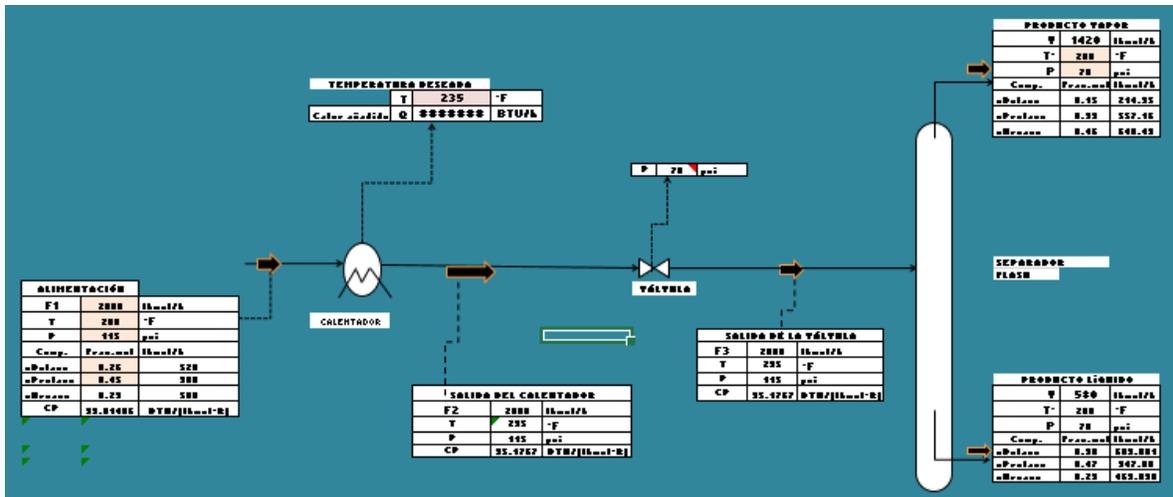


SIMULACIÓN DE PROCESOS



JORGE CIRO JIMENEZ OCAÑA

A mi familia

Este libro fue elaborado durante el ejercicio del periodo sabático 2018, en el Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez. A quien agradezco permitirme continuar con mi labor académica durante 35 años de mi vida.

ÍNDICE

PRÓLOGO	7
INTRODUCCIÓN	9
1.- FUNDAMENTOS DE SIMULACIÓN	
1.1. CONCEPTOS BÁSICOS	10
1.2. BALANCES SIMPLES	12
1.2.1 <u>Proceso de evaporación</u>	12
1.2.2 <u>Proceso de Cristalización</u>	14
1.2.3 <u>Proceso de mezclado de dos soluciones</u>	15
1.2.4 <u>Proceso de mezclado de tres soluciones</u>	17
1.3. BALANCES SIMULTÁNEOS DE MASA Y CALOR	18
1.3.1 <u>Ecuación de Bernoulli</u>	18
1.3.2 <u>Cálculo de la potencia de una bomba</u>	20
1.3.3 <u>Cálculo de flujos de descarga de fluidos</u>	22
1.3.4 <u>Flujo de calor en las paredes de un horno</u>	24
1.3.5 <u>Flujo de calor a través del aislante de una tubería</u>	29
1.3.6 <u>Balace de energía en un calentador</u>	32
1.3.7 <u>Intercambiador de calor de doble tubo</u>	34
1.3.8 <u>Reactor de tanque agitado continuo no isotérmico</u>	36
1.4. ALGORITMOS DE SOLUCIÓN DE MODELOS	37
1.4.1 <u>Definiciones y clasificación</u>	37
1.4.2 <u>Algoritmo del modelo matemático del proceso de evaporación</u>	39
1.4.3 <u>Algoritmo del modelo matemático del proceso de cristalización</u> ...	40

1.4.4 <u>Algoritmo del modelo matemático del proceso de mezclado</u>	41
1.4.5 <u>Algoritmo del modelo matemático para el cálculo de la potencia de una bomba</u>	42
1.4.6 <u>Algoritmo del modelo matemático para el cálculo del flujo de calor en la pared de un horno</u>	43
1.4.7 <u>Algoritmo del modelo matemático que calcula el espesor óptimo del aislante, en una tubería que transporta fluido caliente</u>	44

2. SIMULACIÓN MODULAR

2.1 DESARROLLO DE MÓDULOS DE SIMULACIÓN

2.1.1 <u>Introducción</u>	46
2.1.2 <u>Bases de datos</u>	46
2.1.3 <u>Procesos de evaporación de agua de mar</u>	50
2.1.4 <u>Intercambiador de calor de doble tubo</u>	52
2.2 CONSTRUCCIÓN DE UN SIMULADOR	56
2.2.1 <u>Cálculo de la potencia de una bomba</u>	56
2.2.2 <u>Destilación flash</u>	58
2.3 INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS	60

3. SIMULACIÓN COMERCIAL

3.1 MANEJO DE UN SIMULADOR COMERCIAL	61
3.1.1 Bosquejo histórico de los simuladores en ingeniería química	61
3.1.2 Simuladores comerciales típicos	62

3.2 CASOS DE ESTUDIO DE DISEÑO, ANÁLISIS Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS EN INGENIERÍA QUÍMICA	62
3.2.1 <u>Simulador ASPEN-HYSYS</u>	62
3.2.2 <u>Simulador DWSIM</u>	68
3.3 INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS	75
BIBLIOGRAFIA	76

PRÓLOGO

El propósito de este libro es servir de guía a los estudiantes de ingeniería química, en el análisis del comportamiento de los procesos químicos, que permite construir los modelos matemáticos representativos correspondientes, para que usando programas de cómputo se encuentren diversas soluciones que determinen la sensibilidad del proceso, cuando se manipulen cambios en las condiciones de operación del proceso, expresadas en las variables y parámetros que forman parte del modelo matemático.

El contenido de este texto está ajustado al programa de la asignatura “Simulación de Procesos”, que se imparte en la carrera de ingeniería química del Instituto Tecnológico Nacional; y que se desarrolla en tres unidades de estudio.

La primera unidad se denomina Fundamentos de simulación. Donde se describen y explican los conceptos básicos del campo de la simulación; se elaboran modelos matemáticos al desarrollar balances de materia y de energía en procesos de la industria química; y se plantean algoritmos para la solución de los modelos.

La segunda unidad, Simulación modular, es la parte del libro donde se desarrollan módulos de simulación para resolver modelos matemáticos de procesos que analizan en ingeniería química. Estos módulos son ejemplos de simuladores; que pueden integrar un simulador de un proceso más complejo, si se interconectan como operaciones unitarias. Los simuladores se construyen usando Excel como herramienta de cómputo, por la facilidad de acceso que los estudiantes tienen al paquete y por las grandes posibilidades de cálculo que tiene. Se estructuran las bases de datos que permiten el análisis de sensibilidad, a diferentes condiciones de operación.

La tercera unidad, que se denomina Simulación comercial, describen las características y aplicaciones de simuladores comerciales usados en ingeniería química. Considerando que los simuladores comerciales son de aplicación específica, se presentan ejemplos de manejo.

En todo el texto, se insiste en la importancia que tiene para el ingeniero químico el desarrollo de modelos matemáticos de procesos, porque para esto se requiere de un análisis detallado de cada una de las etapas que los constituyen, lo que nos lleva al conocimiento del comportamiento de cada proceso en función de las condiciones de operación.

Las condiciones de operación están determinadas por los valores de todas las variables que están involucradas en el proceso. La influencia de cada una de ellas se define con el análisis del proceso; ya que algunas son variables más significativas para el proceso, mientras que otras se pueden parametrizar, o sea considerarlas como constantes, en ciertos rangos de valores de las condiciones de operación. Y aquí es donde la lógica y el sentido común del ingeniero intervienen para llevar a cabo una adecuada discriminación de las variables de proceso para que sean consideradas en las ecuaciones que constituyen el modelo matemático.

El siguiente paso es encontrar un método de solución del modelo matemático y desarrollar su implementación en un programa de cómputo para analizar, simular y optimizar el proceso.

En el desarrollo de las tres unidades, se mantiene el criterio de que “simulación de procesos” es una materia integradora de todas las asignaturas previas de la retícula de ingeniería química que permite, a través de la interpretación de los resultados de los simuladores, optimizar las condiciones de operación de un proceso real.

INTRODUCCIÓN

Los ingenieros químicos pueden analizar el comportamiento de un fluido que viaja a través de tuberías que forman parte de un proceso industrial o sea un proceso artificial. Pero este análisis puede extenderse a la corriente de un río, que es un proceso natural. En ambos procesos, los modelos representativos están constituidos por ecuaciones de transporte de cantidad de movimiento, pero aplicadas a geometrías diferentes y esto puede provocar que la solución matemática sea en cierto modo diferente.

Los ingenieros químicos del siglo xx, que se ocupaban del diseño y optimización de nuevos procesos industriales, previamente usaban réplicas en pequeña escala de comportamiento análogo, para diseñar el equipo y definir las condiciones de operación del proceso real. Las réplicas usadas eran modelos físicos, pequeñas plantas piloto, que en realidad constituían prototipos de las plantas de procesamiento que se construirían a escala industrial. Estos prototipos absorbían meses de trabajo y por el sistema de control necesario para la medición de las variables involucradas tenían costos significativos para el inversionista.

En la década de los años 60 del siglo pasado, con el desarrollo de programas de cómputo para ser manejados en los grandes equipos de cómputo de esa época, las actividades de simulación aprovecharon los modelos conceptuales de los procesos que ya habían desarrollado ingenieros químicos como William L. Luyben, aplicando métodos numéricos de solución y propiciando un avance considerable en el control y optimización de procesos.

1.- FUNDAMENTOS DE SIMULACIÓN

1.1. Conceptos básicos

El Diccionario de la Real Academia Española define al verbo simular como “representar algo, fingiendo o imitando lo que no es”. Entonces, los ingenieros debemos entender que la simulación es una técnica, con muchas ventajas, que usamos para obtener información del comportamiento de un proceso real, a través del análisis de una réplica o modelo que debe tener un comportamiento análogo del objeto que representa. Además, si tomamos una de las definiciones que el Diccionario de la Real Academia Española tiene de la palabra proceso: “conjunto de las fases sucesivas de un fenómeno natural o de una operación artificial”, podemos formular una definición más amplia del término que nos ocupa en este texto:

Simulación de procesos es una técnica que permite representar, a través de un modelo o réplica, las operaciones sucesivas e interrelacionadas de cualquier proceso real, ya sea de carácter natural o artificial, para conocer el comportamiento del sistema ante el cambio de las variables del proceso.

Los modelos conceptuales son estructuras matemáticas constituidas por ecuaciones algebraicas, ecuaciones diferenciales y bases de datos debidamente interrelacionadas en un algoritmo de solución, que requiere del uso de la computadora para la simulación.

Las ecuaciones algebraicas se obtienen del balance de materia y energía de un proceso en estado estacionario o sin reacción química. Las ecuaciones diferenciales se presentan cuando se analiza el proceso en estado no estacionario, ya que una o más variables dependen del tiempo; es decir, es un sistema dinámico. Las ecuaciones cinéticas son ecuaciones diferenciales que se presentan en el modelo, cuando en un proceso multicomponente ocurren conversiones de las sustancias involucradas.

En todo modelo matemático existen variables que forman parte del conjunto que conforman las condiciones de operación y que uno puede modificar para optimizar el proceso. En el algoritmo de solución, éstas se denominan variables de entrada.

Las variables que dependen del valor de los parámetros de entrada, son funciones o relaciones que se obtienen de los balances de materia, energía o cantidad de movimiento; o son ecuaciones cinéticas.

Para el caso de las funciones que se presentan en los modelos es muy importante determinar el rango de validez de la ecuación correspondiente; y esto debe advertirse en el algoritmo de solución, para que en el desarrollo de la simulación no se obtengan resultados erróneos porque el estado de agregación de alguna sustancia involucrada ha cambiado y los valores de sus propiedades físicas cambian drásticamente o pierden su continuidad.

Como en la simulación se cambian las variables de entrada, para realizar el análisis de sensibilidad que depende de las funciones del proceso, es necesario conocer los valores de las propiedades físicas o químicas que intervienen en las ecuaciones para diferentes condiciones de operación de los procesos. Los datos de las propiedades se requieren en valores continuos; porque resulta complicado manejar tablas de datos; entonces, es necesario ajustar datos experimentales para convertirlas en funciones matemáticas continuas. Así, una buena base de datos es otro elemento fundamental del programa de simulación. No olvidar que el ajuste de los datos tiene validez en el rango de los parámetros del estado físico que corresponde a las propiedades a determinar.

Los parámetros de entrada son los valores que se fijan para un determinado conjunto de condiciones de operación: temperatura; presión; flujos volumétricos; flujos de masa; composiciones de los componentes que intervienen en el proceso; entre otros.

1.2. BALANCES SIMPLES

Para entrar gradualmente al ambiente de la simulación, en esta sección se analizan procesos cuyo comportamiento queda definido con un balance de materia. El propósito de esta sección es construir el modelo matemático de cada proceso. En la sección 1.4 del texto se elaboran los algoritmos correspondientes que permiten desarrollar los programas de cómputo; es decir, los módulos de simulación.

1.2.1 Proceso de evaporación. Se aplica un balance de materia a la evaporación que sufre el agua de mar por la radiación solar, en una región tropical y en condiciones ambientales, a la temperatura promedio de 22°C. El agua se mantiene en un recipiente a cielo abierto, con dimensiones específicas dadas: ancho a , largo L y espesor de la película h . La evaporación se lleva a cabo para concentrar la solución salina hacia el punto de saturación, donde ocurra la precipitación de la sal.

Manzur y Cardoso en un ingenioso experimento miden la masa evaporada del agua en función del tiempo y a temperatura ambiente de 22°C, reportando una velocidad de evaporación, R_{evap} , igual a 0.0000293 Kg/ (s m²); resultado que se maneja para este balance de masa (A. Manzur y J. Cardoso. 2015).

La concentración de sales en el agua de mar C_s , en promedio es de 35 kilogramos por metro cúbico. Este es un parámetro de entrada que permite calcular la masa de sal de la corriente 1, dependiendo del volumen de solución salina que se va a evaporar, V_{ss} . La cantidad de agua pura por cada metro cúbico de solución salina es de 965 kilogramos, C_A .

En el diagrama de bloques de la figura 1, la corriente 1, que puede considerarse como la corriente de entrada al diagrama, corresponde a la condición inicial del proceso ($t = 0$); que son datos de entrada. Donde M_1 es la masa de la solución salina que se coloca en el recipiente para evaporarse, m_{s1} es la masa de sal que contiene inicialmente la solución salina y m_{A1} es la masa de agua que conforma inicialmente la solución.

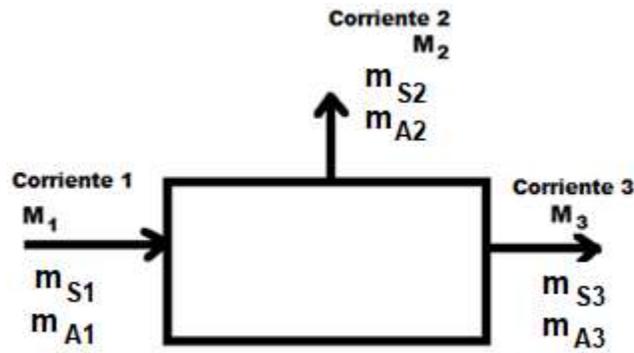


Figura 1

Por la corriente 2 solamente sale el agua que se evapora M_{A2} ; y la masa total de la corriente M_2 es igual a M_{A2} ; por lo que M_{S2} la masa de sal que sale en esta corriente es igual a cero. M_{A2} se calcula como el producto de la velocidad de evaporación del agua, R_{evap} , por el área superficial de la solución A_{exp} y el tiempo de exposición t_{exp} . La velocidad de evaporación del agua, R_{evap} es un parámetro fijo de entrada, para el caso que se analiza; sin embargo, tiene valores diferentes para condiciones ambientales diversas. El tiempo de exposición t_{exp} es un dato de entrada que introduce el usuario del simulador.

La corriente 3 del diagrama, corresponde a la condición final del proceso, al tiempo de exposición t_{exp} que introduce el usuario del simulador. Donde M_3 es la masa de la solución salina que queda al final del proceso de evaporación, conteniendo una masa disuelta de sal igual a m_{S3} , que es igual a m_{S1} ; y una masa de agua m_{A3} .

Por lo que, el modelo matemático de este balance de materia está formado por las ecuaciones siguientes:

$$M_1 = M_2 + M_3 \quad (1)$$

$$m_{S1} = m_{S2} + m_{S3} \quad (2)$$

$$m_{A1} = m_{A2} + m_{A3} \quad (3)$$

$$m_{S1} = C_S V_{ss} \quad (4)$$

$$m_{A1} = C_A V_{ss} \quad (5)$$

$$V_{ss} = a L h \quad (6)$$

$$A_{exp} = a L \quad (7)$$

$$m_{A2} = R_{evap} A_{exp} t_{exp} \quad (8)$$

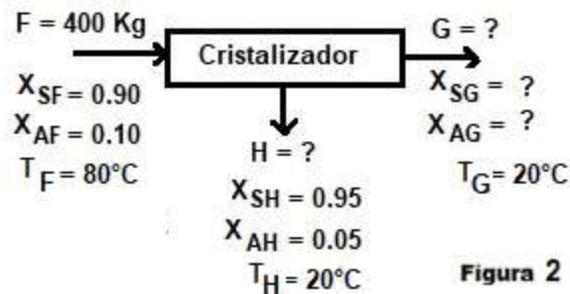
$$M_1 = m_{S1} + m_{A1} \quad (9)$$

$$M_2 = m_{S2} + m_{A2} \quad (10)$$

$$M_3 = m_{S3} + m_{A3} \quad (11)$$

1.2.2 Proceso de Cristalización. Se alimentan a un cristalizador 400 kilogramos por hora de una solución acuosa de nitrato de potasio al 90%, a la temperatura de 80°C. En el cristalizador se enfría a 20°C, cristaliza la sal, separándose una disolución fría saturada (agua madre) con 31.6% en peso de sal y cristales húmedos con 5% en peso de agua. Se requiere calcular los flujos en kilogramos por hora de la disolución saturada y de cristales húmedos que salen del cristalizador.

El diagrama de flujo para este proceso, tomando como base de tiempo una hora, se presenta en la figura 2.



El modelo matemático lo constituyen las tres ecuaciones siguientes:

Balance general de masa: $F = G + H \quad (12)$

Balance de masa de sólidos salinos: $F X_{SF} = G X_{SG} + H X_{SH} \quad (13)$

Balance de masa de agua: $F X_{AF} = G X_{AG} + H X_{AH} \quad (14)$

Por la composición de entrada: $X_{AF} = 1 - X_{SF} \quad (15)$

Los valores de F , X_{SF} , T_F , X_{SH} , X_{AH} y T_G , son datos de entrada, que debe asignar quien desea resolver el problema. Los valores de X_{SG} y X_{AG} dependen de la temperatura de saturación, T_G ; que aparecen en la tabla 1.

°C	0	10	20	30	40	50	60	70	80	90	100
g. KNO ₃ /100 g. agua	13.3	20.9	31.6	45.8	63.9	85.55	110.0	138.0	169.0	202.0	246

Tabla 1. Solubilidad del nitrato de potasio en agua.

Fuente: Perry, R. (1992). Manual del ingeniero químico. México: McGraw-Hill.

Todos estos valores se sustituyen en el modelo para obtener las ecuaciones simultáneas:

$$\text{De la ecuación (12)} \quad 400 \text{ kg} = G + H \quad (16)$$

$$\text{De la ecuación (13)} \quad (400)(0.90) = (0.316)G + (0.95)H \quad (17)$$

Que al resolverlas dan como resultado; 368.45 kilogramos de cristales húmedos en la corriente H y 31.55 kilogramos de agua madre en la corriente G, en un tiempo de operación de una hora.

1.2.3 Proceso de mezclado de dos soluciones. Cuando se desea obtener una cantidad definida de una solución C, que tenga una composición también definida de dos componentes; y se tienen dos soluciones de los mismos componentes con diferentes concentraciones, A y B, se realiza un proceso simple de mezclado. Donde es necesario conocer la cantidad de A y de B, que se combinan para obtener la cantidad deseada de la solución C. El diagrama de flujo representativo de este proceso se presenta en la figura 3.

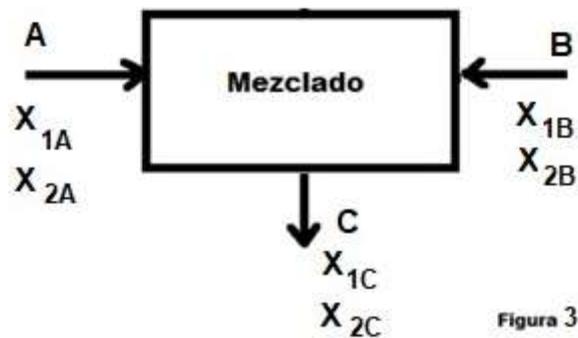


Figura 3

El modelo matemático está formado por las siguientes ecuaciones:

Ecuación general de balance:

$$A + B = C \quad (18)$$

Ecuaciones de balance por componentes:

$$X_{1A} A + X_{1B} B = X_{1C} C \quad (19)$$

$$X_{2A} A + X_{2B} B = X_{2C} C \quad (20)$$

En la figura 3, X_{1A} es la fracción masa del componente 1 en la corriente A, X_{2A} es la fracción masa del componente 2 en la corriente A, X_{1B} es la fracción masa del componente 1 en la corriente B, X_{2B} es la fracción masa del componente 2 en la corriente B, X_{1C} es la fracción masa del componente 1 en la corriente C; y X_{2C} es la fracción masa del componente 2 en la corriente C.

Para ilustrar el uso de este modelo matemático, supongamos que se desean 200 kilogramos de una solución acuosa con una fracción masa de 0.20 de hidróxido de potasio. Para esto se mezclan dos soluciones que se tienen en existencia, la primera con una fracción masa de 0.09 de hidróxido de potasio y la segunda con una fracción masa de 0.39 de hidróxido de potasio. Lo que se requiere, es determinar la cantidad en kilogramos de cada solución disponible, que se deben alimentar al mezclador para obtener la solución con la composición deseada.

Sustituyendo los datos del caso particular en el modelo matemático, se obtienen las ecuaciones siguientes:

$$A + B = 200 \quad (21)$$

$$0.09 A + 0.39 B = (0.20) (200) \quad (22)$$

$$0.91 A + 0.61 B = (0.80) (200) \quad (23)$$

Considerando a las ecuaciones (22) y (23) como un par de ecuaciones simultáneas, y resolviendo este sistema de ecuaciones, se deben mezclar 126.7 Kilogramos de solución A, con 73.3 Kilogramos de solución B para encontrar la solución deseada.

1.2.4 Proceso de mezclado de tres soluciones. Cuando se mezclan tres flujos A, B y C, de tres soluciones, cada una con tres componentes iguales; pero de concentraciones diferentes y conocidas, X_{1A} , X_{2A} , X_{3A} , X_{1B} , X_{2B} , X_{3B} , X_{1C} , X_{2C} y X_{3C} ; con el propósito de obtener un flujo requerido S de una solución con las concentraciones definidas X_{1S} , X_{2S} y X_{3S} ; es necesario calcular los flujos A, B y C. El diagrama de flujo de este sistema de mezclado se representa en la figura 4.

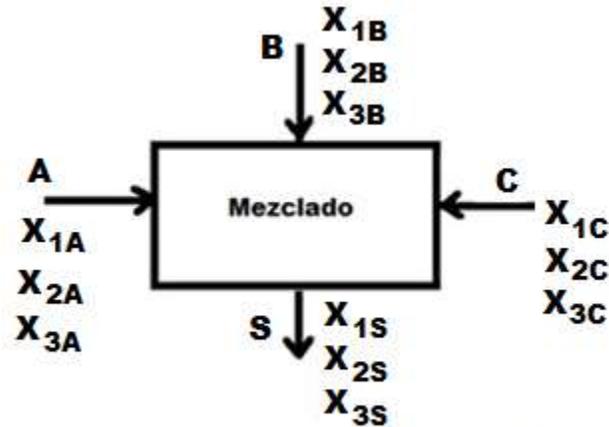


Figura 4

El modelo matemático de este caso son las expresiones matemáticas siguientes:

Ecuación general de balance:

$$A + B + C = S \quad (24)$$

Ecuaciones de balance por componentes:

$$X_{1A} A + X_{1B} B + X_{1C} C = X_{1S} S \quad (25)$$

$$X_{2A} A + X_{2B} B + X_{2C} C = X_{2S} S \quad (26)$$

$$X_{3A} A + X_{3B} B + X_{3C} C = X_{3S} S \quad (27)$$

Como puede observarse, las ecuaciones (25), (26) y (27) constituyen un sistema de tres ecuaciones simultáneas, al resolverlas por álgebra de matrices, definen los flujos requeridos A, B y C.

1.3. BALANCES SIMULTÁNEOS DE MASA Y CALOR

Los modelos matemáticos que se presentan aplicando balances de materia y de energía en esta sección, son representativos de operaciones unitarias cuya formulación no resulta demasiado complicada; la intención es, que a través del análisis fenomenológico, se muestre la metodología para definir las variables de diseño o de optimización del proceso, que están en función de otras variables, que también deben ser identificadas; y de los parámetros que están determinados por las condiciones de operación del proceso. Estos últimos también pueden ser modificados por el analista del proceso.

1.3.1 Ecuación de Bernoulli. Para aplicar un balance de masa y energía se analiza un sistema de flujo de fluidos, aplicando la ecuación de Bernoulli para calcular la potencia de una bomba que mueve a un fluido incompresible; así como también para calcular flujos de descarga de fluidos desde tanques elevados.

La ecuación de Bernoulli representa la relación entre la energía cinética, energía potencial y energía de presión de un sistema de flujo. Se deduce a partir de un balance de cantidad de movimiento de un fluido newtoniano, cuyo modelo resulta ser la ecuación de Navier Stokes:

$$\rho \left(\frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \vec{v} \right) = \mu \nabla^2 \vec{v} - \nabla p + \rho \vec{g} \quad (28)$$

Que después de una serie de simplificaciones, consideraciones y correcciones genera la ecuación de Bernoulli:

$$\frac{p_1}{\rho g} + \frac{v_1^2}{2g} + z_1 + H_P = \frac{p_2}{\rho g} + \frac{v_2^2}{2g} + z_2 + H_F \quad (29)$$

Durante el flujo, la densidad del fluido ρ se considera constante y la aceleración de la gravedad g tiene el valor que corresponde al lugar donde se instala este sistema.

En el punto 1 del sistema de flujo, la presión del fluido es p_1 , la velocidad es v_1 y la altura z_1 ; mientras que, en el punto 2, la presión p_2 , velocidad v_2 y la altura z_2 .

El término H_P se conoce como cabeza de la bomba y corresponde a la altura de columna del líquido que proporciona la potencia de la bomba. El término H_F se denomina pérdida de carga; y se calcula como la suma de la pérdida de energía que sufre el fluido por la fricción a lo largo de la tubería h_f , más la pérdida de energía que sufre el fluido por atravesar los accesorios usados en el flujo h_a ; que son codos, válvulas, Tés, reducciones, expansiones, entre otros objetos.

El cálculo de h_f se realiza con la ecuación de Darcy Weisbach:

$$h_f = f \left(\frac{L}{D} \right) \frac{v^2}{2g} \quad (30)$$

Donde L es la longitud de toda la tubería por la que circula el fluido; y D es el diámetro interno de la tubería. El coeficiente f , se conoce como factor de fricción de Darcy o coeficiente de rozamiento, que en general es función del número adimensional de Reynolds, Re ; y de la rugosidad relativa de la tubería: $f = f(Re, \epsilon_r)$.

El número de Reynolds es la relación entre las fuerzas inerciales y las fuerzas viscosas que experimenta un fluido, como se presenta en la ecuación (31).

$$Re = \frac{Dv\rho}{\mu} \quad (31)$$

Y la rugosidad relativa, ϵ_r , es el cociente de la rugosidad absoluta que posee el interior de la tubería y el diámetro interno. El valor de la rugosidad absoluta depende del material de fabricación de la tubería y para tuberías comerciales aparece en tablas proporcionadas por los fabricantes.

Si el flujo del fluido en la tubería es laminar, el valor del coeficiente de fricción se toma como $64/Re$. Para flujo turbulento el valor de f se obtiene del diagrama de Moody que requiere de la rugosidad relativa de la tubería y del número de Reynolds; pero para un programa de cómputo es más conveniente usar una correlación matemática y se recomienda la de S. E. Haaland:

$$f = \left\{ -1.8 \text{Log} \left[\left(\frac{\epsilon/D}{3.7} \right)^{1.11} + \left(\frac{6.9}{Re} \right) \right] \right\}^{-2} \quad (32)$$

Para calcular la pérdida de energía h_a se usa la fórmula:

$$h_a = (\sum K_a) \frac{v_2^2}{2g} \quad (33)$$

Donde $\sum K_a$ es la suma de los valores de cada uno de los coeficientes de pérdida de carga de los accesorios que intervienen en el sistema de flujo. Estos valores se reportan en los libros de Mecánica de Fluidos.

1.3.2 Cálculo de la potencia de una bomba. Para calcular la potencia de una bomba se despeja de la ecuación de Bernoulli, ecuación (29), la cabeza de la bomba H_P y se sustituye en la ecuación (32):

$$P = \frac{H_P Q \rho g}{\eta} \quad (34)$$

Donde Q es el gasto volumétrico que se desea obtener; ρg es el peso del fluido que se desea mover; y η la eficiencia de la bomba, valor que proporciona el fabricante y corresponde a la razón: (energía que capta el fluido) / (energía que consume la bomba).

Para obtener el modelo matemático de este cálculo, se analiza un sistema de flujo como el de la figura 5. En el punto 1, la presión del fluido es p_1 , la velocidad es v_1 y la altura z_1 . En el punto 2, la presión p_2 , velocidad v_2 y la altura z_2 .



Figura 5

El punto 1, de la figura 5, representa el nivel del líquido que se encuentra dentro de un tanque sumergido; y que deberá fluir por una tubería, representada por la línea

gruesa del dibujo. En este punto, la presión p_1 es la presión atmosférica; si el volumen del tanque sumergido es grande, la velocidad v_1 es prácticamente igual a cero; y si este punto es el nivel de referencia z_1 es igual a cero.

El punto 2, de la figura 5, se ubica a la salida de la tubería, con un diámetro interno D , que descarga el fluido en el tanque elevado. Ahí, la presión p_2 es la presión atmosférica; z_2 es la altura a la que se encuentra este punto con respecto al punto 1; y v_2 es la velocidad que se necesita para proporcionar un flujo volumétrico Q que llene el tanque elevado, con un volumen V , en un tiempo definido t .

Por lo tanto, el modelo matemático para el cálculo de la potencia de la bomba, en caballos de potencia h_p , es:

$$Q = \frac{V}{t} \quad (35)$$

$$v_2 = \frac{4Q}{\pi D^2} \quad (36)$$

$$f = \left\{ -1.8 \text{Log} \left[\left(\frac{\epsilon/D}{3.7} \right)^{1.11} + \left(\frac{6.9\mu}{Dv_2\rho} \right) \right] \right\}^{-2} \quad (37)$$

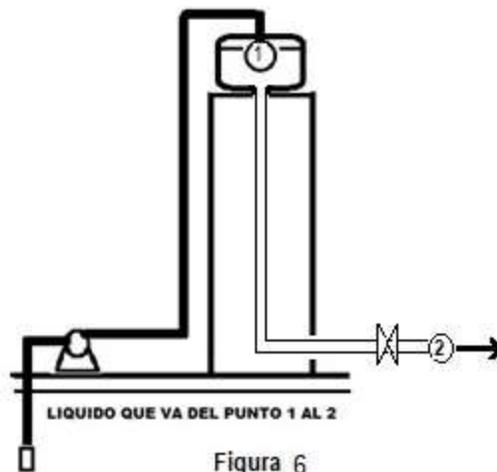
$$H_p = z_2 + \frac{v_2^2}{2g} \left[1 + f \left(\frac{L}{D} \right) + \sum K_a \right] \quad (38)$$

$$P = \frac{H_p Q \rho g}{746\eta} \quad (39)$$

Como ejercicio, se resuelve este modelo para el caso práctico siguiente: Se desea llenar con agua, en un tiempo de treinta minutos, un tanque que tiene un volumen de diez metros cúbicos; se encuentra a una altura z_2 de quince metros; se usa tubería de hierro galvanizado cédula 40, con diámetro nominal de dos pulgadas, rugosidad absoluta de 0.15 milímetros y diámetro interno de 52.5 milímetros. La longitud total de la tubería es de 25 metros. La temperatura del medio ambiente es de 20°C, la densidad del agua es de 1000 kg/m³ y la viscosidad es de 0.001 kg/(m,s). En el arreglo de flujo de la figura 5, se utilizan cuatro codos de 90°, cada uno con un factor de fricción de 0.75 y una válvula check con factor de fricción de igual a 3.

Sustituyendo estos datos en el modelo matemático se desarrollan los siguientes cálculos: de la ecuación (35) se obtiene el flujo volumétrico, $Q = 0.0055556 \text{ m}^3/\text{s}$; que sustituyendo en la ecuación (36) da la velocidad de descarga, $v_2 = 2.56636 \text{ m/s}$; la que se sustituye junto con los datos dados necesarios en la ecuación (37) para obtener el factor de fricción, $f = 0.0267702$; la cabeza de la bomba, por la ecuación (38) es igual a $H_p = 21.629096 \text{ metros}$; y Finalmente, de la ecuación (39) se obtiene la potencia de la bomba expresada en caballos de potencia, $P = 2.1068557 \text{ hp}$. Lo recomendable es usar una bomba de dos caballos de potencia que se ofrece en el mercado.

1.3.3 Cálculo de flujos de descarga de fluidos. Otra aplicación práctica de la ecuación de Bernoulli, es el cálculo de los flujos de descarga de un fluido que desde un tanque elevado se lleva al proceso de una planta industrial. La figura 6 es el diagrama de flujo de este sistema.



El nivel del líquido en el tanque elevado, que es el punto 1 del balance, que se mantiene a la misma altura z_1 , gracias al sistema de bombeo; en ese punto la velocidad del fluido se considera igual a cero; y la presión p_1 es igual a la presión atmosférica. En flujo de descarga, se calcula en el punto 2; donde el fluido sale al medio ambiente con la velocidad v_2 y en ese punto la presión p_2 es igual a la presión atmosférica. El flujo volumétrico de descarga, Q , se calcula con la ecuación (36);

que requiere el diámetro interno como dato de la tubería y el valor calculado de la velocidad v_2 .

Por lo que, a partir de las ecuaciones (29), (30), (31), (32), (35), (36) y (37) se estructura el modelo matemático de este caso, que viene a ser la rutina de cálculo:

$$f = \left\{ -1.8 \text{Log} \left[\left(\frac{\epsilon/D}{3.7} \right)^{1.11} + \left(\frac{6.9\mu}{Dv_2\rho} \right) \right] \right\}^{-2} \quad (40)$$

$$v_2 = \left(\frac{2gz_1}{\left[1 + f \left(\frac{L}{D} \right) + \sum Ka \right]} \right)^{1/2} \quad (41)$$

$$v_2 = \frac{Re\mu}{D\rho} \quad (42)$$

$$Q = \frac{\pi D^2 v_2}{4} \quad (43)$$

Si analizamos las ecuaciones del modelo matemático, para calcular el flujo es necesario hacer un cálculo iterativo con las ecuaciones (40) y (41), hasta que la solución satisfaga a las dos ecuaciones en el valor de v_2 y entonces, con este valor, calcular el del flujo volumétrico de descarga.

Tomando como referencia la figura 6, se aplica el modelo matemático al caso siguiente: Se descarga de agua del tanque elevado donde Z_1 es igual a 15 metros; la tubería que se usa es de fierro galvanizado, con diámetro nominal de dos pulgadas, diámetro interno de 52.5 milímetros y una rugosidad absoluta de 0.15 milímetros. A una temperatura de descarga, la densidad del fluido es 1000 kg/m³ y la viscosidad 0.001 kg / (m s). En la descarga el fluido se somete a una contracción con una contribución a la fricción de 0.5; pasa por un codo de 90°, con una contribución a la fricción de 0.75 y fluye por una válvula de compuerta, completamente abierta, con una contribución a la fricción de 0.19.

Para iniciar el cálculo, se supone un flujo turbulento con un Reynolds de 200,000; para obtener con la ecuación (42) una velocidad de descarga de 3.80952 m/s. Sustituyendo esta velocidad en la ecuación (40), se obtiene un factor de fricción “f”

igual a 0.026482, valor que al sustituirlo en la ecuación (41) da una velocidad de 4.84671 m/s. Como esta velocidad no es igual a la obtenida con el Reynolds supuesto, se sustituye la velocidad de 4.8467 m/s en la ecuación (40) para calcular un nuevo factor de fricción "f" que es igual a 0.026352, que se sustituye en la ecuación (41) para obtener una velocidad de 4.8563 m/s. Nuevamente, usamos esta última velocidad para calcular con la ecuación (40) un factor de fricción, que ahora tiene un valor igual a 0.026351 y al sustituirlo en la ecuación (41) da una velocidad igual a 4.8564. Y después de esta iteración de cálculo, puede usarse esta velocidad para calcular el flujo volumétrico con la ecuación (43), que es igual a 0.010513 m³/s.

Actividad 1.- Analizando el proceso de descarga de un fluido, a partir de la ecuación de Bernoulli, obtener la ecuación (41), que forma parte del modelo matemático.

1.3.4 Flujo de calor en las paredes de un horno. Cuando un horno es de paredes rectangulares construidas con los mismos materiales, basta con analizar el transporte de calor en una de las paredes cuando está en funcionamiento, para conocer el comportamiento del transporte de calor en todas ellas.

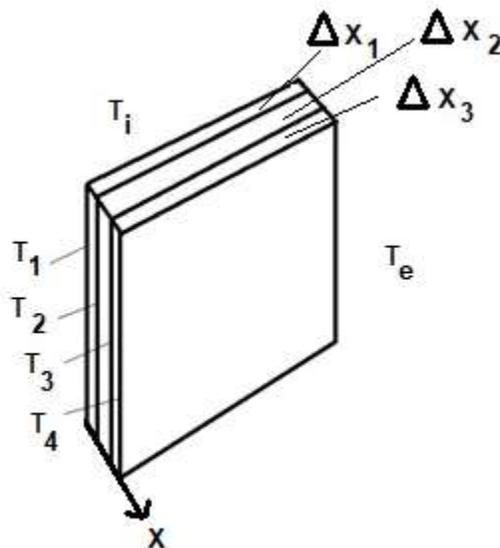


Figura 7

La figura 7, representa la pared de un horno, formada por tres capas de materiales diferentes, que servirá como modelo gráfico para desarrollar el modelo matemático

de la transferencia de calor a través de ellas. El interior del horno está caliente a una temperatura global igual a T_i ; mientras que, la temperatura del medio ambiente que rodea al horno es igual a T_e . La primera capa de la pared está hecha con un material sólido que tiene conductividad térmica k_1 , su espesor es ΔX_1 y la superficie interna de ella tiene la temperatura T_1 . La segunda capa de la pared es un material aislante que tiene conductividad térmica k_2 , con espesor ΔX_2 y la superficie de esta capa que está en contacto con la primera capa se encuentra a la temperatura T_2 . La tercera capa de la pared tiene un espesor ΔX_3 , está hecha con un material de conductividad térmica k_3 ; la superficie de esta capa que está en contacto con la segunda capa se encuentra a la temperatura T_3 ; mientras que, la superficie de esta capa que, a su vez, es la parte exterior del horno está a la temperatura T_4 .

Como el valor de la temperatura T_i es mayor que la temperatura T_e , el calor fluye en dirección x , del interior del horno hacia el medio ambiente, a través de las capas de la pared con área transversal $A_T = a \cdot b$, donde “a” es el ancho de las placas y “b” es la altura de ellas.

El flux de calor del ambiente interior a la superficie interior de la pared se calcula con la ecuación de enfriamiento de Newton:

$$q_x = \frac{Q}{A_T} = h_i(T_i - T_1) \quad (44)$$

Donde h_i es el coeficiente local de transferencia de calor, que se calcula con el número de Nusselt, cuando se desarrolla transferencia de calor entre un fluido en movimiento y una placa plana:

$$Nu = \frac{h_i L}{k} \quad (45)$$

Donde L es la longitud de la altura de la pared y k es igual a la conductividad térmica del fluido a la temperatura del fluido que transfiere calor con la pared. Como el enfriamiento o calentamiento de una placa depende del movimiento del fluido con el que transfiere calor, h_i es función del valor del número de Reynolds y del valor del número de Prandtl. Por lo que, para el cálculo de h_i se usa una de las dos correlaciones siguientes:

Para flujo laminar
$$Nu = \frac{h_i L}{k} = 0.664 Re_L^{0.5} Pr^{1/3} \quad (46)$$

Para flujo turbulento
$$Nu = \frac{h_i L}{k} = 0.037 Re_L^{0.8} Pr^{1/3} \quad (47)$$

Donde el número de Reynolds para el flujo de un fluido alrededor de una placa es:

$$Re = \frac{Lv\rho}{\mu} \quad (48)$$

En esta ecuación, ρ y μ son propiedades del fluido que llega a la pared con una velocidad v .

Y el número de Prandtl para este proceso de transferencia de calor es:

$$Pr = \frac{Cp\mu}{k} \quad (49)$$

Donde Cp , μ y k son propiedades del fluido que transfiere calor con la pared del horno.

Por lo que, una vez calculado h_i , despejándolo de la ecuación (44) se calcula el calor transferido del interior de horno a la primera pared:

$$Q = A_T h_i (T_i - T_1) \quad (50)$$

Para obtener la expresión matemática que calcula el flujo de calor transportado por conducción a través de la primera capa, se parte de la ecuación de energía, en coordenadas rectangulares:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_x \frac{\partial T}{\partial x} + v_y \frac{\partial T}{\partial y} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = k \left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \quad (51)$$

En este caso se analiza el transporte de calor en un sólido, unidireccional y a régimen permanente; con estas consideraciones se simplifica la ecuación (51), para generar la ecuación siguiente:

$$\left(\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \right) = 0 \quad (52)$$

Esta ecuación se integra bajo las condiciones frontera de la pared, el resultado se sustituye en la ecuación de la ley de conducción de Fourier, para obtener la expresión del flux de calor a través de la primera placa:

$$q_x = \frac{Q}{A_T} = k_1 \frac{(T_1 - T_2)}{\Delta x_1} \quad (53)$$

De donde, el flujo de calor que pasa a través de la primera placa es:

$$Q = \frac{k_1 A_T (T_1 - T_2)}{\Delta x_1} \quad (54)$$

Con un procedimiento de deducción similar al usado para llegar a la ecuación (54), se obtiene la ecuación de flujo de calor para la segunda placa:

$$Q = \frac{k_2 A_T (T_2 - T_3)}{\Delta x_2} \quad (55)$$

Y de igual manera, se deduce la ecuación del flujo de calor para la tercera placa:

$$Q = \frac{k_3 A_T (T_3 - T_4)}{\Delta x_3} \quad (56)$$

El flux de calor que se desarrolla de la pared exterior de la tercera placa al medio ambiente que rodea al horno se calcula con la ecuación de enfriamiento de Newton:

$$Q = A_T h_e (T_4 - T_e) \quad (57)$$

Donde h_e es el coeficiente local de transferencia de calor entre la superficie de la última capa de la pared compuesta y el aire que rodea al horno, que se calcula con el número de Nusselt:

$$Nu = \frac{h_e L}{k} \quad (58)$$

Donde L es la longitud de la altura de la pared y k es igual a la conductividad térmica del aire a la temperatura que transfiere calor con la pared. Para el cálculo de h_e se usa una de las dos correlaciones (46) o (47), dependiendo de la velocidad con que aire llegue a la superficie exterior del horno.

Para calcular la transferencia de calor que se desarrolla desde el interior del horno al medio ambiente, se despejan las diferencias de temperaturas de las ecuaciones de flujo de calor, para dar las expresiones siguientes:

De la ecuación (50): $(T_i - T_1) = \frac{Q}{A_T} \frac{1}{h_i}$ (59)

De la ecuación (54): $(T_1 - T_2) = \frac{Q}{A_T} \frac{\Delta x_1}{k_1}$ (60)

De la ecuación (55): $(T_2 - T_3) = \frac{Q}{A_T} \frac{\Delta x_2}{k_2}$ (61)

De la ecuación (56): $(T_3 - T_4) = \frac{Q}{A_T} \frac{\Delta x_3}{k_3}$ (62)

De la ecuación (57): $(T_4 - T_e) = \frac{Q}{A_T} \frac{1}{h_e}$ (63)

Sumando las ecuaciones (59), (60), (61), (62) y (63); factorizando y despejando el flujo de calor Q, se obtiene la ecuación que calcula el flujo de calor que atraviesa la pared de un horno compuesta por tres capas:

$$Q = \frac{A_T(T_i - T_e)}{\left[\frac{1}{h_i} + \frac{\Delta x_1}{k_1} + \frac{\Delta x_2}{k_2} + \frac{\Delta x_3}{k_3} + \frac{1}{h_e} \right]} \quad (64)$$

Para este cálculo de este calor se requiere tener como datos de entrada: las dimensiones de la pared, ancho "a", altura "b" para calcular A_T ; la temperatura del interior del horno, T_i ; la temperatura del medio ambiente que rodea al horno, T_e . los espesores de las paredes ΔX_1 , ΔX_2 y ΔX_3 . Además de los datos necesarios para calcular los valores de h_i y h_e . Sin embargo, la utilidad práctica de esta ecuación es que permite calcular el espesor óptimo del aislante, que en este análisis se ha denominado ΔX_2 , para que el flujo de calor sea mínimo. Por lo que, para el mejor diseño de un horno se pueden calcular los flujos de calor Q, para diferentes valores del espesor del aislante que se usa, lo que constituye un proceso de simulación muy práctico.

Para desarrollar el programa de simulación con valor práctico de este caso, es necesario considerar que el modelo matemático está constituido por las ecuaciones (64), (48), (49), (46) y (47).

Actividad 2.- Establecer las condiciones frontera necesarias e integrar la ecuación (52), sustituir el resultado obtenido en la ecuación de la ley de conducción de Fourier, para obtener la ecuación (53) que forma parte del modelo matemático.

1.3.5 Flujo de calor a través del aislante de una tubería. Cuando por un tubo circula vapor es necesario aislarlo para evitar pérdidas de calor, que impactan en los costos de operación de los procesos. Para construir el modelo matemático de este caso, se analiza el transporte de calor en un tramo L de la tubería aislada.

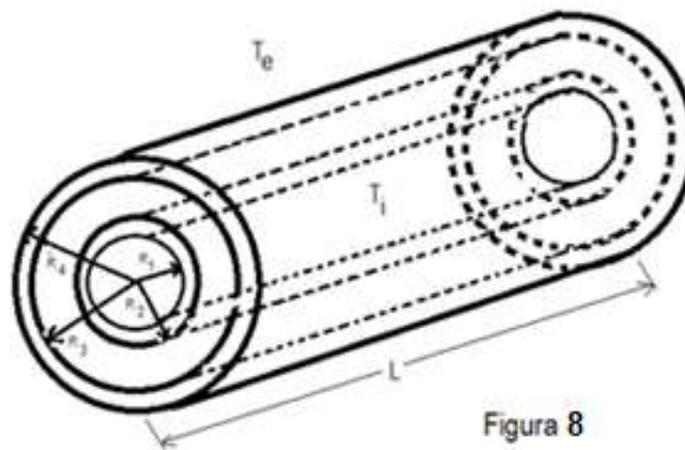


Figura 8

Como se observa en la figura 8, se representa un tramo de tubería con radio interno R_1 , recubierto con un aislante de espesor $R_2 - R_1$ y un recubrimiento para proteger el aislante de espesor $R_4 - R_3$. La temperatura del medio ambiente que rodea a la tubería es T_e . Por el interior de la tubería fluye un fluido caliente, vapor o líquido, con una temperatura global igual a T_i ; de manera que, T_i es mayor que T_e . Así, por esta diferencia de temperaturas, el calor fluye desde el interior del tubo hacia el medio ambiente, a través de las tres capas de diferente material que conforman la tubería aislada. La superficie interna de la tubería se considera que siempre está a la temperatura T_1 ; mientras que, la superficie externa de la tubería que forma la interfase con la superficie del aislante se mantiene a la temperatura T_2 , la superficie del aislante que está en contacto con la capa del recubrimiento externo tiene una

temperatura T_3 ; y la superficie exterior del recubrimiento se mantiene a la temperatura T_4 .

El flujo de calor del fluido que va del interior de la tubería hacia la pared interior del tubo se calcula con la ecuación de enfriamiento de Newton, expresada así:

$$q_r = \frac{Q}{A_{T1}} = h_i(T_i - T_1) \quad (65)$$

Donde $A_{T1} = 2\pi R_1 L$ (66)

Por lo que: $Q = 2\pi R_1 L h_i (T_i - T_1)$ (67)

Donde h_i es el coeficiente de transferencia de calor, cuando se transporta calor por convección entre un fluido en movimiento y las paredes internas del tubo, su valor se obtiene a partir del número de Nusselt:

$$Nu = \frac{h_i D}{k} \quad (68)$$

Donde D es el diámetro interno de la tubería y k es a la conductividad térmica del fluido caliente que fluye por la tubería. Como el enfriamiento o calentamiento de la pared de la tubería depende del movimiento del fluido que transfiere el calor, h_i es función del valor del número de Reynolds y del valor del número de Prandtl. Por lo que, para el cálculo de h_i se usa una de las dos correlaciones siguientes:

Para flujo laminar $Nu = \frac{h_i D}{k} = 4.36$ (69)

Para flujo turbulento $Nu = \frac{h_i D}{k} = 0.023 Re^{0.8} Pr^n$ (70)

Si el fluido que fluye produce calentamiento sobre la pared del tubo el valor de n es 0.4; mientras que, produce enfriamiento el valor de n es 0.3.

El número de Reynolds para el flujo en una tubería es:

$$Re = \frac{D v \rho}{\mu} \quad (71)$$

Donde ρ y μ son propiedades del fluido que se mueve con una velocidad promedio v . Y el número de Prandtl para este proceso de transferencia de calor es:

$$Pr = \frac{Cp\mu}{k} \quad (72)$$

Aquí Cp , μ y k son propiedades del fluido.

Para encontrar la ecuación de transporte de calor a través de cada capa se usa la ecuación de energía en coordenadas cilíndricas:

$$\rho C_p \left(\frac{\partial T}{\partial t} + v_r \frac{\partial T}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial T}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial T}{\partial z} \right) = k \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 T}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial z^2} \right) \quad (73)$$

Como el transporte de calor es unidireccional y ocurre en sólidos, a régimen permanente, la ecuación (73) se simplifica:

$$\frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial T}{\partial r} \right) = 0 \quad (74)$$

Una vez integrada la ecuación diferencial (69), bajo las condiciones frontera del caso, se sustituye en la ecuación de la ley de conducción de Fourier para obtener las ecuaciones del flujo de calor. Para la primera placa se tiene:

$$q_x = \frac{Q}{A_{T2}} = k_1 \frac{(T_1 - T_2)}{R_2 \ln \left(\frac{R_2}{R_1} \right)} \quad (75)$$

De donde:

$$Q = \frac{2\pi L k_1 (T_1 - T_2)}{\ln \left(\frac{R_2}{R_1} \right)} \quad (76)$$

Para la segunda placa:

$$Q = \frac{2\pi L k_2 (T_2 - T_3)}{\ln \left(\frac{R_3}{R_2} \right)} \quad (77)$$

Para la tercera placa:

$$Q = \frac{2\pi L k_3 (T_3 - T_4)}{\ln \left(\frac{R_4}{R_3} \right)} \quad (78)$$

Y el flujo de calor de la superficie exterior del recubrimiento al medio ambiente que la rodea, por la ley de enfriamiento de Newton, es:

$$Q = 2\pi L R_4 h_e (T_4 - T_e) \quad (79)$$

Donde h_e es el coeficiente de transferencia de calor entre el aire del medio ambiente y la superficie externa de la tercera capa del sistema. Su valor se obtiene a partir de la ecuación de Churchill y Bernstein:

$$Nu = \frac{h_e D}{k} = 0.3 + \frac{0.62 Re^{1/2} Pr^{1/3}}{[1 + (0.4/Pr)^{2/3}]^{1/4}} \left[1 + \left(\frac{Re}{282000} \right)^{5/8} \right]^{4/5} \quad (80)$$

Para calcular el número de Reynolds, se considera el diámetro externo de la pared compuesta, la velocidad de aproximación del aire en flujo cruzado con la tubería aislada, la densidad y la viscosidad del aire a la temperatura del medio ambiente que rodea a este sistema. En el cálculo del Prandtl, también se consideran las propiedades del aire a la temperatura del medio ambiente que rodea a la pared compuesta.

Por lo que, despejando las diferencias de temperatura de cada una de las ecuaciones (67), (76), (77), (78) y (79); sumándolas; y factorizando, se obtiene la expresión del flujo de calor a través de la pared de una tubería aislada:

$$Q = \frac{2\pi L(T_i - T_e)}{\left[\frac{1}{h_i R_1} + \frac{\ln\left(\frac{R_2}{R_1}\right)}{k_1} + \frac{\ln\left(\frac{R_3}{R_2}\right)}{k_2} + \frac{\ln\left(\frac{R_4}{R_3}\right)}{k_3} + \frac{1}{h_e R_4} \right]} \quad (81)$$

Esta ecuación permite, considerando valores prácticos, obtener el espesor óptimo del aislante para la tubería, variando el radio R_3 hasta que, desde el punto de vista ingenieril, el flujo de calor se pueda considerar como un mínimo.

Actividad 3.- Establecer las condiciones frontera necesarias e integrar la ecuación (74), sustituir el resultado obtenido en la ecuación de la ley de conducción de Fourier, para obtener la ecuación (75) que forma parte del modelo matemático.

1.3.6 Balance de energía en un calentador. Para desarrollar este balance de energía se considera el proceso que se representa en la figura 9, donde un flujo de 0.15 kg/s de aire entra al calentador con temperatura de 25°C y presión de 20 psia, para recibir calor de un flujo de 0.65 kg/s de vapor de agua saturado, a una presión

de 143.27 kpa. El vapor de agua se condensa y se envía a una trampa de vapor. Se requiere conocer la temperatura de salida del aire.

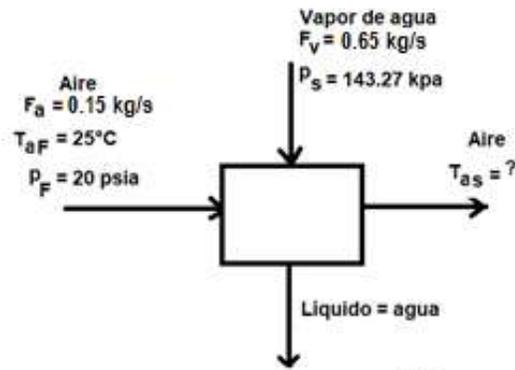


Figura 9

El balance de energía es: “Calor cedido por el vapor = Calor absorbido por el aire”; y el modelo matemático es:

$$F_v h_{fg} = F_a C_{pa} (T_{as} - T_{aF}) \quad (82)$$

De donde se despeja T_{as} , que es el valor requerido:

$$T_{as} = T_{aF} + \frac{F_v h_{fg}}{F_a C_{pa}} \quad (83)$$

Para resolverlo, se toman los datos de las tablas de propiedades termodinámicas, Cengel (2004). El valor del calor específico del aire a 25°C igual a 1.007 kJ/(kg°C); y el calor latente que cede el agua al condensarse a la presión de 143.57 kPa es de $h_{fg} = 2.23$ kJ/(kg°C). Con estos datos y la información del caso, por la ecuación (61), la temperatura del aire a la salida del calentador es igual a 34.6 °C.

Este ejemplo, a pesar de lo sencillo, es muy ilustrativo para efectos de simulación; ya que, las condiciones de entrada pueden variar y en consecuencia los valores de salida son diversos. Para responder a las variaciones del sistema, en este caso y en los anteriores analizados es necesario contar con bases de datos de propiedades, que respondan a valores de acuerdo a las condiciones de operación que se presenten en los sistemas de análisis.

Esto debe considerarse al elaborar el algoritmo de solución. Y es importante que la estructura computacional permita respuestas inmediatas ante solicitudes de entrada diferentes.

1.3.7 Intercambiador de calor de doble tubo. Es un equipo que permite la transferencia de calor entre dos corrientes en un proceso. Cuando un intercambiador se usa para calentar fluidos de proceso se usa vapor como un fluido de servicio; en ocasiones dependiendo del proceso, un fluido caliente recirculado puede usarse como un medio de calentamiento. Si el intercambiador se opera como un enfriador, el equipo solamente elimina calor sensible del fluido caliente; y generalmente, para este caso, el fluido de servicio es agua de enfriamiento. Mientras que, los condensadores son equipos de transferencia de calor donde ocurren cambios de fase en el fluido que se enfría; por lo que, se elimina calor sensible y calor latente. Para el análisis de este equipo y el establecimiento del modelo matemático, se debe considerar si se tiene construido el intercambiador de calor o si se está diseñando.

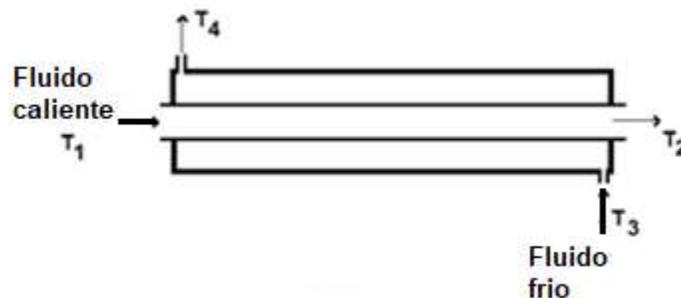


Figura 10

En el primer caso se conocen las dimensiones, la longitud L del intercambiador, diámetro interno D_{i1} y diámetro externo D_{e1} del tubo interior, el diámetro interno del tubo exterior D_{i2} . Se desea disminuir la temperatura de un fluido, que puede introducirse en el tubo interior como el de la figura 10, se conoce el flujo másico m_G , la temperatura T_1 a la que entra y se requiere que la temperatura de salida T_2 sea la mínima con este equipo; por lo que se hace variar el flujo másico y la temperatura de entrada del agua de enfriamiento, en el rango permitido por las condiciones de operación, hasta alcanzar el máximo calor transferido.

El modelo matemático del sistema de enfriamiento, se obtiene del sistema de transferencia de tres capas cilíndricas que se presenta en la figura 11; aunque la capa metálica del tubo no ofrece gran resistencia a la transferencia, es conveniente considerarla.

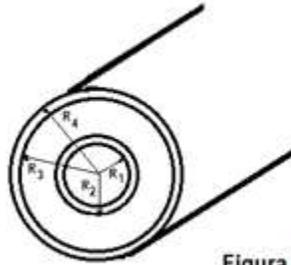


Figura 11

La transferencia de calor ocurre desde el fluido caliente que fluye por el ánulo que forman los tubos concéntricos a la pared exterior del tubo de menor diámetro y se calcula con la ley de enfriamiento de Newton; después el calor pasa a través de la primera pared metálica, a pesar de ser una resistencia al flujo pequeña conviene considerarla; y el calor que se transmite de la pared interior del tubo de menor diámetro al fluido que circula por él, se calcula también con la ley de enfriamiento de Newton. De acuerdo a la figura 11, se obtienen las ecuaciones siguientes:

$$Q = \frac{2\pi L \Delta T_{ML}}{\left[\frac{1}{h_e R_{e1}} + \frac{\ln\left(\frac{D_{e1}}{D_{i1}}\right)}{k_1} + \frac{1}{h_i R_{i1}} \right]} \quad (84)$$

$$\Delta T_{ML} = \frac{\Delta T_2 - \Delta T_1}{\ln\left(\frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}\right)} \quad (85)$$

$$\Delta T_1 = T_1 - T_4 \quad (86)$$

$$\Delta T_2 = T_2 - T_3 \quad (87)$$

$$h_i = 0.023 D_{i1} k_i Re^{0.8} Pr^{0.5} \quad (88)$$

$$Re = \frac{D_{i1} v_i \rho_i}{\mu_i} \quad (89)$$

$$Pr = \frac{c_{p_i} \mu_i}{k_i} \quad (90)$$

$$h_e = 0.027D_{e1}k_eRe^{0.805}Pr^{0.333} \quad (91)$$

$$Re = \frac{D_{eq}v_e\rho_e}{\mu_e} \quad (92)$$

$$D_{eq} = \frac{D_{i2}^2 - D_{e1}^2}{D_{e1}} \quad (93)$$

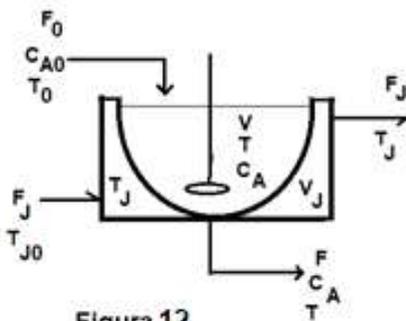
$$Pr = \frac{Cp_i\mu_i}{k_i} \quad (94)$$

En el diseño de un intercambiador de doble tubo se requiere calcular la longitud del equipo, que ofrezca la superficie de transferencia de calor adecuada. El modelo matemático es el mismo, sólo cambia la ecuación (84):

$$L = \frac{\left[\frac{1}{h_e R_{e1}} + \frac{\ln\left(\frac{D_{e1}}{D_{i1}}\right)}{k_1} + \frac{1}{h_i R_{i1}} \right]}{2\pi\Delta T_{ML}} \quad (95)$$

Y se manipulan las variables de diseño para encontrar el tamaño del equipo, sin olvidar las reglas heurísticas de diseño.

1.3.8 Reactor de tanque agitado continuo no isotérmico. Considerando que en este reactor perfectamente agitado se lleva a cabo una reacción exotérmica irreversible de orden n: $A \rightarrow B$. Para remover el calor de la reacción λ se usa una chaqueta de enfriamiento, por donde entra un flujo F_j de agua de enfriamiento a una temperatura T_{j0} . El volumen de agua V_j en el recipiente de enfriamiento se mantiene constante.



Balance global en el reactor:
$$\frac{dV}{dt} = F_0 - F \quad (96)$$

Balance por componente en el reactor:

$$\frac{dVC_A}{dt} = FC_{A0} - FC_A - Vkc_A^n \quad (97)$$

Ecuación de energía en el reactor:

$$\rho \frac{dVh}{dt} = \rho(F_0h_0 - Fh) - \lambda Vkc_A^n - UA_h(T - T_J) \quad (98)$$

Ecuación de energía en el reactor:

$$\rho_J V_J \frac{dh_J}{dt} = F_J \rho_J (F_0 h_{J0} - h_J) - UA_h(T - T_J) \quad (99)$$

Las ecuaciones (96), (97), (98) y (99) constituyen el modelo matemático del CSTR considerado. Donde a través de consideraciones prácticas se puede establecer un algoritmo de solución para sistemas de reacción específicos.

1.4. ALGORITMOS DE SOLUCIÓN DE MODELOS

1.4.1 Definiciones y clasificación. Algoritmo es una serie de actividades secuenciales que se deben seguir para resolver un problema específico. Es muy importante definir con la mayor precisión al algoritmo, para evitar rutas equivocadas de solución. Además, la secuencia debe tener un número finito de pasos para evitar caer en una cadena sinfín. Los algoritmos usados en la simulación de procesos constan de tres partes fundamentales:

- Entrada de información;
- Procesamiento de la información; y
- Resultados de salida.

Para elaborar un algoritmo de solución es recomendable seguir los pasos siguientes:

1. Analizar detenidamente el problema para entender lo que se pretende resolver y con qué información se cuenta;

2. Elaborar un Diagrama de Flujo de Proceso (DFP), donde se consigne toda la información disponible sobre el proceso, como: flujos volumétricos, máscicos o molares; concentraciones de todos los componentes involucrados; temperaturas de entradas, de salidas o internas de las operaciones unitarias; presiones en las corrientes y equipos que se consideren necesarias; entradas y salidas de flujos de calor; y relaciones cinéticas, según sea el caso. Facilita la tarea, en la medida de lo posible, unificar las unidades y sistemas de medida.
3. Rotular los equipos y las operaciones que intervienen en el proceso. Numerar y nombrar las corrientes y de ser necesario los equipos y las sustancias químicas que intervengan.
4. Elaborar una tabla de análisis que contenga las posibles ecuaciones de balance de materia y energía a plantear, número de tales ecuaciones independientes disponibles, ecuaciones adicionales de equilibrio, relaciones de operación, condiciones de operación, entre otras, número de otras ecuaciones independientes disponibles N_e , número de variables-incógnitas N_i , para determinar los grados de libertad ($N_i - N_e$).
5. A partir de la tabla de análisis determinar un mapa de solución de los balances, seleccionando primero uno de los sistemas de proceso que tenga sólo un grado de libertad; o sean los más determinados, que resultan solubles usando una adecuada base de cálculo.
6. Solucionar secuencialmente los sistemas establecidos para el proceso, en el orden determinado en el mapa de solución y explicitar el vector solución.

En ingeniería de procesos se manejan dos tipos de algoritmos, cuyo uso depende del usuario, a saber:

- Los algoritmos que pueden representarse a través de un conjunto de palabras por medio de las cuales se puede representar la lógica de un programa, este conjunto de palabras se conoce como pseudocódigo. Son muy populares en ingeniería química, porque resultan bastantes explícitos para el programador y de fácil construcción para el ingeniero; y

- Los diagramas de flujo que representan gráficamente la secuencia y la lógica del programa de cómputo a construir. Manejados con regularidad por los ingenieros en sistemas.

La diferencia entre algoritmo para el método modular secuencial y el algoritmo para el método orientado a ecuaciones se debe a la aplicación que tendrá. Para un proceso en operación que se desea analizar y optimizar se construye un simulador orientado a ecuaciones, que se construye con los balances de materia y energía, las ecuaciones cinéticas y de transporte, en forma global, considerando al proceso como todo un sistema. Por el contrario, para diseñar nuevos procesos es conveniente crear módulos de simulación de diferentes operaciones unitarias, que pueden constituir un proceso y se pueden enlazar secuencialmente, haciendo los arreglos necesarios y conectándolos con las corrientes de proceso necesarias.

1.4.2 Algoritmo del modelo matemático del proceso de evaporación.

1.- Elaborar una pequeña base de datos, con el valor de la velocidad de evaporación del agua, $R_{\text{evap}} A = 0.0000293 \text{ Kg/ (s m}^2\text{)}$; la concentración promedio de sales en el agua de mar, $C_S = 35 \text{ kg/(m}^3\text{)}$; y la cantidad de agua pura por cada metro cúbico de solución salina, $C_A = 965 \text{ kg/(m}^3\text{)}$.

2.- Introducir como datos de entrada las dimensiones del evaporador, ancho en metros, a ; largo en metros, L ; y el espesor de la película de la solución, h . Y el tiempo que dure el proceso de evaporación, t_{exp} .

3.- Calcular el volumen de la solución salina a evaporar, $V_{\text{ss}} = a L h$. Con este resultado calcular la masa de la sal en el estado inicial, $m_{\text{S1}} = C_S V_{\text{ss}}$; la cantidad de agua pura por cada metro cúbico de solución salina, $m_{\text{A1}} = C_A V_{\text{ss}}$; y la masa de la solución salina que se coloca en el recipiente para evaporarse, $M_1 = m_{\text{S1}} + m_{\text{A1}}$.

4.- Calcular el área de exposición del evaporador, $A_{\text{exp}} = a L$, con este resultado se calcula la masa que se evapora en el tiempo seleccionado y que se señala en la corriente 2, $m_{\text{A2}} = R_{\text{evap}} A_{\text{exp}} t_{\text{exp}}$. En esta corriente no hay salida de sal, $m_{\text{S2}} = 0$. Por lo tanto, $M_2 = m_{\text{A2}}$.

5.- Para definir la corriente 3, se considera que $m_{S3} = m_{S1}$; $m_{A3} = m_{A1} - m_{A2}$; y en consecuencia, $M_3 = m_{S3} + m_{A3}$.

6.- En la misma hoja donde se introducen los datos de entrada, se deben presentar los resultados del balance, colocados en los lugares que corresponden en el diagrama de flujo.

1.4.3 Algoritmo del modelo matemático del proceso de cristalización.

1.- Elaborar una pantalla de entradas y salidas, donde se haga la presentación del programa de simulación, explicando en forma breve el proceso de cristalización. Dibujando el diagrama de flujo del proceso, donde se selecciona estratégicamente las celdas para introducir los datos de entradas que debe dar el usuario; y las celdas donde se recibirán y se desplegarán los resultados que se obtengan al resolver el modelo matemático.

2.- Con los datos de la tabla 1 ajustar a una ecuación los valores de la concentración de la solución saturada de nitrato de potasio, a diferentes temperaturas; así al introducir la temperatura del cristalizador, T_G , se obtiene X_{SG} y con este valor se calcula X_{AG} .

3.- En una base de tiempo una hora, solicitar se introduzcan los datos de entrada siguientes: flujo requerido en H; cantidad en kilogramos de solución que se introduce al cristalizador, F; composición de la solución salina alimentada y expresada como fracción masa X_{SF} y X_{AF} ; la temperatura de la solución salina alimentada, T_F ; el grado de humedad a que se desean cristalizar el nitrato de potasio, en un rango del 3% al 5%, expresada en la fracción X_{SH} , la temperatura a la que se enfría la solución salina en el cristalizador, T_G , que es igual a T_H .

3.- Sustituir F, X_{SF} , X_{SG} y X_{SH} , en las ecuaciones (12) y (13); y resolver las ecuaciones simultáneas resultantes para calcular los flujos en masas en las corrientes de salida G y H.

4.- Enviar los valores calculados a sus celdas correspondientes en el diagrama de flujo de la pantalla de entradas y salidas.

1.4.4 Algoritmo del modelo matemático del proceso de mezclado.

1.- Elaborar una pantalla de entradas y salidas, donde se haga la presentación del programa de simulación, explicando en forma breve el proceso de mezclado que se realiza. Dibujando el diagrama de flujo del proceso, donde se selecciona estratégicamente las celdas para introducir los datos de entradas que debe dar el usuario; y las celdas donde se recibirán y se desplegarán los resultados que se obtengan al resolver el modelo matemático.

2.- Solicitar introduzcan como datos de entrada: la cantidad deseada en kilogramos de la solución C. los valores de X_{1A} , X_{2A} , X_{3A} , X_{1B} , X_{2B} , X_{3B} , X_{1C} , X_{2C} y X_{3C} .

3.- Sustituir los datos de entrada en las ecuaciones (17) y (18); para resolver las ecuaciones simultáneas resultantes para calcular cantidades requeridas de las soluciones flujos en masas en las corrientes de salida A y B.

4.- Para darle mayor riqueza a este algoritmo, con una base de datos de pesos moleculares y factores de conversión, se elabora una pantalla de entradas y salidas que despliega diversas formas de expresión para las concentraciones de las corrientes; ver figura 13.

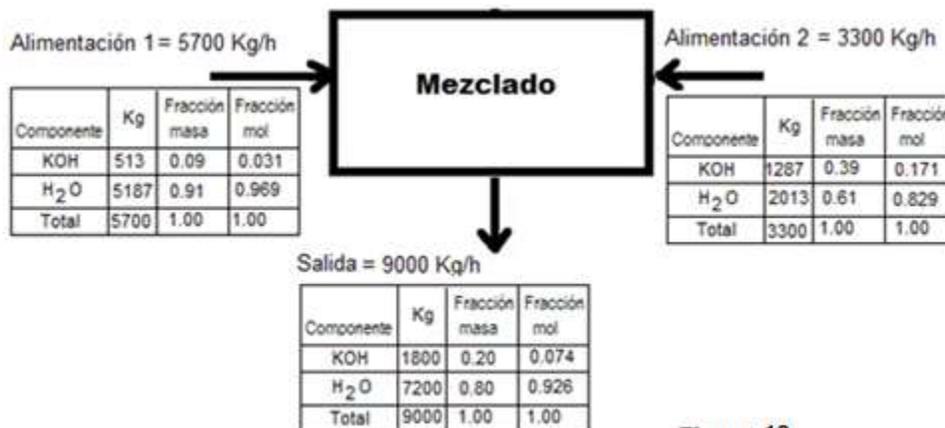


Figura 13

Actividad 4.- Analizando el modelo matemático del proceso de mezclado de tres soluciones, elaborar el algoritmo que se requiere para construir el programa de simulación de este proceso.

1.4.5 Algoritmo del modelo matemático para el cálculo de la potencia de una bomba.

1.- Elaborar una pantalla de entradas y salidas, donde se haga la presentación del programa de simulación, explicando en forma breve que permite calcular la potencia de una bomba necesaria para desarrollar un flujo que llene un tanque elevado a un tiempo deseado. Dibujando el diagrama de flujo del proceso, donde se selecciona estratégicamente las celdas para introducir los datos de entradas que debe dar el usuario; y las celdas donde se recibirán y se desplegarán los resultados que se obtengan al resolver el modelo matemático.

2.- Con los valores que el usuario del simulador introduzca del volumen del tanque V y el tiempo de llenado que se desea, calcular el flujo volumétrico con la ecuación (35) del modelo matemático, en otra hoja del programa.

3.- Se construye la primera base de datos del simulador, que contiene los diámetros internos de los tubos que se necesita para el siguiente cálculo, en función de los diámetros nominales y número de cédula, que son datos que el usuario del programa debe proporcionar.

4.- Con el flujo volumétrico calculado y el diámetro interno conocido, se calcula la velocidad de descarga, usando la ecuación (36) del modelo matemático.

5.- Se construye la segunda base de datos del simulador, que contiene las rugosidades relativas de los tubos usados; y una tercera base de datos con las densidades y viscosidades del fluido que se transporta, ambas, en función de la temperatura de operación. Para que con estos valores se calcule el factor de fricción con la ecuación (37) del modelo matemático. Para recuperar estos valores, el usuario debe proporcionar el material con que está hecho el tubo usado y el fluido que se maneja.

6.- Se construye la cuarta base de datos del simulador, que contiene las pérdidas de fricción por el uso de accesorios en las tuberías, como codos, uniones, válvulas, reducciones o expansiones. Con estos valores se calcula la suma de las contribuciones de cada accesorio usado, ΣK_a , que se requiere; junto con la longitud

de la tubería, L , y la altura de descarga, Z_2 , que deben introducirse; y los valores ya calculados de la velocidad de descarga, v_2 ; y el valor dado del diámetro interno de la tubería, D , se calcula la cabeza de la bomba, H_p , usando la ecuación (38).

4.- Con el valor calculado de la cabeza de la bomba, H_p , usando los valores ya calculados de las variables requeridas y manejando una eficiencia de bomba, η , igual a 0.75, se calcula la potencia en Hp's de la bomba requerida.

Actividad 5. - Analizando el modelo matemático del proceso de descarga de un fluido, elaborar el algoritmo que se requiere para construir el programa de simulación de este proceso.

1.4.6 Algoritmo del modelo matemático para el cálculo del flujo de calor en la pared de un horno.

1.- Elaborar una pantalla de entradas y salidas (E/S), donde se haga la presentación del programa de simulación, explicando en forma breve que permite calcular el flujo de calor que se desarrolla desde el interior del horno al medio ambiente, cuando se varía el espesor del aislante.

2.- Presentar en la pantalla (E/S), el diagrama de flujo del proceso, seleccionando de manera estratégica las celdas donde se deberán introducir los datos de entradas que debe proporcionar el usuario y la ubicación de las celdas que presentarán los resultados de salida.

3.- Solicitar se introduzcan en la pantalla (E/S) los datos de entrada: dimensiones de la pared del horno; temperatura global del interior del horno; temperatura global del aire que rodea al horno; espesores de las placas que conforman la pared, el tipo de material de que está hecha cada placa para extraer los valores de las conductividades de la base de datos de propiedades del material. Requerir como datos de entrada: la humedad, temperatura y velocidad del aire que se mueve dentro del horno y entrega calor por convección a la pared interna del horno; para extraer de una base de datos la densidad, viscosidad, calor específico y conductividad de este fluido. En la misma pantalla (E/S), se solicita como datos de

entrada: la humedad, temperatura y velocidad del aire que rodea al horno y recibe calor por convección de la pared externa del horno; para extraer de una base de datos la densidad, viscosidad, calor específico y conductividad del aire.

4.- Con los datos de entrada, calcular el número de Reynolds y el número de Prandtl y dependiendo de los resultados, usar la ecuación (46) o (47), para calcular el valor de h_i . Repetir este procedimiento con los datos y las ecuaciones correspondientes para calcular el valor de h_e .

5.- Con los valores calculados de h_i y h_e , más los datos de entrada introducidos calcular el flujo de calor a través de una pared del horno, usando la ecuación (64).

6.- Como el propósito de este programa de simulación es encontrar el espesor óptimo del aislante, se deben realizar al menos diez corridas variando el espesor del aislante desde 0.5 a 5 centímetros, para que los resultados del flujo de calor se grafiquen contra el espesor del aislante y se visualice el punto donde la variación de la pendiente ya no tenga un valor práctico significativo, punto que indica el espesor óptimo de la pendiente.

1.4.7 Algoritmo del modelo matemático que calcula el espesor óptimo del aislante, en una tubería que transporta fluido caliente.

1.- Diseñar y construir la pantalla de entradas y salidas (E/S), ahí presentar el programa de simulación, explicando el objetivo de éste, explicando como la variación del espesor del aislante cambia el flujo de calor que se transfiere a través de las capas cilíndricas, y la simulación permite determinar el espesor óptimo del aislante que se debe usar.

2.- Dibujar el diagrama del proceso en la pantalla (E/S), indicando en que celdas se deben introducir los datos de entrada que proporciona el usuario y cuáles son las celdas que darán los resultados de salida.

3.- Solicitar en la pantalla (E/S), como datos de entrada: diámetro de la tubería; cédula de la tubería; material de que está hecha; temperatura global del interior de la tubería; temperatura global del aire que rodea a la tubería aislada; espesor de la capa de aislante; espesor del recubrimiento.

4.- Diseñar y construir una base de datos, con las conductividades de las capas que conforman la tubería aislada; los diámetros internos y espesor de la tubería; densidades, viscosidades, calores específicos y conductividad de los fluidos que se involucran en este proceso de transferencia de calor.

4.- Con los datos de entrada, calcular el número de Reynolds y el número de Prandtl y dependiendo de los resultados, usar las ecuaciones (69) o (70), para calcular el valor de h_i . Usando los datos de entrada correspondientes, calcular el número de Reynolds y el número de Prandtl para el aire que fluye alrededor de la tubería aislada; y sustituirlos en la ecuación (80) para encontrar el valor de h_e .

5.- Con los valores calculados de h_i y h_e , más los datos de entrada introducidos y requeridos en la ecuación (81), se determina el calor que fluye en una tubería aislada, desde el interior al medio ambiente.

6.- Para cada sistema con condiciones definidas, desarrollar cálculos de calor para diferentes espesores desde 0.1 centímetros hasta 5 centímetros, con el propósito de estimar el espesor óptimo del aislante.

Actividad 6. - Analizando el modelo matemático del proceso de transferencia de calor en un intercambiador de doble tubo, elaborar el algoritmo que se requiere para construir el programa de simulación.

2.- SIMULACIÓN MODULAR

2.1 Desarrollo de módulos de simulación

2.1.1 Introducción

Desarrollar un módulo de simulación, para resolver el modelo matemático de una operación unitaria de un proceso que se estudia en ingeniería química, es una tarea compleja para el docente por las actividades relacionadas con este propósito. Se debe desarrollar, en los alumnos, la capacidad de análisis de procesos para establecer los modelos matemáticos correspondientes. Comprometer a los alumnos para que elaboren un algoritmo, con claridad y detalle, que permita resolver el modelo matemático, de manera que se desarrolle adecuadamente el análisis de sensibilidad con las variables del proceso. Justificar el uso de Excel, como un paquete accesible en costo, con facilidad de manejo, alta capacidad de cálculo y versatilidad de programación, que permite desarrollar la simulación modular en el breve tiempo asignado en la instrumentación didáctica de la materia de simulación de procesos.

2.1.2 Bases de datos

En el desarrollo de un módulo de simulación es de importancia fundamental, para los análisis de sensibilidad, construir las bases de datos de las propiedades involucradas en el módulo. Para esto se desarrolla una investigación bibliográfica de fuentes confiables y se ajustan los datos obtenidos mediante métodos numéricos, para obtener valores a cualquier condición de operación del sistema que se va a simular.

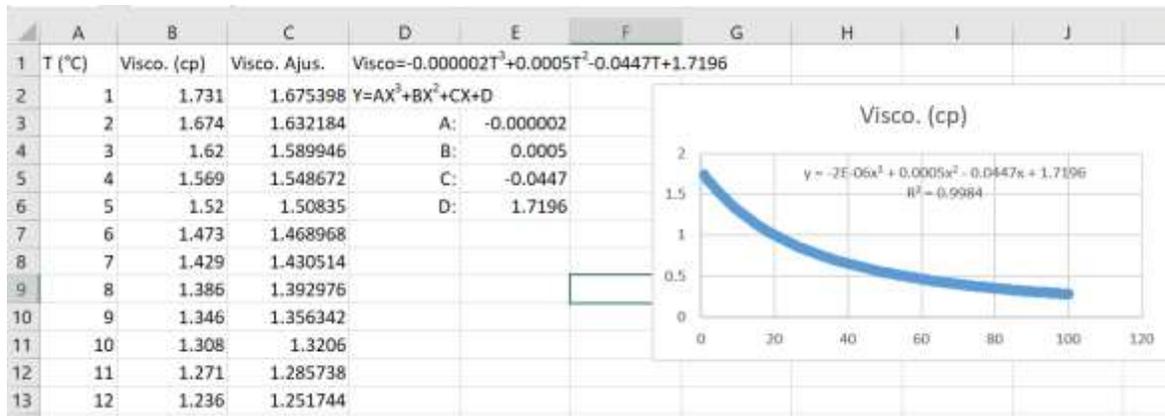


Figura 14

Estos ajustes no se tienen que hacer a mano, Excel nos permite ajustar los datos a expresiones matemáticas polinomiales, logarítmicas o exponenciales. Nos proporciona la ecuación matemática y el índice de correlación, que debe ser uno o cercano a la unidad para que se considere un buen ajuste. Pero, lo más importante, es que el ingeniero de procesos sepa el rango de validez de sus datos, para no caer en zonas de cambio de estado que darían resultados erróneos.

La viscosidad del agua se presenta como tablas en muchos libros de texto y manuales de propiedades físicas; para usarla en un programa de simulación es necesario contar con una ecuación matemática que calcule la propiedad a cualquier temperatura deseada, la figura 14, presenta el ajuste realizado en Excel. El índice de correlación es muy bueno; pero generalmente se requiere tener una base de datos con propiedades de varios fluidos y entonces se ajustan a un modelo algebraico similar; por ejemplo, una ecuación cuadrática, sacrificando precisión que en la práctica no es tan necesaria. Para la viscosidad del agua se observa que el modelo de ecuación cuadrática da un índice de correlación menor, véase figura (15); pero los valores calculados son aceptables en los rangos más frecuentes de operación.

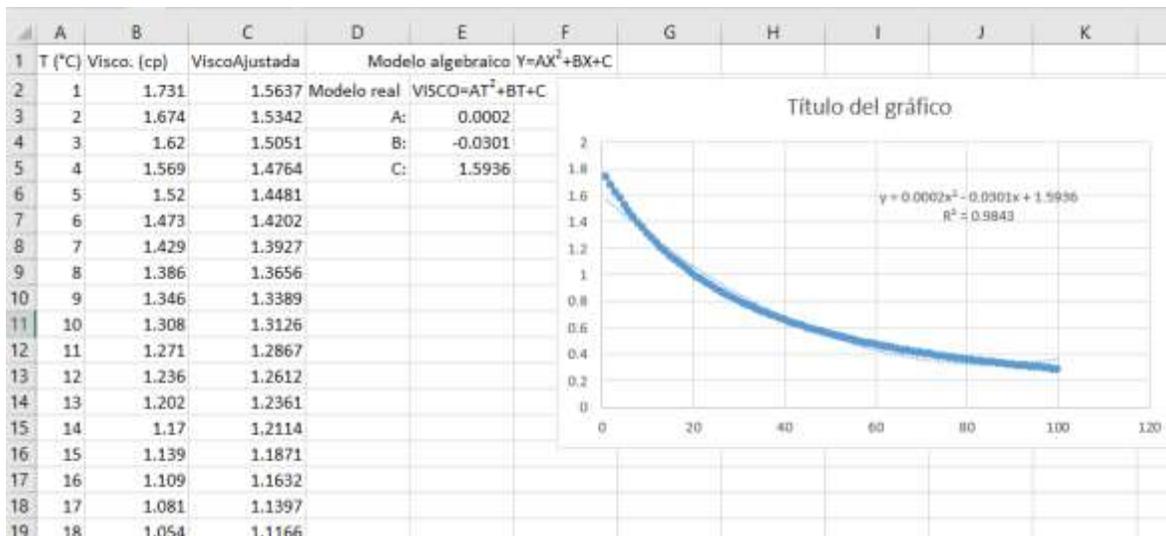


Figura 15

Si ajustamos los datos de la viscosidad del aceite de soya, a una ecuación cuadrática se obtiene la expresión que se presenta en la figura 16.

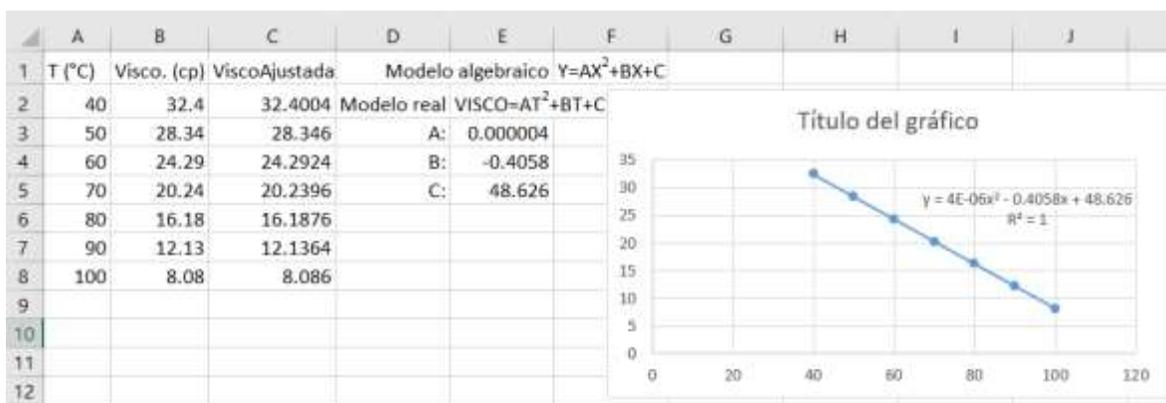


Figura 16

Esto permite construir una base de datos más amplia en Excel, con la opción de seleccionar el fluido que participa en el programa de simulación. Como se aprecia en la hoja de Excel de la figura 17.

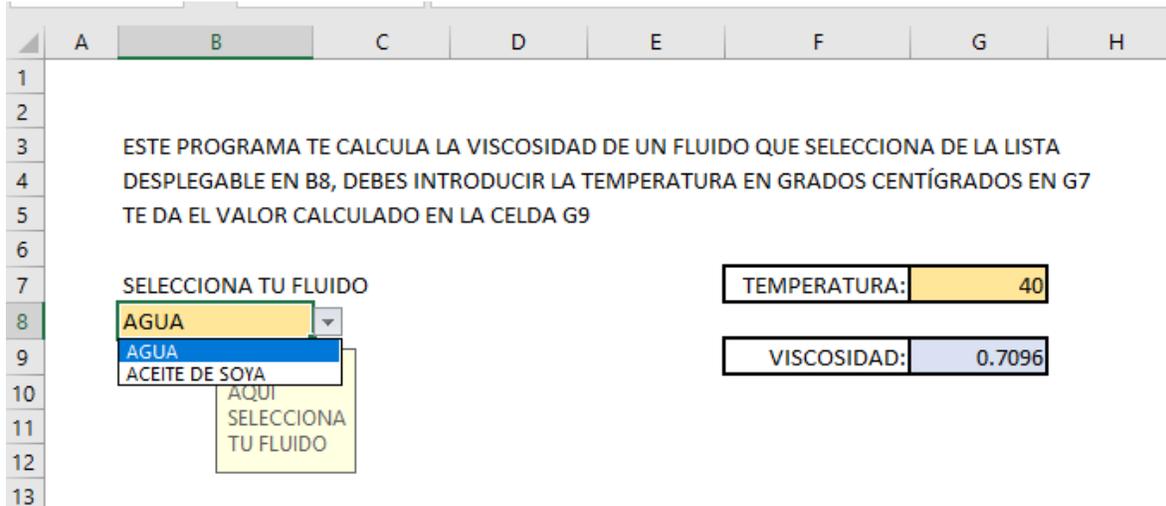


Figura 17

Una vez seleccionado el fluido de trabajo, Excel va a la hoja de parámetros de las ecuaciones que resultaron de los ajustes, véase figura 18, calcula la viscosidad requerida y la envía a la hoja de salida de la base de datos, de la figura 17.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J
1		PARAMETROS								
2	FLUIDOS	A	B	C	FLUIDO:	AGUA				
3	AGUA	0.0002	-0.0301	1.5936	A:	0.0002	B:	-0.0301	C:	1.5936
4	ACEITE DE SOYA	0.000004	-0.4058	48.626	VISCO=A*T ² +B*T+C					
5					TEMPERATURA:	40				
6					VISCOSIDAD:	0.7096				

Figura 18

En la carpeta de ProgsExcel que se anexa en este texto, se incluye esta base de datos correspondiente a las figuras anteriores, para que se utilice como un programa guía y elaborar bases de datos más completas, como actividades de evaluación formativa. Los alumnos deberán elaborar bases de datos para diferentes propiedades que se usan en los módulos de simulación; para comprender que éstas constituyen un elemento fundamental y necesario para un simulador.

2.1.3 Proceso de evaporación de agua de mar

Se desarrolla un módulo de simulación sencillo, cuya elaboración permite visualizar las posibilidades de hacerlo más completo, incluyendo la opción de trabajar en ambientes de diferentes temperaturas, considerar la humedad del ambiente y la presión atmosférica como factores que favorecen o inhiben el proceso.

Como lo sugiere el algoritmo, primero se debe construir la base de datos. En el caso que se presenta, se tiene la información para la temperatura ambiente de 22°C; pero para una simulación más cercana a la realidad, se deben ajustar los valores de los parámetros que dependen de la temperatura para que se tenga la disponibilidad de la información que permita hacer una simulación más completa.



BASE DE DATOS DEL MÓDULO DE SIMULACIÓN
El usuario puede modificarlos si tiene la información correspondiente a otra temperatura de operación.

Datos conocidos	Valor	Unidades
Temperatura del medio ambiente	22	°C
Velocidad de evaporación (R_{evap})	0.0000293	Kg/(s m ²)
Concentración promedio de sal (C_S)	35	kg/m ³
Concentración de agua en el mar (C_A)	965	kg/m ³
Concentración Saturación a 22°C	36	g de sal/100g de agua
Concentración Saturación a 22°C	360	kg de sal/m ³ de agua

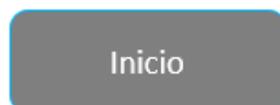


Figura 19

Con esta base de datos se elabora la pantalla de entradas y salidas, (E/S), del módulo de simulación, figura 20. Aquí el usuario, tiene como opciones definir el tiempo de exposición a la radiación solar de la masa de agua, que se determina automáticamente al introducir las dimensiones del recipiente.

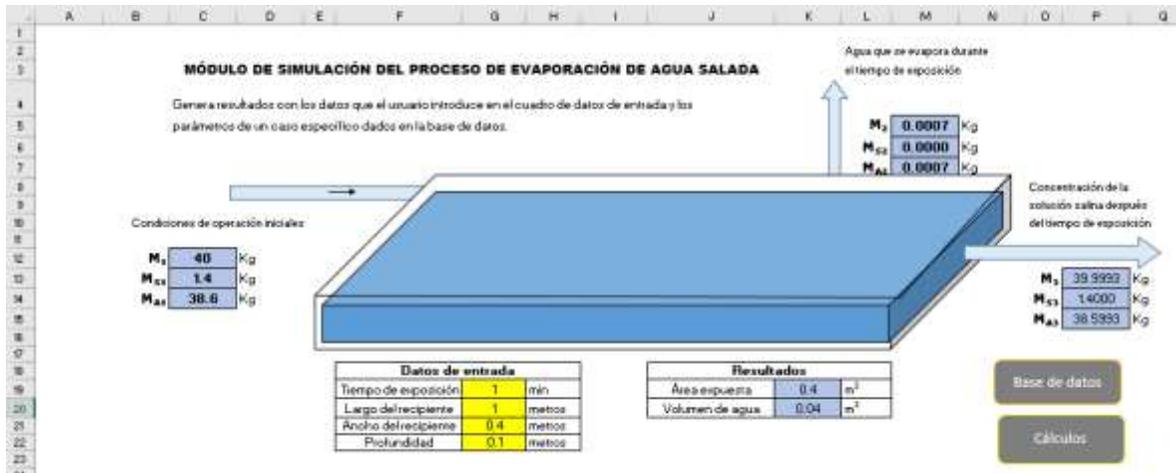


Figura 20

En la pantalla (E/S), al introducir los datos de entrada se despliegan de inmediato las condiciones de operación iniciales, la masa de agua que se evapora durante tiempo de exposición y la concentración de la solución salina después del tiempo de exposición. Todo esto es el resultado de las operaciones que se desarrollan en base al modelo matemático en la hoja "Cálculos" de la figura 21. Este programa de simulación se anexa en la carpeta ProgsExcel.

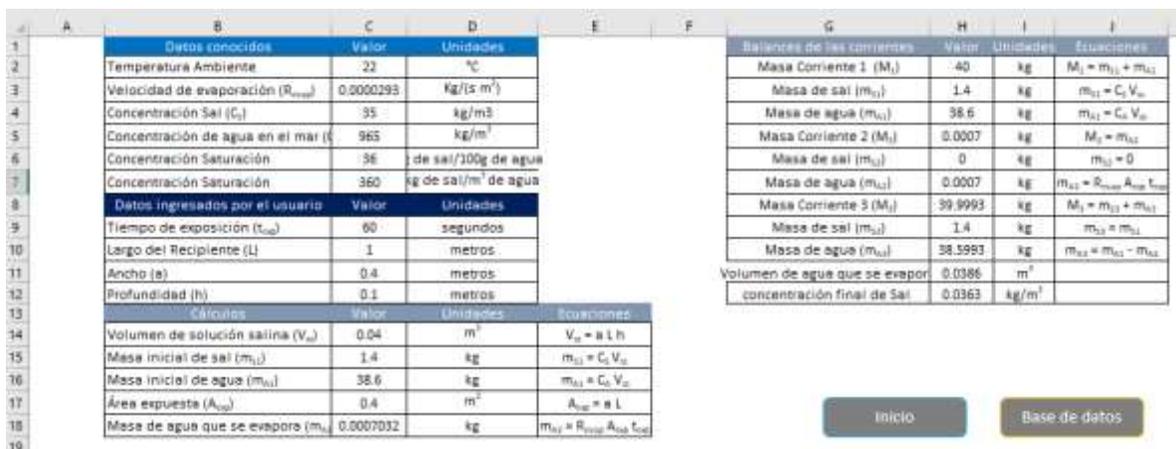


Figura 21

2.1.4 Intercambiador de calor de doble tubo

Se desarrolla un módulo de simulación tipo, que debe ser guía para que el alumno elabore, cuando menos, un programa modular que simule el comportamiento de uno de los procesos que se consideraron en los subtemas 1.2 y 1.3; partiendo de la necesidad de resolver el modelo matemático de cada caso. La simulación de un intercambiador de doble tubo permite explicar, paso a paso, la construcción de cada componente del módulo; sin embargo, el programa completo se entrega en la carpeta ProgsExcel, anexa a este texto. Estos se construyeron con estilo personal y práctico; y puede resultar en el trabajo de grupo, que los alumnos desarrollen módulos de simulación elaborados con más creatividad, mejor apariencia y enlazados con Visual Basic.

Este módulo de simulación es un libro de Excel formado por cinco hojas de cálculo: la pantalla Entradas – Salidas; la base de datos Diámetros; la hoja denominada Cálculos; la hoja de conversiones; y otra base de datos llamada Tablas.



Figura 22

La pantalla Entradas – Salidas tiene cuatro ventanas de datos que el usuario debe proporcionar. En la corriente donde el fluido caliente entra, la celda para introducir el fluido que se va a enfriar tiene un selector, C14, tiene un selector con los fluidos que se pueden enfriar, en este están disponibles solo dos, Metanol y Glicerina, como

se aprecia en la figura 23. La inserción de los selectores se hace con la herramienta “Validación de datos” de opción Datos de la barra de herramientas de Excel.

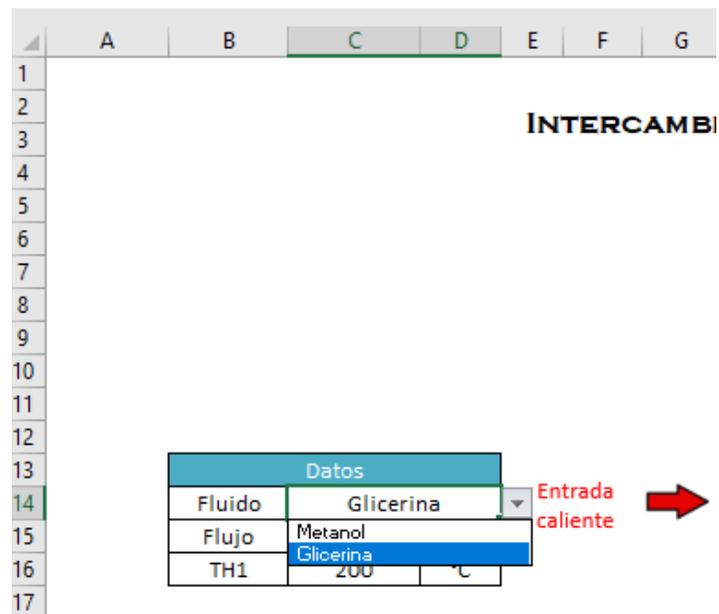


Figura 23

En las celdas D15 y D16, se seleccionan de un menú las unidades de los datos que se van a introducir y el módulo hace las conversiones necesarias para realizar los cálculos del modelo matemático, a través de la hoja “Conversiones”.

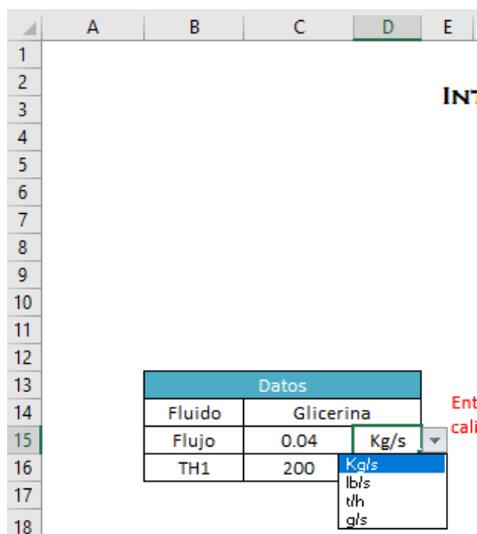


Figura 24

El flujo expresado en masa por unidad de tiempo, puede introducirse en kilogramos/segundo (Kg/s), libras/segundo (lb/s), toneladas/hora (t/h) o gramos/segundo (g/s), según como se tenga el dato. El valor de la temperatura como dato de entrada puede darse en grados centígrados (°C), grados fahrenheit (°F), grados Kelvin o grados Rankine, figura 24.

En la ventana central superior, el usuario del programa debe seleccionar los diámetros nominales de las dos tuberías que conformarán el intercambiador de calor. “Di nom:” de la celda K10 corresponde al diámetro nominal del tubo interno del intercambiador y “De nom:” de la celda K9 es el diámetro del segundo tubo del intercambiador, véase figura 25. Ambas celdas despliegan un menú de diámetros que pueden usarse para conformar el intercambiador de calor. La hoja denominada “Diámetros”, figura 26, es una base de datos de las características de la tubería usada en el intercambiador.

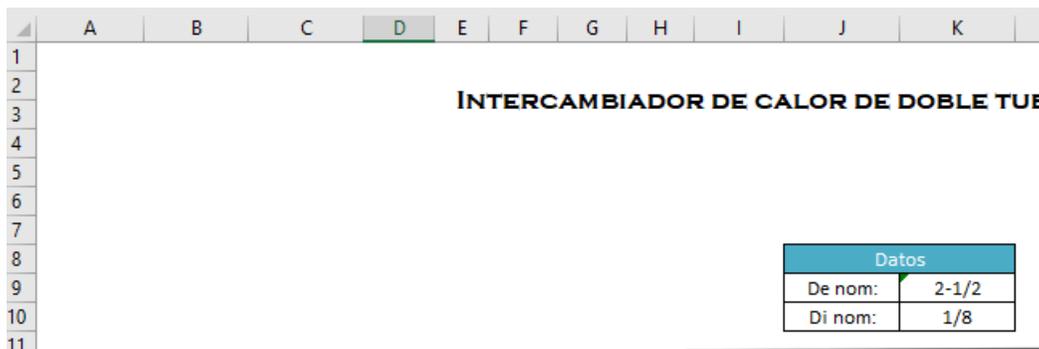


Figura 25

Nominal pulg		tamaño nominal de la tubería (pulg)		tamaño nominal de la tubería (pulg)-Cédula					
Di	De	Diámetro exterior	Diámetro interior	diámetro interno (m)	externo (mm)	externo (m)	Di	De	
3/8	2-1/2	1	1/8	0.00663	10.29	0.00029	1/8"	ICed-40	1/8"
1	3/8	2	1/8	0.00625	13.72	0.01372	1/8"	ICed-40	3/8"
		3	1/8	0.01252	17.15	0.01715	3/8"	ICed-40	3/8"
		4	1/8	0.01590	21.34	0.02134	1/2"	ICed-40	1/2"
		5	1/8	0.02093	26.67	0.02667	3/4"	ICed-40	3/4"
		6	1	0.02664	33.40	0.0334	1"	ICed-40	1"
		7	1-1/4	0.03505	42.16	0.04216	1-1/4"	ICed-40	1-1/4"
		8	1-1/2	0.04089	48.26	0.04826	1-1/2"	ICed-40	1-1/2"
		9	2	0.05250	60.33	0.06033	2"	ICed-40	2"
		10	2-1/2	0.06271	73.03	0.07303	2-1/2"	ICed-40	2-1/2"
		11	3	0.07732	89.90	0.0889	3"	ICed-40	3"
		12	3-1/2	0.09012	101.6	0.1016	3-1/2"	ICed-40	3-1/2"
		13	4	0.10230	114.3	0.1143	4"	ICed-40	4"
		14	5	0.12620	141.3	0.1413	5"	ICed-40	5"
		15	6	0.15430	168.3	0.1683	6"	ICed-40	6"
		16	8	0.20270	219.1	0.2191	8"	ICed-40	8"

Figura 26

Con los datos que el usuario proporciona, con la información necesaria aportada por las bases de datos, las instrucciones programadas en la hoja de Excel denominada "Cálculos", figura 27, realizan todas las operaciones numéricas que el algoritmo indica, para encontrar el área de transferencia de calor, A_s , expresada en metros cuadrados, de donde se calcula la longitud del intercambiador, que se reporta en la hoja de Entradas – Salidas.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M
1													
2													
3													
4				Datos de entrada			Tubo interior			Contracorriente			
5				Arreglo	Contracorriente		T promedio	175		ΔT_1	89.5626		
6				Ubicación del Fluido	Interior		μ	26.6005		ΔT_2	120		
7				Fluido interno	Glicerina		ρ	1179.5725		ΔT_{lm}	104.0403		
8				Fluido externo	Agua		Cp	3.3614		A_s int	0.630395		
9				Flujo interno	0.04	Kg/s	k	0.2122					
10				Flujo externo	0.02	Kg/s	Di	0.00683					
11	TC2	200		TH1	200	°C	Vi	0.925558905					
12	TH2	150.00		TH2	150	°C	Pr	421.3709741					
13		20		TC1	30	°C	Re	0.280323564					
14		0.00		TC2	0	°C	hi laminar	113.7118594					
15							hi turbulento	1.583359681					
16							hi	113.7118594					
17				TH1	200	°C							
18				TH2	150.0000	°C							
19				TC1	30	°C							
20				TC2	110.4374	°C							
21													
22													
23													
24													
25													
26													
27													
28													
29													
30													
31													
32													
33													
34													
35													
36													
37													

Si dan TH2	
(TH1+TH2)/2	175
CpH	3.36
Cp a TC1	4.178902
Qced Si H esta int	6.7228
TC2	110.44

Si dan TC2	
(TC1+TC2)/2	70.218699
Cpc	4.1926989
Cp a TH1	3.52
Qabs	6.7449957
TH2	152.08

Tubo exterior	
T promedio	70.2186986
μ	0.000379572
ρ	977.3813306
Cp	4.192698874
k	0.283542947
De	0.003885895
Ve	1.725416344
Pr	0.005612666
Re	17264.5264
he de 4-4	320.854518
he de 4-40	505.4448213
he de 40-4000	835.1906161
he de 4000-40000	1039.847666
he de 40000	901.8287981
he	1039.847666

Q	6722.8	w
Q	6.7228	Kw
U	102.5027396	W/m ² · °C

Figura 27

Las fórmulas requeridas para cada operación numérica, que indica el modelo matemático, se aplican en cada celda de la hoja de cálculo. Estas pueden analizarse en el programa completo que se anexa en la carpeta ProgsExcel. Se recomienda analizar este módulo muestra para desarrollar otros módulos de simulación, como actividades de evaluación formativa del curso.

2.2 Construcción de un simulador.

2.2.1 Cálculo de la potencia de una bomba. Este es el ejemplo más sencillo de un proceso de flujo de fluidos que para simularse, se conecta la pantalla de entradas y salidas, con los cálculos que indica el modelo matemático, apoyándose en una base de datos. Debe servir de guía para una simulación orientada a ecuaciones, que sea complementada con la opción de seleccionar mayor cantidad de fluidos.

CÁLCULO DE LA POTENCIA DE UNA BOMBA PARA TRANSPORTE DE UN FLUIDO

INTRODUCIR DATOS DE LA INSTALACIÓN		
L 1 =	3.70	m
L 2 =	1.50	m
L 3 =	5.00	m
L 4 =	12.00	m
L 5 =	2.50	m
L 6 =	0.30	m
Z 2 =	15.00	m
Volumen del tanque elevado:		
	10,000	litros
Tiempo de llenado deseado:		
	30	minutos
	Diámetro nominal de tubería	
	2	pulgadas

Seleccione el fluido

- Agua
- Agua
- Aceite de soya

Selecciona el fluido que deseas llevar al tanque elevado

Temperatura de operación: 20 °C

Densidad:	998.066	kg/m ³
Viscosidad:	0.0010716	kg/(m s)

Potencia de Bomba:	2.10377635	hp
--------------------	------------	----

Figura 28

Aquí se incluyen dos fluidos, agua y aceite de soya, toca al alumno ampliar la selección, desarrollando las ecuaciones de ajuste en la base de datos, figura 29.

PROPIEDADES DE LOS FLUIDOS CONSIDERADOS EN ESTE SIMULADOR

Densidad	Densi= AT ² +BT+C			Viscosidad	Visco= AT ² +BT+C		
	Coeficientes				Coeficientes		
Fluidos	A	B	C		A	B	C
Agua	-0.0037	-0.0677	1000.9	Agua	0.0002	-0.0301	1.5936
Aceite de soya	-0.0036	-0.3182	926.09	Aceite de soya	0.000004	-0.4058	48.626

Temperatura de operación: 20

Densidad de:	Agua	998.066	kg/m ³		
A:	-0.0037	B:	-0.0677	C:	1000.9

Viscosidad de:	Agua	0.0010716	kg/(m s)		
A:	0.0002	B:	-0.0301	C:	1.5936

Figura 29

En la figura 28, la pantalla Entradas – Salidas se observan celdas sombreadas donde se introducen longitudes diferentes de los tramos de tubería, según convenga, esto provoca que el valor de Z_2 tiene que ser diferente y es necesario proporcionarlo. En la celda B14 se debe introducir el volumen del tanque que desea llenarse, en un tiempo deseado en minutos que se debe indicar en la celda B17. La temperatura de operación se introduce en la celda J9, con este valor, las correlaciones de la base de datos de la figura 29 calculan la densidad y la viscosidad del fluido, que se requieren en las ecuaciones del modelo matemático.

En la pantalla Entradas – Salidas, de la figura 28, aparece sombreada la celda E17, indicando que el usuario proporcione el diámetro nominal de la tubería; sin embargo, el diámetro interno y la rugosidad para esta tubería está definida en los cálculos. Lo que no debe ser así en un simulador; pero esto se hace así para que el alumno construya una base de datos, con la información necesaria para que el usuario pueda seleccionar diámetros nominales, cédulas y materiales diferentes de la tubería que use en este sistema de llenado de tanque elevado. Esta es una actividad de evaluación importante y permitirá encontrar otras opciones de capacidad y refinamiento de este sencillo simulador, que modificará el enlace con la hoja de cálculos de la figura 30. El programa en Excel se anexa en la carpeta ProgsExcel.

	A	B	C	D	E	F	G	H	I	
1	HOJA DE CALCULOS PARA LA SIMULACIÓN									
2										
3		Datos de entrada:					Cálculos			
4		Volumen del tanque:	10,000	Litros			metros cúbicos:	10		
5		Diámetro Nominal tubería Ced 40:	2	pulgadas			Tiempo de llenado:	30	minutos	
6		Longitud de tramos de tubería:						1800	segundos	
7		L1:	3.70	m			Flujo volumétrico:	0.00555556	metros cúbicos/segundo	
8		L2:	1.50	m			Velocidad de descarga V_2 :	2.56636244	m/s	
9		L3:	5.00	m			Longitud total de tubería L:	25	m	
10		L4:	12.00	m			Rugosidad absoluta	0.15	mm	
11		L5:	2.50	m			Temperatura de operación	20	°C	
12		L6:	0.30	m			Densidad del fluido:	998.066	kg/m ³	
13		Distancia entre niveles Z_2 :	15.00	m			Viscosidad del fluido:	0.0010716	kg/(m s)	
14		Diámetro interno Tubería	52.5	mm			Diámetro interno Tubería:	0.0525	m	
15							Factor de fricción f:	0.0268343		
16		Contribución por accesorios:					Σka :	6		
17		Codos:	0.75				Cabeza de bomba Hp:	21.6393343		
18		Válvula Check:	3				Potencia de bomba hp:	2.10377635	hp	

Figura 30

2.2.2 Destilación Flash. En la destilación instantánea o flash una parte de una mezcla líquida se vaporiza mediante la reducción de presión. Este método de separación se puede aplicar a mezclas binarias y mezclas multicomponentes. La mezcla a separar debe estar entre los puntos de rocío y de burbuja; y se deja que alcance el equilibrio para que se separe la fracción vapor de la fracción líquida. La concentración de los componentes más ligeros es mayor en la fase vapor y los componentes más pesados se concentran en la fase líquida.

El equipo de separación flash consiste de un intercambiador de calor, una válvula de control y un tanque de separación. El diagrama del proceso se presenta en la figura 31.

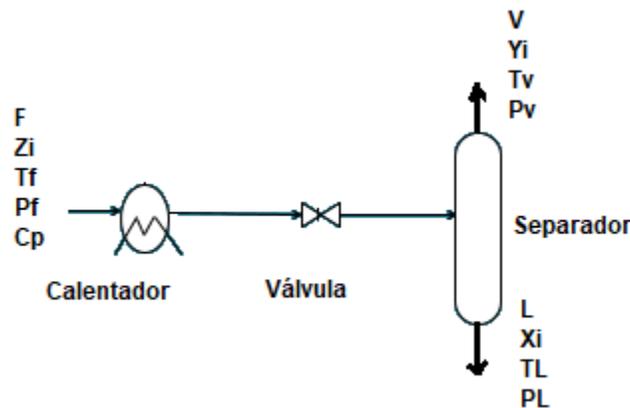


Figura 31

Se ha desarrollado en Excel el programa de simulación del separador flash, que se anexa en la carpeta ProgsExcel, de acuerdo al modelo matemático:

$$F = V + L \quad (100)$$

$$Z_i F = Y_i V + X_i L \quad (101)$$

$$F H_F + Q = V H_V + L H_L \quad (102)$$

$$Y_i = K_i X_i \quad (103)$$

$$T_V = T_L \quad (104)$$

$$P_V = P_L \quad (105)$$

$$\sum_1^n Z_i = 1 \quad (106)$$

$$\sum_1^n Y_i = 1 \quad (107)$$

$$\sum_1^n X_i = 1 \quad (108)$$

La pantalla de Entrada – Salidas, que se presenta en la figura 32, muestra las celdas sombreadas donde el usuario del programa debe introducir los datos de entrada. El programa despliega en las celdas de salida las respuestas que se procesan en la hoja de cálculos. La hoja BaseDatos tiene los parámetros necesarios para el balance de energía.

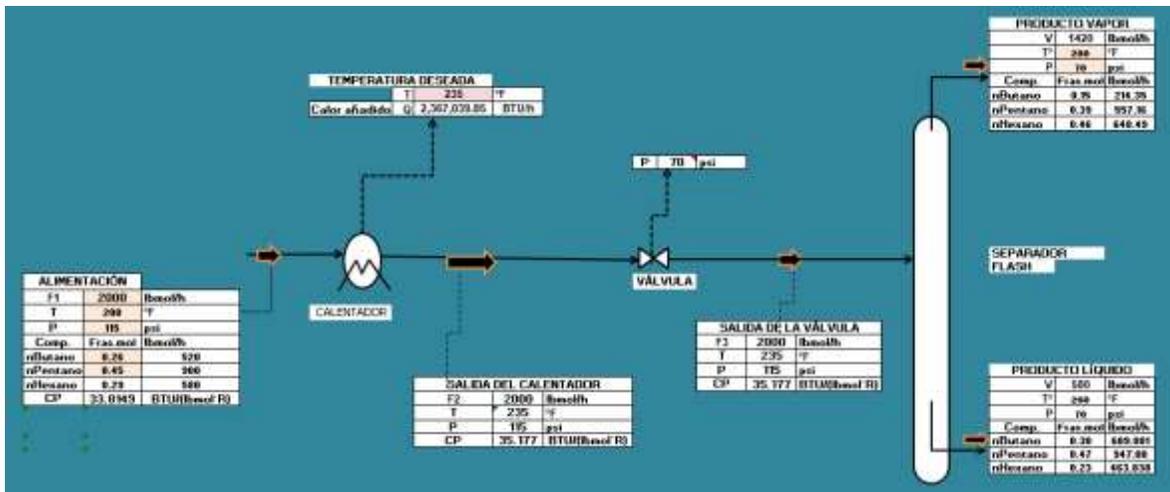


Figura 32

Este programa de la carpeta ProgsExcel, denominado SEPARADOR-FLASH, debe ser un elemento de apoyo para que el alumno, desarrolle una simulación más completa. Considerando que deben incluirse más componentes, lo que obligará a elaborar una base de datos más amplia. La constante de equilibrio K_i se ha calculado usando un método gráfico, que debe sustituirse por un método numérico programado que de versatilidad al programa. Falta desarrollar el balance entálpico de todo el proceso. Por lo que, el docente debe analizar este programa y apoyar a sus alumnos, para que la actividad de desarrollo del simulador sirva como un buen elemento de evaluación formativa del curso.

2.3 Interpretación de resultados.

Esta etapa es la parte más importante del proceso de simulación, que justifica el tiempo empleado en el análisis del proceso real, la elaboración detallada del modelo matemático, el planteamiento del algoritmo que llevará a la construcción del programa de cómputo y las corridas de prueba del simulador. En la fase de la interpretación de resultados, se analizan las salidas del simulador con criterio ingenieril, aprovechando las reglas de dedo que se encuentran en la bibliografía de ingeniería química y sobre todo el usuario debe desarrollar un sentido crítico, para verificar si las salidas del simulador tienen un carácter lógico.

El análisis de sensibilidad que se desarrolle con un simulador construido para un propósito particular, sirve para retroalimentar todo el proceso de construcción del programa, modificando o reestructurando subrutinas de cálculo, ampliando bases de datos o cambiando métodos de estimación de propiedades.

Para el propósito anterior, pueden usarse los programas de la carpeta ProgsExcel, que se han elaborado dejando todas las posibilidades de modificación, de ampliación o de reestructuración de ellos. Por lo que se sugiere que se analicen con detalle y sirvan como elementos de actividades de evaluación formativa para el curso.

3.- SIMULACIÓN COMERCIAL

3.1 Manejo de simuladores comerciales

3.1.1 Bosquejo histórico de los simuladores en Ingeniería química

La simulación de procesos es un instrumento de trabajo de los ingenieros químicos, que nació lentamente, en paralelo con la aparición de las computadoras y de los lenguajes de programación orientados a procedimientos como Fortran. En la década de los 60s del siglo XX, se desarrollan los primeros paquetes de simulación de procesos. Un antecesor de los actuales simuladores de procesos es el programa PACER, que fue elaborado para cálculos de balances de materia y de energía en redes de procesos a régimen permanente y realizó su primera prueba práctica en 1964. PACER es un acrónimo para Process Assembly Case Evaluator Routine y es el primer programa de simulación de procesos desarrollado por Paul T. Shannon, profesor de la Escuela de Ingeniería Química de la Universidad de Purdue, Lafayette, Indiana; a solicitud de la Humble Oil and Refining Company. De esa época es el paquete de simulación FLOWTRAN, desarrollado por Monsanto.

En 1967 se fundó el Winter Simulation Conference, que es un centro donde se archivan los lenguajes de simulación y aplicaciones derivadas. En la década de los 70's, se refinaron los modelos de estimación de propiedades fisicoquímicas, se incluyeron:

- ❖ Criterios de rasgado y convergencia en corrientes de recirculación.
- ❖ Se aumentaron las unidades de proceso.
- ❖ Se flexibilizó la síntesis de variadas redes de proceso.
- ❖ Se incluyeron criterios de optimización.

Aparecieron entonces, los paquetes de simulación: CONCEPT, SYMBOL, CHEMSHARE, CHEMTRAN, PROSPRO, GEMCS, GEPOS, PDA, y FLOWPACK.

A finales de los años 80's da inicio el desarrollo de paquetes de simulación interactivos: CHEMCAD, MICROCHESS, HYSYS y ASPEN.

A partir de 1991 se inicia la comercialización de paquetes de simulación dinámica y de integración de energía. Su comercialización marcó el comienzo de un uso más intensivo y generalizado en la industria y en las universidades.

3.1.2 Simuladores comerciales típicos

El manejo del simulador ASPEN-HYSYS y el manejo del simulador DWSIM se describen resolviendo casos de estudio en la sección 3.2. El simulador ASPEN-HYSYS es usado en algunos tecnológicos del Tecnológico Nacional de México, a pesar de que su licencia tiene un costo elevado para la comunidad académica. El simulador DWSIM es gratuito y está disponible al ingresar a la página web www.ingenieriaquimica.org. Este sitio web fue creado por el ingeniero químico Federico Scodelaro en 2006 y se recomienda visitarlo y suscribirse a la mayor comunidad de ingenieros químicos en español de la web, para descargar el simulador y obtener artículos, reseñas de software, recursos, noticias, y eventos orientados a profesionales y estudiantes de ingeniería química.

3.2 Casos de estudio de diseño, análisis y optimización de procesos en ingeniería química

3.2.1 Simulador ASPEN-HYSYS

Aspen-Hysys es un software comercial de simulación de procesos químicos perteneciente a la compañía Aspen Tech. Su fácil manejo puede, a primera vista, ocultar su gran potencia de cálculo bajo un interfaz gráfico muy intuitivo, capaz de acercar cómodamente al usuario hasta los datos reales de los equipos reales. Sin embargo, puede ocurrir en ocasiones que el uso de este software sin el apoyo del docente o de algunos textos que son excelentes manuales, puede ser una actividad tediosa que lleve a la frustración o confusión en la interpretación de resultados. Por lo que, en esta sección de manejo del HYSYS solamente se presentan pasos claves para simular un proceso y se pide al lector utilice el libro de Santana J. y Mena V. (2016), que se refiere en nuestra bibliografía, como un manual para el manejo de HYSYS.

Es conveniente advertir, que el uso correcto y completo de este paquete de simulación, solo se consigue si se tienen conocimientos sólidos de operaciones unitarias, fisicoquímica y termodinámica, que permiten realizar el análisis de los procesos, verificar la aproximación a la realidad de los resultados y llevar a cabo el análisis de sensibilidad de las variables involucradas.

Como en todo paquete de cómputo, el proceso de instalación del software genera automáticamente un acceso directo al programa, que se usa para para acceder al simulador. Una vez que se teclea el acceso directo, se despliega en la pantalla de la computadora la ventana principal de HYSYS, como se presenta en la figura 33. En esta pantalla se puede acceder a simulaciones realizadas anteriormente o crear una nueva simulación. Para iniciar el manejo del simulador HYSYS, se recomienda explorar detalladamente su entorno gráfico, la barra de herramientas que conserva un ambiente de trabajo similar en las versiones nuevas del paquete que la compañía va ofreciendo. Se sugiere la secuencia de exploración: **Iniciar el programa - Familiarizarse con su escritorio - Reconocer las barras de herramientas.**

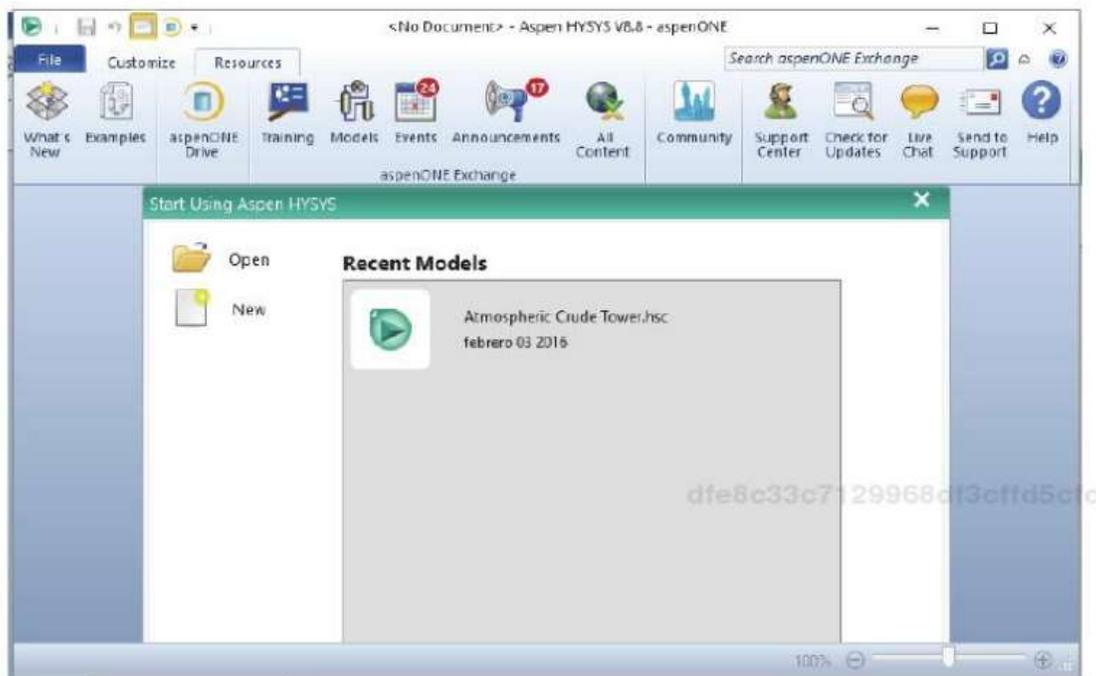


Figura 33

Para crear una nueva simulación, oprimir el botón **New** de la pantalla de la figura 33, que abrirá la ventana de *Component List*, que se presenta en la figura 34. Donde se deberá seleccionar los componentes involucrados en la nueva simulación; así como el paquete de propiedades de los fluidos seleccionados.

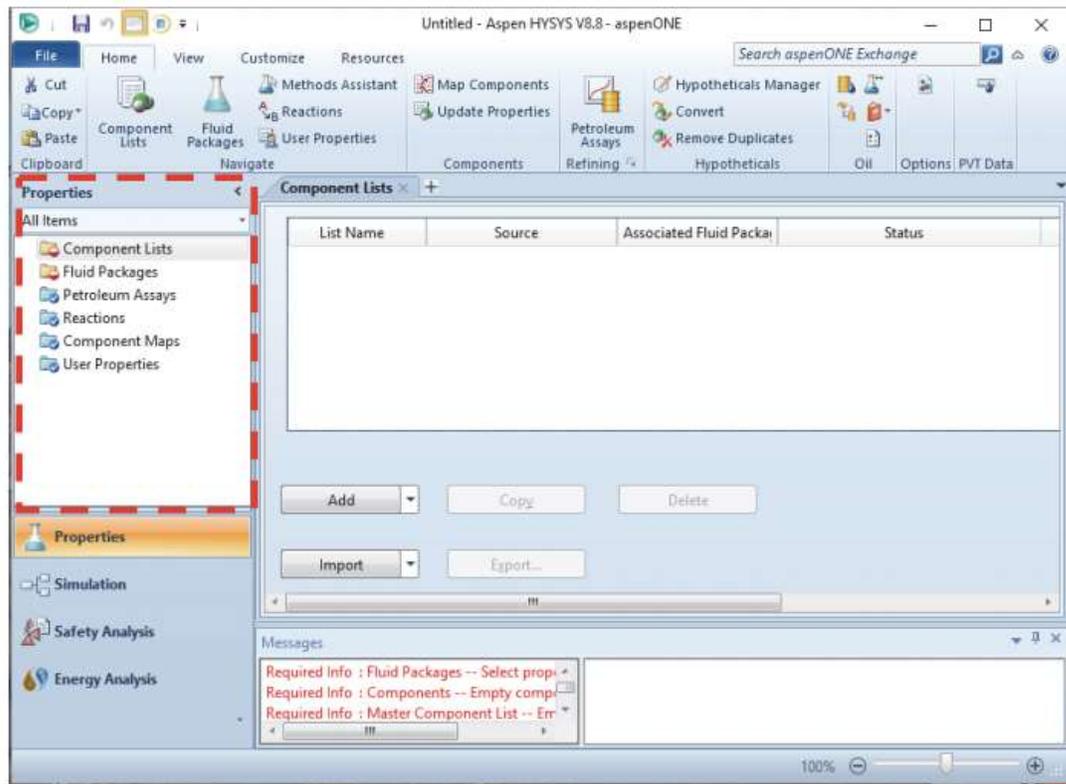


Figura 34

No se ha mencionado, pero resulta obvio que cuando vamos a usar el HYSYS, ya tenemos un diagrama de flujo del proceso, con las entradas y salidas de los componentes involucrados y las condiciones de operación que son datos.

De esta manera, usamos la opción Component List, procedemos a seleccionar los componentes que se incluyen en nuestro proceso y que forman parte del banco de datos del HYSYS. Una vez terminado el proceso de selección, la barra de status de la pantalla se pone en color verde para indicar que el procedimiento fue correcto, como se observa en la figura 35.

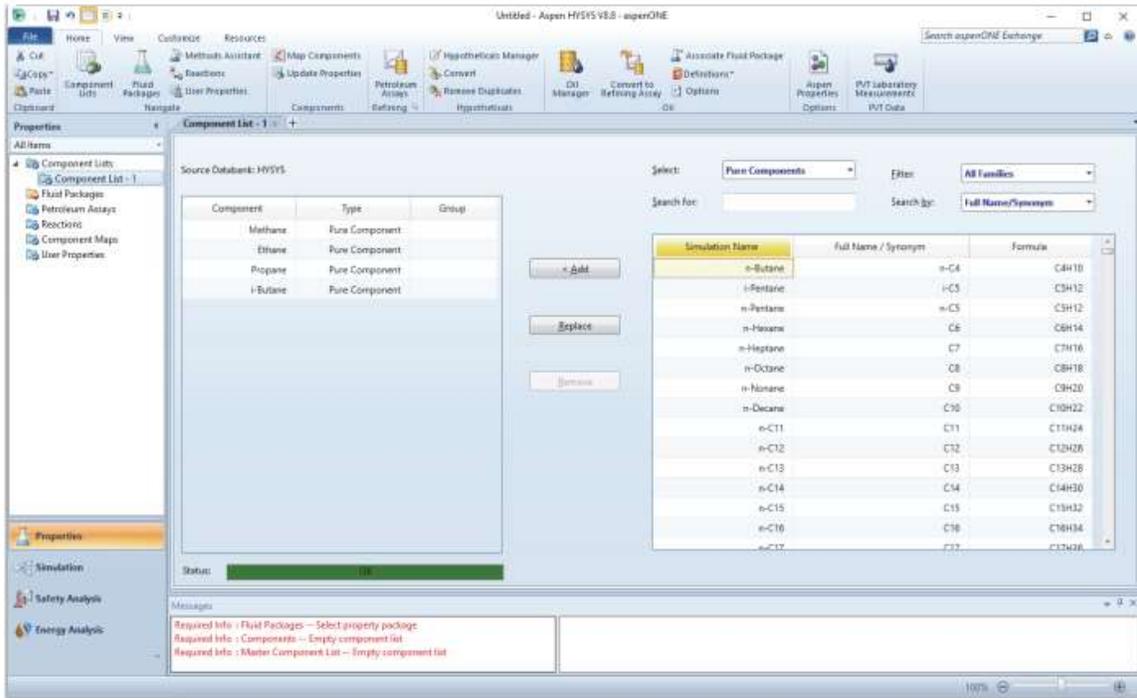


Figura 35

El siguiente paso es abrir la opción Fluid Package y seleccionar el paquete de propiedades que se ajuste a la simulación. Se despliega la pantalla de la Figura 36.

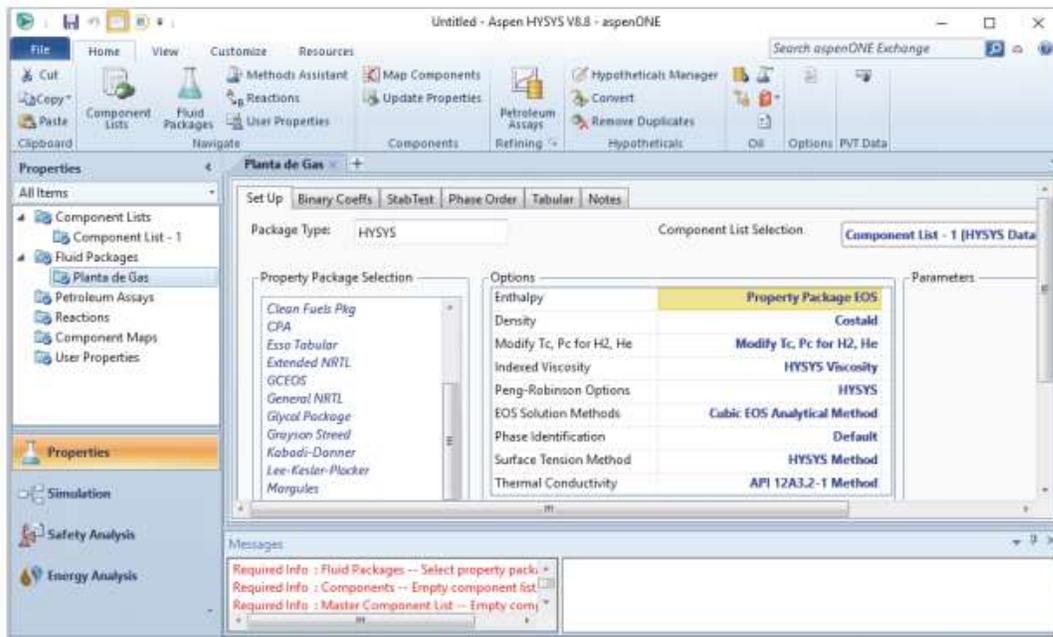


Figura 36

El *Fluid Package* calcula las propiedades de los fluidos y propiedades termodinámicas de los componentes y mezclas en la simulación. Al definir el *Fluid Package* se puede iniciar la simulación. Para ingresar a la ventana donde se construirá el diagrama de flujo del proceso, se presiona el botón *Simulation*, que se encuentra en la parte inferior izquierda de la pantalla mostrada en la figura 35 y aparece la ventana de la figura 36.

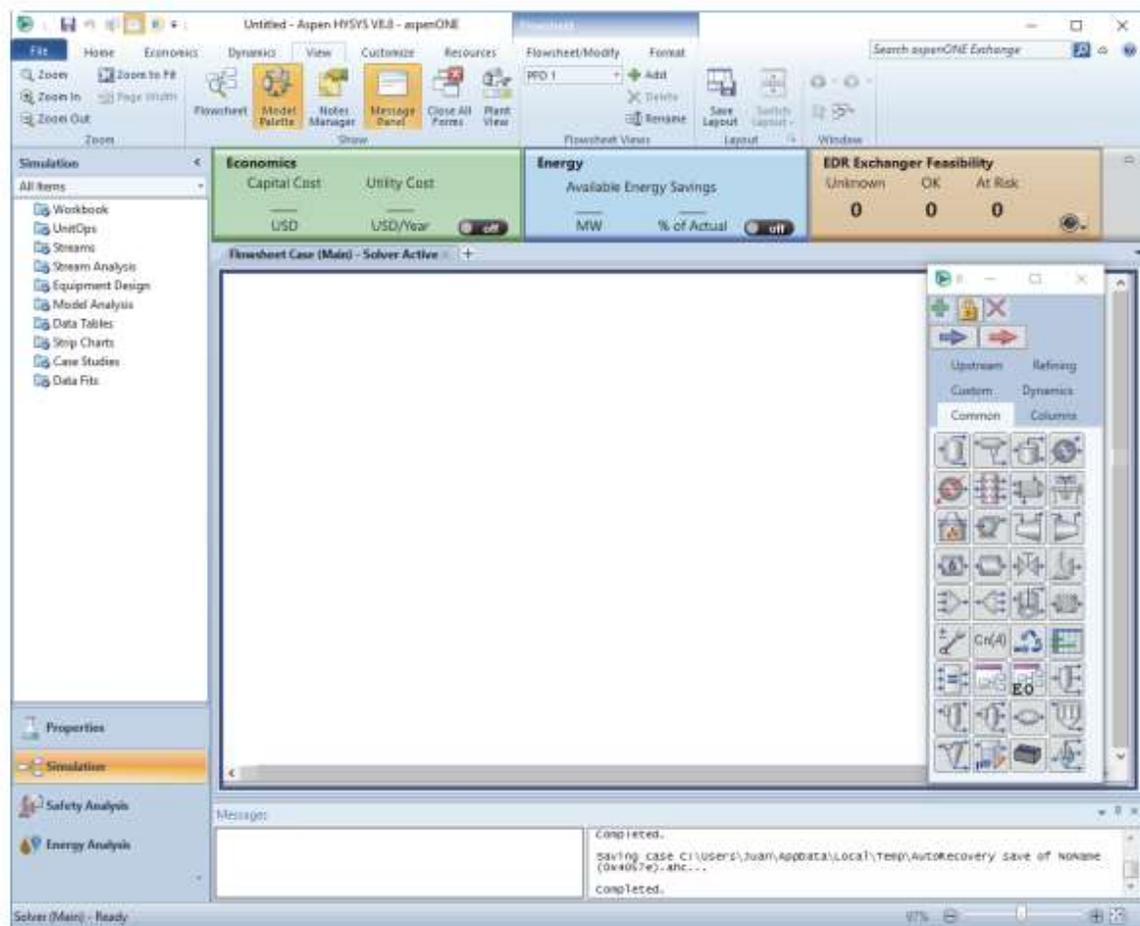


Figura 37

En el lado derecho de la pantalla de la figura 37 se encuentra una barra vertical de herramientas, denominada paleta de objetos. De donde se seleccionarán los iconos y símbolos que representan los equipos, operaciones unitarias, corrientes de materia y de energía, que serán arrastradas con el ratón de la computadora al área de simulación para construir el diagrama de flujo del proceso.

Se sugiere que los alumnos usen el HYSYS para simular el comportamiento separador Flash, debido a que ya conocieron el modelo matemático del proceso y es una separación sencilla que al obtener resultados satisfactorios motivará la aplicación a procesos más desarrollados. Debiendo llegar a un diagrama de flujo como el de la figura 38.

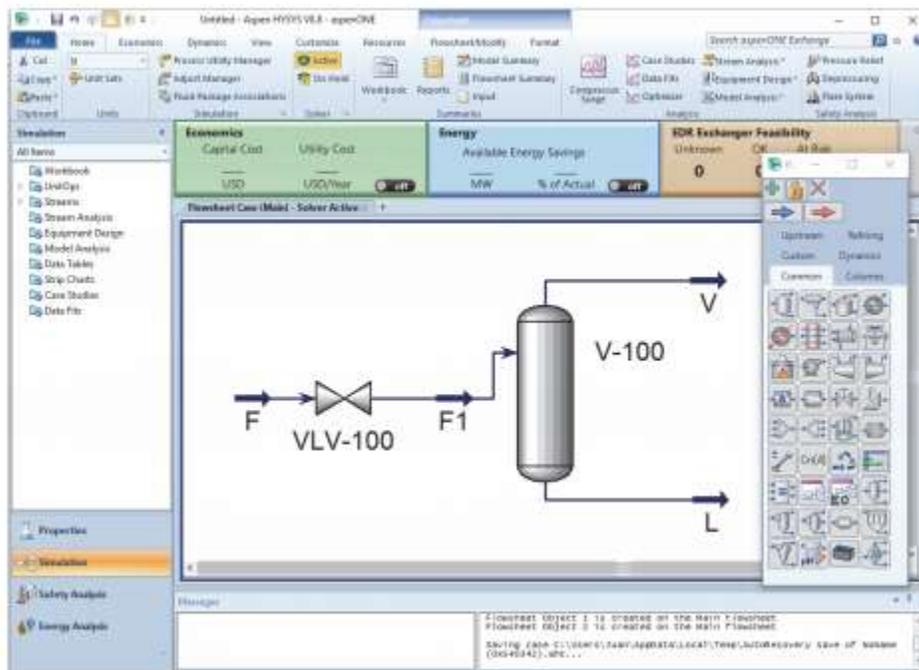


Figura 38

Considerando la corriente de entrada a una temperatura de 25°C, con una presión de 300 kPa, flujo molar de 100 kgmole/h, los componentes y sus respectivas fracciones molares son: etano, 0.05; propano, 0.15; n-butano, 0.25; n-pentano, 0.2; y n-Hexano, 0.35. Se selecciona el paquete de fluido *Peng Robinson* y sistema de unidades SI. Introducir una corriente de energía Q-100. La válvula es del tipo Joule-Thompson y se debe introducir sobre ella una caída de presión de 7 kPa.

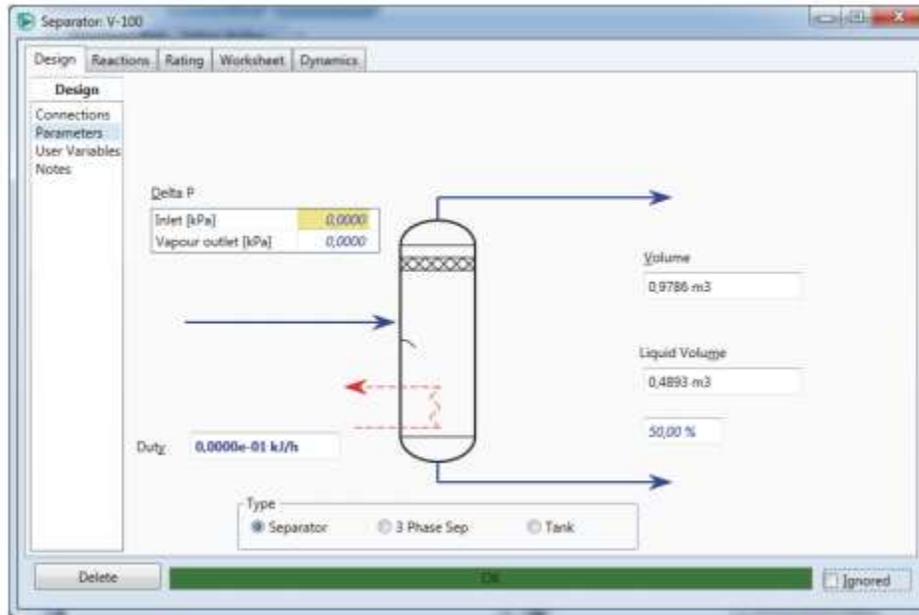


Figura 39

Si todo el procedimiento es correcto se despliega en la pantalla el status de color verde, como se presenta en la figura 39. Y se oprime el botón worksheet para observar los resultados en los flujos de productos.

3.2.1 Simulador DWSIM

Los grandes simuladores de procesos comerciales, como el Aspen-HYSYS, si bien son muy potentes, tienen un precio que queda fuera del presupuesto de pequeñas empresas, universidades, tecnológicos y de los estudiantes. DWSIM es un simulador de procesos, de código abierto y descarga libre. Se dice que es de código abierto, porque cualquier persona interesada puede acceder al código fuente de la aplicación, adaptarlo a sus necesidades o corregir errores. Y como muchas aplicaciones de código abierto su descarga es totalmente gratuita.

DWSIM fue desarrollado originalmente por Daniel Medeiros, un ingeniero de procesos brasileño, en 2006, al que luego se le sumó Gregor Reichert. DWSIM tiene una interfaz gráfica intuitiva y fácil de usar, con muchas de las funciones que encuentras en simuladores comerciales. Permite usar una lista completa de

operaciones unitarias, modelos termodinámicos avanzados, soporte para sistemas reactivos y herramientas de caracterización de crudos.

Al instalarlo genera en el escritorio un acceso directo, que al pulsarlo con el ratón despliega la pantalla de entrada que se presenta en la figura 40.

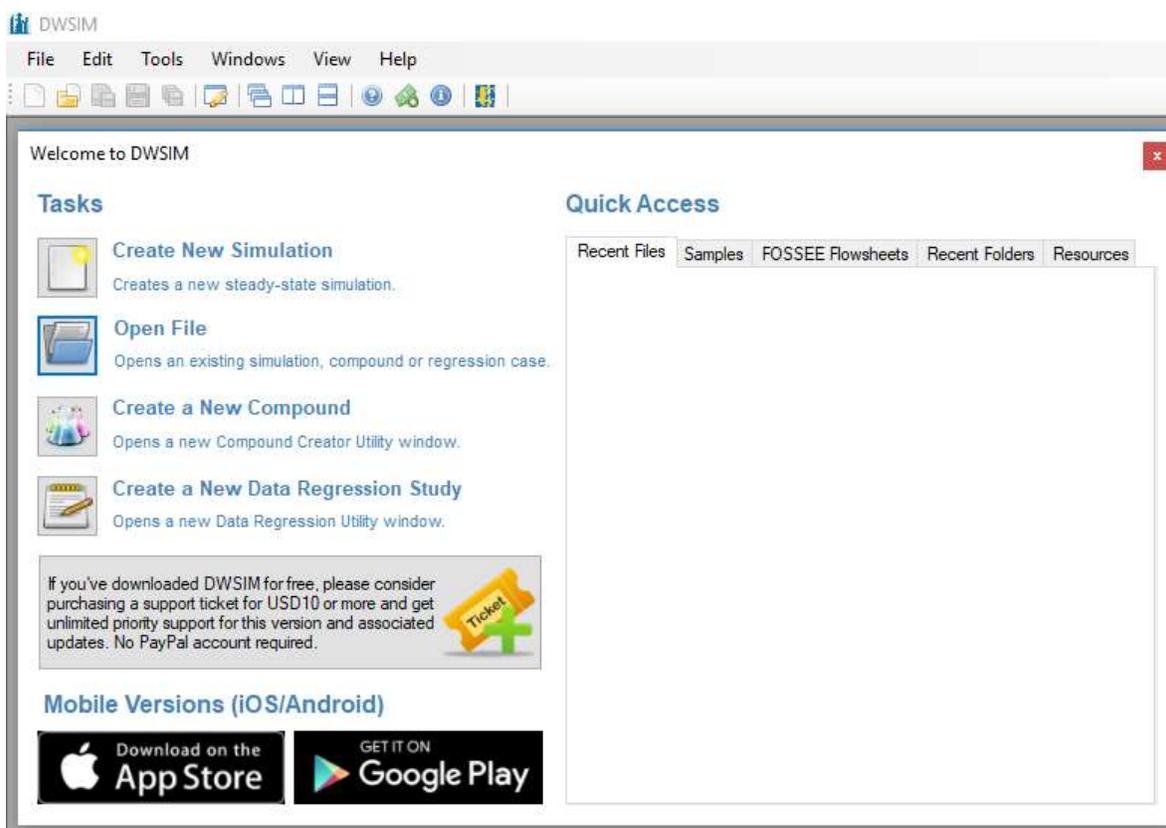


Figura 40

Para una nueva simulación se selecciona la opción de *Create New Simulation*, que nos lleva a una ventana de bienvenida, de la figura 41. Donde presenta un menú de opciones:

Introducción (Lugar donde nos encontramos)

Compounds (Opción para seleccionar los componentes involucrados)

Property Packages (Para seleccionar el paquete de propiedades del fluido)

System of Units (Selección del sistema de unidades a usar)



Figura 41

Se sugiere usar, como estrategia didáctica el mismo caso que se propuso para resolver con el simulador ASPEN-HYSYS: Se desea separar, usando un separador flash, una corriente de entrada a una temperatura de 25°C, con una presión de 300 kPa, flujo molar de 100 kgmole/h, los componentes y sus respectivas fracciones molares son: etano, 0.05; propano, 0.15; n-butano, 0.25; n-pentano, 0.2; y n-Hexano, 0.35. Se selecciona le paquete de fluido *Peng Robinson* y sistema de unidades SI. Introducir una corriente de energía Q-100. La válvula es del tipo Joule-Thompson y se debe introducir sobre ella una caída de presión de 7 kPa.

Para iniciar con la introducción de datos; en primer lugar, se selecciona la opción *Compounds*, oprimiendo el botón del ratón de la computadora sobre esta palabra. El programa despliega la ventana de la figura 42, donde se buscan de una lista los componentes: etano, propano, butano, pentano y hexano. Y se agregan (Add) al proceso a simular, como se muestra en la figura 43.

Compounds

- ✓ Introduction
- ▶ **Compounds**
- ▶ Property Packages
- ▶ System of Units

Select the compounds that you want to add to the simulation. Use the textbox to search and select a compound in the list. Click "Next" to continue.

Search

Name	CAS #	Formula	Database	CP
Air	132259-10-0	(N2)0.78...	ChemSep	<input type="checkbox"/>
Argon	7440-37-1	Ar	ChemSep	<input checked="" type="checkbox"/>
Bromine	7726-95-6	BrBr	ChemSep	<input type="checkbox"/>
Carbon tetrachloride	56-23-5	CCl4	ChemSep	<input type="checkbox"/>
Carbon monoxide	630-08-0	CO	ChemSep	<input checked="" type="checkbox"/>
Carbon dioxide	124-38-9	OCO	ChemSep	<input checked="" type="checkbox"/>
Carbon disulfide	75-15-0	SCS	ChemSep	<input type="checkbox"/>
Phosgene	75-44-5	COCl2	ChemSep	<input type="checkbox"/>
Trichloroacetyl chlori...	76-02-8	CCl3COCl	ChemSep	<input type="checkbox"/>
Hydrogen chloride	7647-01-0	HCl	ChemSep	<input checked="" type="checkbox"/>
Chlorine	7782-50-5	Cl2	ChemSep	<input type="checkbox"/>
Hydrogen iodide	10034-85-2	HI	ChemSep	<input type="checkbox"/>
Hydrogen	1333-74-0	H2	ChemSep	<input checked="" type="checkbox"/>
Water	7732-18-5	HOH	ChemSep	<input checked="" type="checkbox"/>

Added

Next > Cancel

Figura 42

Compounds

- ✓ Introduction
- ▶ **Compounds**
- ▶ Property Packages
- ▶ System of Units

Select the compounds that you want to add to the simulation. Use the textbox to search and select a compound in the list. Click "Next" to continue.

Search

Name	CAS #	Formula	Database	CP
Propane	74-98-6	CH3CH2...	ChemSep	<input checked="" type="checkbox"/>
1-nitropropane	108-03-2	CH3CH2...	ChemSep	<input type="checkbox"/>
2-nitropropane	79-46-9	CH3CH(...	ChemSep	<input type="checkbox"/>
1,2-propanediol	57-55-6	C3H8O2	DWSIM	<input type="checkbox"/>
CycloPropane	75-19-4	C3H6	CoolProp	<input checked="" type="checkbox"/>
n-Propane	74-98-6	C3H8	CoolProp	<input checked="" type="checkbox"/>
1,3-bis(chloranyl)pro...	142-28-9	C3H6Cl2	ChEDL Thermo	<input type="checkbox"/>
propanenitrile	107-12-0	C3H5N	ChEDL Thermo	<input type="checkbox"/>
1,3-bis(chloranyl)-2-(...	1067-09-0	C5H9Cl3	ChEDL Thermo	<input type="checkbox"/>
2-chloranylpropane	75-29-6	C3H7Cl	ChEDL Thermo	<input type="checkbox"/>
1-methoxypropane	557-17-5	C4H10O	ChEDL Thermo	<input type="checkbox"/>
1,2-bis(chloranyl)pro...	78-87-5	C3H6Cl2	ChEDL Thermo	<input type="checkbox"/>
1-chloranyl-2,2-dime...	753-89-9	C5H11Cl	ChEDL Thermo	<input type="checkbox"/>
2-methylpropane	75-28-5	C4H10	ChEDL Thermo	<input checked="" type="checkbox"/>

Added

N-butane (ChemSep)
N-pentane (ChemSep)
N-hexane (ChemSep)

Next > Cancel

Figura 43

Se marca con el ratón el botón *Next*, de la ventana para seleccionar el paquete de propiedades. En este caso se sugiere Peng Robinson, véase la figura 44.

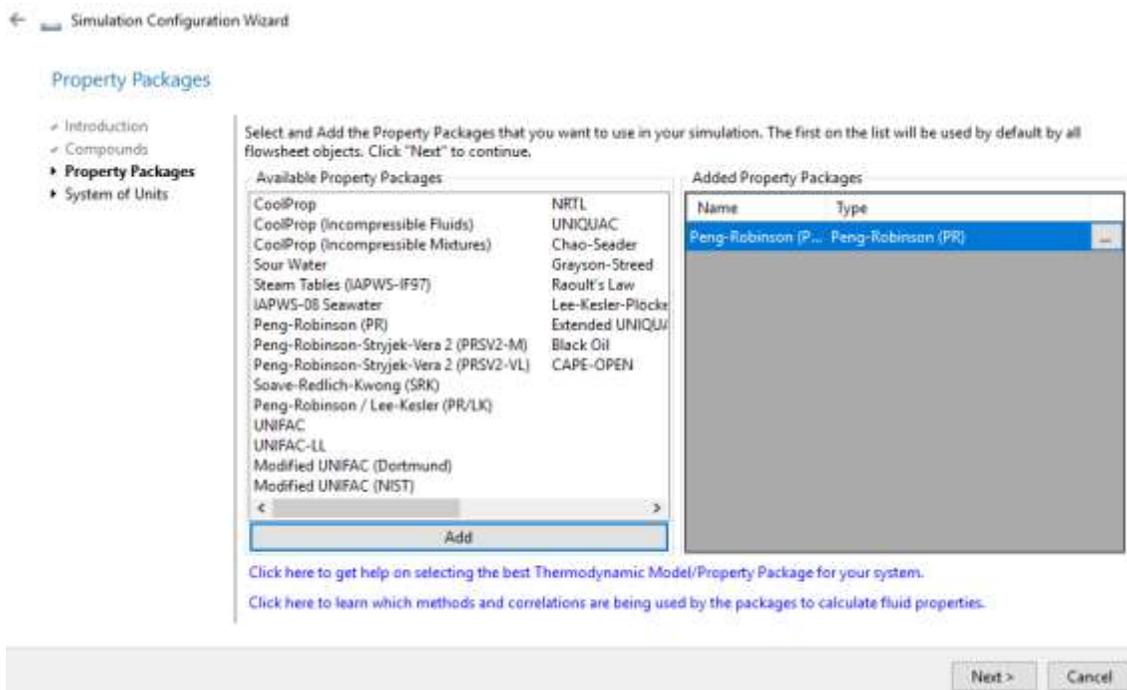


Figura 44

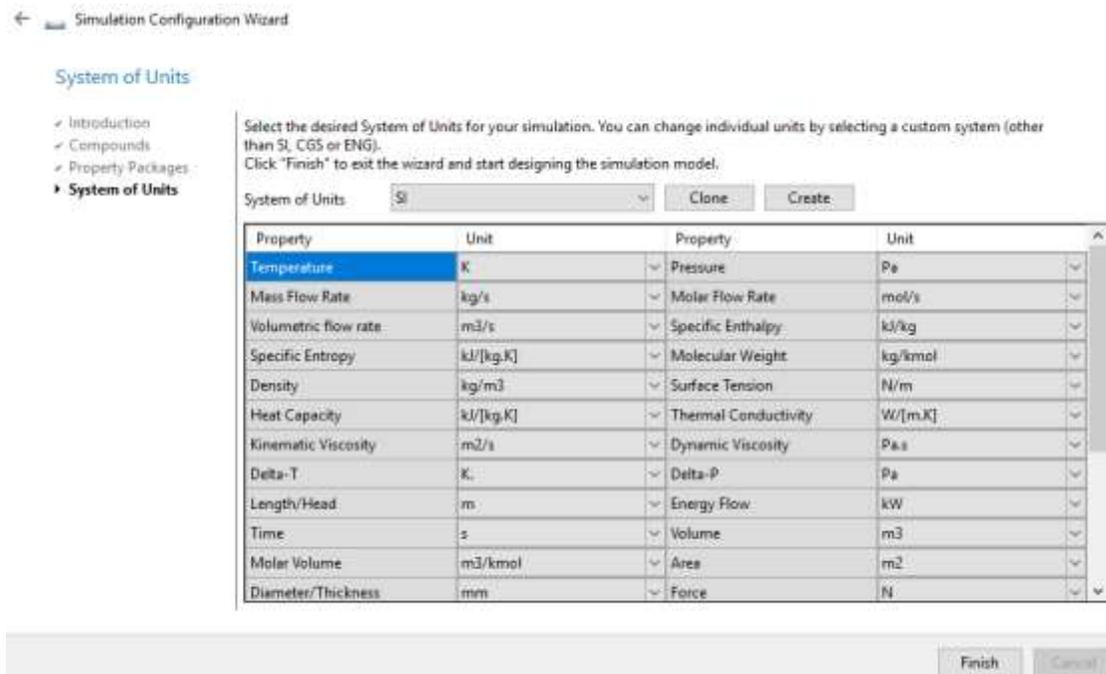


Figura 45

El último paso de la configuración del programa es definir el sistema de unidades a manejar, a través de la opción *System of Units*, como se observa en la figura 45. Se marca con el ratón el botón *Finish* y el programa nos lleva al espacio donde se crea el diagrama de flujo del proceso, (*Flowsheet*), de la figura 46.

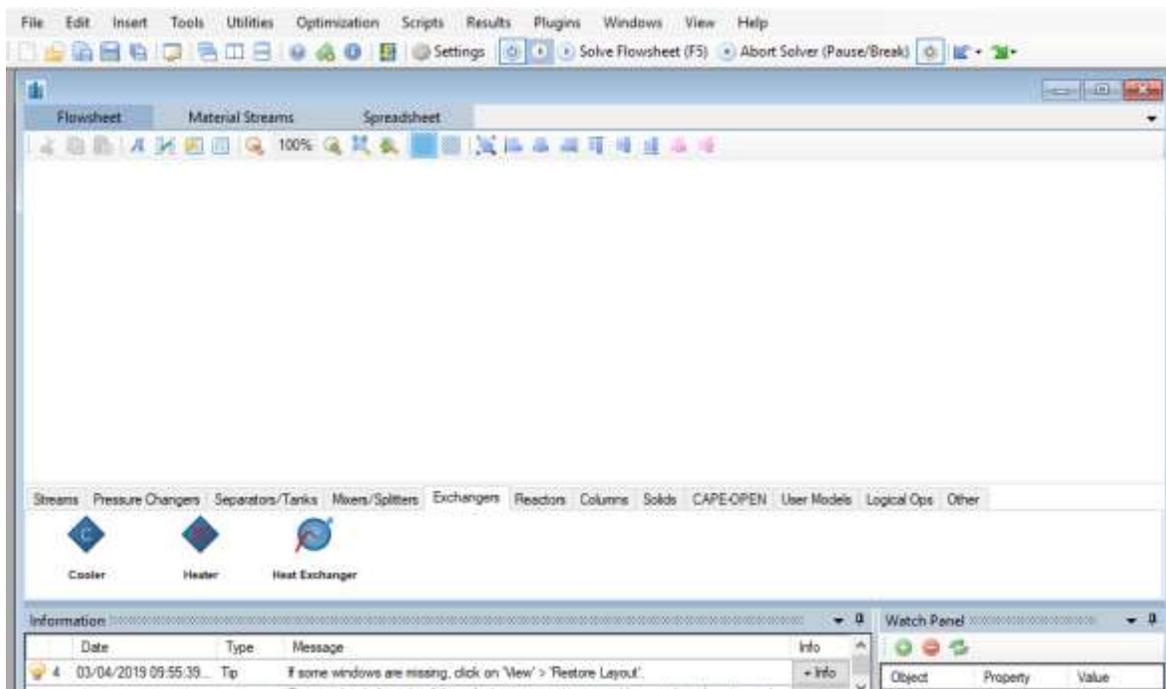


Figura 46

El *Flowsheet* tiene en la parte horizontal inferior una barra de elementos que se usan para construir el diagrama de flujo del proceso: *Streams* (corrientes de materiales y de energía); *Pressure Changers* (modificadores de presión, como válvulas o compresores); *Separators/tanks* (separadores); y *Exchangers* (intercambiadores de calor); entre otros, como se aprecia en la figura 46. Con estos elementos seleccionados con el ratón los equipos, arrastrándolos y conectándolos en el campo de diseño, se construye el diagrama de flujo del separador flash, como se presenta en la figura 47.

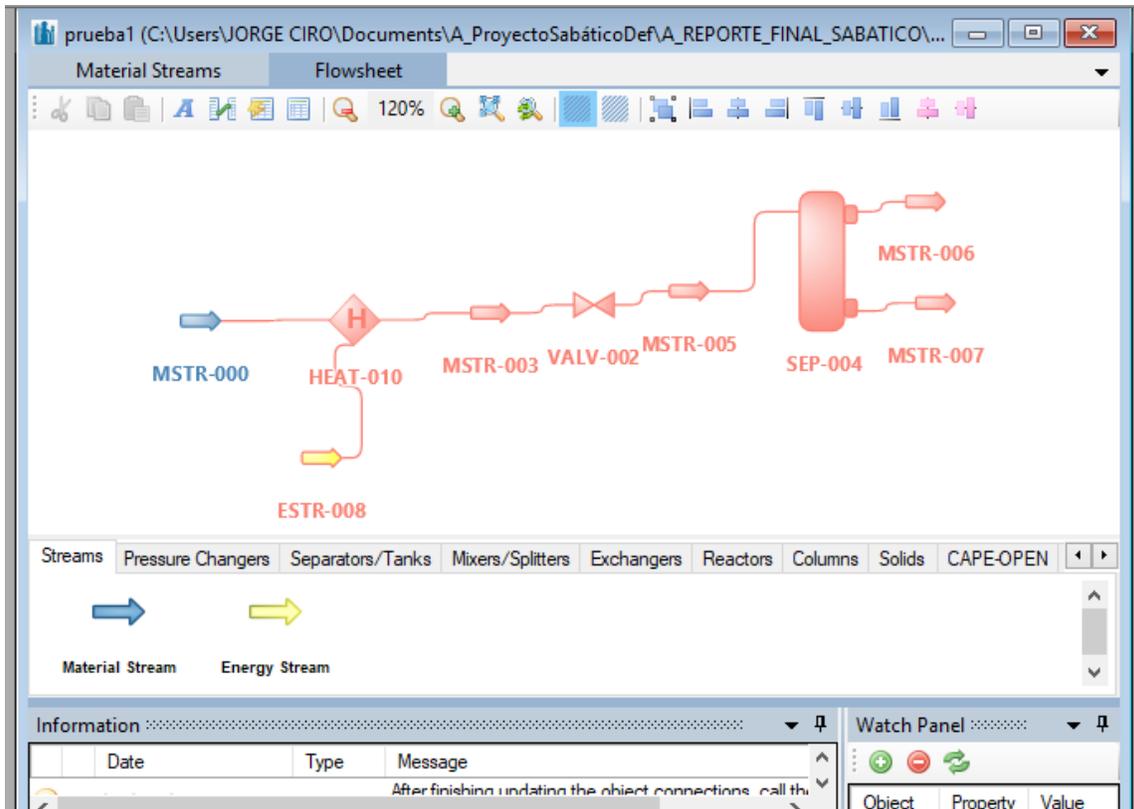


Figura 47

Una vez elaborado el diagrama de flujo, se señalan cada uno de los equipos, así como sus entradas y salidas correspondientes, para que el programa despliegue las ventanas que indican las conexiones entre las operaciones del proceso; y presenta las celdas que son destino de los datos necesarios para desarrollar la simulación. Como las condiciones de operación y las composiciones de las corrientes. Se deben explorar todos los elementos del diagrama para no omitir ninguna información necesaria para que se desarrollen las corridas de cálculo. Esta ventana tiene un cuadro en la parte inferior, donde se pueden leer los mensajes del simulador, de éxito o de error, o de falta de información. Como ejemplo se presenta la ventana de la figura 48. Es actividad de evaluación formativa del alumno, llenar todas las ventanas de información que requiera el programa.

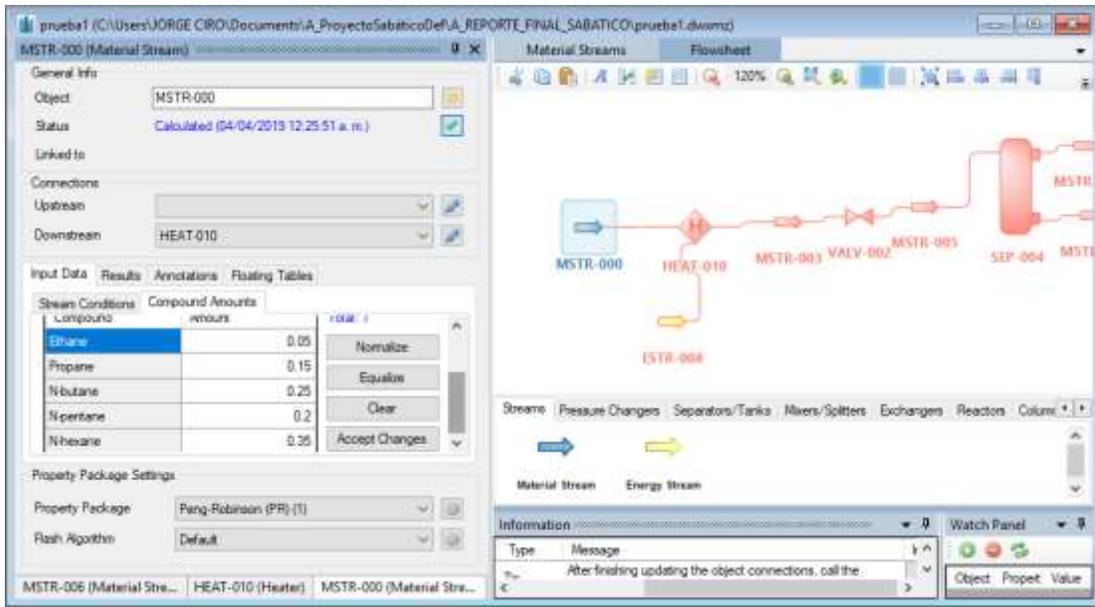


Figura 48

Cuando se ha introducida toda la información requerida por el programa de simulación, se presentará el mensaje: *The Flowsheet was calculated successfully*. Lo que significa que se ha desarrollado la simulación y entonces se puede posicionar el ratón en las salidas que nos darán los resultados.

Se deja como una actividad de evaluación formativa para el estudiante elaborar un manual de manejo del simulador DWSIM, tomando como base los tutoriales publicados en internet.

3.3 Interpretación de resultados

Como el uso de simuladores del tipo de HYSYS permite hacer corridas diferentes, es conveniente desarrollar análisis de sensibilidad en módulos de simulación y en procesos sencillos, para que el alumno comprenda la aplicación ingenieril de estas herramientas.

Como una última actividad de evaluación formativa, que puede ser en algunos casos la actividad principal cuando no se cuente con el HYSYS, se pide al alumno usar el DWSIM como una herramienta de simulación, para proceso que desee analizar. Esto le permitirá comparar resultados de simulación con el ASPEN-HYSYS; y en caso de ser la única herramienta aprovechar este simulador gratuito.

BIBLIOGRAFÍA

- Cengel, Y. y Cengel, A. (2011). Transferencia de calor y masa. México: McGraw-Hill.
- Cuevas, M. (2000). Introducción a la simulación en ingeniería química. España: Universidad de Jaén.
- Creus, A. (2007). Simulación y control de procesos por ordenador. España: Marcombo.
- Ibarra, J. (2013). Aplicaciones informáticas de hojas de cálculo. España: Editorial CEP S. L.
- Iglesias, O. y Paniagua, C. (2013). Conceptos básicos de simulación de procesos en simuladores modulares. Argentina: Editorial de la Universidad de La Plata.
- Kern, D. (1999). Procesos de transferencia de calor. México: Compañía Editorial Continental S. A. de C. V.
- King, J. (1980). Separation Processes. USA: McGraw-Hill.
- Luyben, W. (1973). Process Modeling, Simulation, and Control for Chemical Engineers. USA: McGraw-Hill.
- Manzur, A. y Cardoso, J. (2015). Velocidad de evaporación del agua. Revista Mexicana de Física 61 (2015) 31-34. Universidad Autónoma Metropolitana – Iztapalapa. México.
- Martínez, V., Alonso, P., López, J., Salado, M. y Rocha, J. (2000). Simulación de procesos en ingeniería química. México: Plaza y Valdés Editores.
- Perry, R. (1992). Manual del ingeniero químico. México: McGraw-Hill.
- Rao, S. (2009). Engineering Optimization. USA: John Wiley & Sons, Inc.
- Santana, J. y Mena, V. (2016). Introducción a ASPEN-HYSYS. España: Universidad de Las Palmas de Gran Canaria.

Torres, R. y Castro, J. (2010). Análisis y simulación de procesos de refinación del petróleo. México: Instituto Politécnico Nacional.

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

www.ingenieriaquimica.org