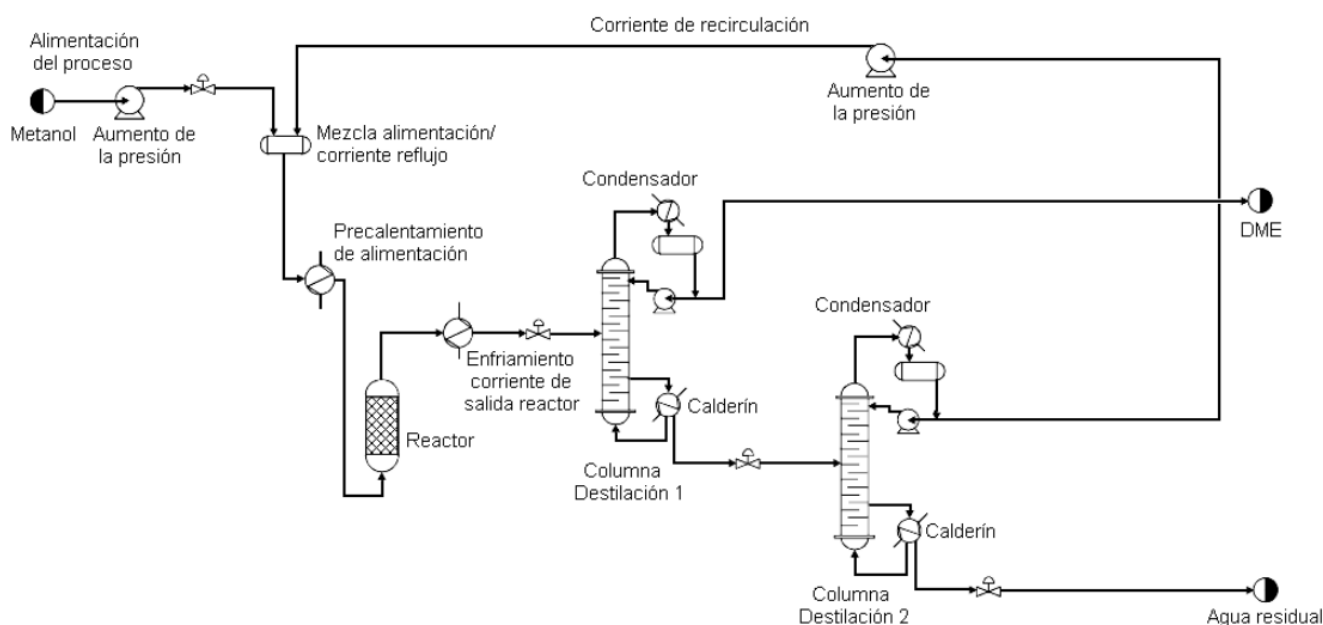


Fig 3.46 Diagrama del Proceso para la obtención del Dimetileter, (DME), a partir de Metanol

Tanto el DME como el DEE puede ser un substituto del Gas Licuado (Propano-Butano), como combustible para automóviles, debido a su número de cetános y su reducción de emisiones, derivado que es un gas limpio, fácil de transportar y licuar.

Se obtiene a partir de la deshidrogenación catalítica tanto del Metanol como de Etanol y obteniendo como residuo agua.

El etanol se transforma en DEE y agua además del reactor se emplean dos columnas de destilación para separar los productos del reactor el etanol que no reacciona y se recicla.

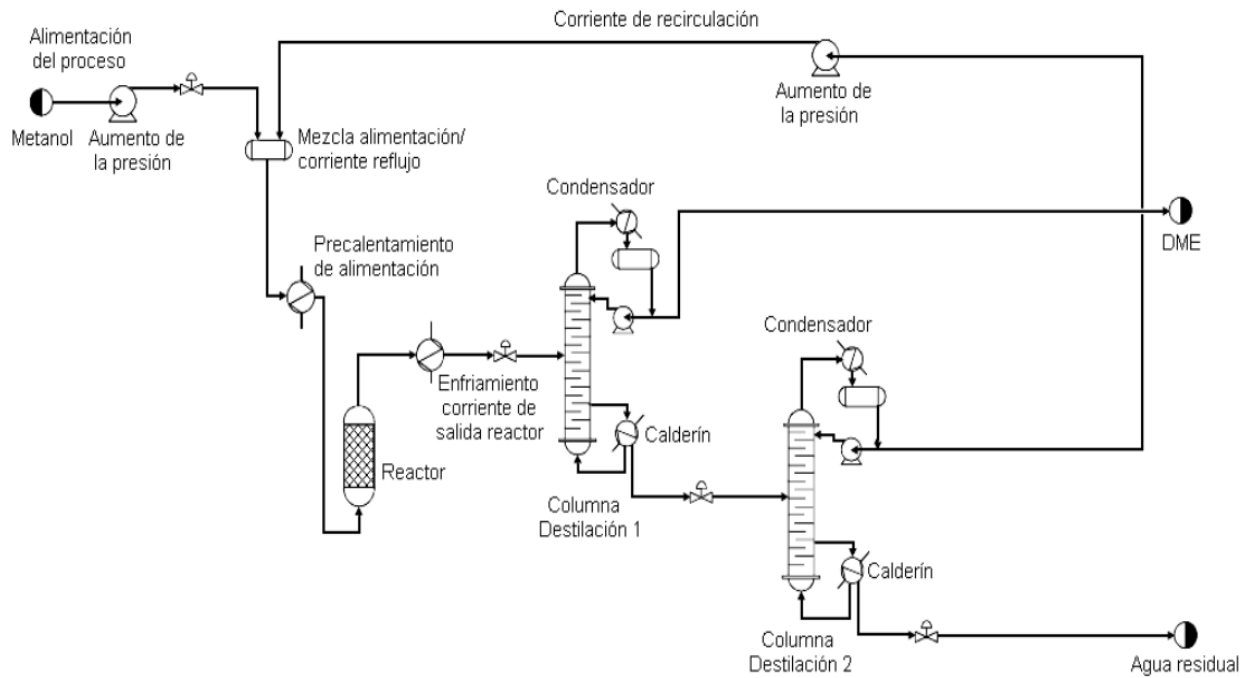


Fig 3.47 Diagrama del Proceso para la obtención del Dimetiléter a partir de Metanol

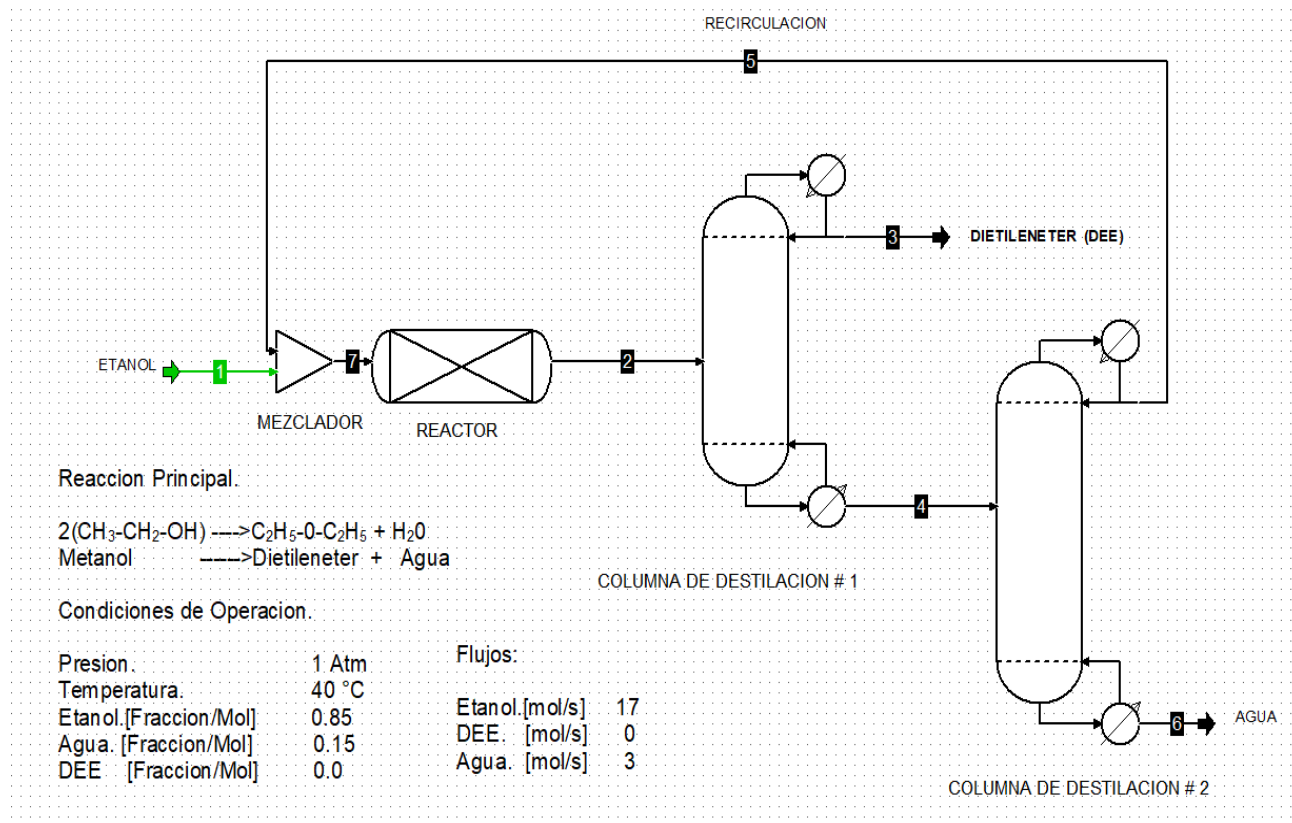


Fig 3.48 Diagrama del proceso propuesto para la obtención del Dietileneter a partir de Etanol

Incorporación de la información.

Document Explorer		
- FlowsheetingWithCOCOandChemSep - Flowsheet 1, 2 1 - Settings		
name	1	unit
▶ Stream		
▶ Connections		
▼ Overall		
pressure	1	atm
temperature	40	°C
mole fraction [Ethanol]	0.85	
mole fraction [Diethyl ether]	0	
mole fraction [Water]	0.15	
flow	20	mol / s
MW	41.8609	g / mol
▼ Compound flows		
Ethanol	17	mol / s
Diethyl ether	0	mol / s
Water	3	mol / s
▼ Phase Fractions		
molar phaseFraction [Liquid]	1	
▼ Liquid composition		
mole fraction [Ethanol]	0.85	
mole fraction [Diethyl ether]	0	
mole fraction [Water]	0.15	
▼ Overall properties		
enthalpy	-41061.859	J / mol
enthalpyF	-277041.46	J / mol
volume	5.1226222e-05	m³ / mol
bubblePointTemperature	78.307035	°C
bubblePointPressure	0.16798889	atm
dewPointTemperature	78.36756	°C
dewPointPressure	0.16647827	atm
▶ Liquid properties		

Fig 3.49 informacion incorporada del proceso de obtencion del DDE

Reactor:

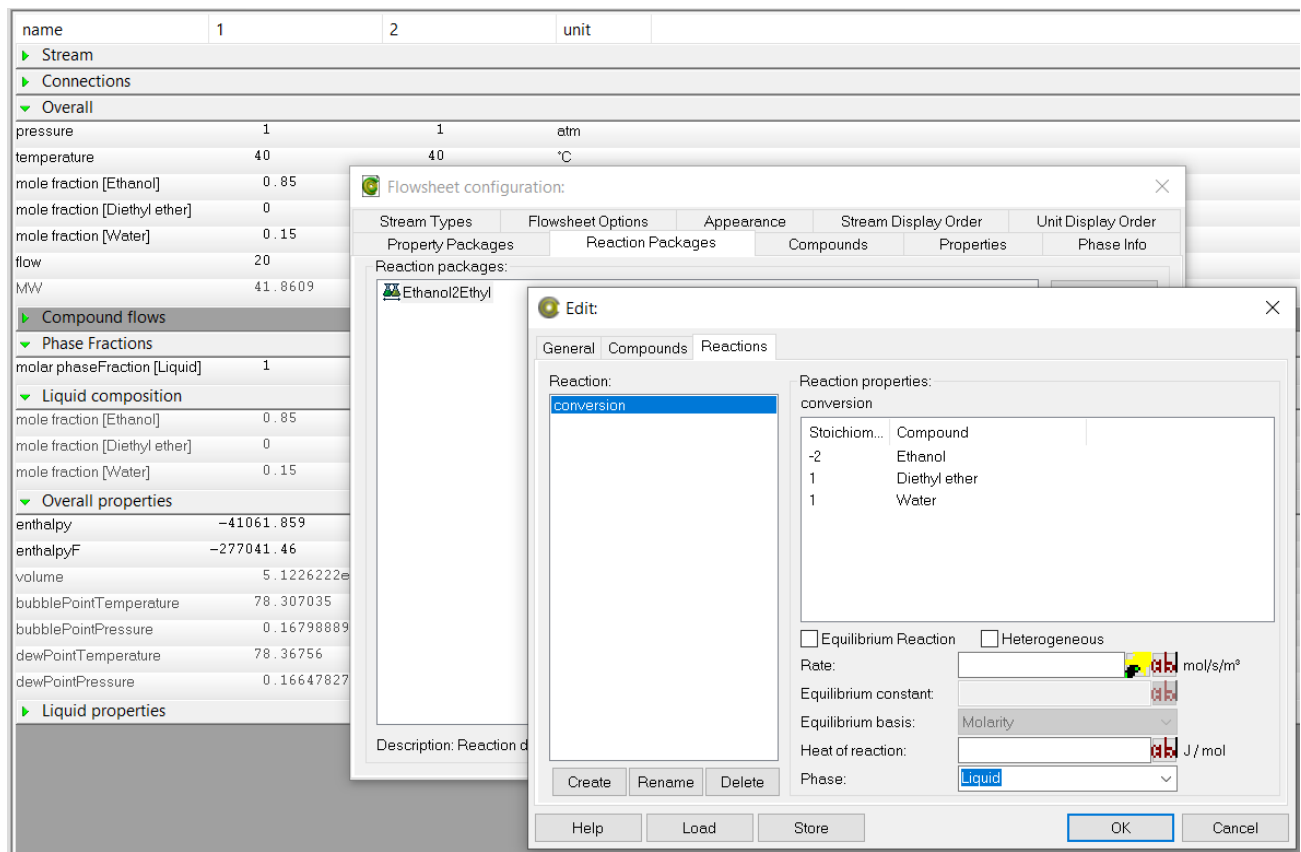


Fig 3.50 Valores estequiométricos de la reacción.

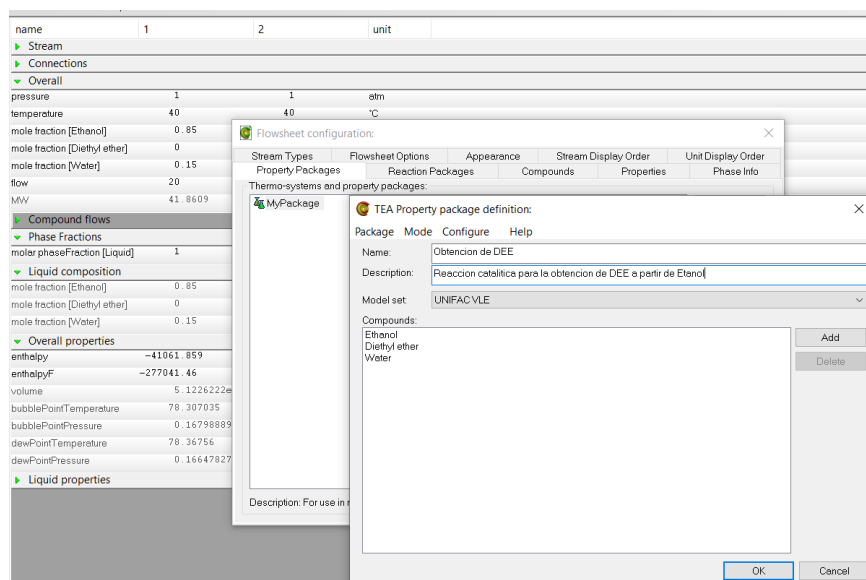


Fig 3.51 Modelo Termodinámico para el cálculo de propiedades

Corriente 1 y 2

name	1	2	unit
Stream			
Connections			
Overall			
pressure	1	1	atm
temperature	40	40	°C
mole fraction [Ethanol]	0.85	0.41514483	
mole fraction [Diethyl ether]	0	0.20758034	
mole fraction [Water]	0.15	0.37727484	
flow	20	40.651355	mol / s
MW	41.8609	41.308391	g / mol
Compound flows			
Phase Fractions			
molar phaseFraction [Liquid]	1	1	
Liquid composition			
mole fraction [Ethanol]	0.85	0.41514483	
mole fraction [Diethyl ether]	0	0.20758034	
mole fraction [Water]	0.15	0.37727484	
Overall properties			
enthalpy	-41061.859	-38678.775	J / mol
enthalpyF	-277041.46	-279778.39	J / mol
volume	5.1226222e-05	5.1850644e-05	m³ / mol
bubblePointTemperature	78.307035	55.292478	°C
bubblePointPressure	0.16798889	0.56189262	atm
dewPointTemperature	78.36756	78.639754	°C
dewPointPressure	0.16647827	0.15599928	atm
Liquid properties			

Fig 3.52 Información incorporada en las corrientes 1 y 2

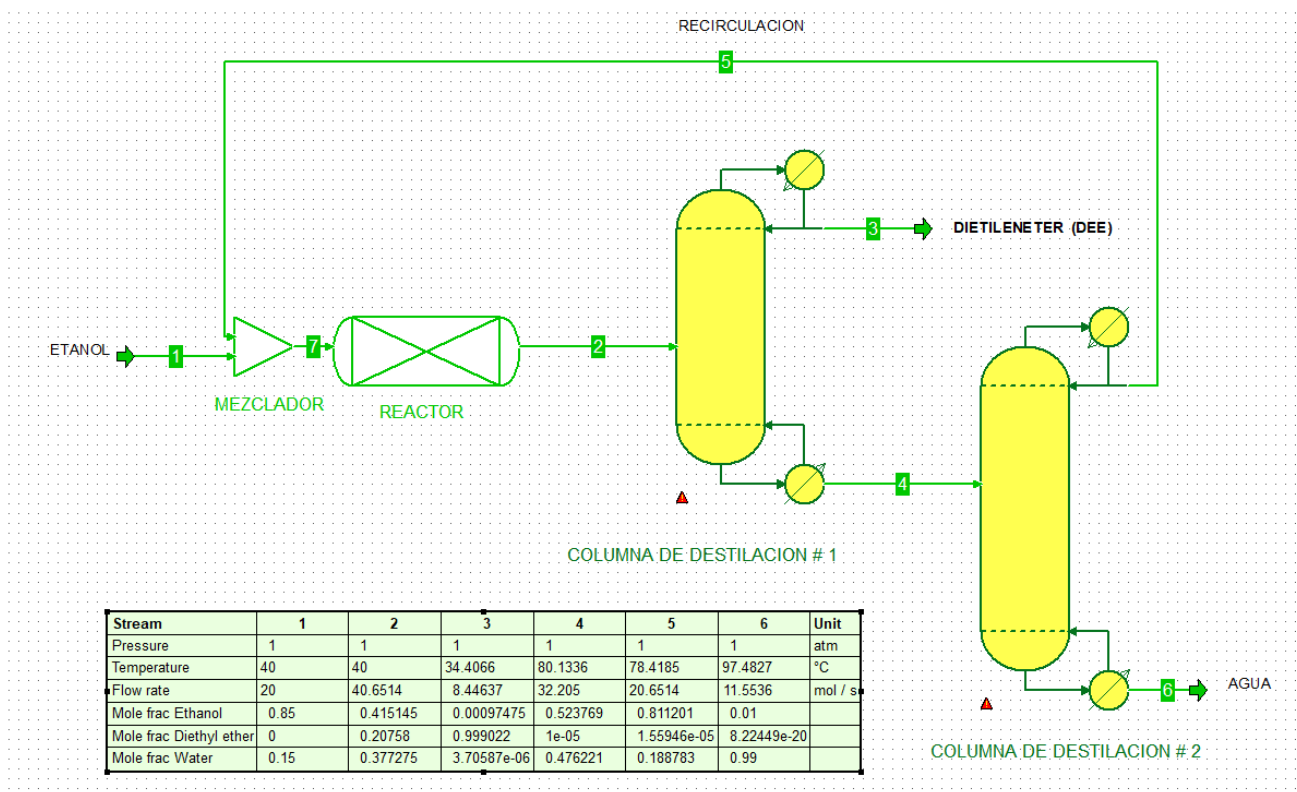


Fig 3.53 Resumen de la mejor corrida con sus resultados por corriente

Algunas Graficas.

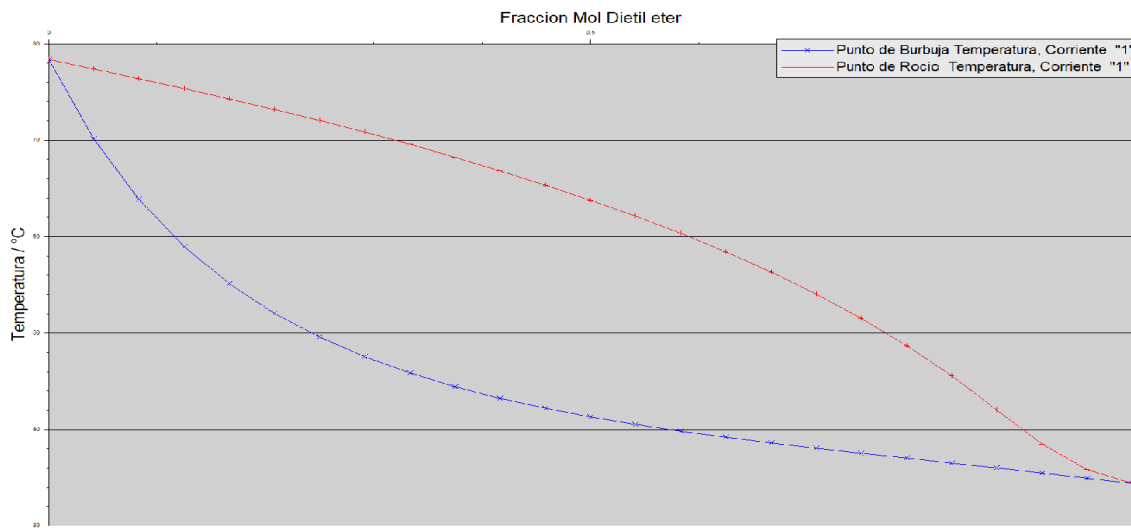


Fig 3.54 Temperatura-Fracción Mol del DEE

Análisis de resultados.

Corriendo la Aplicación se observa que la obtención del DEE en el reactor es arriba del **0.20758** Frac/mol y la del agua es de **0.3772** Frac/mol sin embargo a la salida por el domo de la primera columna la concentración del DEE es del **0.999** Frac/mol y la del agua es muy pequeña en la columna # 2 sucede lo contrario la composición del agua es **0.99** Frac/mol y la del DEE es ínfima.

Se observa que las composiciones obtenidas son mejores que las propuestas por el trabajo de Tesis sin embargo son necesario la evaluación Técnica - Económica de los dos procesos

Es necesario ajustarla relación de Recirculación debido a que es un parámetro muy sensible en el proceso.

BIBLIOGRAFIA

Arturo Jiménez Gutiérrez, (2021), Diseño de procesos en ingeniería química, Universidad Nacional de Colombia, Facultad de Ingeniería.

Cengel, Y. y Cengel, A. (2011). Transferencia de calor y masa. México: McGraw-Hill.

Charles Russell Severance, (2016), Python for Everybody: Exploring Data in Python 3, Sue Blumenberg

Chemsep, (marzo, 2024), modeling separation processes, recuperado de <http://www.chemsep.org>

Cuevas Aranda Manuel, (2011), Introducción a la simulación en Ingeniería Química. Ed. Servicio de Publicaciones -Universidad de Jaén

David M. Himmelblau, Kenneth B. Bischoff · (2021) ,Análisis y Simulación de procesos: Reverte

Hernán Darío Álvarez Zapata, (2022), Modelado dinámico de procesos químicos y biológicos, Ed. Universidad Nacional de Colombia

Iván Gil, Javier Guevara, José García, (2011), Análisis y simulación de procesos en ingeniería química, universidad de Colombia

Jiménez Gutiérrez Arturo, (2021), Diseño de procesos en ingeniería química, Ed. Reverte S.A.

Kern, D. (1999). Procesos de transferencia de calor. México: Compañía Editorial Continental S. A. de C. V.

Luis Puigjaner · (2006), Estrategias de modelado, simulación y optimización de procesos, Ed. Sintesis

Python, (Julio, 2024), documentación Python de <http://docs.python.org/3/>

R. Smith: Chemical Process Design and Integration. 2 nd Edition, John Wiley & Sons, 2016; Pinch Analysis from Chapter 15 onwards (ISBN 9781119990130)

Verruschi Elisa, (2011),Optimización de reactores químicos, Ed. Editorial Académica Española

Walas, S. (2012). Chemical Process Equipment. USA: Ed. Elsevier