

Libros de **Cátedra**

Conceptos básicos de simulación de procesos en simuladores modulares

Omar Iglesias
Carmen N. Paniagua

FACULTAD DE
INGENIERÍA

e
exactas



UNIVERSIDAD NACIONAL DE LA PLATA

CONCEPTOS BÁSICOS DE SIMULACIÓN DE PROCESOS EN SIMULADORES MODULARES

Omar Iglesias
Carmen N. Paniagua



2013

Iglesias, Omar

Conceptos básicos de simulación de procesos en simuladores modulares / Omar Iglesias y Carmen N. Paniagua. - 1a ed. - La Plata : Universidad Nacional de La Plata, 2013.

E-Book. ISBN 978-950-34-1000-4

1. Ciencias. 2. Enseñanza Universitaria. I. Paniagua, Carmen N. II. Título

CDD 501.711

Fecha de catalogación: 20/08/2013

Diseño de tapa: Dirección de Comunicación Visual de la UNLP



Universidad Nacional de La Plata – Editorial de la Universidad de La Plata

47 N.º 380 / La Plata B1900AJP / Buenos Aires, Argentina
+54 221 427 3992 / 427 4898
editorial@editorial.unlp.edu.ar
www.editorial.unlp.edu.ar

Edulp integra la Red de Editoriales Universitarias Nacionales (REUN)

Primera edición, 2013
ISBN 978-950-34-1000-4
© 2013 - Edulp

PRESENTACIÓN

Ing. Miguel de Santiago

El proceso evolutivo de las ingenierías se ha nutrido de tres vertientes:

1. El progreso del conocimiento en las ciencias que aplica cada especialidad de la ingeniería; 2. La innovación y desarrollo de los métodos y procedimientos de construcción de maquinarias, estructuras y procesos; y 3. El progreso de los métodos y procedimientos de cálculo y de diseño. Es en este último tema donde se inserta esta obra.

Las mayores dificultades en el campo del cálculo y el diseño en la ingeniería química se deben a la diversidad de procesos y productos que debe manejar, la poca frecuencia de repetición de problemas similares y la extrema complejidad de los sistemas fisicoquímicos. Esto conduce a que cada nuevo emprendimiento sea generalmente un trabajo de alta originalidad donde hay que manejarse con información escasa y abundante incertidumbre.

La ingeniería química parte a los inicios del siglo 20 con el problema de pasar del laboratorio químico a las dimensiones de producción industrial que permitan la satisfacción del mercado en condiciones económicas y de seguridad. Los cálculos se reducían a balances de materiales y de energía, con uso de máquinas manuales de cálculo o de la regla de cálculo, asistida por tablas (de logaritmos y de trigonometría). Los errores en los datos de diseño permitían trabajar apenas con 3 cifras significativas. Altos porcentajes de error y excesivo tiempo del diseño eran los problemas del ingeniero.

El desarrollo de nuevos equipos más eficientes se basó en la investigación tecnológica basada fundamentalmente en desarrollos de ecuaciones empíricas con amplio uso de la teoría de los modelos. Muchos cálculos complejos se facilitaban con la construcción de gráficos, cartas y nomogramas. Las operaciones unitarias dieron los elementos fundamentales de los procesos químicos pero la concatenación de esos elementos operativos en un proceso solo podía intentarse a través de una planta piloto, que debía operarse por tiempos prolongados para descubrir problemas operativos no visibles en el laboratorio o el

banco de pruebas. Se disminuyeron así los porcentajes de error e incertidumbre pero aumentaron los costos y el tiempo de desarrollo de los proyectos.

La gran revolución aparece con la computadora digital electrónica (viejo nombre obsoleto). Los cálculos más complejos son ahora posibles y además se pueden barrer gran cantidad de alternativas en segundos o minutos en búsqueda del óptimo funcionamiento. Al principio fueron grandes máquinas solo accesibles a poderosas instituciones y que además requerían de ímprobo trabajo de programación del cálculo. La Ingeniería Química se transformaba así en un coto de las grandes compañías tecnológicas de los países desarrollados. Por ese entonces comienza a aparecer la idea del desarrollo de programas que construyan en el papel la integración de los procesos. Estos programas se basaban en módulos de operaciones y procesos unitarios que deberían integrarse, en un programa a construir por el ingeniero.

La miniaturización de las computadoras permite nuevamente al ingeniero individual y la pequeña empresa de ingeniería a participar del cálculo, construcción y operación de procesos. Los programas de cálculo, todavía un gran emprendimiento, se multiplican, perfeccionan y difunden a través de procesos de licencia. Son desarrollos costosos, solo accesibles a compañías industriales o tecnológicas de buena envergadura comercial, pero son los jóvenes ingenieros quienes deben manejarlos.

El problema tiene varios estadios. 1. El conocimiento del programa, para lo que hay que leer el manual y realizar algunos ejercicios. Una cierta guía es necesaria para seleccionar las tareas de mayor utilidad relegando algunas actividades de menor interés.

2. Construir el programa específico para el propio proyecto, para lo cual se requieren estrategias y estratagemas de un ingeniero con gran experiencia y entusiasmo juvenil.

Es en este contexto donde se ubica la obra de los Profesores Iglesias y Paniagua, indicando los procedimientos de ordenamiento y construcción del proceso, teniendo en cuenta las facilidades y limitaciones del Programa de Simulación (Simulador UniSim Design de Honeywell , un programa de la familia de Hysys). La

posibilidad de practicar con el programa es indispensable para la asimilación de los conceptos. Sin embargo los conceptos estratégicos del desarrollo de aplicaciones serán siempre de aplicación general.

El contenido de esta obra se reparte en capítulos, que incluyen un prólogo, 12 capítulos y otro final con algunas propuestas de trabajo. En el capítulo 1 se muestra la configuración básica del programa Simulador. Algunos pequeños ejercicios permiten una mejor asimilación de las herramientas del simulador y especialmente en cuanto a construir el diagrama de proceso. Así como el Capítulo 1 se orienta específicamente a cómo introducir la información pertinente al Simulador, el capítulo 2 se orienta a obtener del Simulador la información calculada en alguna de las alternativas que ofrece el simulador.

El capítulo 3 está dedicado al concepto clave de todo programa de simulación de procesos químicos. El banco de datos de modelos de predicción de propiedades fisicoquímicas y termodinámicas, tanto en productos puros como en mezclas. Esto requiere que el profesional que use el simulador tenga una noción cierta de cuáles son los modelos disponibles y los más apropiados a cada caso específico. Aquí es donde verdaderamente la obra de los Profesores Iglesias y Paniagua comienza a tener la mayor utilidad. Este tema se prolonga en el capítulo 4 en que se trata de predecir propiedades de materiales que no están en la base de datos y además como caracterizar mezclas determinadas como es el caso de los cortes de petróleo y representarlas por un producto hipotético.

En el capítulo 5 a través del planteo de problemas de equilibrio entre fases en tanque flash se introduce al estudiante en la estrategia de los cálculos y el uso de reglas prácticas para establecer objetivos que permitan obtener un diseño óptimo. Al mismo tiempo se va adquiriendo práctica en el manejo de la predicción de propiedades, el uso de sistemas de unidades y en el uso de las diversas herramientas del simulador.

En el capítulo 6 se expande el análisis general de estrategia de cálculo a la consideración de la estructura de un proceso en cuanto a la existencia o no de grados de libertad, la consistencia termodinámica, la construcción en el plano de equipos con varias funciones mediante la combinación de operaciones

elementales. Se analizan, además, los problemas de convergencia de los cálculos y una introducción al tratamiento de reciclos.

En el capítulo 7 se encara la complejidad del problema de la existencia de numerosos reciclos de información y su influencia en el cálculo. La estrategia de cálculo implica en primera instancia la determinación de los reciclos y la búsqueda del ordenamiento óptimo del cálculo de cada uno de los reciclos.

En el capítulo 8 se trata el problema de los equipos de transferencia de calor en toda su generalidad: intercambiadores de calor con diferentes geometrías, evaporadores y hornos, interaccionando con servicios auxiliares o con otras corrientes de proceso, lo que generalmente introduce dificultades adicionales en el cálculo. El texto de la obra da estrategias especiales de cálculo.

En el capítulo 9 se trata el problema del transporte de fluidos dentro de los procesos. Ello incluye los equipos de impulsión: bombas para el manejo de líquidos, compresores para impulsar gases o expansores para recuperar energía disponible, eyectores para la creación de vacío, etc. El sistema puede también calcular caudales o pérdida de carga en tramos de cañerías. Si bien con líquidos se puede obviar el cálculo de equipos, en gases las propiedades de las corrientes cambian significativamente y además el costo de los equipos es importante y los equipos forman parte activa en el flowsheet a simular.

El Capítulo 10 está destinado exclusivamente a la simulación de columnas de destilación. Esta operación tiene generalmente una gran complejidad en cuanto a los cálculos y además es una pieza costosa dentro del costo total de la inversión del proceso. El simulador solo resuelve el problema de verificar el funcionamiento de una columna existente en diferentes condiciones operativas, por lo que se debe realizar un procedimiento que diseñe una columna que aproximadamente resuelva el problema, (short cut design), para luego entrar en un proceso de diseño riguroso, siempre con la ayuda del simulador. Las condiciones de presión en la columna y las temperaturas de cabeza y fondo de la columna son variables que pueden determinar la economía de la instalación. La obra de los Profesores Iglesias y Paniagua guía en el procedimiento de diseño con numerosas reglas heurísticas y estrategias de cálculo que favorecen el encontrar las condiciones

óptimas. Mediante ejemplos y ejercicios se verifican procedimientos de uso con el programa de simulación.

El capítulo 11 se dedica a los reactores químicos. El simulador ofrece varias alternativas de diseño o simplemente de cálculo de rendimientos. Los avances de reacción pueden ser datos experimentales o resultados del cálculo en base a ecuaciones de cinética de reacción o de equilibrio químico. Mediante el uso de ejemplos cuidadosamente elegidos, la obra permite valorar los recursos del simulador e integrar el reactor químico al proceso productivo.

Los capítulos precedentes mostraron procedimientos y reglas para constituir un proceso productivo de industrias de tipo químico. El proceso constituye generalmente un sistema complejo en el que la aspiración mayor en el proceso de diseño fue obtener un sistema en que se asegure un funcionamiento compatible de todos los equipos. A continuación es necesario verificar los rendimientos económicos del proceso y en esa etapa es conveniente, haciendo uso de los grados de libertad del sistema, proceder a un análisis de optimización del funcionamiento del proceso para obtener el máximo rendimiento económico. El capítulo 12 de la obra, constituye una introducción al uso de las herramientas matemáticas (procedimientos de optimización) que el simulador provee. Como siempre, se ejemplifican las operaciones con el uso de ejemplos y ejercicios cuidadosamente seleccionados.

El Anexo propone el análisis de dos procesos industriales de los que se suministra el flowsheet y los datos de diseño necesarios para proceder al dimensionamiento de los equipos del proceso y los balances de materiales y energía.

Como corolario digamos que la obra de los Profesores Iglesias y Paniagua constituye un excelente curso de diseño de procesos, que habitualmente no se proporciona en cursos regulares, por la cantidad de tiempo que insumiría a los alumnos y al profesor llevar adelante un simple ejemplo. El uso de un simulador permite obviar este inconveniente y es en este sentido una muy importante contribución a la enseñanza de la Ingeniería Química.

ÍNDICE

Prólogo	1
Capítulo 1. Asomándonos al simulador	
Una mirada a nuestro simulador	4
Las primeras operaciones	6
Armando el esquema de simulación	11
Unidades usadas por los distintos sistemas disponibles en UniSim Design	20
Propuesta de Trabajo	21
Capítulo 2. Estructurando la salida de información	
Uso del Workbook	22
Reportes	27
Tablas en el ambiente de trabajo	28
Estudios de variaciones: DataBook	30
Capítulo 3. Selección de modelos termodinámicos	
Introducción	33
El ELV y las interacciones moleculares	34
Termodinámica del ELV. Métodos de predicción	37
Recomendaciones de uso	40
Predicción de Propiedades. Métodos Disponibles en UniSim Design.....	44
Ecuaciones de estado	45
Modelos de coeficientes de actividad	47
Tratamiento de no condensables	51
Propuesta de Trabajo	52
Capítulo 4. Compuestos hipotéticos y cortes de petróleo	
Introducción	53
Compuestos hipotéticos	54
Incorporando un compuesto hipotético	54
Caracterización de un corte de petróleo	60
Ingreso de la información	64

Generación de los compuestos hipotéticos para el crudo	68
Transferencia de la información	72
Propuestas de trabajo	73
Capítulo 5. Equilibrio de fases. Tanque separador	
Equilibrio líquido - vapor en un tanque flash	74
Un ejemplo de aplicación	77
Otros cálculos relacionados con el equilibrio de fases	81
Envolvente de fases y otras herramientas	83
Propuestas de trabajo	88
Capítulo 6. Algunas cuestiones básicas en la simulación de un proceso	
Planteo del problema	89
Análisis del problema propuesto	91
A modo de ayuda	101
Propuestas de trabajo	103
Capítulo 7. Tratamiento de reciclados en simuladores modulares	
Consideraciones generales	105
Generación de la matriz de ciclos y arcos	106
Selección del conjunto de corte	109
La selección final	113
Propuesta de trabajo	118
Capítulo 8. Procesos de transferencia de calor	
Algunas consideraciones generales	119
Las operaciones más simples	122
El intercambiador de calor	125
Uniando los elementos y otros cálculos adicionales	132
Uso de la operación unitaria horno	134
Normas TEMA: Códigos para designar intercambiadores de tubo y coraza.....	139
Propuestas de trabajo	140
Capítulo 9. Simulando el transporte de fluidos	
Consideraciones generales	141
Cañerías y bombas	142
Algunas consideraciones sobre accesorios	149

Gases en movimiento	150
Una operación lógica vinculada al uso de varios paquetes termodinámicos	154
Propuestas de trabajo	158
Capítulo 10. Simulación de operaciones de destilación	
Algunas consideraciones previas	160
El uso de la operación Short Cut Column en UniSim	162
Modelo riguroso de la columna de destilación. Grados de libertad	166
Simulación rigurosa de la columna	170
Los equipos auxiliares	177
Incorporando el condensador	179
Incorporando el reboiler	181
Separador de compuestos (Component Splitter)	183
Propuesta de trabajo	186
Capítulo 11. Simulación de reactores	
Algunas cuestiones generales	187
Ejemplo de aplicación	188
Tipos de reacciones disponibles	191
Reacciones de equilibrio y de conversión	194
Reactores no cinéticos: equilibrio y conversión	200
Reactores cinéticos: reactor tubular	203
Reactores cinéticos: Reactor Tanque Agitado Continuo	210
Propuestas de trabajo	216
Capítulo 12. Asomándonos al optimizador	
Características generales	217
Caso propuesto	218
Uso del optimizador	220
Función objetivo y restricciones	223
Propuesta de trabajo	228
Anexo. Propuestas de análisis de un proceso visto como un sistema interactuante	
Producción de ciclohexano	230
Producción de óxido de etileno	231
Índice temático	234

PRÓLOGO

Los enfoques educativos, los técnicos, en particular, al igual que un sinnúmero de aspectos de la vida del hombre, son, necesariamente, procesos evolutivos. Sin abandonar esta característica fundamental, hay momentos en la historia en los que la velocidad de cambio es tan alta, que parecen producirse quiebres en el transcurrir de la evolución.

Cuando ello ocurre, suele decirse que estamos frente a un cambio de paradigma y los educadores nos vemos en la necesidad de modificar enfoques y contenidos de que y como los enseñamos.

En el campo de la Ingeniería, el último cuarto del siglo XX es un claro ejemplo de este cambio. Tal vez como pocas veces en el pasado, un elemento juega un rol preponderante en ese proceso: la informática.

La disponibilidad de potentes ordenadores habilitó no sólo la difusión de técnicas numéricas complejas, sino el desarrollo de programas de aplicación de uso profesional.

Esto se reflejó en las líneas directrices de formación de los ingenieros.

Por ejemplo, en el caso de los ingenieros químicos, antes de la irrupción de las computadoras personales, en el ciclo profesional, se ponía un énfasis particular en el diseño de procesos, con una visión analítica y un acento muy fuerte en el manejo de técnicas numéricas y algoritmos de cálculo específicos, de fuentes de datos, criterios y valores aconsejados.

En la actualidad, debido a que gran parte de todo esto puede ser resuelto con el uso de un software adecuado, el énfasis debe centrarse en el manejo de situaciones “abiertas”, perfeccionando la capacidad de plantear y analizar alternativas, sobre la base de un amplio enfoque conceptual del problema y un eficaz uso del software de cálculo.

Esto requiere cambiar la anterior visión analítica por otra sistémica, considerando, simultáneamente, los distintos elementos que interactúan en un proceso.

En Ingeniería Química, la herramienta más adecuada para abordar este enfoque sistémico es, sin dudas, el simulador de procesos.

Básicamente, permite resolver, en forma simultánea, los balances de materia y energía que se verifican en una planta, teniendo en cuenta especificaciones dadas de presión, temperatura y composición.

Para lograrlo, dispone de modelos matemáticos de los distintos componentes o equipos así como de algoritmos que permiten estimar las propiedades termodinámicas de las mezclas que circulan a través de esos elementos. A todo esto se suma la presencia de procedimientos que permiten abordar, con éxito, la resolución de un sistema de miles de ecuaciones no lineales acopladas, un problema típico en diseño y análisis de plantas químicas.

La razón de esta obra es dotar a nuestros alumnos de un texto introductorio, donde se planteen las cuestiones y técnicas básicas de la simulación de procesos y en la que hemos querido transmitir la experiencia docente recogida en el dictado de cursos sobre el tema.

En esos cursos hemos utilizado el simulador UniSim Design de Honeywell, un programa de la familia de Hysys, cuyo uso académico, por parte del Departamento de Ingeniería Química de la Facultad de Ingeniería de la Universidad Nacional de La Plata, fuese gentilmente autorizado por la empresa propietaria del programa.

En los distintos capítulos, en la medida de lo posible, hemos querido enfatizar el análisis de los sistemas a simular, en base a la consideración conceptual de los grados de libertad que surgen de las distintas propuestas.

Después de presentar las características generales del software, decidimos incluir la consideración de los aspectos termodinámicos conexos a toda simulación: la elección del paquete encargado de predecir las propiedades de las mezclas, la incorporación de compuestos inexistentes en la base de datos disponible y la caracterización de cortes de petróleo, problema, este último, de particular relevancia para la Ingeniería Química en la región.

Se abordan, luego, la simulación de distintas unidades de proceso, como tanques de separación de fases, equipos de intercambio de calor, transporte de fluidos, torres de destilación y reactores.

Paralelamente, se van presentando las operaciones lógicas y complementos, tales como Set, Adjust, Recycle y Spreadsheet, que permiten estructurar adecuadamente las simulaciones.

Asimismo, presentamos una breve introducción al modo de trabajo cuando debe encararse la optimización de un proceso utilizando un simulador.

Al final de cada capítulo hemos agregado una o dos propuestas de trabajo, tomadas de nuestros cursos, donde se pueden ejercitar las cuestiones tratadas en cada tema. En muchas de ellas se ha buscado que la resolución implique el tratamiento de un pequeño sistema, para reforzar ese cambio de visión al que nos referíamos antes.

El libro se completa con la propuesta de simulación de dos plantas simples de producción petroquímica, en cuya solución se pueden apreciar las características interactuantes que tienen los elementos que las componen.

Por último, queremos agradecer a todos nuestros alumnos de grado y posgrado, quienes han sufrido, pacientemente, los avatares propios de este camino que los autores han hecho al andar.

CAPÍTULO 1

ASOMÁNDONOS AL SIMULADOR

Una mirada a nuestro simulador

Como ya dijimos, el objetivo de este libro es adquirir las destrezas básicas necesarias para trabajar con un simulador de procesos.

Todos los simuladores de proceso son esencialmente iguales, aunque diferentes en lo particular. Con esto queremos decir que el esquema de uso primordial de un simulador es el mismo, cualquiera sea el programa que se utilice. Las diferencias se establecen en la cantidad y calidad de información y las prestaciones disponibles en cada uno de ellos.

Por lo tanto, una vez que somos capaces de trabajar con un determinado simulador nos costará muy poco esfuerzo utilizar otro diferente. Lógicamente, deberemos aprender a manejarnos con los aspectos particulares del nuevo programa. Esto nos obliga a considerar detenidamente las singularidades del simulador que disponemos para poder trabajar con él.

La primera pantalla que encontramos al abrirlo es la que se muestra en la figura 1.

En esa ventana podemos ver que existen varias zonas bien diferenciadas:

- la barra de menú
- la barra de herramientas
- el ambiente de trabajo
- la ventana de estado (Object Status Window/Trace Window)
- la barra de estado.

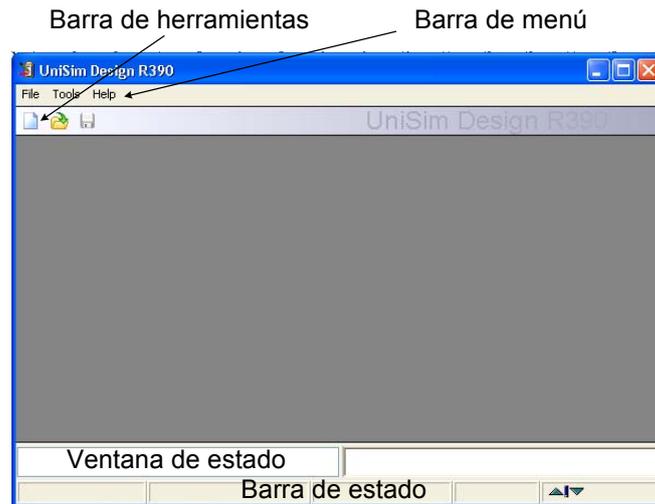


Figura 1. *Ventana inicial de UniSim Design*

A través de la *barra de menú* podremos, por ejemplo:

- Abrir un libro de trabajo nuevo, recuperar uno previo, grabar o interrumpir la operación con el simulador. Todo esto se realiza eligiendo la opción File.
- Modificar las preferencias por defecto de la simulación, por ejemplo, el sistema de unidades, como veremos más adelante. Para seleccionar esta opción, se lo hace a través del elemento Tools|Preferences. Las modificaciones que se introduzcan, si se van a utilizar en otra simulación, pueden grabarse como un archivo de extensión PRF. Al comienzo de la sesión, el simulador abre el archivo UniSim Design.PRF, por lo que, si se le dá este nombre a la modificación efectuada, se producirá el reemplazo y a partir de ese momento serán las preferencias que se adopten para todas las simulaciones que se realicen. Si se le dá otro nombre, habrá que cargar el nuevo archivo de preferencias en la simulación que se desee utilizarlas.

La barra de herramientas está formada por íconos y constituye un atajo para un acceso más rápido a algunas de las operaciones de la barra de menú. Es de naturaleza dinámica, ya que se va modificando de acuerdo al punto en que se encuentre la simulación.

La ventana de estado se divide en dos partes, una a la izquierda, que corresponde al objeto y otra, a la derecha, de rastreo, donde se van dejando registradas las distintas instancias de las operaciones de cálculo.

En la ventana de la izquierda, se indicarán los requerimientos necesarios, si hay alguno, para completar el cálculo del objeto o estará en blanco, si se han satisfecho todos los requisitos.

Las primeras operaciones

Comencemos, ahora, a trabajar con nuestro simulador resolviendo un problema simple: nos vamos a proponer *encontrar la cantidad de calor que deberemos entregar a 10 kgmol/h de una mezcla equimolecular de propano, isopentano y n-hexano, disponible a 25 °C y 4 bar, para obtener un caudal molar de 4 kgmol/h de líquidos.*

Una cuestión que debemos establecer es el sistema de unidades con el que vamos a trabajar. Al final de este capítulo tenemos una tabla con las unidades utilizadas por el simulador para las principales variables en los distintos sistemas disponibles (EuroSi, Field, SI).

Los simuladores admiten que se cambie en cualquier momento el sistema de unidades con el que se está trabajando. Es más, al introducir los datos es posible mezclar unidades y el programa se encargará de efectuar las conversiones para expresar los valores en las unidades que corresponda.

Es una buena práctica establecer, al iniciar la simulación, el sistema con el que vamos a trabajar. Esto evita que, luego, si queremos cambiar, se pierda tiempo mientras el programa realiza todas las conversiones.

Supongamos que quisiésemos usar una variante del sistema SI, donde la energía (Energy) estuviese expresada en kW en lugar de kJ/h.

Para ello, en el menú elegimos la opción Tools|Preferences, tras lo cual se abre una ventana donde, al seleccionar la solapa Variables, aparece la ventana de la figura 2. La selección de un sistema de unidades o la modificación de uno existente se realiza dentro de la opción Units.

Para hacer lo que nos proponemos vamos a generar una copia del sistema SI. Para ello oprimimos el botón Clone. Aparece, entonces, un nuevo sistema

“NewUser”; cambiémosle el nombre si lo deseamos y modifiquemos la unidad de energía a kW.

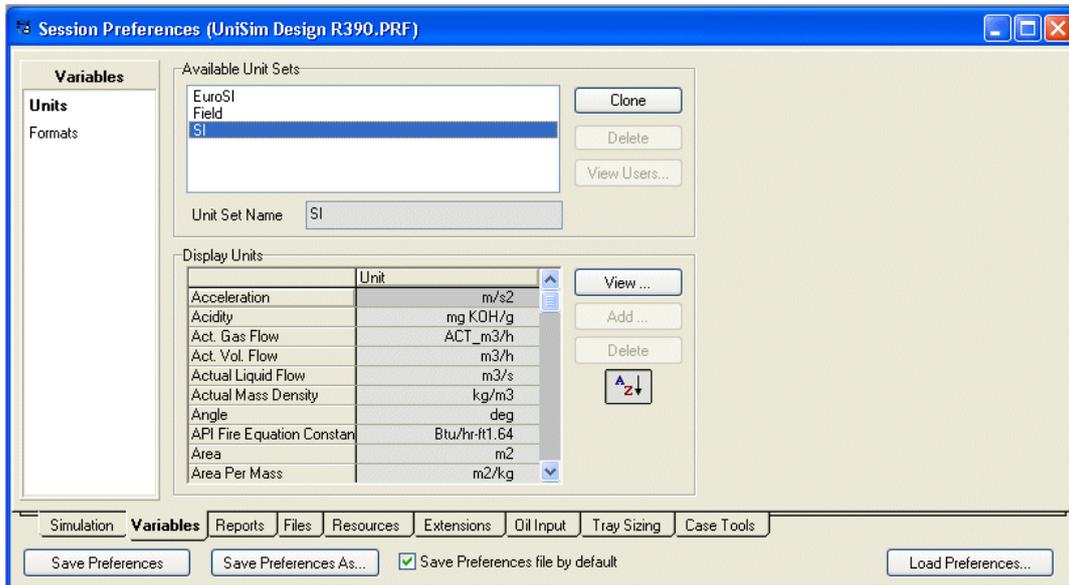


Figura 2. Solapa Variables de la Ventana Tools|Preferences

Si quisiésemos que éste fuera nuestro sistema de unidades por defecto, deberíamos dejar tildada la opción Save Preferences file by default, lo que ocasionará que al cerrar el simulador todas las modificaciones se graben automáticamente en el archivo del sistema UniSim Design.PRF. Si queremos preservar el sistema que hemos definido pero que no sea el de defecto, debemos destildar la opción y grabarlo con un nombre particular con el botón Save Preferences As..., para recuperarlo con Load Preferences, cuando sea necesario. Con la opción sin seleccionar y sin grabar la modificación, el sistema de unidades sólo será usado por el caso que abramos posteriormente.

Como en nuestra simulación vamos a trabajar en el sistema SI, deberemos seleccionarlo, desechando la modificación, antes de comenzar a trabajar en el nuevo caso.

Luego de elegir el sistema de unidades, utilicemos la opción File|New|Case para comenzar a estructurar la simulación. Tras ello, aparecerá la ventana de la figura 3.

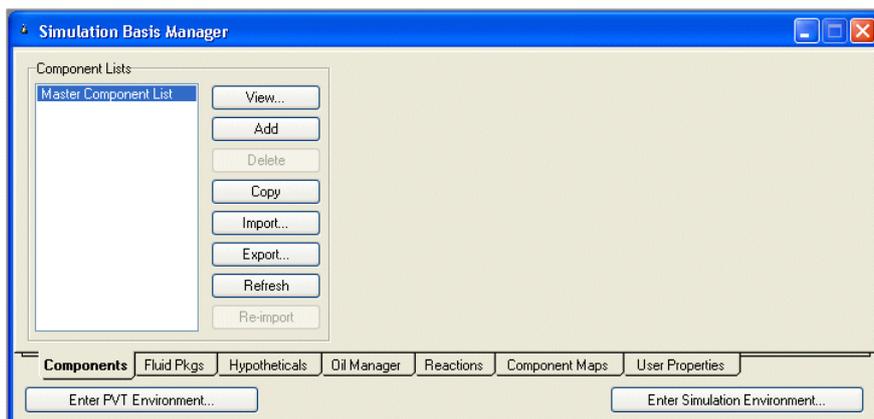


Figura 3. Ambiente termodinámico (Basis Manager)

En esta ventana podemos definir el caso termodinámico, que es la conjunción del paquete de propiedades y los compuestos a los que se le ha de aplicar. UniSim Design no admite cualquier modo de construir el o los casos. En lo que sigue adoptaremos una de las formas admitidas por el simulador, por ser la más segura en cuanto a procedimiento.

Empecemos por abrir la solapa Fluid Pkgs para seleccionar el paquete termodinámico que vamos a utilizar en la simulación. Al hacerlo, el aspecto de la ventana es el de la figura 4.

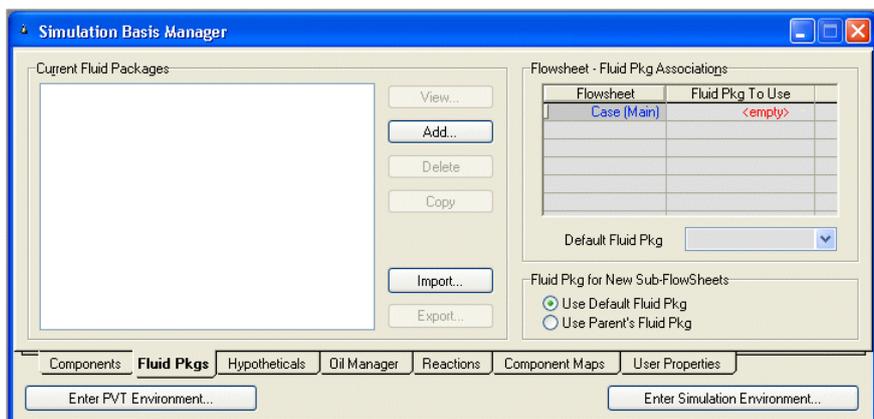


Figura 4. Solapa Fluid Pkgs

En algunos simuladores existe un asistente para la selección de los modelos termodinámicos, pero en UniSim Design no existe tal facilidad.

Para nuestro problema vamos a elegir una ecuación de estado, por ejemplo, Peng-Robinson (en el capítulo “Selección de Modelos Termodinámicos”

encontraremos la justificación del criterio de selección adoptado). En la solapa Fluid Pkgs oprimimos el botón Add tras lo cual se abre la ventana que permite definir el paquete de propiedades. Ello lo realizamos en la solapa Set Up. Para facilitar la selección podemos hacer uso del filtro de paquetes, indicando que muestre sólo las ecuaciones de estado (EOSs). En la lista que aparece elegimos Peng-Robinson. En el indicador Property Pkg aparecerá el nombre del paquete seleccionado. Si deseamos podemos darle un nombre, reemplazando el que, por defecto, asigna el simulador en el cuadro Name. Todo lo anterior se puede ver en la figura 5.

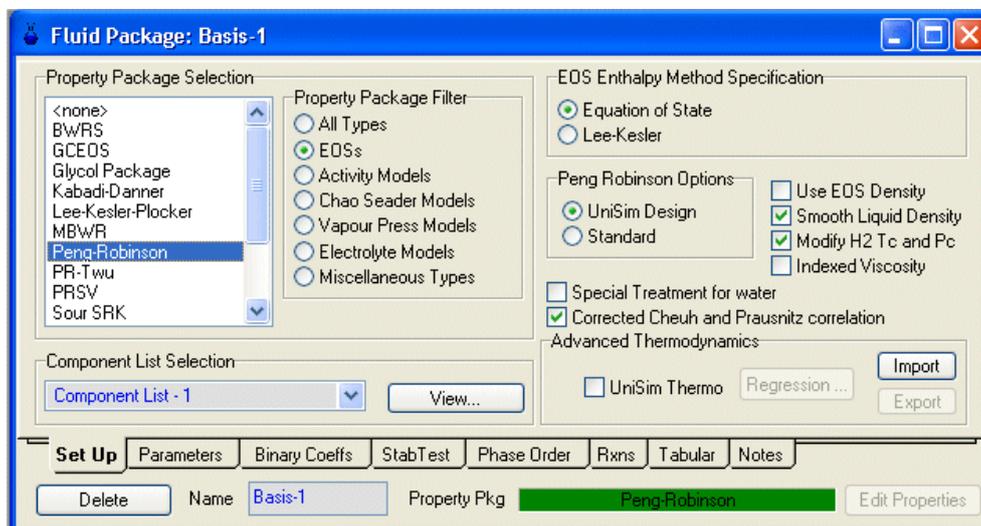


Figura 5. Selección del paquete termodinámico

Una vez seleccionado el paquete, debemos definir los compuestos, oprimiendo el botón View al lado del Component List Selection, tras lo cual aparece otra ventana, como la de la figura 6, en la que se selecciona cada compuesto y luego al apretar el botón Add Pure, el mismo pasa a la lista de seleccionados. En nuestro caso, la selección es sencilla, pero para facilitar el ingreso se puede escribir en Match la fórmula o el nombre del compuesto, indicando previamente la alternativa elegida. A medida que se va completando el ingreso, el simulador irá mostrando sólo aquellos compuestos cuya fórmula o nombre los convierte en candidatos de acuerdo al ingreso parcial realizado.

Se pueden elegir múltiples compuestos teniendo la tecla CTRL apretada.

Previamente a esto puede acotarse el conjunto de compuestos a analizar haciendo uso de los filtros disponibles, a través del botón View Filters desde donde se puede elegir una o más familias de compuestos.

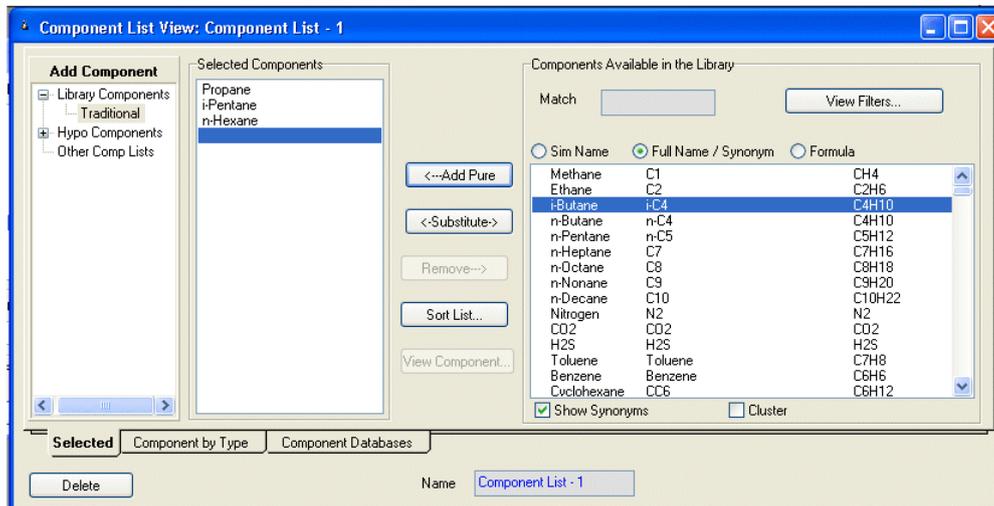


Figura 6. Selección de los compuestos

Al lado de la lista de compuestos seleccionados, se encuentran otros botones además del ya usado Add Pure. El botón Substitute intercambia el compuesto resaltado en la lista de los seleccionados por el que se encuentra resaltado en la lista global. El botón Remove, obviamente, los elimina de la lista de los activos y los devuelve a la de los elegibles. Con Sort List se modifica el orden en el que aparecen los compuestos: el elegido para moverse se colocará antes del que se seleccione en segundo término. Estos movimientos se realizan para corregir el orden originalmente planteado y lograr una mayor comodidad al momento de introducir los datos de composición.

Finalmente, con el botón View Component, se pueden ver las propiedades físicas y termodinámicas del compuesto seleccionado.

Finalizada la selección de compuestos, cerramos la ventana con la lista de componentes, tras lo cual volveremos a la ventana de la figura 5 y, al cerrarla, a la 4, donde figura la información que hemos ingresado.

Ahora estamos en condiciones de comenzar a estructurar nuestra simulación. Para ello, oprimimos el botón Enter Simulation Environment que se encuentra abajo a la derecha de la ventana.

Si en algún momento tuviésemos que volver al ambiente termodinámico, lo podemos hacer desde la entrada Simulation en el menú principal y allí elegir Enter Basis Environment, o, más directo, a través del ícono .

Armando el esquema de simulación

Cuando se ingresa al ambiente de simulación, la vista inicial depende de lo que se haya elegido en las preferencias. Las 3 vistas disponibles son:

- PFD (**P**rocess **F**low **D**iagram), que es una representación gráfica del diagrama de procesos del caso a simular;
- Workbook, donde se despliega, en forma tabular, la información de las corrientes y los equipos involucrados;
- Summary, es una ventana desde la cual se puede revisar en forma individual cada una de las corrientes de materia y energía y los equipos presentes en la simulación.

Cualquiera de ellas pueden ser desplegadas cuando se desee, pero al ingresar al ambiente, aparece sólo la seleccionada en las preferencias. La opción por defecto es PFD, como se muestra en la figura 7.

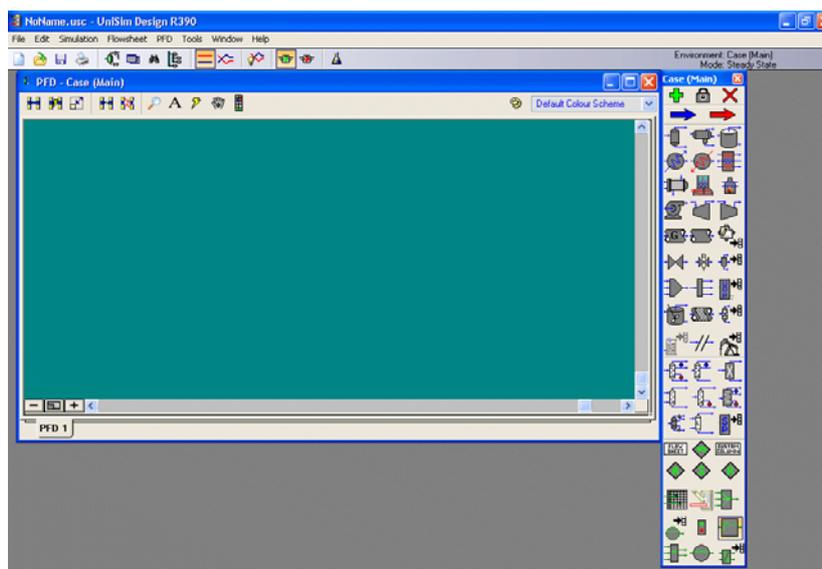


Figura 7. El PFD y la paleta de objetos

En la figura se pueden observar dos zonas principales: una, de fondo verde, la zona de trabajo, donde se construirá el diagrama de proceso de la simulación; una segunda, la paleta de objetos, que contiene los elementos más usados para estructurar una simulación. La flecha azul, por ejemplo, nos permite incorporar una corriente de materia; si tuviésemos que hacerlo con una de energía deberíamos usar la flecha roja que está a su derecha.

En la barra de menú de la zona de trabajo hay un ícono  que permite ocultar la paleta si es que está visible y molesta o mostrarla si está oculta.

Comencemos a estructurar la simulación que nos permitirá determinar la cantidad de calor a transferir a la mezcla del problema planteado mas arriba para lograr el objetivo propuesto.

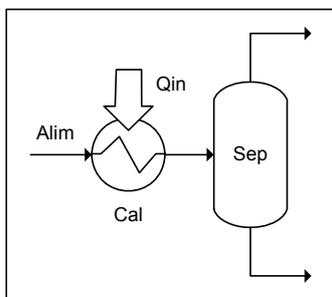


Figura 8. Caso propuesto

Un esquema posible para resolver el problema propuesto es el que se muestra en la figura 8. Para conocer la cantidad de calor que necesita la corriente Alim, es suficiente contar con un calentador y las corrientes de entrada y salida. El separador no es necesario, porque podemos especificar la fracción vaporizada deseada en la corriente de salida del calentador, pero lo incorporamos para facilitar consideraciones posteriores.

Agreguemos, entonces, una corriente de materia que representará la alimentación al sistema. Con doble clic sobre la flecha azul de la paleta, se incorpora un ícono, que la representa, a la zona de trabajo y se abre una ventana para ingresar la información que corresponde a ese objeto. Por defecto, la ventana se abre en la opción Conditions de la solapa Worksheet, en la cual es posible ingresar la información general de la corriente. Le vamos a asignar el nombre Alim e ingresaremos los valores de la temperatura, la presión y el flujo molar, de acuerdo a los datos del problema. Para la presión debemos ingresar la unidad (bar), ya que es distinta a la del sistema de unidades SI elegido, eligiéndola de la lista desplegable que se dispone.

Podemos ver que las restantes entradas permanecen vacías y aparece un aviso, indicando que debe ingresarse la composición. Lo haremos seleccionando la opción Composition. Por defecto, se supone que se

Otra forma de entrar un objeto es con un único clic en el ícono de la paleta y luego otro en la zona de trabajo.

ingresarán fracciones molares; si fuese necesario definir la composición de otro modo deberemos cambiar la base, accediendo a la lista de opciones admitidas a través del botón Basis.

En nuestro problema bastará con entrar, como fracción molar, el mismo número para cada uno de los compuestos. Al indicar que se ha terminado con los ingresos, apretando el botón OK, el simulador se encargará de normalizar los valores entrados, haciendo que su suma sea uno.

En este momento vemos que la corriente está totalmente especificada, tanto en sus variables intensivas como extensivas. Podemos ver que la corriente es un líquido en su punto de burbuja o por debajo de él.

Para continuar estructurando la simulación, cerremos la ventana de Alim. En realidad no se necesita hacerlo; el simulador la ocultará en el momento que se abra la de otro objeto. Agreguemos, ahora, en el PFD dos equipos, un calentador (Heater) y un separador (Separator). A estos últimos cambiémosles los nombres por defecto, llamándolos, por ejemplo, Cal y Sep, respectivamente. Para ello, al hacer clic sobre el objeto que lo representa en la zona de trabajo, se abre una ventana para ingresar la información que corresponde a ese objeto. Por defecto, en los equipos, la ventana se abre en la opción Connections de la solapa Design y para las corrientes, como ya vimos, en la opción Conditions de la solapa Worksheet.

Como su nombre lo indica, en Connections es donde se deben definir las corrientes de entrada y salida de los equipos, además del nombre que se le quiera dar al equipo. Por ejemplo, en la ventana del calentador, ingresemos el nombre Cal y elijamos a Alim como su corriente de alimentación seleccionándola de la lista desplegable correspondiente. En la ventana del separador, además de cambiarle el nombre, vamos a designar como Vap a la salida en fase vapor (Vapour Outlet) y Liq a la salida en fase líquida (Liquid Outlet). El simulador creará, con esos nombres, las corrientes de salida del equipo.

Puede verse que no es necesario que generemos a priori las corrientes de materia y energía vinculadas a un equipo. La corriente Alim, por ejemplo, podría haber sido generada directamente desde el calentador.

Volviendo al PFD, podemos observar los ingresos realizados. Nos falta aún, la conexión entre el calentador y el separador.

Para ello, seleccionemos el modo attach desde el ícono  de la barra de menú de la zona de trabajo (o desde el menú mediante la secuencia PFD|Selection Mode|Attach). Al posicionar el mouse sobre el equipo aparecen todos los posibles puntos de conexión. En este caso, ubicándolo sobre la salida de Cal (Product), aparece un pequeño cuadrado blanco, en ese momento oprimimos el botón izquierdo y manteniéndolo apretado arrastramos el cursor hacia la entrada de Sep. Cuando allí aparezca otro cuadrado blanco liberemos el mouse y la conexión queda hecha a través de una nueva corriente.

Anulemos el modo attach, volviendo al modo move. Cambiemos el nombre de la corriente generada a SalCal y, si es necesario, mejoremos el diagrama con PFD| Auto Position All.

Si todas las conexiones se han realizado correctamente, deberemos obtener un diagrama como el de la figura 9. En ella podemos observar que la corriente Alim que está totalmente especificada, está representada por una flecha azul, a diferencia de las restantes que lo están en celeste. El color amarillo del separador nos indica que no está resuelto y el rojo del calentador, que requiere una corriente de energía. El simulador indica este requerimiento en la zona de mensajes.

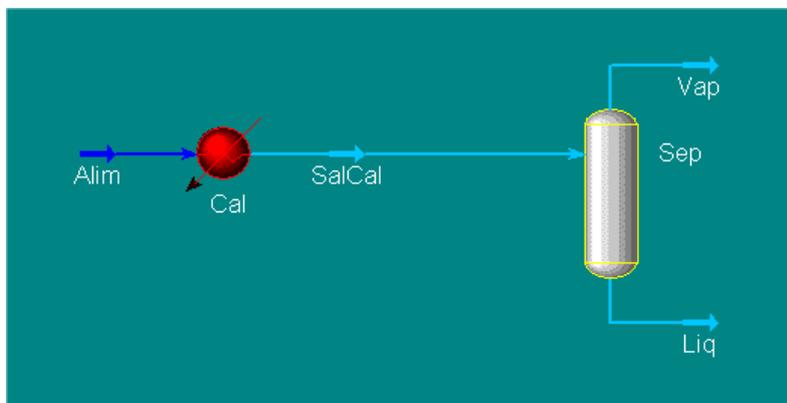


Figura 9. Paso intermedio en la simulación

Activemos Cal para ver qué modificaciones se han producido. Si nos situamos en la opción Conditions de la solapa Worksheet, veremos obviamente que, el puerto de entrada está totalmente especificado pero en el de salida sólo se encuentran los valores de composición y caudal. Allí también podemos ver el mensaje requiriendo una corriente de energía.

Otro dato que hay que fijar en el calentador, es la pérdida de carga. Como lo que queremos saber es la cantidad de calor a entregar a la corriente, sin modificar la presión, fijaremos en Cal esa pérdida igual a cero. Lo haremos eligiendo la opción Parameters en la solapa Design. Si volvemos a la solapa Worksheet, veremos que la corriente de salida tiene determinada la presión.

Para resolver la ausencia de la corriente de energía, una posibilidad es generarla en el PFD. Para ello elijamos la flecha roja en la paleta, depositémosla cerca del calentador, cambiémosle el nombre a Qin y en el modo attach, conectemos el final de la flecha con la entrada de energía de Cal. Salgamos del modo attach.

El problema aún no está resuelto. Falta ingresar un dato, la fracción líquida (o la vaporizada, que es el complemento) que se requiere. Hagámoslo, poniendo el valor del flujo molar en cualquiera de las corrientes de salida o la fracción vaporizada en la corriente SalCal. Se resuelve el sistema y se obtiene, para el flujo de calor a agregar, un valor cercano a 54 KW.

¿Y que hubiera pasado si, en lugar de un caudal molar se hubiera requerido un valor determinado del caudal másico de la corriente líquida? En este caso, el simulador carece de un algoritmo que permita determinar la temperatura y la composición de las fases líquido y vapor de la salida, como ocurría en el caso anterior, con igual cantidad de información. Debemos, entonces, generar el procedimiento que permita el cálculo para esta situación no prevista.

Es obvio que el programador no puede prever todas las circunstancias que puedan aparecer en un cálculo pero el programa debe tener alguna herramienta que permita resolverlas.

Si conociéramos presión, composición y temperatura a la entrada del separador, la operación calculará, sin problema, la condición de equilibrio. Se dispondrá, entre otros, del valor del caudal másico de la corriente líquida de salida. Es posible, entonces, realizar un cálculo iterativo modificando la temperatura a la entrada para conseguir el caudal másico requerido.

La operación a la que debemos recurrir es Adjust. Esta unidad, en esencia, no realiza otra cosa que la búsqueda de la raíz de una ecuación.

Nosotros pretendemos que el caudal másico de la corriente Liq sea igual a 450 kg/h variando la cantidad de calor que se agrega en el calentador Cal, que es un modo de modificar la temperatura.

Comencemos por quitar la especificación de 4 kgmol/h en la corriente Liq, con lo cual el sistema queda sin resolver.

Luego, agreguemos al esquema de simulación, desde la paleta de objetos, un Adjust . En la figura 10 podemos ver la información que debemos incorporar en la solapa Connections. Dejémosle el nombre ADJ-1.

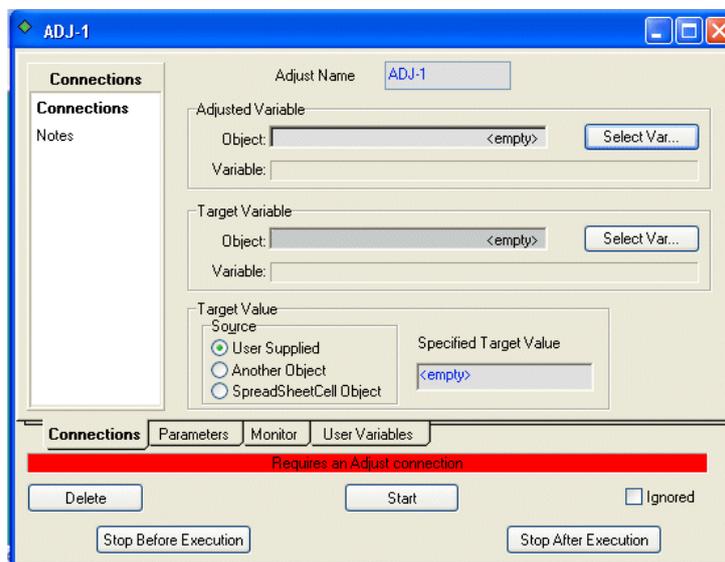


Figura 10. Solapa Connections del Adjust

En el Adjust hay tres parámetros fundamentales: 1) la variable ajustada (Adjusted Variable), que corresponde a la variable que se modificará; 2) la variable cuyo valor se quiere hacer igual a la especificación (Target Variable) y 3) el valor de esta última (Specified Target Value).

Ingreseemos la variable que el simulador debe modificar. Para ello, oprimamos el botón Select Var.. de Adjusted Variable, tras lo cual se despliega la ventana de la figura 11.

Elijamos Qin de la lista Object, tras lo cual, en el sector denominado Variable, aparece una lista asociada a la variable seleccionada. Elijamos Heat Flow y oprimamos el botón OK.

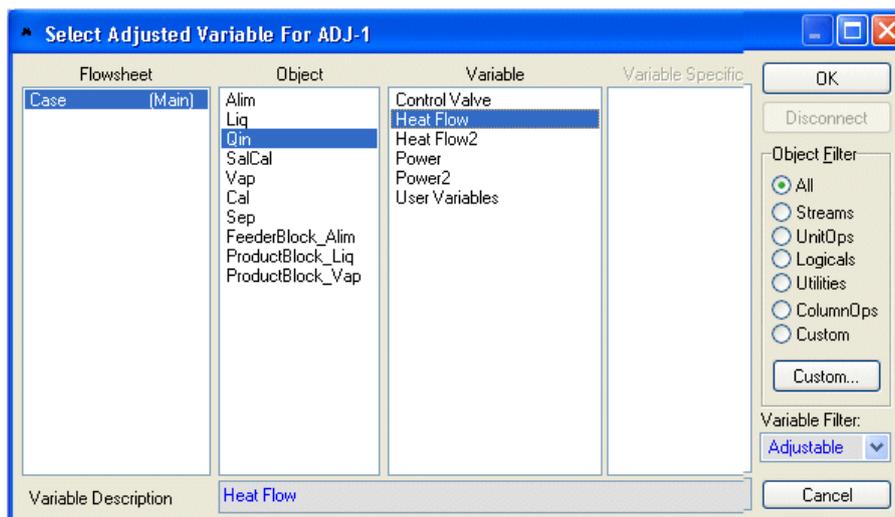


Figura 11. Selección de la variable ajustada

Repetamos el procedimiento para la variable objeto de la especificación oprimiendo Select Var en Target Variable. En este caso seleccionemos la corriente Liq y la variable Mass Flow.

Coloquemos el valor deseado de 450 kg/h en el cuadro Specified Target Value. En este momento aparece el mensaje Unknow Maximum, que nos indica que debemos ir a la solapa Parameters. Demos el valor 0.5 kg/h a la tolerancia (diferencia entre el valor requerido y el calculado por el simulador) y dejemos el valor por defecto, 2.5 kW, al tamaño del paso.

Para poder operar, el objeto Adjust requiere que la corriente Qin disponga de un valor inicial para el flujo de energía. Ingreseemos 50 kW en Qin y luego, en la ventana de Adjust, oprimamos el botón Start que se encuentra en la parte inferior de la misma, como se puede ver en la figura 10.

Si nos fijamos en la solapa Monitor de Adjust, veremos las iteraciones necesarias para llegar a la convergencia solicitada. La figura 12 muestra los resultados de las iteraciones para el valor inicial elegido.

Podemos observar que para lograr un flujo másico de 450 kg/h, equivalente a un flujo molar de 6 kgmol/h, se requiere un flujo de calor de 36.3 kW. Este valor es inferior al del caso visto anteriormente, ya que también es menor la fracción vaporizada obtenida.

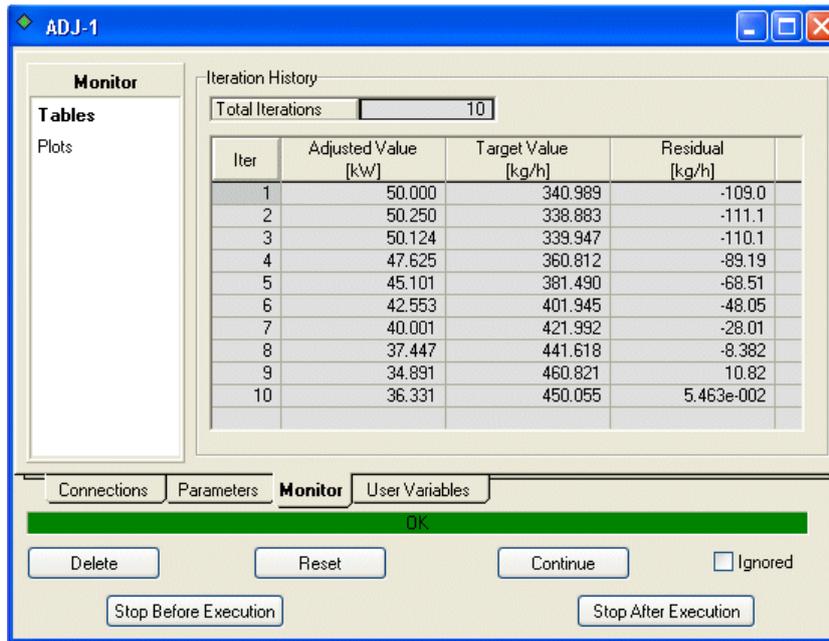


Figura 12. Resultados de las iteraciones del objeto Adjust

Terminemos, ahora, nuestra sesión de trabajo con el simulador. Primero, grabemos lo realizado mediante la opción File del menú, elijamos Save As y demos un nombre. El simulador dará automáticamente la extensión usc.

Si deseamos continuar con otra simulación, debemos cerrar la actual con la orden File|Close Case, en caso contrario, con la orden Exit, abandonamos nuestra sesión de trabajo.

En el simulador, en la barra de herramientas, como podemos ver en la figura 13, en la parte derecha de la barra de íconos, al lado del correspondiente para ingresar al ambiente termodinámico, se encuentran dos botones, uno color verde que está seleccionado y otro rojo. El primero habilita el cálculo mientras que el segundo indica, cuando está activo, que el mismo se encuentra suspendido.



Figura 13. Barra de herramientas

En la simulación que hemos realizado no ha ocurrido ningún error fatal, y, por consiguiente, nunca se ha “encendido” el botón rojo. Si hubiera ocurrido,

deberíamos haber subsanado el error para luego habilitar el cálculo a través del botón verde.

En algunas situaciones, nos puede convenir que el cálculo no comience hasta que hallamos completado cierta información. En este caso, nosotros seleccionaremos el botón rojo, ingresaremos los datos y luego activaremos el cálculo con el botón verde.

Bibliografía

- UniSim Design User Guide

UNIDADES USADAS POR LOS DISTINTOS SISTEMAS DISPONIBLES EN UNISIM DESIGN

	EuroSi	Field	SI
Temperature	°C	°F	°C
Pressure	bar	Psia	kPa
Flow	kgmole/h	lbmole	kgmole/h
MassFlow	kg/h	lb/h	kg/h
Liq. Vol. Flow	m ³ /h	barrel/day	m ³ /h
Energy	kcal/h	Btu/h	kJ/h
MolarDensity	kgmole/m ³	lbmole/ft ³	kgmole/m ³
Heat Capacity	kJ/kgmole °C	Btu/lbmole °F	kJ/kgmole °C
Viscosity	cP	cP	cP
Mass Cp	kJ/kg °C	Btu/lb °F	kJ/kg °C
MassDensity	kg/m ³	lb/ft ³	kg/m ³
UA	kJ/ °C h	Btu/ °F h	kJ/ °C h
Molar Entalpy	kcal/kgmole	Btu/lbmole	kJ/kgmole
Length	m	ft	m
Molar Volumet	m ³ /kgmole	ft ³ /lbmole	m ³ /kgmole
HeatTransferCoeff	kJ/h m ² °C	Btu/hr ft ² °F	kJ/h m ² °C
Large Heat Flow	kcal/h	MMBtu/h	GJ/h
Area	m ²	ft ²	m ²
Volume	m ³	ft ³	m ³
Velocity	m/s	ft/s	m/s
Time	seconds	seconds	seconds
Heating Value	kcal/kgmole	Btu/lbmole	kJ/kgmole
Mass Heating Value	kcal/kg	Btu/lb	kJ/kg
Heat Of Vap.	kcal/kgmole	Btu/lbmole	kJ/kgmole
Mass Heat Of Vap.	kcal/kg	Btu/lb	kJ/kg

Propuesta de trabajo

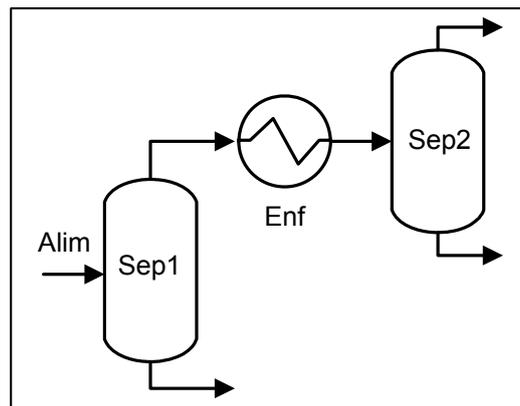
Encuentre la cantidad de calor que se necesita extraer a la fase vapor del primer separador para obtener 50 kgmol/h en la fase vapor del segundo separador.

La corriente de alimentación al sistema de 100 kgmol/h, se dispone a 150 °C y 1000 kPa y su composición es:

i- pentano	n- pentano	n-hexano	n-heptano
0.2	0.4	0.25	0.15

Adopte una pérdida de carga en el enfriador igual a 40kPa.

Indique además, cual es el flujo del n-C6 en la fase líquida.



CAPÍTULO 2

ESTRUCTURANDO LA SALIDA DE INFORMACIÓN

Uso del Workbook

Ya hemos visto que el Workbook despliega, en forma tabular, la información de las corrientes y los equipos involucrados en la simulación. Pero, si en la simulación se tuviesen, por ejemplo, varios intercambiadores de calor y nosotros quisiésemos tener una solapa donde se encuentren exclusivamente estos equipos, deberíamos agregarla. UniSim nos permite incorporar páginas adicionales, así como, agregar o borrar variables asociadas a las corrientes y equipos que se muestran en cada página o modificar el formato de esos valores.

Para comprender las potencialidades de esta herramienta, lo haremos en base a un problema simple: nos vamos a proponer *encontrar la cantidad de calor que deberemos entregar a 10 kgmol/h de una mezcla equimolecular de propano, isopentano y n-hexano, disponible a 25 °C y 4 bar, para obtener un caudal molar de 4 kgmol/h de líquidos*. En la figura 1 se muestra un esquema posible para resolver el problema propuesto.

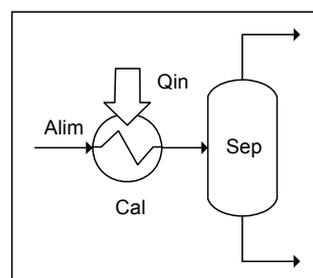


Figura 1. Caso propuesto

Una vez realizada la simulación, abramos el Workbook. El aspecto de las distintas solapas depende de la versión del simulador que dispongamos, en este caso, como podemos ver en la figura 2, aparece una solapa Streams donde se encuentran las corrientes de materia junto a las de energía y otra para las operaciones unitarias.

No debemos olvidar que el Workbook es, como el PFD, una representación de nuestro caso. Por lo tanto, si eliminamos desde él una corriente o equipo,

posicionándonos sobre su nombre y oprimiendo la tecla de borrado, lo estaremos haciendo de la simulación.

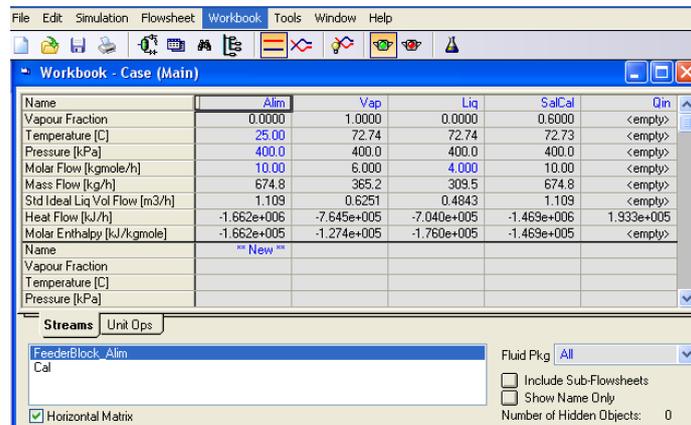


Figura 2. Solapa Streams del Workbook

Si queremos que en el Workbook no aparezca alguna corriente o equipo, lo que debemos hacer, como veremos más adelante, es ocultar esos objetos.

En la figura 2 está seleccionada la corriente Alim. En el sector inferior, aparecen las operaciones unitarias vinculadas a la misma (si se tratase de una operación, aparecerían las corrientes de entrada y salida de la misma). En este caso, Alim ingresa al calentador Cal y no proviene de ninguna otra operación. El simulador indica esto atribuyendo el origen a FeederBlock, que representa el exterior a la simulación. Si fuese una corriente producto que no ingresase a otro equipo, el exterior lo representa como ProductBlock. En todos los casos específica a que corriente se refiere, agregando *_nombre de la corriente*.

Debajo de este sector aparece seleccionada la opción Horizontal Matrix, que permite definir si las corrientes aparecerán en columnas, como en este caso, o en filas.

Si hacemos doble clic sobre cualquier celda, excepto las de los flujos, se abre la ventana de propiedades de la corriente. Si lo hacemos sobre las celdas de los flujos, se abre una ventana con las composiciones, en forma de fracción molar, másica o volumétrica dependiendo del flujo que se haya elegido. Si se realiza la misma operación en el sector inferior sobre las operaciones unitarias involucradas, se abre la ventana de las mismas.

Si accedemos a la solapa Unit Ops, nos encontraremos con una ventana que tiene el aspecto de la figura 3 y desde allí se pueden realizar las distintas opciones. Si bien es posible, como en el caso de las corrientes, agregar o borrar una operación, por sencillez, nosotros lo haremos siempre desde el PFD. El único botón realmente útil en este caso, es el que nos permite abrir la ventana del equipo seleccionado e ingresar o modificar información.

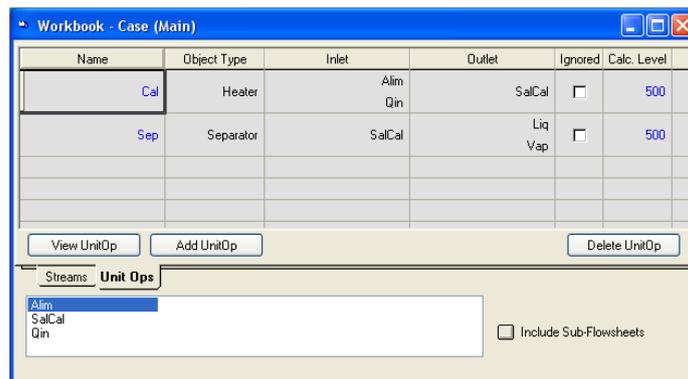


Figura 3. Solapa Unit Ops del Workbook

Cuando el Workbook se encuentra activo, se incorpora en la barra de menú el elemento Workbook, como lo podemos ver resaltado, en la figura 2.

Los comandos asociados con este menú son los siguientes:

- Setup: permite el manejo de las distintas solapas del Workbook, como veremos más adelante.
- Export: contiene un submenú mediante el cual se puede exportar la estructura del Workbook o de algunas páginas del mismo.
- Import: es la operación inversa a Export.
- Page Scope: permite, en ciertos casos, mostrar u ocultar los objetos de los subflowsheets. Lo mejor es hacerlo activando el botón *Include Sub-Flowsheets*, en la solapa activa.
- Order/Hide/Reveal Objects: mediante esta opción se pueden ordenar y ocultar los objetos del Workbook. En la figura 4 podemos ver que hemos ordenado

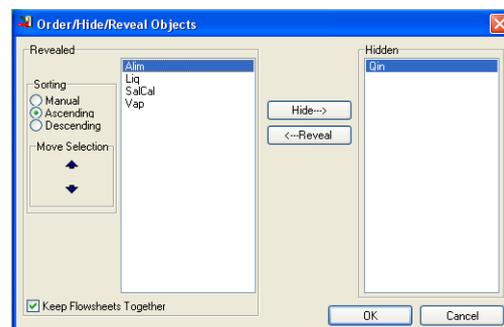


Figura 4. Ordenamiento en el Workbook

los nombres de las corrientes de materia en forma ascendente (la opción por defecto es Manual) y que esté oculta la corriente de energía.

Habíamos dicho que podíamos agregar páginas adicionales al Workbook,

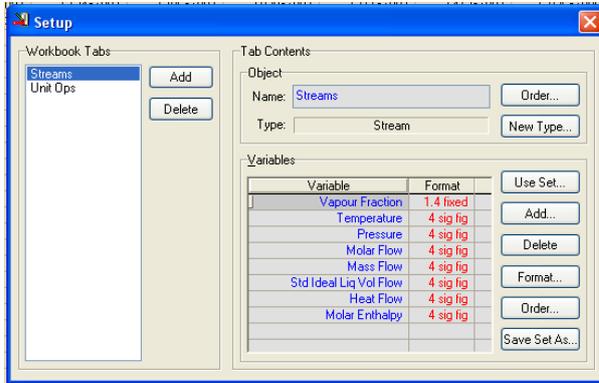


Figura 5. Opción Setup del Workbook

cambiar las variables que se muestran en cada página o modificar el formato de los valores. Esto se hace mediante la opción Setup. Al seleccionarla, aparece una pantalla con el aspecto de la figura 5.

En el sector de la izquierda se encuentran los nombres de las

solapas existentes en el Workbook, pudiéndose desde allí, borrar alguna de ellas o agregar nuevas. En el sector de la derecha, además del nombre de la solapa activa y el tipo de objetos contenidos en la misma, se indica el formato (exponencial, un número fijo de decimales o un número de dígitos significativos) y la precisión con el que se verán los valores de las variables. Esto último se puede modificar con el botón Format.

Veamos ahora cómo se puede agregar una nueva solapa. Supongamos que queremos generar una con la densidad molar y el peso molecular de las corrientes. Estas son propiedades de corrientes de materia, por lo cual deberemos generar una solapa que contenga sólo objetos de ese tipo y, luego, hacer que se muestren esas propiedades.

Para hacerlo, oprimamos el botón *Add* del sector de la izquierda de la ventana de la figura 5 y se abrirá otra ventana que nos permitirá seleccionar el tipo de objetos que contendrá la nueva solapa. Expandamos el ícono *Streams* para visualizar los subítems, seleccionemos *Material Stream* y oprimamos el botón *OK* (Figura 6). Al cerrarse la ventana retornamos a la anterior, donde si lo deseamos, podemos cambiar el nombre que el

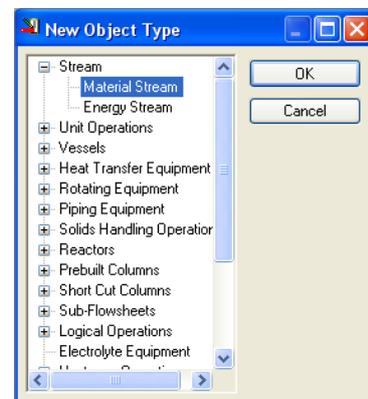


Figura 6. Agregando solapas

simulador dá a la nueva solapa, por “Otras Prop” y borrar todas las variables por defecto con el botón *Delete* del grupo Variables del sector inferior de la ventana.

Ahora concretemos lo que nos propusimos oprimiendo el botón *Add* y desde la nueva ventana elijamos, primero, la densidad molar, como podemos ver en la figura 7 y oprimamos el botón *OK*.

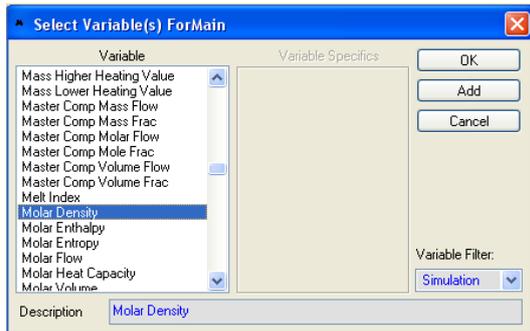


Figura 7. Agregando una fila

Repitamos el procedimiento para el peso molecular.

Si esto último lo hubiéramos hecho en la solapa Streams no hubiéramos tenido necesidad de generar una nueva. El procedimiento adoptado ha sido al sólo efecto de ver como generar una nueva solapa.

Del mismo modo podríamos agregar la composición de las corrientes, explicitando la totalidad de los compuestos o sólo de algunos.

Una vez estructurado el Workbook, podemos imprimir la información contenida, en forma parcial o en su totalidad. Para ello, es necesario tenerlo abierto y desde la barra del título, con el botón derecho del mouse seleccionar *Print Datasheet*.

Se abre una ventana como la de la figura 8 y desde allí podemos elegir las páginas a imprimir, optar por imprimir sólo los objetos contenidos en las páginas seleccionadas sobre los que hemos realizado alguna especificación (opción *Specs Only*) o generar un

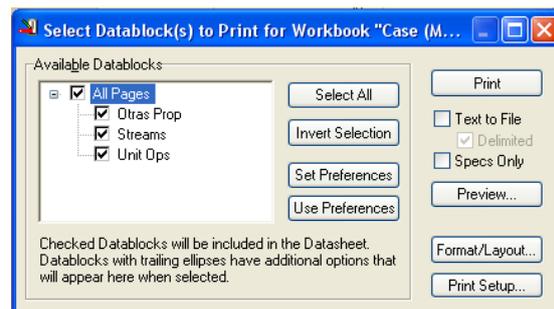


Figura 8. Opciones de impresión

archivo de texto en lugar de enviarla directamente a la impresora. Usando el botón *Format/Layout* podemos elegir el sistema de unidades en el que se expresarán los resultados impresos, así como ciertos aspectos formales de la salida, tal como marcar aquellos valores que hemos introducido como especificación.

Otra forma es oprimir el botón derecho, teniendo seleccionada la corriente en el PFD.

Si lo deseamos, podemos imprimir sólo la información de una corriente. Para ello, una posibilidad es situarnos, en el Workbook, en cualquier celda de la columna de la corriente deseada y oprimir el botón derecho del mouse. Al hacerlo, podremos seleccionar, en la ventana que se ha de abrir, la información que deseamos imprimir: Worksheet (Condiciones, composición, propiedades, etc.), Attachments (Operaciones unitarias y utilidades), User Variables, etc.

Reportes

Otra forma de imprimir la información de la simulación, en forma personalizada y en el orden que el usuario lo desee, es usando la opción Tools|Reports del menú. Al hacerlo, se abre una ventana desde la cual se puede crear un “reporte” o editarlo, si ya existe uno.

Si elegimos crear uno, en el próximo paso podríamos cambiar el nombre que el simulador dá por defecto, pero lo imprescindible es seleccionar la información que se incluirá en el informe. Para ello debemos oprimir el botón *Insert Datasheet*, tras lo cual aparece una ventana, como la de la figura 9. Allí se encuentran dos botones de radio que permiten mostrar, para una posterior elección, los objetos en forma individual o por categorías (Stream, Unit Operations, Vessels, etc.), pudiéndose, en este caso, desplegar las distintas alternativas.

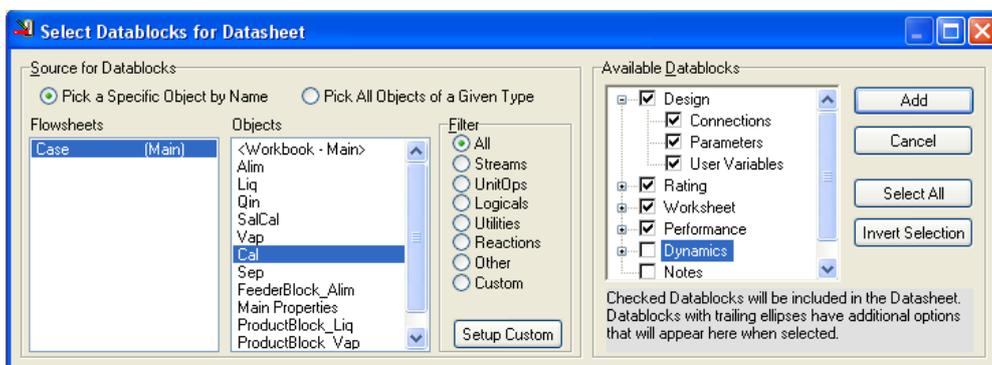


Figura 9. Selección de la información a imprimir en el reporte

Si se elige la primera de las opciones, aparecerá un filtro, a través del cual se restringe la lista a los objetos de un mismo tipo.

Tengamos presente que, si se elige por categoría, se imprimirán todos los objetos de la misma.

Una vez elegido el objeto, con el botón *Add*, lo agregamos al conjunto a ser impreso; pero antes de hacerlo, debemos elegir la información que se ha de imprimir. Esto lo hacemos desde el sector de la derecha, donde aparecen las distintas solapas propias de la ventana del objeto, con sus opciones, que se pueden desplegar u ocultar.

Tengamos en cuenta que la información contenida en una opción se imprime en forma completa. Si, por ejemplo, para las corrientes de materia, seleccionamos la opción *Conditions* de la solapa *Worksheet*, no podremos evitar que en el informe aparezca la entalpía molar de las corrientes, aunque este valor no nos interese. En este sentido, la impresión del *Workbook* nos da más flexibilidad.

Asimismo, las eliminaciones que hagamos para un objeto determinado, serán válidas para todos los objetos del mismo tipo.

Por último, y como un detalle, podemos ver que es posible imprimir desde aquí, algunas o la totalidad de las páginas del *Workbook*, al igual que lo hacíamos, oportunamente, con la orden *Print Datasheet*.

Tablas en el ambiente de trabajo

En el ambiente de trabajo, complementando la información del PFD, podemos incorporar tablas con el valor de las variables de corrientes específicas o de la totalidad de ellas.

Si deseamos generar la de una corriente en particular, nos posicionamos sobre ella y desde el menú que se despliega al oprimir el botón derecho del mouse, elegimos *Show Table*.

Al hacerlo aparece, junto a la corriente, un cuadro donde se muestran los datos de temperatura, presión y flujo molar de la misma. Esta información la podemos modificar, removiendo o agregando otras variables.

Supongamos que vamos a reemplazar el flujo molar total por los correspondientes a cada uno de los compuestos.

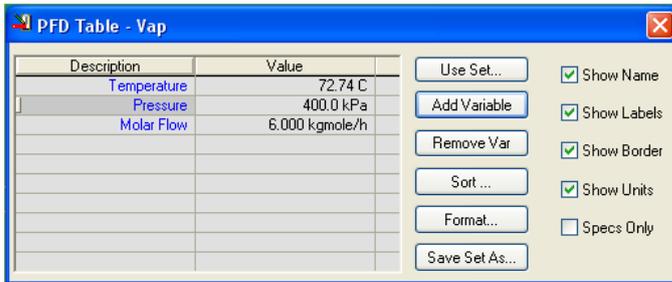


Figura 10. Selección de las variables de la tabla

Para hacerlo, nos ubicamos sobre la tabla y desplegamos, con el botón derecho, un menú de alternativas, del que elegimos *View Properties*. Se despliega, entonces, una ventana como la de la

figura 10. Allí nos ubicamos sobre Molar Flow y la eliminamos. Luego, con el botón *Add Variable*, vamos incorporando los caudales molares individuales, eligiendo, en la ventana que se despliega, la variable *Comp Molar Flow* para cada uno de los compuestos.

La tabla nos quedará como la que muestra la figura 11.

Vap		
Temperature	72.74	C
Pressure	400.0	kPa
Comp Molar Flow (Propane)	2.9538	kgmole/h
Comp Molar Flow (i-Pentane)	1.9630	kgmole/h
Comp Molar Flow (n-Hexane)	1.0832	kgmole/h

Figura 11. Aspecto de una tabla

Si, en cambio, deseamos que la tabla contenga la totalidad de las corrientes, podemos hacerlo

oprimiendo el botón derecho del mouse en el ambiente de trabajo, seleccionar *Add Workbook Table* en el menú que se despliega y elegir la solapa del Workbook que deseamos mostrar. Tengamos presente que el simulador admite generar tablas sólo de aquellas solapas vinculadas a corrientes, con la estructura que hemos definido para ellas.

Ambos tipos de tablas se pueden ocultar o borrar como se lo hace con cualquier objeto del PFD.

Estudios de variaciones: DataBook

En la figura 11 vemos que el flujo molar de propano en la fase vapor es de aproximadamente 3 kgmol/h, que corresponde a un aporte de calor en Q_{in} de $1,933 \cdot 10^5$ kJ/h.

Podría interesarnos ver como se modifica el flujo de ese compuesto en esa fase, cuando se varía Q_{in} . Obviamente, una forma sencilla sería cambiar directamente el valor del Heat Flow, repitiendo el procedimiento tantas veces como valores diferentes quisiéramos analizar.

UniSim dispone de una herramienta que permite hacer automáticamente estos cambios dentro de un rango determinado y muestra los resultados, para las variables seleccionadas, en forma tabular o gráfica.

El acceso a esta herramienta se realiza desde la opción DataBook del menú Tools. Al hacerlo, se abre una ventana como la de la figura 12. En la solapa Variables, presionamos el botón Insert para elegir las variables que integrarán el estudio.

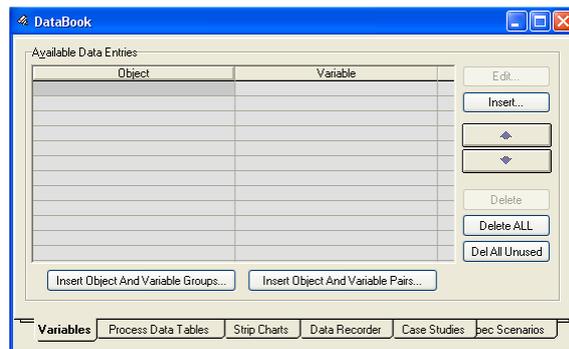


Figura 12. Solapa Variables del DataBook

Al hacerlo, aparece una ventana en la que iremos definiendo el objeto al que pertenece cada variable, por ejemplo, para Q_{in} , la variable en este caso es Heat Flow. Podría ser necesaria una especificación adicional como ocurre cuando elegimos el caudal molar de propano, donde, sucesivamente, seleccionaremos el objeto Vap, la variable Comp Molar Flow, para luego, especificar que se trata de propano, como podemos ver en la figura 13. Cuando completamos esta operación, damos OK y el simulador vuelve a la ventana general del DataBook.

Allí debemos ir a la solapa Case Studies para definir los casos a analizar y, en cada uno de ellos, identificar las variables que se consideran, según su naturaleza, y establecer los límites y el paso de la o las variables independientes.

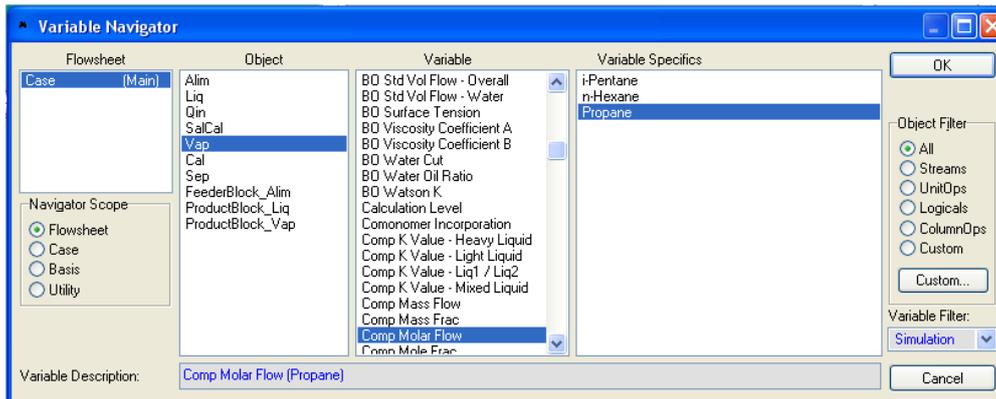


Figura 13. Selección de las variables en el DataBook

En este caso vamos a considerar como variable independiente el aporte de calor y como variable dependiente al caudal molar de propano.

Debemos permitir que se modifique el valor en Q_{in} , lo que en la simulación tal como se ha realizado hasta aquí, ese es un valor calculado. Para permitirlo, quitamos la especificación que introdujimos en el flujo molar de la fase líquida.

En general, el problema deberá tener tantos grados de libertad como variables independientes se vayan a establecer, o, si no los tiene, las variables que se fijarán como independientes deben estar especificadas como datos. Esta última alternativa es la mejor, ya que siempre se contará con un caso base inicial.

Para nuestro análisis se puede ver que el punto de burbuja de la corriente de ingreso al separador, requiere un aporte de calor algo menor a $1,2 \cdot 10^4$ kJ/h y el de rocío algo superior a $3 \cdot 10^5$ kJ/h, por lo cual, tomaremos como límites para el análisis los valores $2,5 \cdot 10^4$ kJ/h y $3 \cdot 10^5$ kJ/h. En la definición del límite inferior se ha considerado la conveniencia de disponer de caudales molares apreciables.

Ahora debemos definir el caso. Para hacerlo oprimimos el botón Add de la solapa Case Studies, donde nos encontramos. La naturaleza de las variables, dependientes e independientes, se fija seleccionando la casilla correspondiente. Luego, con el botón View, accedemos a otra ventana donde, además de poder personalizar el nombre del caso, debemos ingresar los límites y el paso de las variables independientes o la cantidad de puntos a considerar en el análisis.

En nuestro caso vamos a tomar 11 valores, con lo cual el ingreso de la información tiene la forma que podemos ver en la figura 14.

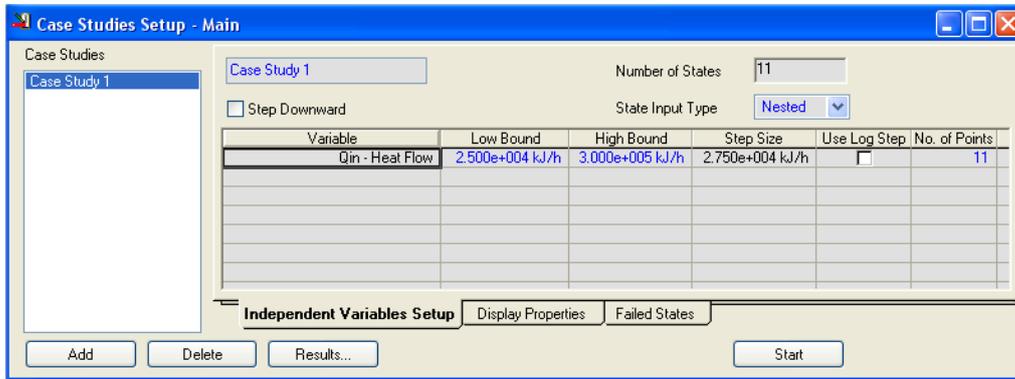


Figura 14. Definición de parámetros de la variable independiente

Una vez que completamos esta información, se habilita el botón Start, que realiza el estudio solicitado. El botón Result nos permite ver los resultados obtenidos en forma gráfica o tabular, según sea la opción que elijamos, como observamos en la figura 15.

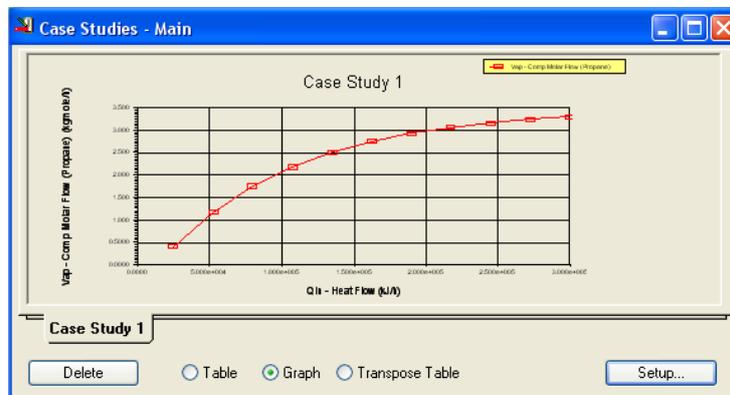


Figura 15. Resultados del caso en estudio

Bibliografía

- UniSim Design Operations Guide

CAPÍTULO 3

SELECCIÓN DE MODELOS TERMODINÁMICOS

Introducción

Cualquier simulación de un proceso requiere disponer del valor de las propiedades fisicoquímicas y termodinámicas de las mezclas de compuestos que circulan, o han de circular, entre los distintos equipos de la planta, en todas las condiciones de composición, presión y temperatura que puedan llegarse a verificar en la operación de la misma.

Esto, obviamente, es prácticamente imposible y debemos hacer uso de técnicas de predicción que permitan estimar esos valores.

La adecuada selección de estas técnicas será crucial para un cálculo preciso de los equipos y corrientes de la planta simulada.

Esto es, no basta con que nuestro simulador cuente con los mejores algoritmos de cálculo, los más rápidos y estables. Si hemos realizado una elección incorrecta del método de predicción de propiedades los resultados que obtengamos en la simulación tendrán poco o nada que ver con la realidad.

Resulta obvio que es imposible realizar una consideración pormenorizada de todas las posibles mezclas de compuestos que pueden presentarse en la simulación de una planta química, a fin de poder establecer el método de predicción más adecuado para cada una de ellas. Solo podemos abordar la cuestión en forma general, tratando de establecer criterios de selección y análisis, con un rango de validez más o menos amplio.

Antes de hacerlo, detengámonos a considerar el comportamiento de los compuestos y sus mezclas, en particular el equilibrio líquido vapor (ELV), desde un punto de vista molecular.

El ELV y las interacciones moleculares

Cualquier propiedad de un compuesto o de una mezcla de ellos está determinada por las fuerzas que existen entre los átomos, dentro de las moléculas, y entre éstas, en la masa del compuesto o mezcla.

De nuestros cursos de Química General podemos recordar la justificación del comportamiento “anómalo” del agua –un líquido en condiciones normales de presión y temperatura, cuando debería ser un gas– como consecuencia de fuerzas intermoleculares que otorgaban al compuesto una cohesión particular.

El agua es un caso particular de moléculas polares. En ellas existen enlaces covalentes entre átomos de diferente afinidad eléctrica. Los electrones compartidos, entonces, se desplazan hacia el átomo más electronegativo (el O en el caso del agua) volviendo electropositivo el otro extremo del enlace. Sobre este dipolo aparecerán fuerzas de atracción entre el extremo positivo de una molécula y el negativo de otra.

El hidrógeno es, quizás, el caso paradigmático, con la formación del llamado enlace o puente de hidrógeno con otros átomos electronegativos además del oxígeno, como el flúor, el cloro o el nitrógeno.

En otros casos la molécula es no polar, como en los hidrocarburos alifáticos, por ejemplo. Allí, la electronegatividad del carbono es baja y, en consecuencia, el enlace covalente no se polariza y aunque está presente el hidrógeno no se verifica la existencia de puentes.

No obstante, existen otro tipo de fuerzas a nivel molecular, las tipo van der Waals, repulsivas a corta distancias y de atracción al separarse las partículas.

No es la intención de este capítulo ahondar sobre estas cuestiones pero sí tenerlas en cuenta como para poder abordar la selección del método de predicción de propiedades con una cierta sustentación teórica.

En principio, podríamos comenzar por ejemplificar lo dicho sobre la interrelación de las propiedades de los compuestos y las fuerzas existentes a nivel molecular considerando el punto de ebullición normal de los 10 primeros hidrocarburos alifáticos normales.

En la figura 1 se encuentran graficados tales valores. De algún curso introductorio de Química general quizás recordemos la mención de la dependencia de esas temperaturas con el *peso molecular* de los compuestos. Sin embargo, no se trata de una consecuencia de la acción de fuerzas de tipo gravitacional, como se puede deducir de la figura 2, donde se han representado los puntos de ebullición normal de los isómeros n-pentano, 2-metilbutano y 2,2 dimetilpropano, de peso molecular 72 y con 0, 1 y 2 cadenas laterales, respectivamente.

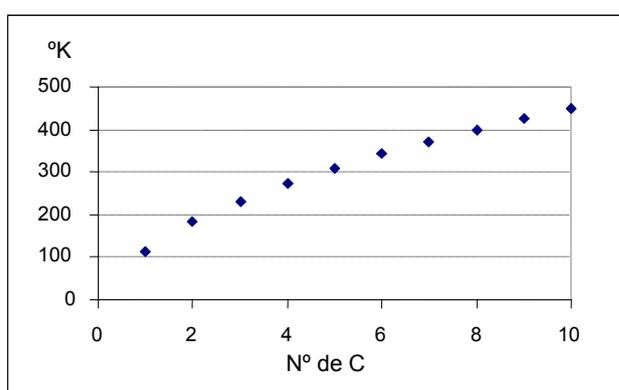


Figura 1. PEB vs longitud de cadena

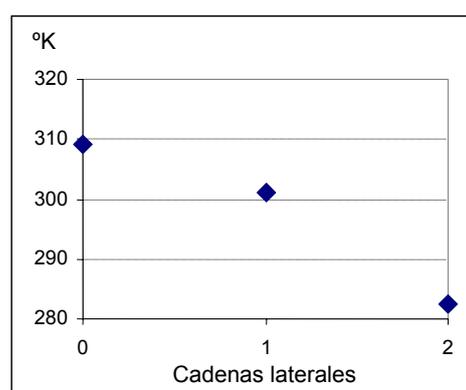


Figura 2. PEB de isómeros de C5

Una línea de pensamiento que permite explicar lo que se muestra en ambos gráficos parte de la consideración de las fuerzas intermoleculares que existen en el seno de los hidrocarburos.

Si tomamos dos moléculas del compuesto C_nH_{2n+2} de la figura 1 es fácil ver que existen n^2 interacciones $C \rightarrow C$, $n(2n+2) C \rightarrow H$ y $(2n+2)^2 H \rightarrow H$. Es obvio que, a medida que aumenta el número de átomos de C se incrementan las interrelaciones y, por ende, las fuerzas a nivel molecular.

Esto se traduce en un aumento del punto de ebullición o, lo que es equivalente, en una disminución de la presión de vapor.

Aparentemente, con lo anterior podríamos explicar el comportamiento de la figura 1 pero no el de la 2. Sin embargo, si tenemos en cuenta que la existencia de cadenas laterales “enmascara” la presencia de algunos átomos (el C sobre el que están ubicadas, por ejemplo), este ocultamiento parcial debilita las interacciones de esos átomos con los de las otras moléculas. Es de esperar,

por tanto, que, a medida que aumenta la ramificación, baje el punto de ebullición.

Podemos aplicar estas líneas de razonamiento a las mezclas binarias, por ser las de tratamiento más sencillo y, luego, extender, como criterios heurísticos, las conclusiones obtenidas a mezclas multicomponentes.

Ahora la cuestión básica a considerar será cómo se ven afectadas las fuerzas intermoleculares que existen, en estado puro, en un compuesto A por el agregado de B, el otro integrante de la mezcla binaria.

Obviamente, a muy bajas concentraciones de B los efectos no resultarán notorios pero lo que nos interesa es analizar la gama completa de composiciones.

Al agregar a A una cantidad significativa de B nos podemos encontrar frente a alguna de estas tres situaciones:

- la interacción entre las moléculas de A y de B en la mezcla es similar a la que existe entre las moléculas de A o B en estado puro;
- la interacción entre las moléculas de A y de B en la mezcla es más débil que la que existe entre las moléculas de A o B en estado puro;
- la interacción entre las moléculas de A y de B es más fuerte que la que existe entre las moléculas de A o B en estado puro.

En el primer caso, el comportamiento de la mezcla seguirá una ley de características aditivas, como la de Raoult para el caso del equilibrio líquido-vapor

$$y_i P = p_i^{sat} x_i \quad i = 1, 2$$
$$\Rightarrow P = p_1^{sat} x_1 + p_2^{sat} (1 - x_1)$$

y a una determinada temperatura la presión total en la fase gaseosa es una combinación lineal de las presiones de vapor de los componentes puros. En estos casos, el comportamiento de la mezcla se considera ideal.

Consideremos, por ejemplo, la mezcla de dos alcanos normales. La estructura de las moléculas permite augurar que las interacciones entre átomos de moléculas de hidrocarburos diferentes serán similares a las que existen entre moléculas del mismo hidrocarburo. Esto se reforzará cuanto menos diferencia exista en el número de átomos de C.

En las otras dos situaciones planteadas para la mezcla de A con B existe una desviación de la idealidad. Cuando la interacción es más débil, la presión de la fase gaseosa será más alta que la que correspondería al comportamiento ideal. Tendremos, en consecuencia, un apartamiento positivo de la ley de Raoult. La mezcla resulta ser más volátil que si fuera ideal y, de existir un azeótropo, este tendrá una temperatura de ebullición menor que la de cualquiera de los componentes puros.

En el otro caso existe un apartamiento negativo debido a una mayor afinidad o interacción entre una molécula de A y una de B que entre dos moléculas de A o dos de B.

La mezcla es menos volátil y, si existe un azeótropo, tendrá un punto de ebullición superior al de los compuestos puros.

La desviación positiva se produce, típicamente, en la mezcla de una sustancia polar como agua o alcohol y una no polar, como un hidrocarburo.

Para el otro caso, una mezcla binaria con desviación negativa de la ley de Raoult puede ejemplificarse con acetona y cloroformo. Aquí existe una molécula, el Cl_3CH , que tiene un “exceso” de átomos electronegativos, o dadores: tres Cl con un único átomo de H disponible para formar puentes. En el otro compuesto, CH_3COCH_3 , se produce la situación inversa, un oxígeno frente a seis hidrógenos. En consecuencia, la mezcla equilibrará estas asimetrías, aumentando las fuerzas intermoleculares respecto de los compuestos puros y habrá un aumento del punto de ebullición o, lo que es lo mismo, un descenso de la presión de vapor.

Termodinámica del ELV – Métodos de predicción

El equilibrio termodinámico entre las fases vapor y líquida de un sistema multicomponente requiere tres condiciones:

- equilibrio térmico, para lo cual la temperatura debe ser igual en ambas fases;
- equilibrio mecánico, que implica igualdad de la presión en ambas fases;

- equilibrio químico, que exige la igualdad de la fugacidad en la mezcla de cada componente en cada fase.

Esta última condición se expresa de distintas maneras, según el grado de idealidad que se admita para el sistema. Así:

a) Si ambas fases se comportan en forma ideal, el equilibrio se plantea a través de la ley de Raoult

$$y_i P = x_i p_i^{sat}$$

b) Si existe una ligera o moderada no idealidad en ambas fases se puede utilizar una formulación del equilibrio que incluye sendos coeficientes de fugacidad ϕ , los que se calculan a partir de una ecuación de estado para sistemas reales:

$$\phi_i^V y_i P = \phi_i^L x_i P$$

c) Si la fase líquida presenta una marcada no linealidad, por ejemplo, debido a la existencia de puentes de hidrógeno, acudiremos al modelo de soluciones, a través del coeficiente de actividad γ :

$$y_i \phi_i^V P = \gamma_i x_i \phi_i^{sat} p_i^{sat} POY_i$$

En la expresión anterior se agrega, además, el factor de Poyting POY_i , que permite tener en cuenta la influencia de la variación de la presión entre la presión de vapor p^{sat} y la del sistema P .

d) Debemos tener presente que el apartamiento de la idealidad se produce en la fase líquida en condiciones de presión y temperatura menos severas que para la gaseosa; esto es, la fugacidad en el vapor se sigue expresando por $y_i P$ pero en el líquido se requiere hacer uso del modelo de soluciones. Tendremos, en este caso, una ley de Raoult modificada como expresión de la igualdad entre fugacidades:

$$y_i P = \gamma_i x_i p_i^{sat}$$

La consideración del ELV en el caso de gases como el N_2 merece un párrafo aparte. En este caso, se trata de un gas que se encuentra disuelto en el líquido y la fugacidad no tiene relación, como antes, con un cambio de fase, por lo que

corresponde aplicar una extensión de la ley de Henry más que la de Raoult. Así, para esos casos, la igualdad de fugacidades quedará expresada como:

$$\phi_i^V y_i P = H_i^{mix} x_i$$

Como dijimos, los coeficientes de fugacidad se calculan a partir de ecuaciones de estado para sistemas reales. En los simuladores de proceso existe a nuestra disposición un gran número de tales ecuaciones. Las más comunes son:

- Soave-Redlich-Kwong (SRK) y sus variantes
- Peng-Robinson (PR) y sus variantes.

Todas estas ecuaciones requieren el uso de coeficientes de interacción binarias para considerar adecuadamente las mezclas multicomponentes. La amplitud y calidad de la base de datos disponible en un simulador en particular determinará, como es obvio, el ajuste de los resultados que obtengamos, siempre dentro del rango de validez de aplicación del método elegido.

Para el cálculo de coeficientes de actividad disponemos, en general, de varias alternativas:

- Ecuación de Wilson
- Ecuaciones de Margules
- Modelo Non Random Two Liquids (NRTL)
- Modelo UNiversal QUAsi Chemical (UNIQUAC)
- Modelo UNiquac Functional group Activity Coefficient (UNIFAC).

Las cuatro primeras metodologías requieren, para su aplicación, valores experimentales de parámetros de interacción entre los compuestos de la mezcla en tanto que UNIFAC es un método predictivo, basado en la contribución de grupos, por lo que se transforma en una alternativa valiosa cuando la información experimental es escasa.

Recomendaciones de uso

Lo que sigue es, en su mayor parte, una reelaboración de las recomendaciones realizadas por G.J. Suppes del Departamento de Ingeniería Química de la Universidad de Missouri-Columbia para la selección de la metodología de cálculo del equilibrio líquido-vapor (ELV) o líquido-líquido (ELL).

- a) Cuando la temperatura reducida de la mezcla, calculada como $T_r = T / \sum z_i T_{ci}$, es mayor que 0.75 y no se prevén fases líquidas inmiscibles, se debe usar una ecuación de estado como SRK o PR, privilegiando aquellas que cuentan con datos experimentales en la base de datos del simulador. De acuerdo a Hyprotech, PR es preferible a SRK, aunque existen opiniones en contrario.
- b) Cuando T_r es menor que 0.75 se debe usar un modelo de solución para la fase líquida y una ecuación de estado para el vapor.
- c) Cuando sólo se prevé una única fase líquida, las mejores elecciones para las alternativas de modelos de solución son
 - NRTL para mezclas orgánicas con presencia de agua
 - Wilson para el resto, aunque algunas fuentes (VirtualMaterials Group) recomiendan la ecuación de Margules para mezclas de hidrocarburos aromáticos.
- d) En aquellas situaciones donde pueda producirse ELL debe usarse NRTL, siempre suponiendo que se cuenta con coeficientes de interacción o se los puede estimar.
- e) Cuando no se puede disponer de coeficientes de interacción (experimentales o estimados) para usar con Wilson o NRTL, se debe utilizar el modelo de solución UNIQUAC con la predicción de los coeficientes de interacción binaria mediante UNIFAC.
- f) Algunos autores recomiendan la realización de gráficas xy , T_{xy} ó P_{xy} para cada par de compuestos presentes en la mezcla y observar si en los mismos aparecen “comportamientos” extraños (picos o quiebres agudos, segmentos planos, etc.). Si nada de ello ocurre, la metodología elegida para predecir el equilibrio es adecuada.

Existen otras recomendaciones, como las de la tabla 1, donde se indica el modelo de coeficientes de actividad recomendado por la empresa VirtualMaterials, proveedora de paquetes de propiedades, para su uso en simulación para distintos tipos de mezclas.

Tipo de mezcla	Modelo recomendable
Compuestos orgánicos con presencia de agua	NRTL
Alcoholes o en mezclas con fenoles	Wilson
Alcoholes, cetonas y éteres	Margules
Hidrocarburos C4 – C18	Wilson
Hidrocarburos aromáticos	Margules

Tabla 1. Modelos recomendados por VirtualMaterials

La tabla 2 se refiere a la aplicabilidad de métodos de coeficientes de actividad en distintos sistemas, así como la posibilidad de extender la información disponible a condiciones distintas de las originales.

Aplicación	Margules	van Laar	Wilson	NRTL	UNIQUAC
Mezclas binarias	A	A	A	A	A
Mezclas multicomponentes	AL	AL	A	A	A
Sistemas azeotrópicos	A	A	A	A	A
Equilibrio líquido-líquido	A	A	NA	A	A
Sistemas diluidos	?	?	A	A	A
Sistemas autoasociativos	?	?	A	A	A
Polímeros	NA	NA	NA	NA	A
Extrapolación	?	?	B	B	B

A: aplicable NA: no aplicable AL: aplicación limitada ?: cuestionable B: bueno

Tabla 2. Aplicabilidad de los métodos de coeficientes de actividad
Fuente: Honeywell

La tabla 3 muestra los paquetes básicos recomendados en función del tipo de proceso.

Tipo de Proceso	Paquete Termodinámico recomendado
Deshidratación de TEG	PR
Acuoso ácido	Sour PR
Procesamiento de gas criogénico	PR, PRSV
Separación de aire	PR, PRSV
Torres atmosféricas de crudo	PR y sus variantes, Grayson Streed (GS)
Torres a vacío	PR y sus variantes, GS, Braun K10, Esso
Torres de etileno	Lee Kesler Plocker
Sistemas con alto contenido de H ₂	PR, Zudkevitch-Joffee (ZJ), GS
Reservorios	PR y sus variantes
Sistemas de vapor	ASME Steam, Chao Seader, GS
Inhibición de hidratos	PR
Productos químicos	Modelos de actividad, PRSV
Alquilación de HF	PRSV, NRTL
Hidrocarburos-agua (alta solubilidad del agua en HC)	Kabadi Danner
Separaciones de hidrocarburos	PR, SRK
Aromáticos	Wilson, NRTL, UNIQUAC
Hidrocarburos sustituidos (cloruro de vinilo, acrilonitrilo)	PR, SRK
Producción de éter (MTBE, ETBE, ter-amil metil eter TAME)	Wilson, NRTL, UNIQUAC
Plantas de etilbenceno / estireno	PR, SRK o Wilson, NRTL, UNIQUAC (según la tecnología de producción)
Producción de ácido tereftálico	Wilson, NRTL, UNIQUAC
Planta de amoníaco	PR, SRK

Tabla 3. Paquetes recomendados en función del proceso
Fuentes: Honeywell, ASPENTech

ASPENTech ha propuesto una guía para la selección de los paquetes de propiedades según el tipo de compuestos y las condiciones operativas. Lo que sigue es un seudocódigo que hemos elaborado a partir del esquema original de ASPEN, considerando los paquetes disponibles en UniSim Design.

- 1.- Si los compuestos son *no polares* ir a 4.
- 2.- Si los compuestos son *polares no electrolitos* ir a 5.
- 3.- Con *electrolitos*, usar un paquete específico. Fin.

4.- No polares

- a) Si la totalidad de los componentes no son hipotéticos, usar *PR*, *SRK*, *Lee-Kesler-Plöcker*. Fin. Si no
- b) Si la presión de la mezcla de componentes reales y pseudocomponentes es
 - Superior a 1 atm usar *CHAO-SEADER*, *GRAYSON*. Fin.
 - Menor a 1 atm usar *IDEAL*. Fin.

5.- Polares no electrolitos

- a) Si la presión es inferior a 10 bar
 - a1) Si se dispone de parámetros de interacción (en la base de datos o suministrados por el usuario)
 - a1.1) Si se prevé que el equilibrio será líquido-líquido usar: *NRTL*, *UNIQUAC* y sus variantes. Fin.
 - a1.2) Si se prevé que el equilibrio será líquido-vapor usar: *WILSON*, *NRTL*, *UNIQUAC* y sus variantes. Fin.
 - a2) No se dispone de parámetros de interacción, usar *UNIFAC*. Fin.
- b) Si la presión es superior a 10 bar
 - b1) Si se dispone de parámetros de interacción usar métodos correlativos. Fin.
 - b2) Si no se dispone de parámetros de interacción usar métodos predictivos. Fin.

Bibliografía

- Henley E. J., Seader J.D., "Operaciones de Separación por Etapas de Equilibrio en Ingeniería Química", Ed.Reverté SA, 1988.
- Suppes, "Selecting Thermodynamic Models for Process Simulation of Organic VLE and LLE Systems", <<http://students.aidche.org/pdfs/thermodynamics.pdf>>.
- UniSim Design Simulation Basis Guide.
- Virtualmaterials Group <<http://www.virtualmaterials.com>>.

PREDICCIÓN DE PROPIEDADES: MÉTODOS DISPONIBLES EN UNISIM DESIGN

UniSim Design dispone de los siguientes modelos para realizar los cálculos térmicos y de transporte para todas las fases:

Ecuaciones de Estado

BWRS	PRSV
GCEOS	Sour SRK
Glycol Package	Sour PR
Kabadi-Danner	SRK
Lee-Kesler-Plöcker	SRK-Twu
MBWR	Twu-Sim-Tassone
Peng-Robinson	Zudkevitch-Joffe
PR-Twu	

Modelos de Actividad

Chien Null	NRTL
Extended NRTL	UNIQUAC
General NRTL	van Laar
Margules	Wilson
<i>Chao Seader</i>	
Chao Seader	Grayson Streed

Modelos de Presión de Vapor

Antoine	Esso Tabular
Braun K10	

Miscellaneous

Amine Pkg	Infochem Multiflash
ASME Steam	NBS Steam
Clean Fuels Pkg USD	Neotec Black Oil
DBR Amine Pkg	

Ecuaciones de estado

Cuando se elige una ecuación de estado, debe especificarse el método que se desea usar para el cálculo de entalpías. Existen dos opciones: 1) Ecuación de estado o 2) Lee-Kesler.

La primera opción usa el método propio de la ecuación de estado seleccionada; en cambio, al elegir Lee-Kesler, se usa la ecuación de estado para los cálculos de equilibrio LV y la de Lee-Kesler para el cálculo de entalpías y entropías. Los resultados obtenidos por Lee-Kesler son comparables a los hallados por las ecuaciones de estado estándares de UniSim y tiene idénticos rangos de aplicabilidad, pero las entalpías calculadas con la segunda opción pueden ser ligeramente más exactas en sistemas con hidrocarburos pesados.

Cuando se elige alguno de los paquetes PR, Sour PR, SRK o Sour SRK debe optarse por alguna de las maneras de calcular las densidades de los líquidos: a) EOS Density y b) Smooth Liquid Density.

En versiones anteriores los paquetes citados usaban el modelo Costald para el cálculo de la densidad del líquido. Este método sólo se aplicaba cuando la temperatura reducida era inferior a la unidad. Cuando T_r era superior a uno, la densidad del líquido se calculaba de acuerdo a la ecuación de estado. Esto se traducía en una discontinuidad en los valores de densidades, lo que ocasionaba problemas, especialmente en el modo dinámico.

Si se elige la segunda opción, entre $T_r = 0.95$ y $T_r = 1$, UniSim Design interpola entre el modelo Costald y la ecuación de estado, dando un valor alisado para la densidad.

1) Soave-Redlich-Kwong (SRK) y variantes

La ecuación SRK original puede usarse para hidrocarburos y gases livianos a presión atmosférica o superior. Los valores obtenidos para distintas propiedades termodinámicas son razonablemente precisos para su uso ingenieril, por lo que goza de una amplia aceptación en el campo de la simulación de procesos.

Modelo Zudkevitch-Joffee

El modelo Zudkevitch-Joffee es una modificación de la ecuación de estado RK. Mejora la predicción del equilibrio líquido vapor de hidrocarburos y de sistemas que contienen hidrógeno.

La ventaja principal de este modelo es la capacidad de predecir la presión de vapor de compuestos puros y la simplificación del método para determinar los coeficientes requeridos para la ecuación. Los cálculos de entalpía son realizados usando el método de Lee-Kesler.

Modelo Kabadi-Danner

El modelo Kabadi-Danner es una variante de la ecuación SRK; mejora los cálculos del equilibrio LLV para sistemas hidrocarburo/agua, particularmente en aquellos con escasa presencia de agua.

2) Peng-Robinson (PR) y variantes

Esta ecuación, al igual que SRK, goza de una amplia aceptación en aplicaciones de la industria del gas, petróleo y petroquímica.

Al seleccionar la ecuación de estado Peng-Robinson, debe elegirse una de las dos variantes disponibles: UniSim Design y Standard.

La variante Standard es una modificación de la ecuación RK y representa con mayor exactitud los sistemas con gas natural. Además, estima mejor las densidades de los líquidos.

UniSim Design es similar a la original pero introduce algunas mejoras, lo que permite extender el rango de aplicación y representar mejor el ELV de sistemas complejos.

Peng-Robinson Stryjek-Vera (PRSV)

La ecuación de estado Peng-Robinson Stryjek-Vera extiende el rango de aplicación de la ecuación original a sistemas altamente no ideales, dando resultados similares a los obtenidos con las ecuaciones de Wilson, NRTL o UNIQUAC.

Esta ecuación tiene un buen comportamiento a bajas presiones. Posee, además, un conjunto limitado de parámetros de interacción con compuestos no hidrocarbonados.

La base de datos contiene parámetros experimentales para las curvas de presión de vapor de todos los componentes puros. Para compuestos hipotéticos que representan fracciones de petróleo, el sistema, en forma automática, hace uso del método de Lee-Kesler para los parámetros de esas curvas, en cambio, para otros definidos por el usuario, existe la posibilidad de ingresar los valores o indicarle al sistema que los calcule a partir de las correlaciones de Lee-Kesler, Gomez-Thodos o Reidel.

Sour PR

La ecuación Sour PR combina la ecuación Peng-Robinson y el método API-Sour de Wilson para manejar sistemas ácidos acuosos.

Para el cálculo de las fugacidades y entalpías de las fases líquido y vapor en hidrocarburos usa la ecuación de Peng-Robinson. Los valores de las constantes de equilibrio para la fase acuosa se calculan con el método API-Sour de Wilson.

Este modelo puede usarse en columnas que tratan crudo o cualquier proceso donde se encuentren hidrocarburos, gases ácidos y agua.

3) Ecuación Lee-Kesler-Plöcker

La ecuación Lee-Kesler-Plöcker deriva de ecuación de Lee-Kesler y es un método general exacto para mezclas y sustancias no polares. No usa la correlación de COSTALD para calcular la densidad del líquido. Esto puede mostrar diferencias cuando se comparan resultados entre ecuaciones de estado.

Modelos de coeficientes de actividad

Aunque las ecuaciones de estado han probado ser confiables en la predicción de propiedades de mezclas de hidrocarburos en un amplio rango de condiciones operativas, su aplicación está limitada primariamente a compuestos no polares o levemente polares. El manejo de mezclas con compuestos polares o con comportamiento no ideal, se ha hecho, tradicionalmente, en base a un modelo dual.

Los modelos de coeficiente de actividad son, comparados con las ecuaciones de estado, de una naturaleza más empírica, y por lo tanto, no pueden ser usados con seguridad en generalizaciones o extrapolaciones a condiciones no probadas.

Los modelos sólo realizan los cálculos de la fase líquida, por lo que debe especificarse el método a usar para calcular la fase vapor.

Al seleccionarlos deben realizarse una serie de especificaciones, fundamentalmente, el método de manejo de la fase vapor.

Para todos, con exclusión de Margules y van Laar, esa elección se restringe a las opciones siguientes (existe listada otra alternativa pero no se encuentra licenciada en la versión disponible):

a) Ideal, se aplica en casos donde se opera a presiones bajas o moderadas y donde, en la fase vapor, existe poca interacción molecular entre los compuestos. Es la opción por defecto.

b) RK puede aplicarse a todos los gases. Lo usual es reemplazarla por SRK.

c) Virial, modela con buenos resultados las fugacidades de la fase vapor de sistemas con fuertes interacciones en dicha fase. Esto ocurre cuando están presentes ácidos carboxílicos u otros compuestos que tienen tendencia a formar enlaces de hidrógeno estables.

d-e) PR y SRK que se usan en todas las situaciones ya vistas.

Otra elección es la temperatura que será usada para estimar los parámetros de interacción del método UNIFAC. Hay un valor por defecto, pero, para obtener mejores resultados conviene seleccionar la temperatura más cercana a las condiciones de operación.

La tercera elección permite optar por el uso o no del factor de Poynting. Obviamente, este factor está sólo disponible para modelos distintos del ideal.

Como ya vimos, los modelos de coeficientes de actividad disponibles son:

Chien Null	NRTL
Extended NRTL	UNIQUAC
General NRTL	van Laar
Margules	Wilson

Modelo Chien-Null (CN)

Chien-Null es un método empírico que permite combinar distintos métodos para tratar mezclas multicomponentes. El usuario, al elegir el modelo CN, puede seleccionar los modelos de coeficientes de actividad que considere mejores para representar el comportamiento de los distintos conjuntos binarios que se pueden formar a partir de la mezcla multicomponente. Así, por ejemplo, se puede escoger NRTL para un par, Margules, para otro, etc. Los valores de los coeficientes de interacción pueden ser estimados por el programa o introducidos por el usuario.

Ecuación de van Laar

Es de naturaleza empírica y puede usarse en sistemas que presentan desviaciones positivas o negativas de la Ley de Raoult. Sin embargo no puede predecir máximos o mínimos en los coeficientes de actividad y por lo tanto, generalmente realiza estimaciones pobres en sistemas con hidrocarburos halogenados y alcoholes.

Además, tiene tendencia a predecir dos fases líquidas cuando, en realidad, no existen, aunque puede representar el comportamiento de mezclas con miscibilidad limitada así como tres fases de equilibrio.

Margules

Puede usarse para modelar el equilibrio líquido vapor y el líquido-líquido. La ecuación no tiene fundamentos teóricos pero es útil para estimaciones rápidas e interpolación de datos.

Existe una versión de cuatro parámetros que extiende su aplicación a mezclas multicomponentes.

Ecuación de Wilson

Aunque esta ecuación es más compleja y requiere más tiempo para los cálculos que las ecuaciones de Margules y de van Laar, puede representar satisfactoriamente casi todas las soluciones líquidas no ideales, con mezclas de compuestos polares y no polares, excepto electrolitos y soluciones que presentan una limitada miscibilidad (ELL o ELLV).

Provee una excelente predicción del equilibrio ternario usando parámetros obtenidos por regresión de datos binarios.

Extended Wilson

Es una variante del modelo Wilson. Usa un número mayor de parámetros de interacción para determinar los coeficientes de actividad.

NRTL

El modelo elimina las limitaciones de Wilson para predecir el equilibrio líquido-líquido, aunque tiene tendencia a establecer falsas separaciones de fases. Es capaz de representar el comportamiento de los equilibrios LV, LL y LLV.

En general es más preciso que Wilson y superior a otros modelos en sistemas agua/compuestos orgánicos.

La extensión a mezclas multicomponentes es directa.

Ofrece poca ventaja sobre la ecuación de Wilson para sistemas que son completamente miscibles.

Es consistente termodinámicamente y puede aplicarse a sistemas ternarios y de orden superior usando parámetros obtenidos por regresión de datos de equilibrio binario.

Tiene una precisión comparable a la ecuación de Wilson para el ELV. Combina las ventajas de las ecuaciones de Wilson y van Laar y, como esta última, no es extremadamente intensiva en tiempo de cálculo. A diferencia de van Laar, puede usarse en sistemas diluidos y en mezclas de hidrocarburos y alcoholes, aunque, para estas últimas, no resulta tan satisfactoria como la ecuación de Wilson.

Permite modelar sistemas donde existe un amplio rango de puntos de ebullición o composición entre componentes, o donde se requiere resolver simultáneamente equilibrios LV y LL.

General NRTL

Extiende la aplicación de NRTL a rangos más amplios de temperatura pero a costa de incrementar la cantidad de información experimental.

UNIQUAC (UNiversal QUASI-Chemical)

El modelo fue desarrollado después del NRTL, tiene las mismas características básicas pero requiere un menor volumen de datos de parámetros de interacción que NRTL. Es capaz de predecir el equilibrio LV, LL y LLV.

Se ha usado con éxito para predecir el equilibrio de sistemas altamente no ideales, por ejemplo, aquellos que contienen moléculas de diferentes tamaños y formas, como los polímeros.

Puede aplicarse a mezclas que contienen agua, hidrocarburos, hidrocarburos halogenados, alcoholes, nitrilos, aminas, ésteres, cetonas y aldehidos.

Los parámetros experimentales encontrados exhiben una escasa dependencia con la temperatura, lo cual favorece la extrapolación del método.

UNIFAC

El método UNIFAC es una herramienta útil para realizar los cálculos de VLE cuando se carece de datos experimentales, con buenas estimaciones en aplicaciones industrialmente importantes.

No obstante, no es un reemplazo para los datos experimentales, y nunca debe tratarse como tal.

Es útil para realizar estudios preliminares pero, para un diseño riguroso, los resultados deben ser revisados a partir de datos experimentales.

Tratamiento de no condensables

El tratamiento de los compuestos no condensables se realiza mediante la ley de Henry, aunque ésta no está disponible para su elección como un método de propiedades termodinámicas.

El simulador la utiliza automáticamente cuando en la mezcla están presentes los compuestos no condensables metano, etano, etileno, acetileno, Hidrogen, Helium, Argon, Nitrogen, Oxygen, NO, H₂S, CO₂ y CO.

La ley de Henry extendida también se usa para modelar las interacciones entre un solvente y un soluto diluido en él.

El término “compuesto no condensable” hace referencia a aquellos que tienen una temperatura crítica por debajo de la del sistema. Obviamente, no se tiene en cuenta la interacción, en el equilibrio LV, entre este tipo de compuestos.

Propuesta de trabajo

Verificar si es recomendable el uso del paquete de propiedades Peng-Robinson:

a) de la mezcla siguiente disponible a 77 °C y 200 kPa

Compuesto	Flujo molar
Etanol	20
Ac.Acético	75
Agua	1.5

b) de la mezcla siguiente disponible a 600 °C y 50 kPa

Compuesto	Flujo molar
Etilbenceno	74
Tolueno	2.3
Agua	760

Si no es recomendable, indicar que se debería usar para cada una de las mezclas.

CAPÍTULO 4

COMPUESTOS HIPOTÉTICOS Y CORTES DE PETRÓLEO

Introducción

En cualquier simulador, por más amplia que sea su base de datos de compuestos, siempre existirá la posibilidad de que, en un caso particular, uno o más de los compuestos no se encuentre en esa base.

Todo simulador de procesos deberá incluir, entonces, la posibilidad de agregar nuevos compuestos o tratar mezclas de composición desconocida.

Esto se lleva a cabo mediante la definición de compuestos hipotéticos. Allí, a partir de ciertas propiedades características, punto de ebullición normal, densidad, peso o estructura molecular, etc., es posible estimar, haciendo uso de correlaciones, las propiedades desconocidas del compuesto.

Este procedimiento es similar al que se lleva a cabo cuando no se dispone de información experimental sobre coeficientes de interacción y se los estima haciendo uso del método UNIFAC.

Obviamente, esto implica que, en la definición de un compuesto hipotético no habrá información experimental de respaldo y que, cuanto mayor sea la cantidad de información suministrada, mejor precisión se debe esperar en la simulación.

Un caso particular de mezclas se nos presentará cuando trabajemos con un corte de petróleo, donde a partir de una serie de ensayos estandarizados, es posible definir una cierta composición para ese corte. Como es lógico, esa composición estará basada en compuestos hipotéticos.

Compuestos hipotéticos

Como ya dijimos, los compuestos hipotéticos pueden representar compuestos puros, mezclas de compuestos, definidas o no o sólidos. Además, por medio de la clonación se pueden transformar en hipotéticos a los compuestos de la biblioteca, modificando los valores de algunas de sus propiedades.

En el simulador que estamos usando, los compuestos hipotéticos, una vez definidos, se manejan exactamente igual que los de biblioteca, salvo que el programa, para el acceso, siempre los mantendrá en dos clases separadas.

UniSim Design va incorporando los distintos compuestos hipotéticos a un grupo por defecto, llamado HypoGroup1. De este modo, podemos agregar, en una operación, la totalidad de los compuestos que hemos definido. Si deseamos tenerlos separados en distintos grupos deberemos generarlos y asignar los compuestos que los integran.

Incorporando un compuesto hipotético

La información mínima necesaria para que el simulador pueda determinar las propiedades del compuesto hipotético depende del valor de la temperatura de ebullición normal (TBN): si es menor de 370 °C es suficiente con ingresar dicha temperatura, si supera ese valor habrá que dar, además, la densidad del líquido. En el caso que el valor de TBN no se conozca, debe darse la densidad del líquido y el peso molecular.

Si bien UniSim Design puede estimar el resto de las propiedades con los dos valores que hemos mencionado, obtendremos mejores resultados si se incorpora la estructura del compuesto, como veremos más adelante.

Como siempre, usaremos un ejemplo para comprender los pasos que se deben seguir para contar en nuestra simulación con un compuesto hipotético.

El ejemplo no tiene otra pretensión que la exclusivamente pedagógica. Supongamos que en la base de datos de compuestos no existiese el etanol. Vamos a generar un compuesto hipotético que lo represente y, dado que, el

alcohol etílico está en la base, podremos comparar las propiedades predichas para el compuesto hipotético con las que se calculan a partir de la información existente.

En esta prueba, admitiremos, para nuestro “alcohol hipotético”, una temperatura de ebullición normal de 78.25 °C y una densidad líquida igual a 787.41 kg/m³.

Abramos el simulador y en un libro nuevo, ingresemos al ambiente Simulation Basis Manager. Vayamos a la solapa Hypotheticals y oprimamos el botón Add para crear un grupo hipotético.

UniSim genera el grupo y, a su vez, abre otra ventana como la de la figura 1, desde la cual podemos agregar los componentes, ingresar las propiedades que conocemos, definir la clase a la cual pertenece el compuesto, etc.

En la ventana de la figura hemos cambiado el nombre por defecto HypoGroup1 a HypoAlcohol y elegido la clase Alcohol de la lista desplegable Component Class.

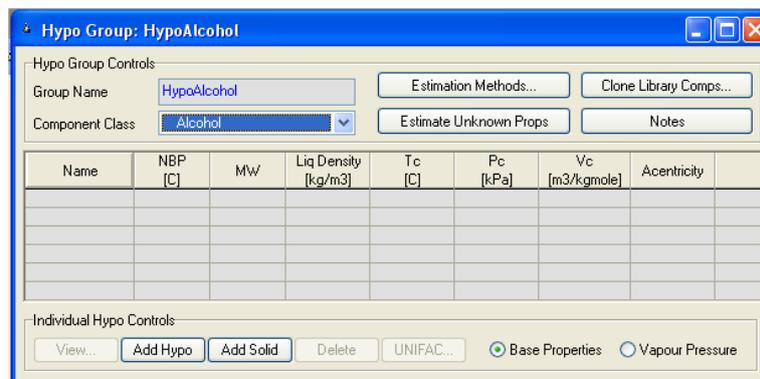


Figura 1. Generación del HypoAlcohol

Para incorporar el alcohol hipotético, oprimamos el botón Add Hypo que se encuentra en la parte inferior de la ventana. Al hacerlo, se crea el compuesto Hypo20000*. Cambiemos su nombre por HypoEt1 (UniSim Design incorporará HypoEt1* a la lista de compuestos hipotéticos. El asterisco se agrega automáticamente), e ingresemos los valores, en las celdas correspondientes, de la temperatura de ebullición normal (NBP) y la densidad del líquido (Liq Density) como podemos observar en la figura 2.

Podemos ver que, en este momento, se han habilitado los botones View, Delete y UNIFAC.

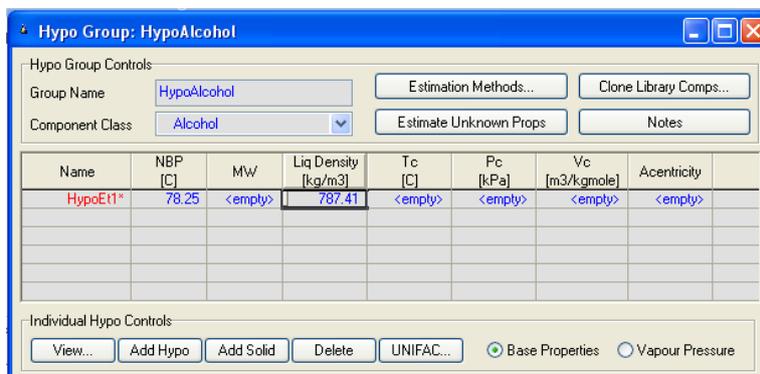


Figura 2. Creación del compuesto HypoEt1*

Al oprimir el botón Estimation Methods podemos acceder a la lista de métodos usados para determinar cada propiedad, pudiéndose, desde allí, modificar la opción por defecto, si lo consideráramos necesario.

Luego, oprimiendo el botón Estimate Unknown Props, le indicamos al simulador que calcule las propiedades desconocidas del compuesto, tras lo cual se completará la información (MW, Tc, etc.) desconocida.

Si se estuviese ajustando el comportamiento de algún compuesto en particular que se encuentra en la lista de los previamente seleccionados, el procedimiento a seguir sería clonar el mismo, mediante el botón Clone Library Comps, y modificar las propiedades que deseamos ajustar.

Si queremos mejorar la estimación, por tratarse en este caso de un compuesto único, podemos ingresar su estructura. Esto no tiene sentido hacerlo si el compuesto hipotético representa una mezcla. El ingreso de la estructura se hace desde la ventana UNIFAC Component Builder, a la cual se accede usando el botón UNIFAC citado previamente.

Para ello, crearemos un segundo compuesto hipotético, HypoEt2, repitiendo los pasos previos sin oprimir el botón para estimar las propiedades.

La fórmula del etanol está compuesta de los grupos CH₃, CH₂ y OH. Para ingresarlos se los elige de la lista desplegable Available UNIFAC Groups de la ventana UNIFAC Component Builder como se muestra en la figura 3. El grupo

CH3 es el primero de la lista y aparece resaltado, por lo cual lo único que debemos hacer es oprimir el botón Add Group(s), tras lo cual veremos el código del subgrupo (1) debajo de Sub Group y la cantidad por defecto de los mismos (1) debajo de How Many en el sector UNIFAC Structure.

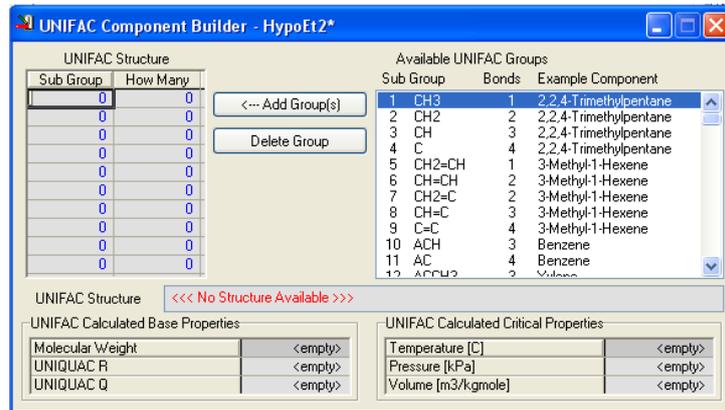


Figura 3. Elección de los grupos

Podemos ver que se va construyendo la estructura del compuesto, en la caja de texto donde inicialmente aparecía “No Structure Available”. Agreguemos, de la misma forma, los grupos CH2 y OH. Podríamos haber agregado los grupos manualmente en la estructura que se va construyendo, pero esto requiere el conocimiento previo de la sintaxis de los mismos.

En la figura 4 podemos ver la estructura completa de nuestro alcohol hipotético. Aparece un mensaje que indica que la construcción de la estructura está terminada y un casillero donde figuran los enlaces libres que tiene la misma. Obviamente, en esta condición ese número es cero pero a medida que se van ingresando los distintos grupos, este valor se modifica y se tendrá un aviso de Incomplete en rojo en lugar del Complete en verde.

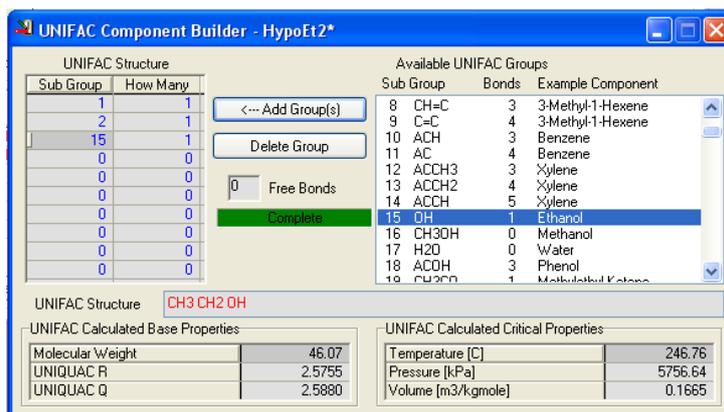


Figura 4. Ingreso completo de la estructura

Al cerrar esta ventana regresaremos a la del grupo y allí debemos oprimir, como lo hicimos con el compuesto HypoEt1*, el botón Estimate Unknown Props, para que se calculen las propiedades del HypoEt2*. En la figura 5 podemos ver los valores estimados por UniSim Design para el nuevo compuesto.

The screenshot shows the 'Hypo Group: HypoAlcohol' window. It includes 'Hypo Group Controls' with 'Group Name' set to 'HypoAlcohol' and 'Component Class' set to 'Alcohol'. Below this is a table comparing properties for HypoEt1* and HypoEt2*.

Name	NBP [C]	MW	Liq Density [kg/m3]	Tc [C]	Pc [kPa]	Vc [m3/kgmole]	Acentricity
HypoEt1*	78.25	86.77	787.41	267.90	3981.11	0.3049	0.2311
HypoEt2*	78.25	46.07	787.41	246.76	5756.64	0.1665	0.5677

Figura 5. Diferencias en las propiedades de HypoEt1* e HypoEt2*

Aparecen diferencias importantes en todas las propiedades calculadas. En particular, la discrepancia en el peso molecular es reveladora del efecto de la polaridad de la molécula de alcohol y un indicador de la eventual mejora en las predicciones del comportamiento de HypoEt2 frente a HypoEt1, siempre en relación al etanol existente en la base de datos.

Hemos finalizado con la definición de los compuestos hipotéticos. Resta ahora, generar un caso termodinámico que los incluya. Para ello, elijamos el paquete termodinámico Wilson y el etanol de la biblioteca.

Posteriormente, desde la ventana Component List View, en la solapa Components del Simulation Basis Manager, nos debemos posicionar sobre Hypo Components en el grupo Add Component de la izquierda. Ahora podemos agregar todo el grupo HypoAlcohol, oprimiendo el botón Add Group, que es lo que haremos, o sólo alguno de los compuestos hipotéticos, seleccionando el compuesto deseado y usando, luego, el botón Add Hypo. La figura 6 nos permite clarificar esta operatoria.

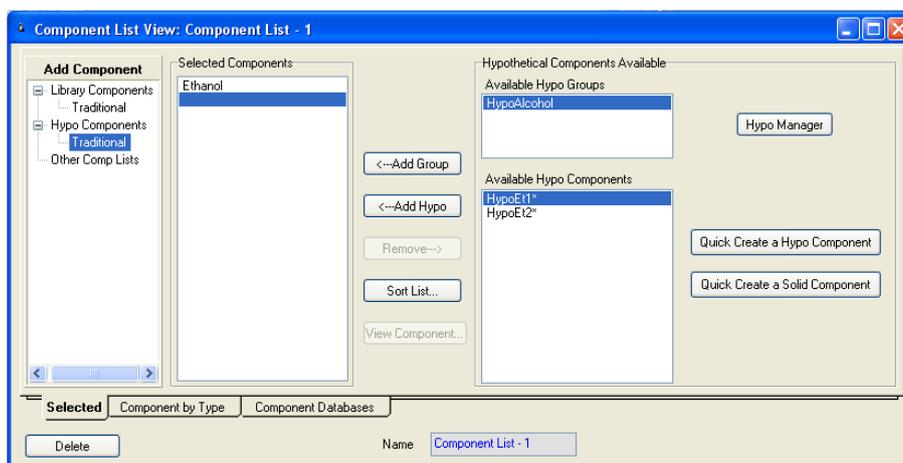


Figura 6. Agregado del grupo HypoAlcohol al caso termodinámico

Con esto hemos terminado la definición del caso termodinámico. Como siempre, vayamos ahora, al ambiente de simulación.

Como habíamos dicho, íbamos a realizar una comparación entre el comportamiento del compuesto hipotético, en este caso, de los compuestos hipotéticos en relación al alcohol etílico de la biblioteca. Para ello, vamos a generar tres corrientes de materia, cada una de las cuales contendrá sólo uno de los compuestos del caso termodinámico. Fijaremos también, la fracción vaporizada en 0, la presión en 100 kPa y un caudal molar unitario. Una vez hecho esto, tendremos las tres corrientes de materia totalmente calculadas y podremos realizar la comparación deseada.

Abramos, entonces, el Workbook como se muestra en la figura 7.

Name	EtOH puro	HipoEt1	HipoEt2	*** New ***
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	
Temperature [C]	77.84	77.83	77.91	
Pressure [kPa]	100.0	100.0	100.0	
Molar Flow [kgmole/h]	1.000	1.000	1.000	
Mass Flow [kg/h]	46.07	86.77	46.07	
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	5.788e-002	0.1102	5.851e-002	
Heat Flow [kJ/h]	-2.698e+005	-1.814e+005	-2.654e+005	
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2.698e+005	-1.814e+005	-2.654e+005	

Streams Unit Ops

ProductBlock: HipoEt1
FeederBlock: HipoEt1

Fluid Pkg: All

Include Sub-Flowsheets
 Show Name Only
Number of Hidden Objects: 0

Horizontal Matrix

Figura 7. Los compuestos hipotéticos y el etanol de la biblioteca

Queda claro, de la comparación de los valores obtenidos para el caudal másico que depende del peso molecular estimado o la entalpía molar, la conveniencia de especificar la mayor cantidad posible de parámetros en la definición de un compuesto hipotético.

Caracterización de un corte de petróleo

Como dijimos en la introducción, caracterizar un corte de petróleo significa convertir los datos de los ensayos de laboratorio que definen tal corte, en una serie de componentes hipotéticos.

Para ello, debemos suministrar una cantidad de información que, como es obvio, cuanto mayor sea el cúmulo de datos ingresados, mejor será la predicción de propiedades del fluido caracterizado.

La información que admite el simulador es:

- Curvas de destilación o análisis cromatográfico
- Curvas de variación de peso molecular, densidad o viscosidad en función de la variable independiente usada en el ensayo realizado
- Valores de propiedades globales (bulk): peso molecular, densidad másica o factor K de Watson (UOP), un índice aproximado de parafinidad. El simulador limita los valores admisibles de estas propiedades; así, el peso

molecular debe ser superior a 16, la densidad debe estar entre 250 y 2000 kg/m³ y el factor K entre 8 y 15.

La predicción como compuestos hipotéticos del comportamiento de la fracción liviana que integra el corte de petróleo no es satisfactoria, razón por la cual es posible evitar que el simulador utilice esta vía.

UniSim Design tiene tres formas para considerar estos componentes de bajo punto de ebullición (Light Ends), normalmente entre C2 y n-C5. Dichas formas son:

- Ignore: la porción de los componentes más livianos serán considerados como hipotéticos. Esto, como dijimos, no es recomendable.
- Auto Calculate: se usa cuando no se dispone de un análisis separado de los compuestos más livianos pero se desea que los mismos sean caracterizados como compuestos puros.
- Input Composition: se usa esta opción cuando se dispone de un ensayo separado de los compuestos más livianos y el del crudo fue preparado con dichos compuestos en la muestra. Es el método más preciso.

En las dos últimas opciones, UniSim Design considera como compuestos puros los elegidos al definir el caso termodinámico.

Cuando la información que se ingresa es una curva de destilación, UniSim Design permite elegir una cualquiera de las siguientes:

- Curva de destilación TBP (True Boiling Point), consiste en una destilación batch en una columna de entre 15 y 100 platos teóricos con un valor mayor o igual que 5 para la relación de reflujo.
- Curva de destilación ASTM D86, consiste en una destilación batch sin reflujo. Se emplea principalmente para petróleos livianos o medios.
- Curva de destilación ASTM D1160, es similar a la ASTM D86 pero se emplea para petróleos pesados a distintas condiciones de vacío.
- Curva de destilación ASTM D2887, es una curva de destilación simulada generada a partir de datos cromatográficos.
- Vaporización de equilibrio EFV (Equilibrium Flash Vaporization), es una curva generada a partir de una serie de experiencias realizadas a presión constante (1 atm). Se vincula la temperatura de ebullición versus el

porcentaje en volumen de líquido destilado, donde la totalidad del vapor formado se mantiene en equilibrio con el líquido sin vaporizar.

El ingreso de las curvas de peso molecular, densidad o viscosidad lo podemos realizar de dos maneras: usando las mismas fracciones de la curva de destilación ingresada (base dependiente), o no (base independiente). En el caso de la viscosidad, UniSim nos da la opción de ingresar esta propiedad para dos valores de temperaturas prefijados (100 °F y 210 °F).

En estas curvas, como en las de destilación, se requiere que, como mínimo, ingresemos cinco pares de valores.

La información mínima requerida por UniSim Design es una curva de destilación o un análisis cromatográfico o, si no disponemos de esos ensayos, dos de las tres propiedades bulk.

Habitualmente, los ensayos de laboratorio proporcionan una curva TBP y la densidad del crudo.

En la definición del paquete termodinámico a utilizar, debe existir compatibilidad con los compuestos hipotéticos que se generen, así, por ejemplo, el paquete Steam no está permitido. Una vez efectuada la definición y los componentes livianos, si se ha de trabajar con la biblioteca para representar la fracción liviana (Light Ends), los pasos que debemos seguir para caracterizar un corte de petróleo son los siguientes:

- a) Ingresar la información disponible. A partir de esos datos, UniSim Design generará, en forma transparente al usuario, una curva TBP y la información correspondiente al peso molecular, la densidad y la viscosidad, siempre que no hayamos ingresado tablas de esas propiedades, en cuyo caso, el simulador tomará esta información en lugar de generarla. Aún cuando se haya ingresado una curva de destilación, ésta, normalmente, no cubre la totalidad de la mezcla y el simulador deberá extrapolar los resultados hasta cubrir el ciento por ciento.
- b) Generar los compuestos hipotéticos. UniSim generará los compuestos mediante el fraccionamiento, a distintos valores de temperatura, de la curva TBP interna. Para definir estos valores de temperaturas debemos optar entre tres alternativas:

- Auto Cut, el corte se produce automáticamente basándose en los rangos de los puntos de ebullición de acuerdo a los que se muestran en la tabla 1.

Rango	Cortes
100 – 800 °F	1 cada 25°F
800 – 1200 °F	1 cada 50°F
1200 – 1600 °F	1 cada 100°F

- User Points, el simulador realiza el proceso de corte según el número de estos (Nc) que le especifiquemos. Para ello, considera tres intervalos: $\Delta 1$ entre PEI, el valor inferior de la curva TBP interna, y 800°F; $\Delta 2$ entre 800°F y 1200°F y $\Delta 3$ entre 1200°F y PES, el valor superior de la curva TBP interna. Además, deben cumplirse, del mejor modo posible, las siguientes relaciones entre los intervalos y el número de compuestos hipotéticos que se generarán en cada uno:

Tabla 1. Opción Auto Cut

$$N1/\Delta 1 = 2 N2/\Delta 2 = 4 N3/\Delta 3 \quad \text{y} \quad N1+N2+N3 = Nc$$

Si se conoce la composición de los livianos, PEI corresponderá a la temperatura de ebullición del componente liviano más pesado, salvo que se especifique otro valor. Esto obliga que el simulador normalice la curva interna de modo de no tener en cuenta los livianos.

- User Ranges, permite definir rangos de corte y especificar el número de compuestos hipotéticos a considerar en cada rango.

Una vez definidos los pseudocompuestos, el simulador determina, a partir de las curvas correspondientes, el punto de ebullición normal, el peso molecular, la densidad y la viscosidad de cada compuesto hipotético. Luego, a partir de estas propiedades, calcula, por medio de correlaciones apropiadas, las restantes propiedades físicas y críticas de cada compuesto hipotético, en forma similar a la que se realiza para cualquier compuesto hipotético.

Resulta claro que en la definición de los pseudocompuestos se utiliza información experimental previamente recolectada. Al momento de generar esa información, la cantidad de compuestos parafínicos considerados es muy importante, por lo cual las propiedades que se determinen a partir de las correlaciones estarán sesgadas hacia el comportamiento de ese grupo de compuestos.

También es evidente que al no considerar la estructura química de esos pseudocompuestos, no resultan adecuados para el cálculo de valores como el número de octano o el comportamiento en zonas de reacción.

- c) Transferir la información de los compuestos hipotéticos a una corriente del flowsheet.

Ingreso de la información

Como siempre, vamos a presentar los distintos pasos en el ingreso de la información a través de un ejemplo.

Nos proponemos caracterizar un corte de petróleo cuya densidad es de 29 °API60, el ensayo de los livianos es el mostrado en la tabla 2 y la curva de destilación TBP es la de la tabla 3.

Comencemos con la simulación, eligiendo Peng Robinson como paquete termodinámico y los compuestos detallados en la tabla 2.

Compuestos	% Vol. Líq.
Metano	0.0065
Etano	0.0225
Propano	0.3200
i-Butano	0.2400
n-Butano	1.7500
i-Pentano	1.6500
n-Pentano	2.2500

Tabla 2. Fracción de livianos

% Vol.	Temp.(°C)
0	-12
4	32
9	74
14	116
20	154
30	224
40	273
50	327
60	393
70	450
76	490
80	516

Tabla 3. Curva TBP

Luego, debemos empezar con el proceso de caracterización. Para ello, vayamos al ambiente Oil Characterization, usando el ícono , o, desde la solapa Oil Manager del Simulation Basis Manager. Al hacerlo, se abre la ventana de la figura 8.

En este momento, desde la solapa Assay, podemos ingresar un ensayo o importar alguno previamente grabado. Usemos, por lo tanto, el botón Add para comenzar a incorporar los datos disponibles de nuestro crudo. Se abrirá una nueva ventana y desde la solapa Input Data, podemos elegir, a través de dos listas

desplegables, la información que ingresaremos: las propiedades de mezcla y el tipo de curva de destilación. El aspecto de esta ventana cambia con la selección que se haga en esas listas.

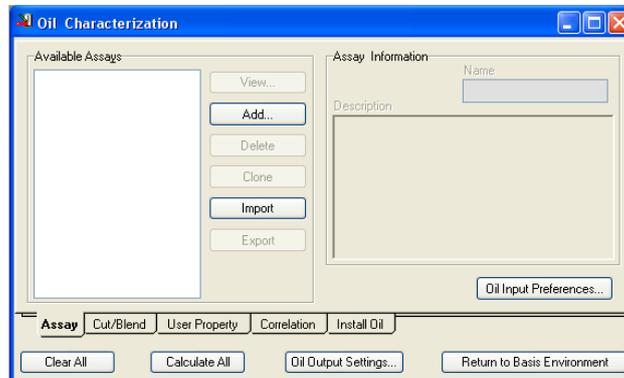


Figura 8. Ambiente Oil Characterization

De acuerdo a la información que disponemos, densidad, curva TBP y composición de los livianos, deberemos elegir la opción Used, de la lista desplegable Bulk Properties y la opción TBP de la otra lista. Por cada una de esas selecciones se generarán sendos botones de opción en el sector de entrada de datos. Al elegir el ensayo TBP aparecerá un conjunto de listas desplegadas que permiten definir si hay información específica de compuestos livianos y si se ingresarán o no curvas de peso molecular, densidad y viscosidad. En la figura 9 se muestra esta ventana, donde se ha cambiado el nombre del ensayo a Crudo1.

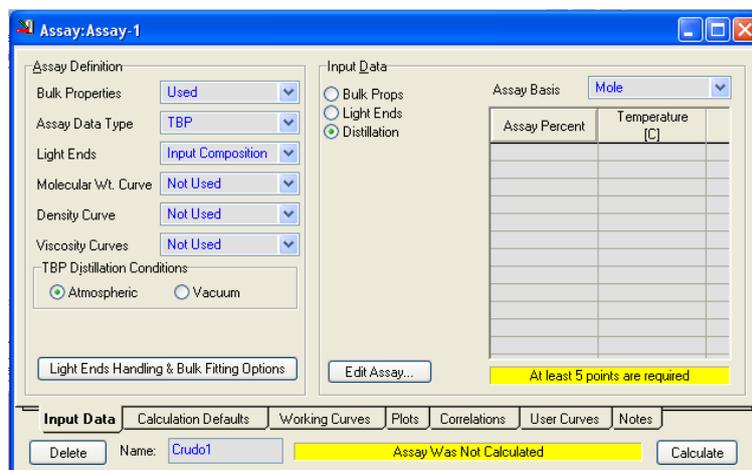


Figura 9. Elección de la información a ingresar

Elijamos, ahora, el botón Bulk Props e ingresemos el valor de la densidad. Para ingresar los valores de la curva TBP, seleccionemos el botón de opción correspondiente, elijamos Liquid Volume, de la lista Assay Basis y oprimamos el botón Edit Assay.

Aparecerá una tabla que, luego de ingresar los valores, tendrá el aspecto de la figura 10. Al oprimir el botón OK, regresamos a la ventana anterior, en la cual aparecerán los datos cargados y el mensaje, en verde, "Table is Ready" en lugar del "At least 5 points are required".

Resta ahora, ingresar la composición de los compuestos más livianos. Elijamos Input Composition de la lista desplegable Light Ends. En el sector Input Data aparecerá un botón que habilita tal ingreso. Al seleccionarlo aparece una tabla donde ya están

Assay Percent [%]	Temperature [C]
0.0000	-12.00
4.000	32.00
9.000	74.00
14.00	116.0
20.00	154.0
30.00	224.0
40.00	273.0
50.00	327.0
60.00	393.0
70.00	450.0
76.00	490.0
80.00	516.0
<empty>	<empty>

Figura 10. Curva TBP

incluidos los compuestos livianos oportunamente elegidos. Allí volcaremos la información disponible, con lo cual la ventana tendrá el aspecto que se muestra en la figura 11.

Light Ends	Composition	NBP [C]
Methane	6.500e-003	-161.5
Ethane	2.250e-002	-88.60
Propane	0.3200	-42.10
i-Butane	0.2400	-11.73
n-Butane	1.750	-0.5020
i-Pentane	1.650	27.88
n-Pentane	2.250	36.06

Figura 11. Ingreso de la composición de los livianos

Una vez que ingresamos todos los datos, oprimimos el botón Calculate para habilitar la realización de todos los cálculos internos que lleva a cabo el simulador.

Desde la solapa Working Curves podemos acceder a los valores estimados, a partir de la curva TBP interna, para el punto de ebullición normal, el peso molecular, la densidad y la viscosidad del corte, en función de una distribución molar acumulada. Estas curvas son usadas para determinar las propiedades de los compuestos hipotéticos que generaremos en un paso posterior.

En la solapa Plots podemos ver la curva que ingresamos en forma de tabla. Si hubiésemos ingresado otra propiedad, por ejemplo, densidad, podríamos acceder a la gráfica correspondiente desde esta solapa.

En la solapa Correlations figuran las correlaciones utilizadas para el cálculo de distintos parámetros (temperatura y presión crítica, factor acéntrico, etc.). Podríamos haber modificado las opciones por defecto, si previamente hubiésemos definido en la solapa Correlations de la ventana Oil Characterization otras alternativas para las diferentes propiedades. Estas nuevas alternativas quedarán agrupadas bajo un nuevo nombre que deberemos seleccionar para modificar el modo en que se realizan las estimaciones.

Cerremos la ventana de ensayo y al volver a la Oil Characterization podemos ver que, ahora, todos los botones están habilitados.

Si quisiéramos ingresar información sobre otras propiedades del corte, lo podríamos hacer en este momento, usando la solapa User Property.

Allí, con el botón Add, ingresaríamos a una ventana donde es posible definir el nombre de la propiedad y las reglas de mezclado, que siguen una ley del tipo $f(P_m) = k \sum X_i f(P_i)$, donde P_m es el valor de la propiedad en la mezcla y P_i la de cada componente, $f(P)$ una cierta función de la propiedad, k una constante y X_i la fracción de cada uno de los componentes en la mezcla. Para X_i podemos elegir base molar, másica o volumen.

Estas propiedades que ingresamos no intervienen en la definición de los compuestos hipotéticos y el simulador solamente les asignará un valor de la misma, según lo que corresponda, a partir de la curva TBP interna que dispone

para el corte. Por esto último, si hemos establecido un tratamiento diferencial para los compuestos livianos, en este momento deberemos ingresar el valor de la propiedad para los mismos.

Si no tuviésemos un tratamiento por separado de los livianos y no necesitásemos modificar ni el nombre de la propiedad ni las opciones para la regla de mezclado (base molar y $P_m = \sum X_i P_i$), bastaría con el ingreso a esta ventana y el cierre inmediato de la misma.

Al volver a Oil Characterization, desde la solapa Assay con el botón View accedemos al ensayo y, una vez allí, en User Curves, el botón Add nos permite incorporar la propiedad al ensayo del crudo e ingresar la tabla de sus valores, en un modo análogo al que rige el ingreso de curvas de densidad, peso molecular o viscosidad.

Generación de los compuestos hipotéticos para el crudo

Una vez ingresados los valores de los distintos ensayos del crudo, debemos generar los compuestos hipotéticos que lo representarán. Para ello, vayamos a la solapa Cut/Blend de la ventana Oil Characterization. Allí existen dos funciones, una para “cortar” el crudo en compuestos hipotéticos y otra para mezclar dos o más crudos de los cuales tenemos ensayos, y transformarlos en un conjunto de compuestos hipotéticos que represente la mezcla. Esta solapa inicialmente tiene el aspecto que se muestra en la figura 12. Para comenzar debemos usar el botón Add.

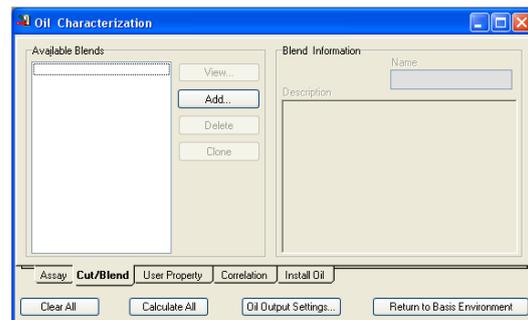


Figura 12. Solapa Cut/Blend

Al hacerlo, se abre otra ventana, como la de la figura 13, donde figuran todos los crudos cuyos ensayos se han ingresado, en este caso, sólo uno. La incorporación al Blend que generará UniSim lo haremos a través del nuevo botón Add. Si hubiésemos ingresado más de un crudo, deberíamos definir la

base en la que se expresarán los flujos de cada uno y el valor de los mismos, de modo de explicitar las proporciones de la mezcla.

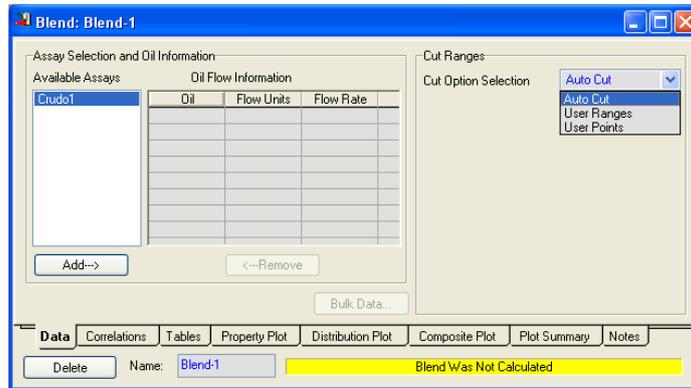


Figura 13. Incorporación del Crudo1 al Blend

En la misma ventana se pueden seleccionar los métodos disponibles para generar los compuestos; los que se muestran desplegados en la figura. Si no se va a trabajar con la opción por defecto, conviene seleccionarla antes de ingresar el crudo, ya que, de otro modo, el simulador realizaría los cálculos con Auto Cut. Hagámoslo así, antes de ingresar Crudo1 al Blend. Elijamos User Ranges y, al hacerlo, debajo de la lista desplegable, aparecerá una tabla donde deberemos ingresar la temperatura límite y el número de cortes a considerar en cada intervalo.

Vamos a tomar 3 intervalos, el primero, hasta 425°C, con 20 cortes, el segundo con 620°C como temperatura límite y 5 cortes y el último, 720°C y 2 cortes.

Luego de seleccionar el ensayo sobre el que se debe realizar la operación, en este caso, Crudo1, único disponible, al oprimir el botón Add--> el simulador genera los compuestos hipotéticos que representan al corte, o la mezcla, si fuera el caso y completa la información en la ventana actual.

En la figura 14 podemos ver el estado de la solapa Data de la ventana Blend, después de haber realizado todas las operaciones indicadas.

El simulador identifica a nuestro Crudo1 como Blend-1. Si quisiéramos, podríamos cambiar ese nombre y mantener, por ejemplo, el Crudo1 original. En nuestro caso, no lo vamos a hacer.

Al establecer un nombre diferente, el simulador habilita la posibilidad de trabajar con una mezcla (Crudo1, Crudo2, etc.) y englobarla en una nueva entidad, Blend-1.

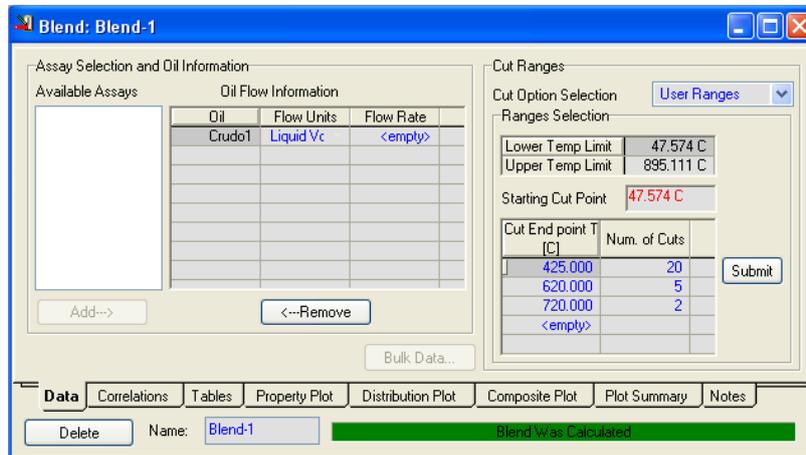


Figura 14. Solapa Data

Si no hubiésemos cambiado la opción por defecto para generar los compuestos (Auto Cut), el simulador realizaría los cálculos una vez que ingresemos el o los crudos. Luego podríamos especificar la opción User Ranges y completar la información de la tabla; en este caso el botón Submit nos permite ordenarle al simulador que actualice los cálculos. Si en lugar de esa opción escogiésemos User Points, la actualización se produciría automáticamente tras el ingreso del número de puntos.

Otra situación en la que debemos usar el botón Submit es cuando inicialmente hemos seleccionado User Ranges pero sin completar la carga. En este caso cuando definamos el Blend, no se calcularán los compuestos hipotéticos hasta que se complete la tabla y se oprima el botón Submit.

Una vez que UniSim ha generado los compuestos hipotéticos, en la solapa Tables de la ventana Blend, podemos ver la identificación de cada uno de ellos con sus propiedades.

A los compuestos se les asigna un nombre de fantasía, NBP_PE, donde PE es el valor redondeado del punto de ebullición normal estimado.

La ventana de la figura 15 muestra la información correspondiente de las propiedades principales de dichos compuestos. Si seleccionamos Other

Properties, obtendremos las propiedades críticas, el factor acéntrico y el K de Watson.

Comp Name	NBP [C]	Mole Wt.	Density [kg/m3]	Viscosity1 [cP]	Viscosity2 [cP]
NBP_60	59,91	74,83	730,7	0,36184	0,19703
NBP_77	76,87	82,63	743,6	0,32847	0,19753
NBP_93	93,50	90,81	756,0	0,37514	0,22205
NBP_113	113,4	100,7	769,1	0,43961	0,25446
NBP_135	134,5	109,6	780,4	0,50988	0,28857
NBP_151	150,9	118,7	791,2	0,59162	0,32711
NBP_170	170,1	129,0	802,5	0,69428	0,37438
NBP_189	189,1	140,6	813,9	0,83338	0,43251
NBP_208	208,2	153,1	825,2	1,0463	0,51078
NBP_227	227,5	167,5	837,0	1,3480	0,60761
NBP_246	245,9	182,3	848,0	1,7439	0,72296
NBP_264	264,5	197,4	858,3	2,2602	0,85844
NBP_283	283,3	213,1	868,0	2,9547	1,0213

Figura 15. Propiedades de los compuestos hipotéticos

En la lista desplegable Table Type, además de Component Properties, se pueden elegir las opciones:

- Component Breakdown: provee el porcentaje de volumen líquido individual y acumulado y los flujos volumétricos, másicos y molares para los compuestos livianos ingresados y los hipotéticos generados, esto último siempre que se haya definido el caudal del crudo.
- Molar Compositions: da las fracciones molares de cada componente puro e hipotético del crudo.
- Oil Properties: brinda, en base a los datos ingresados, curva TBP, en nuestro caso, por ejemplo, la información de las otras curvas de destilación o de propiedades tales como factor acéntrico, peso molecular, densidad, etc.
- Oil Distributions: provee información de la distribución estimada de los productos del crudo que se obtienen por distintos procesos. En cada caso se muestra el rango de temperaturas y la fracción del producto, expresadas en las unidades de la base.

Estas fracciones pueden usarse para estimar los flujos de los productos en el procesamiento del crudo. Así, de acuerdo a lo que se muestra en la figura 16, si destilásemos 10^5 bbl/día, obtendríamos una producción de nafta de $0,164 \cdot 100000 = 16400$ bbl/día.

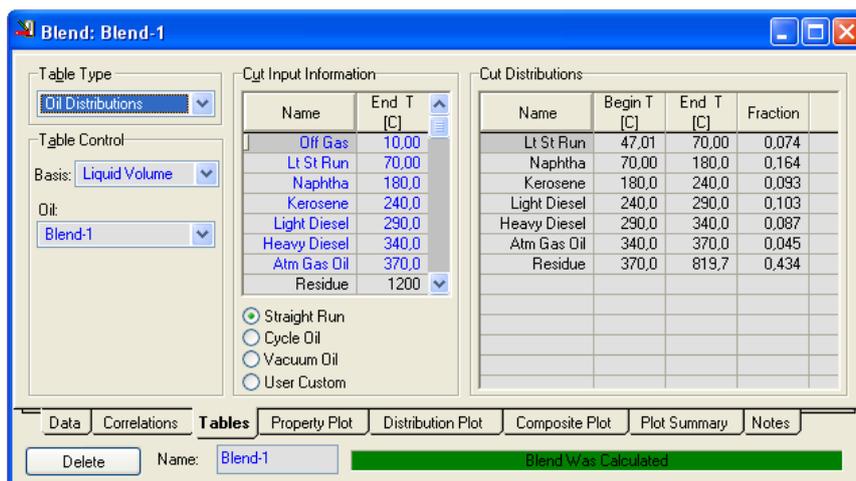


Figura 16. Distribución de los productos del crudo

Transferencia de la información

El paso final de la caracterización es transferir la información de los compuestos hipotéticos a una corriente del flowsheet, para lo cual cerraremos la ventana actual e iremos a la solapa Install Oil de la ventana Oil Characterization.

En la columna Stream Name, ingresemos el nombre de la corriente que representará a este crudo en el flowsheet, por ejemplo, Alim.

Al retornar al Simulation Basis Manager, veremos que todos estos compuestos fueron incorporados al caso termodinámico que habíamos definido y además, tendremos la corriente Alim en el PFD.

Bibliografía

- UniSim Design Simulation Basis Guide.

Propuestas de trabajo

1. Se debe tratar un efluente acuoso para abatir el contenido ciertos contaminantes, hasta los límites legales permitidos.

Dichos contaminantes son: acetaldehído, etilenglicol, metildioxolano, ácido acético y 1,4-dioxano.

Defina el caso termodinámico para realizar la simulación de la planta de tratamiento.

En el caso de que alguno de los compuestos no figure en la base de datos disponible en el simulador, genere, con la mayor precisión posible, un compuesto hipotético a partir de datos de bibliografía.

De ser posible, utilice la información recabada para verificar la exactitud en la predicción de alguna de las propiedades de ese compuesto.

2. Dados los siguientes ensayos de laboratorio, realice los pasos necesarios para caracterizar el crudo, cuya densidad API es 34.93.

Utilice la opción Auto Cut para establecer los rangos de TBP y número de componentes por rango.

Curva TBP	
Temp.(°C)	% Vol. líq
15	1.00
75	6.81
145	20.56
190	28.48
230	35.02
340	54.34
375	60.21
460	71.82
550	83.04
560	84.27

Fracción de livianos	
Compuesto	% Vol. líq
Etano	0.02
Propano	0.30
i-Butano	0.26
n-Butano	0.84

CAPÍTULO 5

EQUILIBRIO DE FASES. TANQUE SEPARADOR

Equilibrio líquido - vapor en un tanque flash

Los procesos de separación constituyen, sin duda, un elemento clave en la industria de procesos.

Por supuesto, el núcleo fundamental siempre será el reactor, donde se define la factibilidad económica preliminar del emprendimiento. Pero el mercado exige determinadas calidades en los productos finales y eso sólo se consigue mediante la adecuada separación de las mezclas de compuestos que constituyen la salida de la zona de reacción.

Debemos tener en cuenta que estos procesos de separación requieren una inversión realmente importante y su contribución al costo operativo general suele ser alto, por lo cual no debe extrañarnos que aquella rentabilidad primaria, evaluada a la luz de los rendimientos en el reactor, pueda ser sustancialmente alterada, al tener que considerar el equipamiento de las unidades de purificación.

En sucesivos capítulos nos vamos a abocar al análisis y la simulación de estos equipos. De un modo u otro, siempre tendremos que considerar sistemas con fases en equilibrio, normalmente uno o más líquidos con un vapor.

El tanque flash es la unidad de proceso más simple cuyo funcionamiento se basa en el equilibrio líquido vapor de los componentes de la mezcla que allí procesamos.

Desde un punto de vista del equipamiento, el tanque flash es un recipiente donde se produce la separación de la fase vapor de la o las fases líquidas presentes. En este capítulo sólo veremos equipos con una única fase líquida.

El modelo matemático que podemos atribuir al equilibrio que se verifica en un tanque flash para 1 mol de alimentación, tomando en cuenta lo indicado en la figura 1, se puede plantear de la forma:

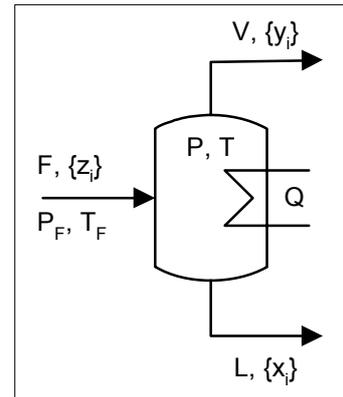


Figura 1. Tanque Flash.

para $i = 1, \dots, NC$

$$z_i = (1 - v) x_i + v y_i$$

$$y_i = k_i x_i$$

$$k_i = k_i(P, T, \{x_i\}, \{y_i\})$$

con

$$\sum_{i=1}^{NC} x_i = 1 \quad ; \quad \sum_{i=1}^{NC} y_i = 1$$

$$\sum_{i=1}^{NC} z_i h_i^F(T_F, P_F) + Q = (1 - v) \sum_{i=1}^{NC} x_i h_i^L(T, P) + v \sum_{i=1}^{NC} y_i h_i^V(T, P)$$

siendo:

F, L, V : caudales molares o indicadores de alimentación, líquido y vapor, respectivamente;

{z_i}, {y_i}, {x_i} : fracciones molares de alimentación, vapor y líquido, respectivamente;

P, T, v : presión, temperatura y fracción vaporizada (V/F), respectivamente;

Q : calor transferido con el exterior, por mol de alimentación (positivo si es un aporte externo);

k_i, h_i : constante de equilibrio líquido - vapor y entalpía del componente i, respectivamente ;

NC : número de componentes en la mezcla.

No es nuestro interés analizar el esquema de cálculo más conveniente para los distintos casos que pueden presentarse al resolver el equilibrio en un tanque flash, pero podemos advertir que la dificultad de realizarlos está determinada, básicamente, por el tipo de funcionalidad que presenten las constantes de equilibrio.

El caso más simple que podemos considerar es el cumplimiento de la ley de Raoult en el equilibrio líquido - vapor:

$$k_i = P_{Vi}(T) / P$$

donde las constantes de equilibrio no dependen de la composición de las fases y las relaciones con la temperatura y la presión se expresan como dos factores separados, donde sólo la primera aporta cierto grado de complejidad.

En el otro extremo encontramos una funcionalidad en la que intervienen, dentro de una expresión compleja, no siempre explícita, la totalidad de los factores, como la que se simboliza en la tercera línea del sistema de ecuaciones planteado.

En este último caso, cualquiera sea el conjunto de datos, tendremos que resolver un sistema de ecuaciones no lineales acoplado.

Todo esto ha de afectar la velocidad con la que será dable alcanzar los resultados e, incluso, con la posibilidad de falta de convergencia en los cálculos.

Una vez hecha esta digresión, importante al momento de analizar comportamientos anómalos de un programa al procesar determinados sistemas, volvamos a centrar nuestro interés en la simulación de un tanque flash.

Como veremos más adelante, en todas las simulaciones debemos tener en cuenta los grados de libertad del sistema que estamos simulando. Veamos cuantos son en las situaciones típicas con las que nos podemos enfrentar.

Por lo pronto, tenemos 3 NC + 3 ecuaciones y un total de 4 NC + 6 variables ($\{z_i\}$, $\{x_i\}$, $\{y_i\}$, $\{k_i\}$, T_F , P_F , T , P , v , Q , sin considerar las entalpías molares de los compuestos puros ya que expresamos su funcionalidad con la presión y la temperatura).

El máximo número de grados de libertad que podemos tener es NC + 3, siempre considerando 1 mol de alimentación, con lo cual los valores de z_i pueden considerarse como los caudales molares de cada componente. Si bien nosotros hemos considerado una única presión para el tanque, el modelo sobre el que trabaja UniSim admite que sean diferentes las de la fase líquida y la del vapor, con lo cual el número de grados de libertad se aumentaría en uno. En nuestro caso no usaremos esta alternativa, restringiéndonos a una única presión para el equipo.

En los problemas que abordaremos, siempre habremos de conocer la composición de la corriente que ingresa al tanque, lo cual consume $NC - 1$ grados de libertad, ya que la fracción individual restante surge por diferencia a 1.

Además de la composición, sabremos cuales son los valores de la temperatura T_F y de la presión P_F , con lo cual el problema queda con sólo dos variables libres.

Existen cuatro casos típicos [Biegler, 1997], según se fije:

- a) el factor de recuperación de un compuesto en una de las fases de salida y la presión o temperatura de operación;
- b) la presión y la temperatura de operación;
- c) la fracción vaporizada y la presión o temperatura de operación;
- d) el calor intercambiado y la presión o temperatura de operación.

El separador disponible en UniSim nos permite resolver, con facilidad, los casos b) y d) y, calculando previamente el caudal molar global del líquido o el vapor, el caso c). La primera de las alternativas, en cambio, no es tan directa, como veremos más adelante.

No olvidemos, además, que todo el análisis lo hemos hecho en base a un mol de alimentación. En el simulador, para tener completamente definida la corriente que ingresa al tanque flash, deberemos dar, además de la composición y de dos variables intensivas (P , T , v , etc.) una variable extensiva como el caudal molar o másico.

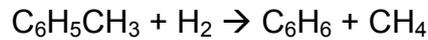
Un ejemplo de aplicación

Lejos de constituir una mera construcción teórica, el tanque flash es una unidad fundamental para la economía de un proceso, al permitir una primera separación, a muy bajo costo, de los compuestos que integran la corriente que debe ingresar a la zona de separación [Douglas, 1988].

La utilidad de un tanque flash, colocado antes de la zona de separación, es realmente significativa cuando, en la mezcla que debemos procesar, existen

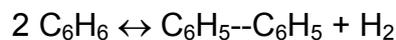
dos grupos de compuestos y la volatilidad relativa del más pesado del primer grupo (livianos) respecto del más liviano del segundo (pesados) es mucho mayor que uno.

Por ejemplo, en la producción de benceno por hidrodealquilación de tolueno:



la reacción se lleva a cabo a altas temperaturas y presiones, con exceso de H_2 a fin de evitar la formación de compuestos nocivos para la actividad del catalizador.

Existe una reacción secundaria



La corriente de salida del reactor podría encontrarse en las condiciones y composición que vemos en la Tabla 1.

T [°C]	P [bar]	Flujos molares [kgmol/h]				
		H ₂	CH ₄	C ₆ H ₆	C ₆ H ₅ CH ₃	Bifenilo
654	32	391	588	67	23	1

Tabla 1. Datos de la corriente de salida del reactor

Esta corriente deberá someterse a un proceso de separación para recuperar los reactivos no reaccionados. Claramente, el hidrógeno y el metano constituyen un grupo mucho más volátil que el de los aromáticos, los que podrían separarse por destilación.

En tal caso, convendría que a la torre sólo ingresaran benceno, tolueno y bifenilo, logrando así el menor diámetro posible para la unidad.

Vamos a plantearnos la simulación de un tanque flash donde se llevará a cabo una primera separación del efluente del reactor de hidrodealquilación. Admitiremos que el enfriamiento lo vamos a realizar con agua, disponible a unos 30 °C, con lo cual la temperatura de trabajo del tanque estará alrededor de los 35 °C.

La lectura exige realizar la simulación

Comenzamos una nueva simulación, elegimos Peng-Robinson como paquete de propiedades y los compuestos presentes en la corriente de salida del reactor.

Agregamos, luego, un Separator , que es el nombre bajo el cual se encuentra la operación unitaria Tanque Flash y tres corrientes de materia. Hagamos las conexiones necesarias.

UniSim dispone de cuatro separadores que admiten múltiples alimentaciones y se diferencian por el número y tipo de salidas, a saber:

- Separator: una corriente de salida en fase vapor y otra líquida.
- 3-Phase Separator: una corriente de salida en fase vapor y dos líquidas.
- Tank: una corriente líquida y otra de vapor. En general se usa para simular acumuladores.
- Single Outlet Vessel: una única corriente de producto.

Claramente, las dos primeras son las usadas en simulación estática. Estas alternativas se seleccionan desde la opción Parameters de la solapa Design.

Volvamos al ejemplo y en la corriente de entrada al separador introduzcamos las condiciones de la salida del reactor, de acuerdo a la tabla 1. Podemos ver que el separador se calcula, debido a que, por defecto, toma la presión P dentro del tanque igual a la de la corriente de alimentación P_F (valor nulo para la pérdida de carga) y un comportamiento adiabático para el equipo (cantidad de calor transferida Q igual a cero).

Vamos a admitir que en el equipo se verifica una pérdida de carga de 20 kPa y que se produce una transferencia de calor Q que nos permite alcanzar 35 °C en las corrientes de salida.

Para ello, en la opción Parameters de la solapa Design del separador, demos el valor 20 kPa a la pérdida de carga del equipo, como podemos ver en la figura 2. Si fuésemos a considerar distinta presión en la fase vapor que la que existe en el interior del equipo, por ejemplo, debido a la presencia de un deshumidificador, en esta solapa, en el campo Vapour Outlet, deberíamos indicar la pérdida de carga adicional en esa fase.

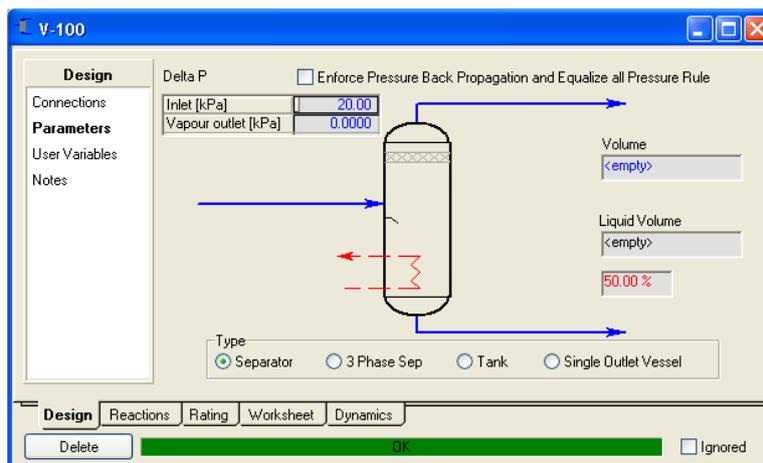


Figura 2. *Parámetros del Tanque Flash*

El otro valor por defecto que debemos modificar es la cantidad de calor Q ; pero lo vamos a hacer de una manera indirecta. Nos habíamos propuesto una temperatura de salida de $35\text{ }^{\circ}\text{C}$, frente a un ingreso de $654\text{ }^{\circ}\text{C}$. Esto nos obliga a agregar una corriente de energía, conectada al separador. Una vez que lo hacemos, podemos ingresar el valor de $35\text{ }^{\circ}\text{C}$ en cualquiera de las corrientes de salida y el simulador ajustará el valor de Q .

Podemos ver que en esta simple operación se recupera, en la fase líquida a ser tratada en el sector de separación, más del 90% de los aromáticos contenidos en el efluente del reactor, y una reducción del caudal a procesar en la columna de destilación que apenas supera el 8% del original.

El simulador confirma nuestra presunción: el tanque flash nos va a permitir disminuir los costos de separación al bajar, drásticamente, el caudal de la corriente a tratar.

Existe una pérdida del producto buscado (fundamentalmente benceno) que forma parte de la corriente gaseosa que se recicla, por lo que deberíamos plantearnos, junto al correspondiente análisis económico, alguna operación para recuperarlo.

Otros cálculos relacionados con el equilibrio de fases

Hay un conjunto de cálculos típicos, dentro del análisis del equilibrio de fases en un tanque flash, que requieren de operaciones adicionales a la incorporación del separador flash.

Uno de ellos es, como mencionamos más arriba, el cálculo del equipo cuando se ha fijado el factor de recuperación de un compuesto en una de las fases de salida y la presión o temperatura de operación.

En este caso, el cálculo no es tan directo, ya que UniSim, al igual que otros simuladores, trabaja sólo con valores totales, no permitiendo discriminar los caudales molares individuales. En principio, entonces, no tendremos disponible la información necesaria para calcular el equipo. Podríamos fijar el caudal molar del compuesto en cuestión en la fase que corresponda pero no podríamos hacerlo con el resto.

Sin embargo, con la ayuda de la operación lógica Adjust, que ya hemos visto anteriormente, podemos realizar el cálculo.

Supongamos que tenemos una corriente de 10 kgmol/h de metano (30%), propano (30%) y n-hexano (40%) a 75 °C y 75 bar. Queremos calcular un tanque flash donde a 35 °C se recupera, en la fase vapor, el 80% del propano ingresado.

Elijamos el paquete termodinámico, Peng-Robinson para el ejemplo, e incorporemos al PFD, un separador, tres corrientes de materia y una de energía. Demos los valores de presión y temperatura a la corriente de entrada y el valor de 35 °C a la temperatura de una de las corrientes de salida. Los grados de libertad se han agotado ya que, por defecto, el simulador toma una pérdida de carga nula en el separador.

Para que el Adjust converja más rápido, conviene dar un buen punto de partida. Para ello, antes de incorporarlo, veamos cual debería ser la pérdida de carga en el separador para que el flujo molar global en la fase vapor sea un valor razonable, teniendo en cuenta el factor de recuperación requerido para el propano. Una consideración posible es que esa corriente podría estar compuesta por todo el metano y la cantidad especificada de propano, con lo

cual el caudal molar global sería de 5.4 kgmol/h. Para poder definir en la corriente de vapor este valor de la variable, debemos borrar el de la pérdida de carga que el simulador introdujo por defecto, ya que, de lo contrario, no podríamos hacerlo. La pérdida de carga resultante es cercana a 7000 kPa y el flujo de propano algo superior al 70% del de la alimentación.

Ahora estamos en condiciones de agregar el Adjust con un valor inicial razonable. Elijamos la pérdida de carga del separador (Vessel Pressure Drop) como variable de ajuste y al flujo molar de propano (Comp Molar Flow | Propane) como variable cuyo valor se desea fijar en 2.4 kgmol/h. Previo a esto, deberemos borrar el flujo molar de la fase vapor e introducir 7000 kPa como valor de la pérdida de carga en el separador.

Desde la solapa Parameters fijemos la tolerancia en 0.002 kgmol/h, 500 kPa al tamaño de paso máximo y dejemos en 100 kPa al tamaño de paso inicial. Oprimamos el botón Start, tras lo cual el simulador encuentra el valor deseado. Desde la solapa Monitor del Adjust, podemos ver la evolución realizada para llegar al resultado buscado, como se ve en la figura 3.

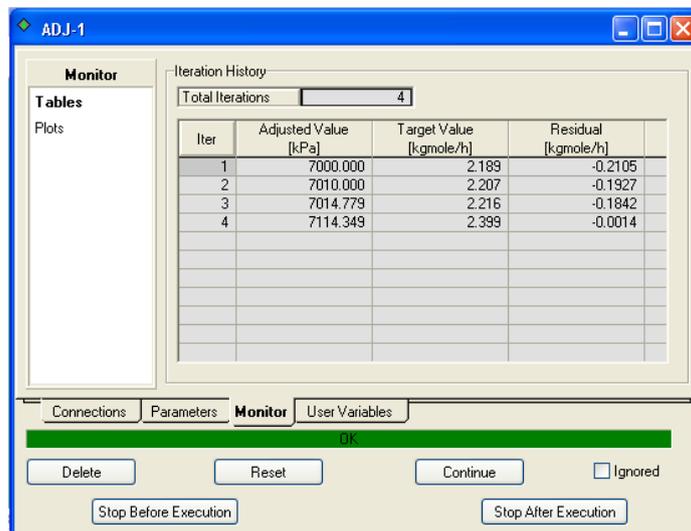


Figura 3. Resultados de las iteraciones

Envolvente de fases y otras herramientas

Un aspecto importante a considerar en el equilibrio líquido-vapor de mezclas multicomponentes es el trazado de la *envolvente de fases*, que representa la relación entre la presión y temperatura en los puntos de burbuja y rocío para una mezcla de composición dada.

Supongamos que tenemos una corriente de 10 kgmol/h de metano (30%), propano (30%) y n-hexano (40%) a 35 °C. Si fijamos la fracción vaporizada en un valor igual a cero, la mezcla se encontrará en su *punto de burbuja* y la presión que calcula el simulador (del orden de 69 bar) es la llamada *presión de burbuja* de la mezcla a 35 °C. Como es obvio, el punto de burbuja, para una determinada composición y temperatura o presión, es una condición de estado. Advertamos que esta condición no es equivalente a fijar una presión, por ejemplo, 70 bar, con un valor de temperatura igual a 35 °C, para la cual la fracción vaporizada resulta ser cero. Existen, en realidad, infinitos valores de P donde esto ocurre: basta que sea superior a la presión de burbuja para obtener un líquido sin trazas de vapor.

Esto no es otra cosa que el cumplimiento de la regla de las fases de Gibbs.

Si en la mezcla anterior, y siempre a 35 °C, fijamos la fracción vaporizada igual a 1 determinaremos el *punto de rocío* para esa mezcla.

En la figura 4 podemos apreciar la envolvente de fases para la mezcla que estamos considerando.

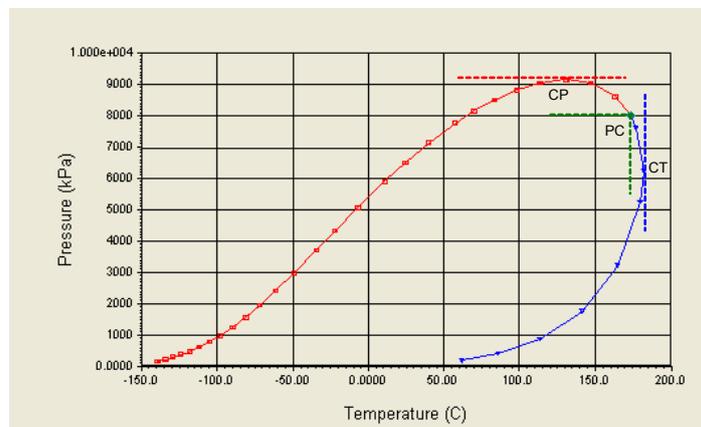


Figura 4. *Envolvente de fases*

La rama superior es la correspondiente a los puntos de burbuja de la mezcla, mientras que la inferior representa los de rocío.

En color rojo hemos resaltado algunos puntos especiales de la envolvente:

a) el punto crítico, PC, donde se unen las dos ramas y carece de sentido hablar de punto de burbuja o rocío;

b) el punto CP (cricondenbar), en el que se registra la presión más alta de toda la envolvente, a la cual todavía puede existir fase vapor;

c) el punto CT (cricondenterm), en el que se verifica la temperatura más alta de la curva, a la cual aún puede presentarse una fase líquida.

En la figura 4 podemos notar que a una temperatura intermedia entre la crítica y la correspondiente al cricondenterm, partiendo de la presión de rocío, primero se produce, como es lógico, un

incremento de la cantidad de líquido presente. Pero, luego, incrementos posteriores de la presión, generan un aumento de la fase vapor, hasta llegar a que toda la mezcla esté en esa fase. Este último tramo se conoce con el nombre de *vaporización retrógrada* y la evolución total la podemos apreciar en

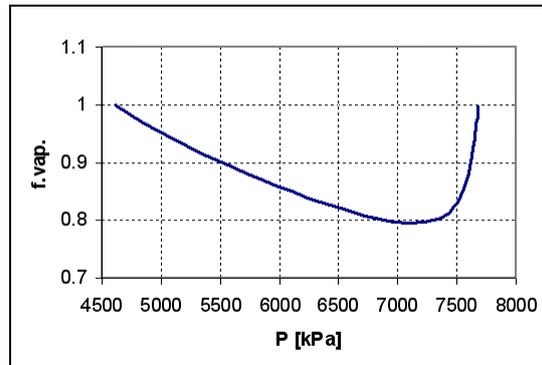


Figura 5. *F.vap vs P para T = 177 °C*

la figura 5.

Un fenómeno similar ocurre para una presión intermedia entre la crítica y la correspondiente al cricondenbar, donde, a partir de una cierta temperatura, un incremento de ésta produce un aumento de la cantidad de líquido en equilibrio con el vapor (*condensación retrógrada*).

Todos los simuladores de procesos, con sus variantes, permiten la construcción de envolventes de fases, así como la determinación del punto crítico y de la temperatura y presión máxima de la curva. Los resultados se disponen en forma gráfica y tabulada.

En general, la generación de una envolvente requiere disponer, en forma previa, de una corriente de proceso donde se encuentre definida, al menos, su composición molar.

Vamos a usar nuestro simulador para determinar la envolvente de fases de la corriente propuesta, metano (30%), propano (30%) y n-hexano (40%).

Elijamos el paquete termodinámico Peng-Robinson y asociémosle los compuestos de la mezcla dada.

La generación de la envolvente es una herramienta que dispone el simulador UniSim. Existen dos maneras de acceder a ella: una es desde la opción Tools|Utilities de la barra de menú y la otra, desde la propia corriente. Elegiremos esta última alternativa para generar la curva.

Seleccionemos, entonces, la corriente y desde la solapa Attachments, elijamos la opción Utilities. Al hacerlo, aparecerán todas las utilidades que se hayan incorporado hasta ese momento a la corriente, como se muestra en la figura 6, donde no hay ninguna todavía. Desde esa ventana se pueden ver, borrar y crear otras nuevas, única alternativa en este caso. Oprimamos, por lo tanto, el botón Create, tras lo cual aparece otra ventana, como la de la figura 7, donde debemos elegir la que deseamos, Envelope Utility, y oprimir el botón correspondiente. Al hacerlo se abre la ventana de la envolvente y en la solapa Design, como vemos en la figura 8, aparecen los valores de temperatura y presión crítica y los de los puntos cricondenbar y cricondenterm.

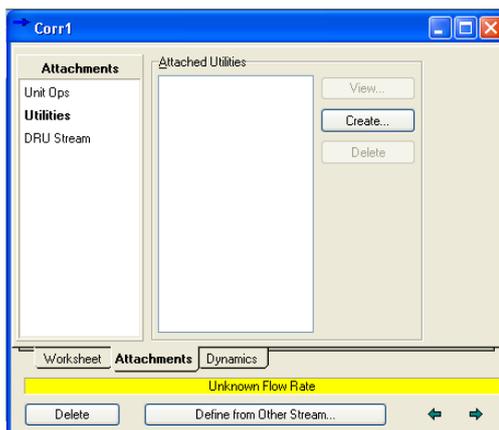


Figura 6. Agregando una Utility

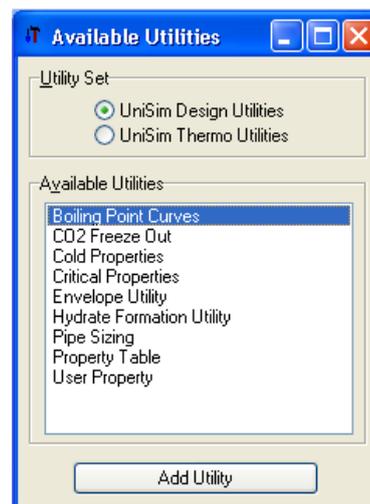


Figura 7. Elijiendo una Utility

Si al paquete termodinámico elegido no le es posible el trazado de la envolvente, el simulador dará un mensaje indicando tal circunstancia. En

algunos casos, el simulador construye la envolvente pero los resultados que obtiene son incoherentes.

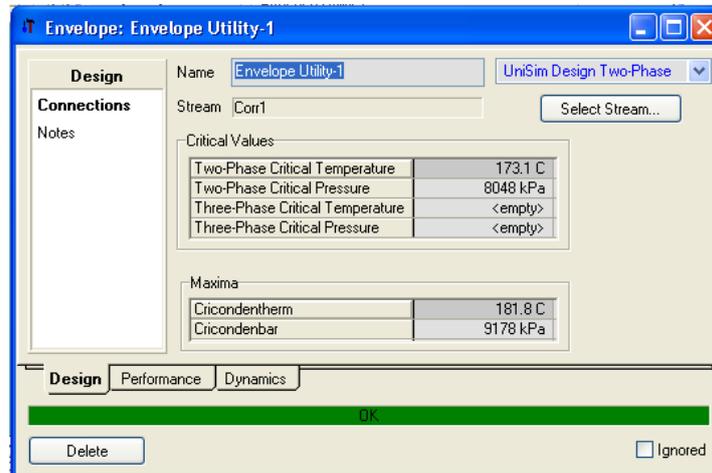


Figura 8. Valores críticos y máximos

Desde la solapa Performance se puede acceder a los resultados tanto en forma gráfica como tabulada para la envolvente en cuestión, tal como se ve en la figura 9. Además, se tiene la posibilidad de seleccionar distintos tipos de gráficos; en este caso se usó el que el simulador tiene por defecto, Presión-Temperatura (P-T).

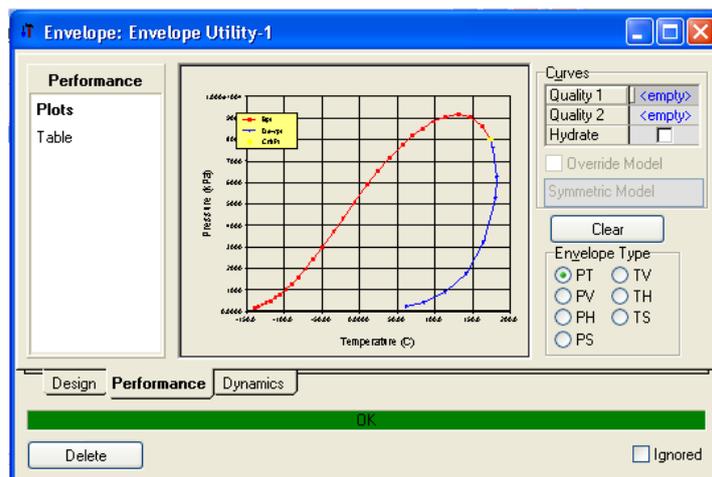


Figura 9. Solapa Performance

Del mismo modo como creamos la envolvente de fases para la corriente, podemos generar nuevas utilidades, por ejemplo, tablas de propiedades con

dos variables independientes, *Property Table*, o estimación de curvas de punto de ebullición bajo distintas metodologías ASTM, *Boiling Point Curves*, entre otras. En todos los casos podemos ver los resultados en forma tabular o gráfica.

Bibliografía

- Biegler L.T., Grossmann I.E., Westerberg A.W., “Systematic Methods of Chemical Process Design”, Prentice Hall, 1997.
- Douglas J.M., “Conceptual Design of Chemical Processes”, McGraw-Hill, 1988.
- UniSim Design Operations Guide.

Propuestas de trabajo

1. La siguiente corriente ha de pasar por un separador trifásico donde la fase vapor estará compuesta básicamente por el H_2 y una de las fases líquidas por el agua. Para minimizar la polimerización del estireno, el separador debe operar entre 50 y 150 kPa y entre 50 y 100 °C.

Flujos molares (kgmol/h)				
Hidrógeno	Agua	Etilbenceno	Estireno	Tolueno
30	820	50	30	2.46

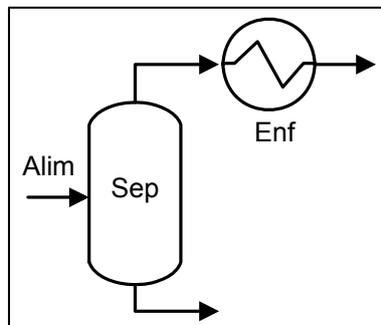
Analice en ese rango de presión y temperatura el comportamiento del caudal de estireno a la salida del separador.

2. Encuentre la cantidad de calor que se necesita extraer a la fase vapor para que condense totalmente.

La corriente de alimentación al sistema, de 100 kgmol/h, se dispone a 150 °C y 1000 kPa y su composición es:

i- pentano	n- pentano	n-hexano	n-heptano
0.2	0.4	0.25	0.15

Adopte una pérdida de carga en el enfriador igual a 10 kPa.



CAPÍTULO 6

ALGUNAS CUESTIONES BÁSICAS EN LA SIMULACIÓN DE UN PROCESO

Planteo del problema

En este tema hemos de abordar una de las cuestiones más importantes a tener en cuenta en una simulación: el análisis de los grados de libertad de nuestro sistema. Si bien los simuladores de proceso, de una u otra forma, llevan un control permanente de los grados de libertad existentes en cada módulo y en el sistema global, nosotros debemos plantearnos ese análisis, al menos en términos conceptuales, antes de comenzar la simulación. De esta forma estaremos en condiciones de establecer la naturaleza “computacional” del problema, en función del conjunto de datos disponibles.

Obviamente, este análisis se ha de tornar tanto más dificultoso cuanto mayor sea la complejidad estructural del sistema que pretendemos simular. En estos casos, nos veremos obligados a particionar nuestro esquema en unidades lo suficientemente simples como para poder realizar el análisis de los grados de libertad en cada una de ellas. Luego, teniendo en cuenta las interrelaciones que las vinculan estaremos en condiciones de determinar los grados de libertad para el sistema completo de acuerdo a la expresión [Rudd & Watson, 1968]:

$$\begin{array}{l} \text{Grados de libertad} \\ \text{del sistema} \end{array} = \begin{array}{l} \text{Suma de los grados de} \\ \text{libertad de cada una de} \\ \text{las unidades} \end{array} - \begin{array}{l} \text{Suma de la información} \\ \text{que intercambian las} \\ \text{unidades} \end{array}$$

Pudiera suceder que nuestro análisis nos condujese a la conclusión que tenemos un número de grados de libertad negativo. Ello indicaría que pretendemos sobre especificar el sistema, con lo que estaríamos planteando un caso imposible de resolver.

En el otro extremo podríamos encontrarnos, después de utilizar toda la información disponible, con un número positivo de grados de libertad. Frente a esto, o bien deberíamos realizar algunas especificaciones adicionales, tantas como grados de libertad tenga el sistema o disponernos a resolver un problema de optimización, una vez fijado un cierto criterio o función objetivo. En algunos simuladores es posible abordar esto último, a costa, por supuesto, de un incremento en la complejidad matemática asociada a la solución.

En realidad nunca se resuelve un problema de optimización considerando el número de grados de libertad que inicialmente se plantean en el problema.

Por el contrario, debemos comenzar por calcular un caso base, en el que, obviamente, habremos agotado los grados de libertad que detectamos al formular el problema. Sobre los resultados obtenidos realizaremos un análisis de significación de las potenciales variables de decisión, para determinar la influencia que cada una de ellas tiene sobre la función objetivo adoptada. [Douglas, 1988].

Para construir el caso base lo habitual es asignarles valores típicos a todas las variables que se han adoptado como de decisión. Estos valores surgen de la aplicación de ciertas reglas heurísticas o criterios aconsejados.

Para aquellas variables que resultan poco significativas, de acuerdo al estudio de significación, mantendremos el valor asignado, en tanto que el de las restantes surgirá de la aplicación del algoritmo de optimización disponible.

La existencia de un número de grados de libertad nulo siempre es requerida en toda simulación pero, en algunos programas, como en el que estamos trabajando, el cálculo se va realizando a medida que se introducen los datos necesarios para especificar el sistema completo o alguna de sus partes.

Además de lo atinente al análisis de los grados de libertad, en este capítulo esbozaremos una posible estrategia para realizar la simulación de un proceso cuando el simulador que disponemos carece de un módulo específico para el equipo en cuestión.

Empecemos por plantearnos el siguiente problema.

En la figura 1 se muestra el esquema de proceso que utilizaremos para concentrar 100 t/h de una solución acuosa de sacarosa al 20% en peso hasta

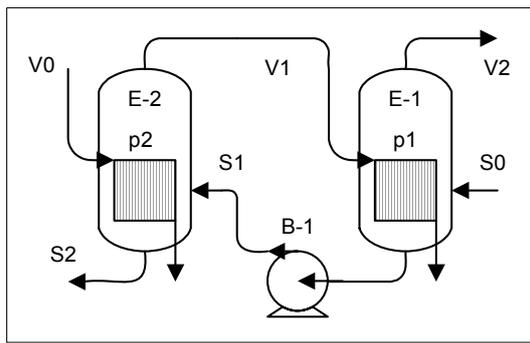


Figura 1. Caso propuesto

alcanzar una concentración del 50%. La solución entrante se encuentra a 85 °C y 1 bar.

Adoptaremos una presión de trabajo de 1.5 bar para el segundo efecto, mientras que el primero operará a 1 bar. Para calificarlo dispondremos de vapor de agua saturado seco a 3.5 bar,

que cederá sólo su calor latente. Admitiremos que ocurrirá otro tanto con el vapor que va del segundo al primer efecto.

Supondremos que la pérdida de carga en ambos lados de los equipos es despreciable. Para la bomba, adoptaremos una eficiencia del 70%.

La primera cuestión que debemos analizar es si la información disponible nos permite realizar correctamente la simulación, esto es, si el sistema carece de grados de libertad.

Otra cuestión es considerar si el simulador con el que estamos trabajando dispone de los módulos necesarios para modelar todas las unidades que componen nuestro sistema.

A esto nos abocaremos a continuación.

Análisis del problema propuesto

Comencemos por considerar el número de grados de libertad que tiene el problema.

Haciendo un análisis conceptual del sistema propuesto podemos ver que si existiese la batería de evaporadores (las áreas y pérdidas de carga serían conocidas) y estuvieran totalmente especificadas las corrientes de entrada al sistema (S_0 y V_0) y las presiones de trabajo en los equipos, las salidas estarían absolutamente determinadas.

Es decir que necesitamos un total de 14 datos: en cada corriente los caudales de cada especie más dos variables intensivas –presión, temperatura, fracción

vaporizada,...—, las áreas de los equipos, las pérdidas de carga y las presiones de trabajo en los mismos. En el problema se han especificado exactamente ese número, a saber:

- caudal total, composición, presión y temperatura de la solución de sacarosa a concentrar (4 valores);
- composición, presión y fracción vaporizada ($v = 1$) del vapor calefaccionante (3 datos);
- fracción vaporizada de los condensados ($v = 0$) (2 datos);
- composición de la solución a la salida (1 dato);
- presiones de trabajo y pérdidas de carga en los equipos (4 datos).

Es decir, nuestro sistema carece de grados de libertad y, en consecuencia, nuestro simulador, una vez modelado el problema, estará en condiciones de entregarnos la solución, entre otros valores, el caudal de vapor a suministrar en el segundo efecto.

Este modo de analizar un sistema requiere de un manejo fluido del funcionamiento de las unidades que lo componen. Otro modo, un poco más laborioso, consiste en formular el conjunto de relaciones que vinculan las variables involucradas, aunque esta vía es de muy difícil aplicación con un simulador modular, donde tenemos cierto grado de desconocimiento de las relaciones que vinculan a las variables en cada uno de los módulos.

Reiteramos que cualquiera de estas dos vías, en distinto grado, quedan restringidas, en la práctica, a la consideración de problemas de mediana complejidad. El análisis de los de mayor envergadura, como dijimos, deberá ser realizado haciendo uso de técnicas de descomposición o, por una vía más cómoda, analizando el cómputo que efectúa el propio simulador.

En el caso que nos ocupa, aunque luego el simulador utilice otra formulación equivalente, el modelo podría ser:

Evaporador E -1

$$S_0 = S_1 + V_2$$

Balance global de materia

$$S_0 x_0 = S_1 x_1$$

Balance de soluto

$$T_1 = f(p_1, x_1) \quad \text{Ascenso ebulloscópico}$$

$$V_1 \lambda(p_2) + S_0 h_L(p_1, T_0, x_0) = V_2 \lambda(p_1) + S_1 h_L(p_1, T_1, x_1) \quad \text{Balance de calor}$$

Bomba B -1

$$\Delta H_B = S_1 [h_L(p_2, T_1, x_1) - h_L(p_1, T_1, x_1)] \quad \text{Balance de energía}$$

Evaporador E -2

$$S_1 = S_2 + V_1 \quad \text{Balance global de materia}$$

$$S_1 x_1 = S_2 x_2 \quad \text{Balance de soluto}$$

$$T_2 = f(p_2, x_2) \quad \text{Ascenso ebulloscópico}$$

$$V_0 \lambda(p_0) + S_1 h_L(p_2, T_1, x_1) = V_1 \lambda(p_1) + S_2 h_L(p_2, T_2, x_2) \quad \text{Balance de calor}$$

En el planteo existen 9 ecuaciones y 9 variables no especificadas (V_0 , V_1 , V_2 , ΔH_B , T_1 , T_2 , S_1 , S_2 y x_2), por lo que el sistema carece de grados de libertad, coincidiendo con el obtenido a través del análisis conceptual.

Una vez resuelta esta primera cuestión deberemos plantearnos el esquema de simulación a adoptar.

Lo primero que encontramos es que nuestro simulador carece de un módulo específico para representar un evaporador.

Una posible solución es desdoblarse el funcionamiento del equipo en dos etapas: la primera, donde se realiza el calentamiento de la solución y, a continuación, otra, donde se separa el vapor, en equilibrio con la corriente líquida remanente. Obviamente, para la primera utilizaremos un equipo de intercambio térmico en tanto que para la segunda podemos echar mano de un tanque flash, siempre y cuando utilicemos un paquete de propiedades adecuado donde, entre otras cosas, la volatilidad de la sacarosa, a las temperaturas de trabajo, sea nula.

Afortunadamente, los modelos de coeficiente de actividad aplicables, como NRTL, Wilson, van Laar, etc., cumplen con esta premisa y, en consecuencia, nos permiten simular el evaporador de esta manera.

Este modo de resolver falencias del simulador en uso debe realizarse con suma cautela, cuidando que, eventualmente, no resulten violados los principios y leyes aplicables al proceso.

Para visualizar este tipo de situaciones riesgosas, suspendamos, por un momento, el análisis de nuestro problema de evaporación y postulamos, a través de un sistema absurdo, una situación que transgrede las cuestiones más elementales de la Termodinámica.

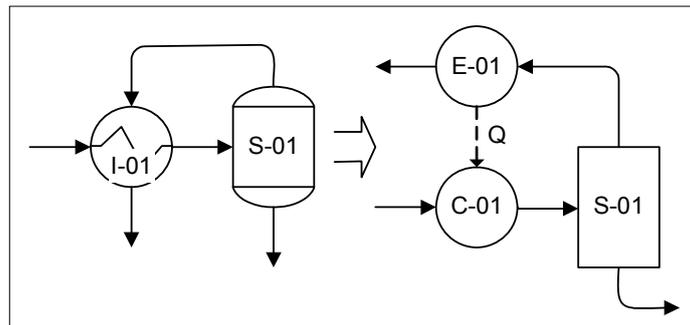


Figura 2. Sistema absurdo

Vamos a simular el sistema ubicado en la parte izquierda de la figura, donde pretendemos que la corriente que ingresa al flash S-01 se caliente en el intercambiador I-01 condensando la fase vapor que sale del flash. Esto es imposible ya que, de lo contrario, tendríamos a nuestra disposición una máquina de movimiento perpetuo.

Pero supongamos que no advertimos esto y en nuestra simulación, en lugar de usar para I-01 el módulo de intercambio específico, lo reemplazamos por un enfriador E-01, donde condensa el vapor y un calentador, C-01, vinculado al anterior por una corriente de energía Q, como podemos ver en la parte derecha de la figura 2.

Vamos a simular ese sistema considerando que deberemos tratar 10 kgmol/h de una mezcla equimolecular de propano, n-pentano, n-hexano y n-heptano, que se encuentra a 15 °C y 1 bar y pretendemos que la fracción vaporizada en S-01 sea 0.75. Por simplicidad, fijamos un valor nulo para la pérdida de carga en ambos equipos de intercambio.

En el sistema planteado, al conocerse todos los valores de la corriente de entrada, si se fija el valor de Q , la salida quedará especificada; esto es, se requiere un dato adicional para consumir la totalidad de los grados de libertad. Ese valor es el de la fracción vaporizada igual a 0.75.

El sistema, así planteado, carece de grados de libertad.

Habrá que ver, entonces, qué cantidad de calor deberá transferir el vapor para obtener la fracción vaporizada pretendida.

Abramos una vez más nuestro simulador y adoptemos como modelo termodinámico, dado el tipo de mezcla y las condiciones operativas, una ecuación de estado, por ejemplo, SRK. A continuación agreguemos los cuatro componentes.

Comencemos ahora a construir nuestro esquema de simulación. Desde el PFD, haciendo uso de la paleta de objetos, agreguemos una corriente de materia. Démosle el nombre Alim y fijemos los datos de la mezcla a tratar: temperatura, presión, composición y caudal molar.

Agreguemos un calentador, C-01. Ingreseemos al modo Attach y conectemos la salida de Alim con la entrada de C-01.

Incorporemos un separador, S-01, y un enfriador, E-01, y hagamos las conexiones correspondientes.

Fijemos la pérdida de carga de ambos equipos de intercambio igual a cero desde la opción Parameters de la solapa Design.

Podemos observar que los tres equipos están en rojo, indicando que les falta una corriente de salida en S-01 y E-01 y una corriente de energía en C-01 y E-01.

Generemos las salidas de materia necesarias y, para subsanar la parte energética, vinculemos la salida de energía de E-01 con la entrada de C-01.

Cuando hacemos esto, el simulador todavía no resuelve el sistema: los equipos bordeados en amarillo y las corrientes de materia aparecen en celeste, salvo la alimentación que está resuelta y está en azul. Esto es lógico, ya que, de acuerdo al análisis que hicimos previamente el sistema aún tiene un grado de libertad.

Para consumirlo, en la corriente que ingresa al separador, especifiquemos su fracción vaporizada en 0.75.

¡Y el simulador obtiene un resultado! Pero si analizamos los valores obtenidos veremos que la corriente que ingresa al separador se calienta desde los 15 °C iniciales hasta unos 60 °C, en tanto que el vapor reduce su temperatura desde esos 60 °C hasta una temperatura inferior a 2 °C.

Lo absurdo del planteo inicial queda oculto en el esquema de simulación que adoptamos, por el que arribamos a una solución incoherente: la fuente termina cediendo calor a un sumidero que se encuentra a una temperatura más alta.

Nos podríamos plantear que hubiera pasado si, en lugar del conjunto calentador-enfriador utilizado, hubiésemos usado el módulo previsto para un intercambiador. Podemos hacerlo como ejercicio y ver que el cálculo procede pero el simulador avisa que se ha producido un cruce de temperaturas.

Esto es común en los simuladores de proceso: en el mejor de los casos se obtiene un mensaje de advertencia, pero el programa nunca deja de ofrecer un resultado. La lógica constructiva, que busca la mayor robustez numérica posible, hace que el cálculo proceda, aún frente a ciertas condiciones de error producidas por planteos erróneos o incoherentes.

Cuidado, pues, cuando se estructura una simulación y mucho más cuando se analiza la información obtenida.

Volviendo a nuestro problema, el arreglo propuesto para paliar la ausencia de un módulo para evaporadores nos conduce al esquema de la figura 3 para realizar la simulación del problema propuesto:

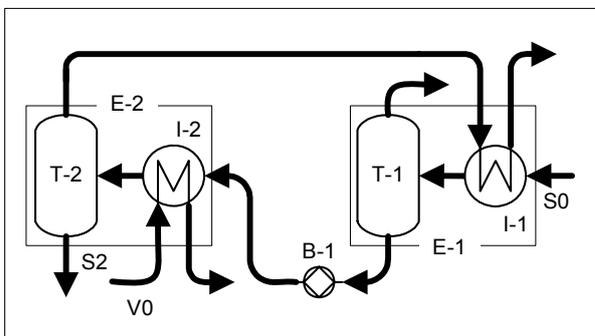


Figura 3. Representación de los evaporadores

Podemos ver, dentro de los recuadros E-1 y E-2, la combinación de intercambiador-flash que usamos para representar los evaporadores.

Advirtamos que es imposible que se produzca una transgresión termodinámica como la vista

anteriormente. Aquí las presiones de trabajo en uno y otro efecto nos aseguran un comportamiento coherente en los equipos de intercambio.

De acuerdo al análisis que realizamos anteriormente el problema carece de grados de libertad, con lo cual, dadas las características del simulador que estamos usando, una vez que estructuramos el esquema de simulación e ingresemos los datos, hemos de obtener, inmediatamente, los valores de las propiedades de todas las corrientes del sistema.

Abramos el simulador e iniciemos un nuevo caso. Elijamos el paquete de propiedades que nos parezca adecuado (NRTL, por ejemplo) e incorporemos los compuestos WATER y SUCROSE.

Ignoremos el aviso del simulador respecto a la adopción de coeficientes binarios nulos y comencemos con la estructuración de la simulación.

Agreguemos ahora dos corrientes de materia, la alimentación de la solución a concentrar, S0, y el vapor externo, V0.

De acuerdo a los datos del problema que pretendemos simular, en S0 fijemos $T = 85\text{ °C}$, $P = 1\text{ bar}$, el caudal másico igual a 100000 kg/h y las fracciones másicas de agua y sacarosa 0.8 y 0.2, respectivamente.

En V0 establezcamos $P = 3.5\text{ bar}$, la fracción vaporizada igual a uno y las fracciones molares de agua 1 y de sacarosa 0.

Los invitamos a que vean cómo ha quedado la información de las corrientes S0 y V0 (las podemos ver a ambas a la vez, usando, desde el menú, la opción Tools|Workbook). ¿Qué diferencias y similitudes se pueden apreciar?

Comencemos a incorporar los módulos que representan a los distintos equipos. Agreguemos dos intercambiadores, Int-01 y Int-02, dos separadores, Sep-01 y Sep-02 y una bomba, B-01. Incorporemos la corriente de energía que necesita la bomba y las corrientes de salida para que el diagrama de proceso sea como el de la figura 4.

Podemos ver que el sistema no es exactamente el que corresponde al de la figura 3. La razón de esta diferencia es evitar, por ahora, la inclusión de un reciclo de materia, con el consiguiente proceso iterativo que siempre complica el cálculo.

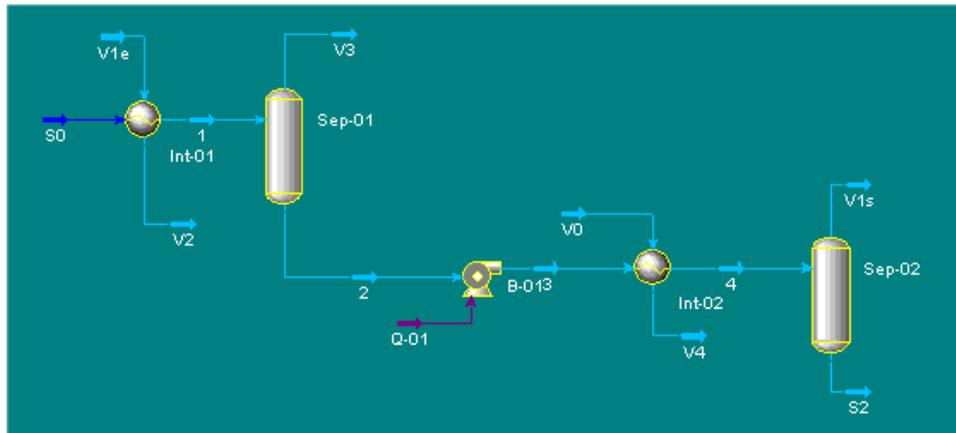


Figura 4. Sistema sin reciclo

Esta estrategia siempre es conveniente frente a problemas de iteración. En estos casos, siempre se requerirán valores iniciales para la corriente de reciclo y cuanto más ajustados sean éstos, más rápida será la convergencia. El esquema propuesto nos permite tener una idea de cuales pueden ser estos valores.

Desde la solapa Design en la opción Parameters, especifiquemos la eficiencia y el salto de presión en la bomba y las pérdidas de carga en ambos lados de los equipos de intercambio. Luego, establezcamos que los vapores de calefacción sólo ceden su calor latente: el valor de la fracción vaporizada pasa de 1 a 0.

También deberíamos especificar el modelo de cálculo adecuado a la situación, como veremos en el capítulo que trata de equipos de intercambio térmico. No lo haremos ya que, en este caso, ese cambio es irrelevante.

Podemos ver que han aparecido algunos valores en ciertos puntos, por ejemplo, en la corriente V4, la presión, cuando se especificó la pérdida de carga y la temperatura cuando establecimos que sólo se cedía el calor latente.

Especifiquemos la composición que se requiere en la corriente S2, fracciones másicas iguales para ambos compuestos.

Así como está planteado tiene aún, un grado de libertad: por ejemplo, la cantidad de calor que cede la corriente V1e.

Para fijarla, establezcamos en V1e, un flujo molar de 1000 kgmol/h, la fracción vaporizada igual a uno y las fracciones molares de agua 1 y de sacarosa 0 y la presión en 1.5 bar, igual a la existente en el separador Sep-02.

En este momento, el sistema se queda sin grados de libertad, sin embargo, el flowsheet no se resuelve. Podemos ver que el simulador avisa que, en los intercambiadores, falta ingresar el dato para una especificación activa y, además, que el equipo está sobreespecificado.

Para solucionar el inconveniente, ingresemos a ambos intercambiadores y desactivemos la especificación de UA, activa por defecto. Ahora sí, podemos ver todos los equipos en color gris y las corrientes en azul, indicando que el caso está resuelto.

Dijimos que, al resolver el caso sin reciclo, podríamos tener una idea de los valores a usar para la suposición cuando lo incorporásemos. Con el valor de 1000 kgmol/h en V1e, obtenemos 2480 kgmol/h de vapor en Sep-02. Si probamos ahora, con 1750 kgmol/h (el promedio de los valores anteriores), el caudal molar del vapor resultante en Sep-02 es de 1741 kgmol/h, un valor satisfactorio para comenzar una iteración.

Pero como quedó dicho antes, en el caso que nos proponemos simular, la salida del vapor de Sep-02 debe ingresar al intercambiador Int-01. Borremos, por lo tanto, la corriente V1e y hagamos la nueva conexión. Podemos observar que, aunque el sistema carece de grados de libertad, el flowsheet no se resuelve. El simulador necesita que lo “ayudemos” a resolver el reciclo. Para ello, disponemos del objeto Recycle.

Este objeto tiene una entrada y una salida e incluye una operación matemática que las vincula. Nosotros le podemos fijar el sentido en que opera: hacia delante (forward) la variable que se ajusta es la salida, hacia atrás (backward), la entrada. En ambos casos la restante corriente es inicialmente supuesta.

Para poder conectar la operación reciclo, debemos previamente cortar la corriente V1s. Para ello, una de las formas de hacerlo es, desde la barra de herramientas del PFD, activar la herramienta Break Connection . El cursor toma la forma X. Lo movemos hacia la corriente V1s hasta que la toque. Cambiará su aspecto a la marca ✓ y, al seleccionarla, la conexión se rompe.

Ahora sí, elijamos, desde la paleta de objetos, el ícono  y agreguémoslo al PFD. Démosle un nombre, por ejemplo, R-01. Conectemos su entrada, con el vapor V1s y la salida con Int-01. Démosle el nombre V1e a la corriente de salida generada.

Ingreseemos a R-01 para especificar, desde la solapa Worksheet, los valores de la corriente V1e: 1.5 bar de presión, una fracción vaporizada de 1, 1750 kgmol/h de flujo molar y la composición.

Podemos ver que, si bien el flowsheet se resolvió, los valores del caudal molar en V1s y V1e difieren significativamente. La razón de estas diferencias se encuentra en las cotas de error que maneja el simulador. Estas cotas se componen, para cada variable, de dos elementos, uno interno E1, que no se encuentra disponible para el usuario, y otro, E2, que se puede modificar desde la solapa Parameters. La cota que se utiliza en los cálculos resulta del producto de ambos elementos. En la tabla 1 se indican los valores de E1 para distintas variables.

Variable	Cota Interna
Fracción vaporizada	0.01
Temperatura	0.01
Presión	0.01
Flujo	0.001**
Entalpía	1.00
Composición	0.0001
Entropía	0.01
** La tolerancia en el flujo es relativa	

Tabla 1. Cotas Internas de Recycle

El valor por defecto de E2 para todas las variables es 10. Con esto, la cota (relativa) que está manejando el simulador para el caudal molar es del 1%, esto es, para los valores de V1e o V1s, un error absoluto de algo más de 17 kgmol/h, lo que justifica el resultado encontrado. Si queremos más precisión deberemos bajar el valor de E2 a 1, por ejemplo. Podemos ver que se alcanza el límite de iteraciones sin alcanzar la convergencia. Aunque le pidamos al

simulador que continúe con el cálculo, no logra equiparar los valores de V1e y V1s, en un número razonable de intentos.

Cuando aparecen problemas de convergencia, tenemos tres posibles vías de solución: disminuir la precisión, aumentar el número de iteraciones o cambiar el método iterativo. Lo primero sería volver a la situación inicial, lo segundo, lo hemos intentado al pedirle al simulador que continúe con el cálculo. Resta modificar el método iterativo.

Desde la opción Numerical de la solapa Parameters elijamos Dominant Eigenvalue en lugar de la opción Wegstein, que es la opción por defecto.

El método Dominant Eigenvalue es mucho más potente que Wegstein, pero debe usárselo en situaciones estrictamente necesarias, ya que al realizar más cálculos siempre lentificará la simulación.

En este caso, el simulador inmediatamente encuentra la solución buscada. El consumo de vapor de 3.5 bar resulta ser de unos 1887 kgmol/h, equivalentes a 34000 kg/h.

A modo de ayuda:

Cuando la corriente sobre la que se realizará el corte tiene gran cantidad de información a fijar, resulta conveniente utilizar el siguiente procedimiento para instalar la operación Recycle:

- a) Resolver la simulación sin cerrar el reciclo
- b) Crear una nueva corriente (S2) y definirla con los valores que tiene la corriente (S1) sobre la que se colocará la operación Recycle. En la definición, haremos uso del botón “Define from other Stream”, indicando las propiedades a copiar en la ventana que se abre “Spec Stream As”.
- c) Suspender el cálculo de la simulación.
- d) Colocar la corriente creada ingresando a la operación donde se completa el reciclo.
- e) Agregar una operación Recycle a la que ingresa la corriente S1 y de la que sale S2.
- f) Reiniciar el cálculo.

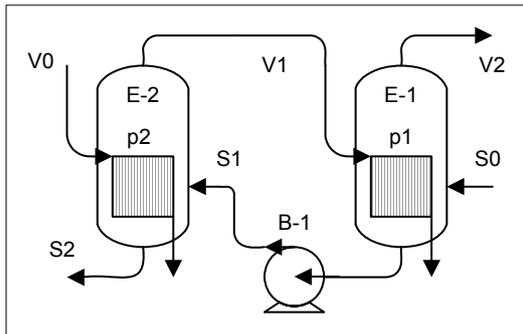
De este modo, cuando el cálculo se reinicia, todas las corrientes tienen un valor estimado y no es necesario haber realizado suposición alguna.

Bibliografía

- Douglas, J.M., *“Conceptual Design of Chemical Processes”*, Mc-Graw Hill, 1988.
- Rudd, D.F.; Watson, C.C., *“Strategy of Process Design”*, Wiley, 1968.
- UniSim Design Operations Guide.

Propuestas de trabajo

1. En este capítulo, se realizó la simulación del esquema de proceso de la figura donde se pretendía concentrar 100 t/h de una solución acuosa de sacarosa al 20% en peso hasta alcanzar una concentración del 50%. La solución entrante se encontraba a 85 °C y 1 bar.



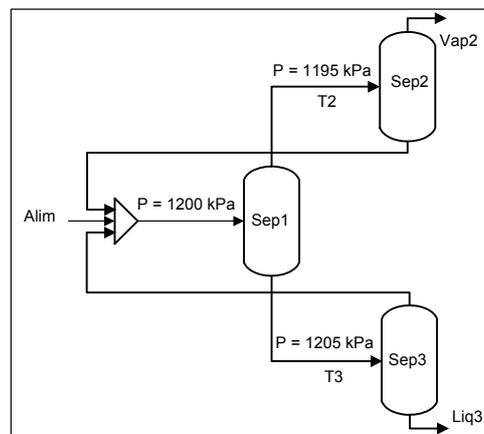
Las presiones de trabajo eran de 1 bar para el primer efecto y 1.5 bar en el segundo. Como medio calefaccionante se usó vapor de agua saturado seco a 3.5 bar, cediendo sólo su calor latente. Se admitió que ocurría otro tanto con el vapor que va del segundo al primer

efecto.

Se supuso despreciable la pérdida de carga en ambos lados de los equipos. Para la bomba, se adoptó una eficiencia del 70%.

¿Cuál es el ahorro en consumo de vapor que se consigue con el esquema planteado en el curso, frente a realizar la concentración en un único efecto que opere a 1 bar?

2. Para el sistema de la figura,



donde las condiciones de la corriente de alimentación son las siguientes:

Temperatura (°C)	Presión (kPa)	Flujos molares (kgmol/h)			
		Propano	n-Pentano	n-Heptano	n-Octano
150	1200	20	40	25	15

Realice, usando la herramienta DataBook, un estudio de variación de las fracciones molares del n-Pentano en la corriente Vap2 y el n-Heptano en Liq3, si la temperatura T2 toma los valores 125°C, 135°C y 145 °C y la T3, los valores 155°C, 160°C y 165°C.

En todos los casos, los valores de presión anotados son los de trabajo de los separadores.

Para cumplimentar los valores de presión y temperatura a la entrada de Sep2 y Sep3 se debe completar el esquema con el uso de bombas, válvulas, calentadores y enfriadores, según el caso.

CAPÍTULO 7

TRATAMIENTO DE RECICLOS EN SIMULADORES MODULARES

Consideraciones generales

Hemos visto previamente, en un ejemplo simple, el uso de la operación lógica Recycle. En el caso analizado, nos resultó sencillo elegir su ubicación, pero, no siempre suele serlo.

Cuando existen reciclos de información, resulta clara la imposibilidad de efectuar el cálculo del sistema en forma directa. Para hacerlo, deben suponerse los valores de una o varias corrientes, proceder al cálculo -de acuerdo a las suposiciones efectuadas- e iterar sobre los valores adoptados.

Las corrientes donde se ubican las operaciones Recycle se denominan *corrientes de corte (tear streams)*. Sobre estas corrientes de corte se deberán suponer una o más variables (temperatura, presión, caudal) y luego verificar la exactitud de esta suposición.

Para lograr que la estructura resultante sea acíclica, deberemos elegir una o más corrientes de corte, lo que constituye el llamado conjunto de corte. Para seleccionar este conjunto tendremos en cuenta que la dificultad de cálculo asociada sea mínima, considerando el número de variables del conjunto y la estabilidad numérica de la iteración. Existen otras cuestiones, como la información disponible, que comentaremos más adelante.

Como dijimos, en el ejemplo visto previamente bastó la simple inspección para determinar el conjunto de corte. En casos de mayor complejidad es preciso instrumentar una cierta metodología para individualizarlo.

Generación de la matriz de ciclos y arcos

Realizaremos el análisis basándonos en el diagrama de proceso de la figura 1, que representa una planta de acondicionamiento de gas natural para su transporte, donde se trata de preparar el producto (corriente 7, en la figura) de modo que su punto de rocío cumpla una cierta especificación. En la simulación supondremos que la alimentación está totalmente definida, que se conocen las pérdidas de carga en los equipos de intercambio, la temperatura de la corriente 4 y la diferencia de temperatura a la entrada de E100 entre las corrientes 2 y 7. Además, admitiremos que la presión a la salida del compresor es la misma que la de la alimentación al sistema y que la corriente que ingresa a la columna hace a una presión media entre las de tope y fondo, ambas conocidas.

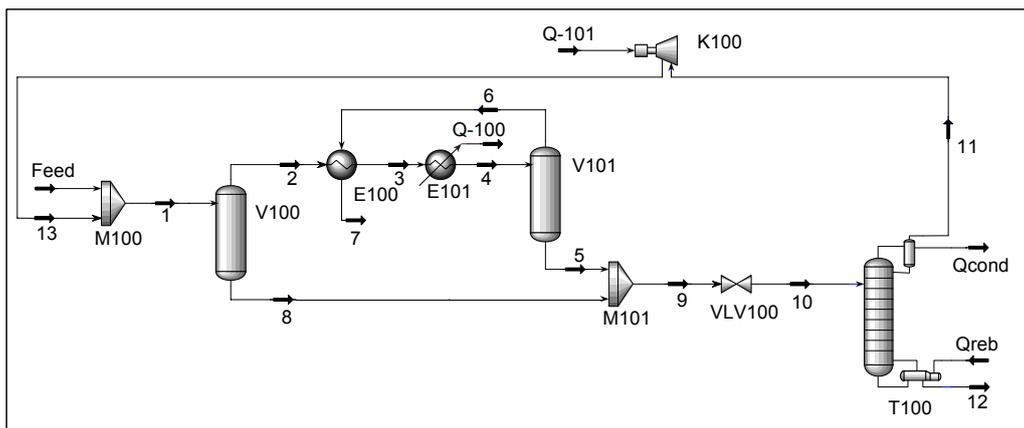


Figura 1. Sistema de acondicionamiento de gas natural

En la columna la cantidad de información suministrada permite que el simulador, dada una cierta alimentación, la resuelva totalmente.

Si en el sistema admitimos que la alimentación es una corriente conocida, que E100 es un equipo existente, que la cantidad de calor removida y la pérdida de carga en E101 y la energía entregada en K100 son valores conocidos, y que la columna es un equipo existente y sus condiciones operativas están fijas, está claro que este sistema tendrá definido su funcionamiento. La alimentación y la columna cumplen estas premisas, con lo que restan cinco datos por especificar (uno en el compresor y dos en cada equipo de intercambio). Para agotar esos

grados de libertad adoptaremos las pérdidas de carga en E100 y E101, la condición a la salida de K100, la temperatura en la corriente 4 y el salto entre T_2 y T_7 .

Para facilitar el análisis, transformaremos el diagrama de proceso en el de la figura 2. Allí se han indicado solamente los bloques que representan a los equipos del sistema y las corrientes de interconexión entre ellos, que son las únicas que nos interesan para la aplicación de los algoritmos que analizaremos.

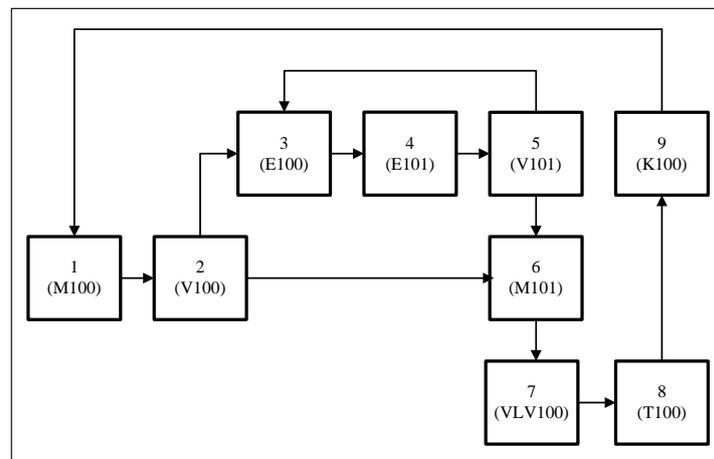


Figura 2. Diagrama de flujo de información

Además, también por simplicidad, hemos identificado a los bloques con los números del 1 al 9.

La selección de un conjunto de corte es un tema profusamente abordado en la literatura. En todos los enfoques pueden visualizarse dos instancias sucesivas:

- la detección de todos los ciclos de información presentes en el sistema;
- la selección del conjunto de corte propiamente dicho.

Para la ejecución del primer paso hemos elegido, de entre un número importante de algoritmos, el debido a Forder y Hutchison modificado por Westerberg.

Para la aplicación del mismo se requiere disponer de la llamada matriz de adyacencias, un arreglo de n filas por n columnas, siendo n el número de nodos o bloques que componen el sistema. En esta matriz el elemento de la fila i y columna j indica si existe o no una corriente que abandona el nodo i para ingresar al nodo j , *arco ij* . Dado que vamos a admitir que todos los arcos

involucran el mismo número de variables desconocidas, los elementos de la matriz de adyacencias pueden ser numéricos o lógicos.

En la figura 3 se muestra la correspondiente matriz para el sistema de la figura 2.

A partir de esta información es posible construir la *matriz de ciclos y arcos*, donde se individualizan la totalidad de los ciclos de información presentes en el sistema y, para cada uno de ellos, los arcos que se encuentran involucrados.

	1	2	3	4	5	6	7	8	9
1		●							
2			●			●			
3				●					
4					●				
5			●			●			
6							●		
7								●	
8									●
9	●								

Figura 3. Matriz de adyacencias

En el cuadro 1 se resumen los pasos a seguir para determinar dicha matriz, a partir de la información contenida en la de adyacencias, de acuerdo al algoritmo de Forder y Hutchison, modificado por Westerberg.

1. Generar una lista inicial vacía. Tomar un nodo cualquiera (fila) de la matriz de adyacencias.
2. Si el nodo figura en la lista de nodos ir a 5; si no
3. Incorporar el nodo a la lista de nodos.
4. Tomar un arco cualquiera que salga del nodo. Considerar el nodo al que ingresa el arco. Ir a 2.
5. La secuencia que comienza en la inclusión previa del nodo en la lista y que concluye con el arco elegido constituye un *ciclo*.
6. Si el ciclo ya ha sido detectado, desecharlo. Si no, incorporarlo a la *matriz de ciclos y arcos*.
7. Eliminar de la lista el último nodo. Considerar el nuevo último nodo (anterior penúltimo).
8. Si el nodo tiene, en la matriz de adyacencias, arcos de salida aún no considerados ir a 4; si no
9. Si en la lista de nodos hay un solo elemento *Terminar*, si no, ir a 7.

Cuadro 1. Generación de la matriz de ciclos y arcos
Algoritmo de Forder-Hutchison-Westerberg

Así, tomado el bloque 1 como nodo inicial, por ejemplo, puede considerarse la secuencia de arcos (1-2), (2-3), (3-4), (4-5) que se resumirían en la lista de nodos

1-2-3-4-5. Al considerar el arco (5-3), el nodo de llegada 3 ya está en la lista y, por lo tanto, la secuencia de arcos (3-4), (4-5) (5-3) o, en forma de lista, (3-4-5-3), constituye un ciclo, identificado con A en la figura 4, que muestra la matriz de ciclos y arcos para el ejemplo.

El proceso sigue, de acuerdo al algoritmo, eliminando el nodo 3 de la lista y eligiendo otro arco aún no analizado que salga de 5, el (5-6). Si luego se eligen los arcos (6-7) (7-8) (8-9) (9-1) la lista queda (1-2-3-4-5-6-7-8-9-1), detectándose otro ciclo, no considerado aún, el (1-2-3-4-5-6-7-8-9-1), indicado como B en la figura 4. De un modo análogo se detecta el último ciclo, C, presente en el ejemplo.

		3	4	5	1	2	5	6	7	8	9	2
Arcos		4	5	3	2	3	6	7	8	9	1	6
C	A	●	●	●								
i	B	●	●		●	●	●	●	●	●	●	
c	C				●		●	●	●	●	●	●
l												
o												
s												

Figura 4. Matriz de ciclos y arcos

Selección del conjunto de corte

Una vez hecho esto, debemos abordar la tarea de encontrar el conjunto de corte más adecuado. Obviamente, el criterio adoptado para juzgar el grado de adecuación es lo que diferencia los distintos algoritmos. Aquí expondremos el debido a Upadhye y Grens, uno de los más consistentes en su concepción básica.

El principio fundamental sobre el que se basa el algoritmo está vinculado al comportamiento que tendrá el sistema durante el proceso iterativo, generado como consecuencia de la elección de un determinado conjunto de corte.

Upadhye y Grens visualizan la existencia de lo que denominan *familias de corte*, distintos conjuntos de corte que poseen el mismo comportamiento en la convergencia del proceso iterativo, lo que resulta fácil de ver a

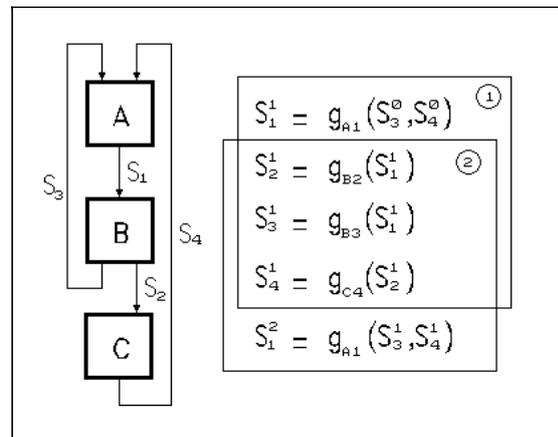


Figura 5. Familias de corte

través de un ejemplo sencillo.

Para el sistema de la figura 5 se ha explicitado el proceso iterativo que da comienzo con la suposición de valores para S_3 y S_4 (S_3^0, S_4^0) y el consecuente cálculo de S_1 , luego S_2 y S_3 y por fin S_4 , cerrando el ciclo (recuadro 1).

Puede verse que lo anterior es equivalente a comenzar el proceso con S_1 como corriente de corte, cuando $S_1 = S_1^1$ (recuadro 2).

Con esto la convergencia del proceso iterativo deberá ser igual tanto si se considera como conjunto de corte a S_3 y S_4 como a S_1 , constituyendo estos dos grupos parte de una misma familia de corte.

Estas familias se generan de un modo muy simple, por la aplicación de la *regla de reemplazo* que puede enunciarse como sigue:

Si $\{D_1\}$ es un conjunto de corte y A_i un nodo donde todos sus arcos de entrada a_{ki} están en $\{D_1\}$, el conjunto $\{D_2\}$, que se obtiene al reemplazar todos los arcos de entrada a_{ki} por todos los arcos a_{ik} de salida de A_i , forma parte de la misma familia de corte que $\{D_1\}$.

En el ejemplo de la figura 5 $\{D_1\} = \{S_3, S_4\}$ incluye la totalidad de las entradas al nodo 1, luego, por la aplicación de la regla enunciada, el conjunto de corte $\{D_2\} = \{S_1\}$ pertenece a la misma familia que $\{D_1\}$, como se había visto.

Una familia de corte se caracteriza por su *vector de ciclos*, donde en la componente i del mismo se indica el número de veces que es abierto el ciclo i por cualquier miembro de la familia de corte, ordenando los ciclos con la convención A, B, C,.... Por ejemplo, un conjunto de corte posible para el caso de la figura 2 está compuesto por los arcos (4-5) y (1-2), como puede verse en la correspondiente matriz de ciclos y arcos; el vector de ciclos resulta ser [1,2,1].

El *orden* de un conjunto de corte es igual al mayor valor de las componentes de su vector de ciclos, esto es, el máximo número de veces que ese conjunto de corte (y todos los de la familia) abre un ciclo cualquiera del sistema

Para el conjunto considerado en el párrafo anterior el orden es 2. Notemos, además, que la aplicación de la regla de reemplazo sobre el nodo 5 (todas sus entradas pertenecen al conjunto de corte) conduce al conjunto (5-3),(5-6),(1-2)

que tiene el mismo vector de ciclos $-(5-3)$ abre A, $(5-6)$ B y el arco $(1-2)$ abre B y C.

Upadhye y Grens encontraron que al incrementar el orden del conjunto de corte se producía un incremento de la inestabilidad numérica del proceso iterativo. El objetivo del algoritmo será, entonces, encontrar el conjunto de corte de menor orden y, complementariamente, con el menor número de arcos.

En el cuadro 2 se resume el esquema del algoritmo. En el mismo se entiende por *columnas equivalentes* en la matriz de ciclos y arcos a aquellas donde los arcos que representan están involucrados en los mismos ciclos, es decir, las columnas son iguales. Siempre buscaremos que permanezca aquella donde disponemos de un mayor número de datos. El número máximo de incógnitas sobre una corriente son dos variables intensivas más los flujos molares de cada uno de los componentes. Pero, en la eliminación de estas columnas, debemos tener en cuenta la información disponible en cada una, bien sea porque constituyen datos del problema o porque el simulador está en condiciones de generarla. Así, por ejemplo, en la corriente 4 del esquema de la figura 1, la temperatura es un dato pero, también se conoce la presión ya que, al fijar la de la alimentación y las pérdidas de carga en los equipos de intercambio, el simulador puede calcular la presión en la corriente 4. En realidad, la presión es un valor conocido en todos los arcos, como un dato o como un valor calculado.

1. Eliminar de la matriz de ciclos y arcos todos los arcos, menos uno, cuyas columnas sean equivalentes.
2. Ordenar la columnas en orden decreciente al número de ciclos en que está involucrado el arco que representa.
3. Formar conjuntos de corte de $1, 2, \dots, N$ arcos. En la generación desechar aquellos conjuntos incompletos cuyo orden iguale o exceda al del conjunto de menor orden encontrado.
4. Si se encuentra un conjunto de primer orden, interrumpir la búsqueda.
5. Aplicar, si resulta necesario, la regla de reemplazo para encontrar otro miembro de la familia que se estime más conveniente.

Cuadro 2. Selección de un conjunto de corte
Algoritmo de Upadhye y Grens

En la matriz de la figura 4 hay tres grupos de arcos equivalentes: el formado por (3-4) y (4-5), el integrado por (1-2), (6-7), (7-8), (8-9), (9-1) y por último, (2-3) y (5-6). En el primero, como ya dijimos, en el arco (4-5) conocemos la temperatura además de la presión y, por esta razón, eliminaremos (3-4) de la matriz de arcos y ciclos.

En el segundo grupo, no existen diferencias en los distintos arcos y, en consecuencia, podemos elegir cualquiera de ellos para representar el grupo. Elegimos (1-2) por ser más fácil suponer los valores iniciales de la corriente, haciéndolos iguales a los de la alimentación. Por la misma facilidad en la suposición de los valores iniciales, elegimos el arco (2-3) para representar el tercer grupo.

En la figura 6 se han ordenado los arcos remanentes de acuerdo al criterio establecido en el punto 2. Puede verse que no existe ningún conjunto de corte de un solo arco.

Con dos arcos se pueden formar dos conjuntos de corte de orden 1: (4-5),(2-6) y (1-2),(5-3), lo que concluye la búsqueda, de acuerdo al punto 4. Existe un tercer conjunto de orden uno, el formado por (5-3), (2-3), (2-6). Obviamente, los tres conjuntos pertenecen a la misma familia, como podemos ver aplicando la regla de reemplazo. Si lo hacemos sobre el nodo 5 al tomar el primer conjunto

		Arcos				
		4	1	5	2	2
C i c l o s	A	●		●		
	B	●	●		●	
	C		●			●

Figura 6. Matriz final

de corte, llegamos al (5-3),(5-6),(2-6) y como el arco (5-6) es equivalente al (2-3) encontramos el conjunto (5-3), (2-3), (2-6). Si continuamos aplicando la regla, ahora sobre el nodo 2, encontramos el conjunto (5-3),(1-2).

Si bien hemos encontrado un conjunto de corte para nuestro problema, el trabajo no está terminado. Es posible, y, en este caso ocurre, como veremos, que los datos que se disponen y las características del simulador modifiquen la real existencia de los ciclos detectados.

No debemos olvidar que en el análisis llevado a cabo, hemos considerado alguno de estos aspectos sólo en una forma muy somera y, por lo tanto, los resultados alcanzados deben considerarse como una primera aproximación. Veamos como ajustar esos resultados.

La selección final

Abandonemos, por un momento, el tratamiento del problema de la figura 1 y restrinjamos nuestra atención al ciclo A, el más interno de todos y el más simple, para poder apreciar su comportamiento frente a distintos grupos de datos.

Propongamos, para ello, un problema estructuralmente análogo, como el de la figura 7, donde se enfría la corriente 2 de caudal, composición, presión y temperatura conocidos. Tengamos en cuenta que, por su posición, en el proceso de cálculo los ciclos externos entregarán al ciclo A la corriente de ingreso totalmente definida (podrá no ser la que corresponde, pero será conocida).

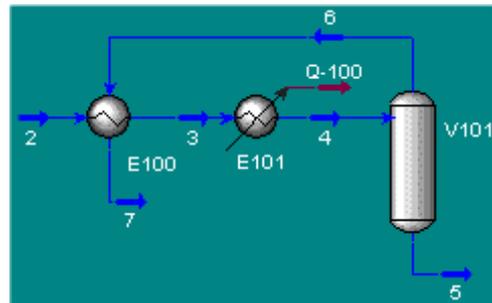


Figura 7. Ciclo interno

Adicionalmente a todo esto, admitiremos que las pérdidas de carga en todos los equipos son conocidas.

Consideremos la composición como una variable vectorial de N componentes, donde no es admisible una especificación parcial ya que, cuando se la especifica, la información suministrada debe abarcar a los N componentes (N-1 datos y el restante por diferencia). Con esto podemos plantear, para los distintos equipos, las siguientes ecuaciones:

Intercambiador E100

$$W_2 [h_2(p_2, T_2, C_2) - h_3(p_3, T_3, C_2)] = Q_I$$

$$W_6 [h_7(p_7, T_7, C_6) - h_6(p_4, T_4, C_6)] = Q_I$$

$$\Delta_{27} = T_2 - T_7, \quad \Delta_{36} = T_3 - T_4$$

$$UA_{100} \Delta(T_2, T_3, T_4, T_7) = Q_I$$

Separador V101

$$W_6 = f_v(p_4, T_4, C_2) W_2$$

$$C_6 = \phi(p_4, T_4, C_2)$$

$$W_5 = W_2 - W_6$$

$$C_5 = \left(\frac{W_2}{W_5} \right) C_2 - \left(\frac{W_6}{W_5} \right) C_6$$

Enfriador E101

$$W_2 [h_3(p_3, T_3, C_2) - h_4(p_4, T_4, C_2)] = Q_{II}$$

En las expresiones anteriores, con Δ_{ij} hemos indicado el salto de temperatura entre las corrientes i y j .

Los datos del problema son, como dijimos, W_2 , P_2 , T_2 , C_2 , y todas las presiones intermedias. Quedan, como variables, T_3 , T_4 , T_7 , Q_I , Q_{II} , W_5 , W_6 , C_5 , C_6 , UA_{100} , Δ_{27} , Δ_{36} , un total de 12 incógnitas vinculadas por 10 ecuaciones, con lo que el sistema tiene 2 grados de libertad.

Este problema fue resuelto utilizando el simulador UniSim Design con los siguientes pares de datos:

Caso A	Caso B	Caso C	Caso D
Δ_{27} y T_4	Δ_{27} y Q_{II}	Δ_{36} y T_3	T_6 y T_3

En los casos A y D el simulador resuelve el sistema en tanto que, en los otros dos, no.

Tengamos en cuenta que los dos primeros casos pueden considerarse funcionalmente equivalentes, desde el punto de vista de la simulación: volviendo a la figura 1, el punto de rocío deseado en la corriente 7 se puede ajustar variando la temperatura de la corriente 4, lo que implica remover una cierta cantidad Q_{II} de calor, o variar Q_{II} y calcular T_4 .

Los casos C y D tienen, matemáticamente, los mismos datos: Δ_{36} es el salto entre T_3 y T_6 . Sin embargo, para UniSim no son equivalentes.

Esto se entiende con facilidad si nos detenemos a examinar, por separado, la situación de cada equipo.

Teniendo en cuenta los datos existentes, podemos ver que en E100 puede haber, como máximo, 4 grados de libertad individuales, en el enfriador hasta 2 y sólo 1 en el caso del separador. Esto coincide con un análisis conceptual simple: en el intercambiador una de las corrientes de entrada está definida y en la otra faltan 3 datos. Si tenemos en cuenta el parámetro UA llegamos al valor encontrado. Otro tanto ocurre en el enfriador y el separador.

La situación en el caso A se muestra en la figura 8.

Allí hemos indicado en negro los datos originales o los valores generados a partir de ellos. El color azul indica que esos valores los hemos adoptado para el caso particular. Podemos ver que el separador no tiene grados de libertad, en el

intercambiador E100 restan tres variables por especificar y una en E101. Esta situación permite que se resuelvan todas las incógnitas del separador, tras lo cual se agotan los grados de libertad de E100 y, con T_3 calculada, se resuelve E101. Los valores calculados en esta secuencia los hemos indicado en rojo y el orden de cálculo, dentro de los círculos en los distintos bloques.

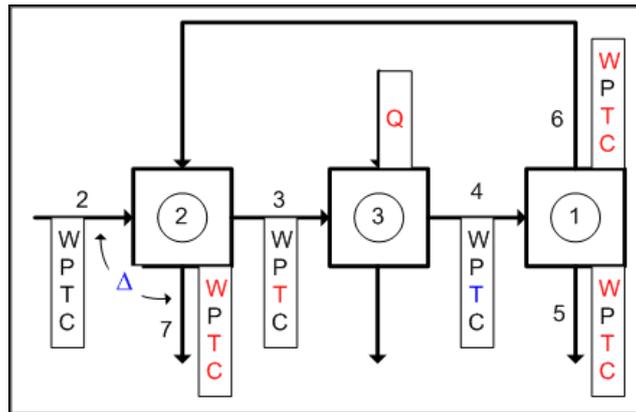


Figura 8. Caso A

La figura 9 nos permite analizar el caso B. Queda claro que no existe ningún módulo sin grados de libertad, aún cuando UniSim calculase T_7 en forma aislada, operación que no realiza por la forma en que se encuentran diseñadas las rutinas del intercambiador.

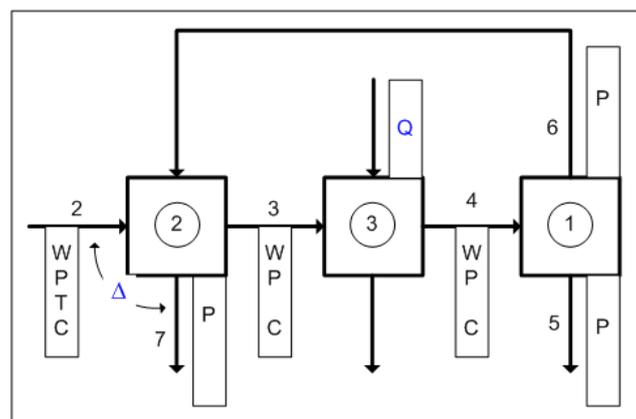


Figura 9. caso B

En la figura 10, partes a y b, hemos representado la situación existente en los casos C y D. Queda claro que en el primero no existe ningún equipo en

condiciones de calcularse, lo que sí ocurre en D: el separador no tiene grados de libertad y una vez que se resuelve puede calcularse el intercambiador y luego el enfriador.

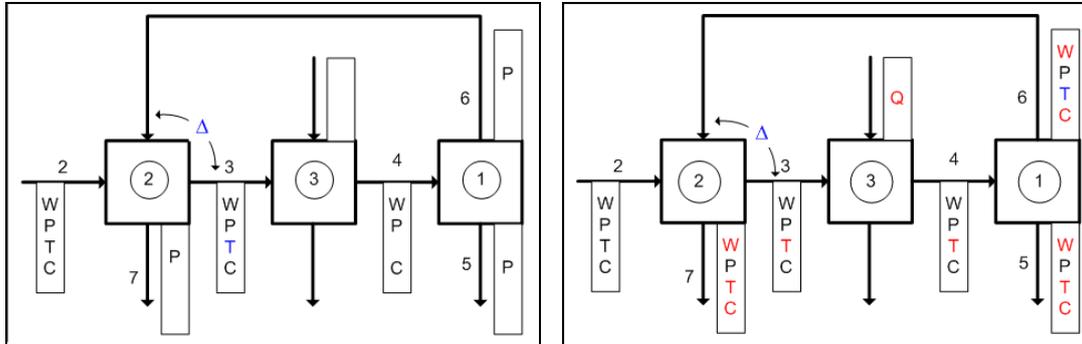


Figura 10a. caso C

Figura 10b. caso D

Con respecto al análisis de grados de libertad, si bien el simulador, en algunos equipos y bajo ciertas condiciones, puede servir de ayuda, la forma más simple y segura de abordar el problema es a través de la vía conceptual.

Hecho esto con nuestro caso simplificado, podemos volver a considerar el sistema original de la figura 1. Resulta claro que, con la información existente, el ciclo A se ha de resolver sin problemas, con lo cual lo podemos eliminar de la matriz de arcos y ciclos de la figura 6. Al hacerlo, el arco 1-2 abre los dos ciclos restantes, esto es, dicho arco constituye el conjunto de corte definitivo, bastando una sola operación Recycle para resolver el problema. Obviamente, la suposición inicial para esa corriente será hacerla igual a la alimentación.

Un comentario final. La selección del conjunto de corte está influenciada por el conjunto de datos adoptado, así como por las características del simulador particular que estemos utilizando. Esto último es difícil de considerar, salvo después de una utilización prolongada del programa en la simulación de un espectro amplio de casos.

El conjunto de datos, en cambio, viene dado por las características del problema, algo fuera de nuestro alcance, pero en su traducción a la simulación particular nos puede habilitar alternativas que simplifiquen el tratamiento. Tengamos en cuenta, también, que, en general, los problemas tienen grados de libertad no consumidos por los datos, lo que da lugar a un proceso de optimización. Este proceso, veremos, comienza por la construcción de un caso base, en el que

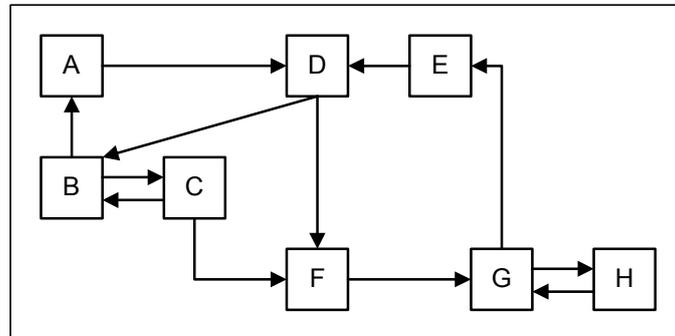
deberemos adoptar valores para las variables de decisión existentes. Cuales son esas variables es, también, una cuestión que nos compete totalmente.

Bibliografía

- Biegler L.T., Grossmann I.E., Westerberg A.W., "Systematic Methods of Chemical Process Design", Prentice Hall, 1997.
- Seider W.D., Seader J.D., Lewin D.R., "Process Design Principles. Synthesis, Analysis and Evaluation", John Wiley & Sons, 1999.

Propuesta de trabajo

Para el sistema de la figura,



Determine:

- la matriz de adyacencias,
- la matriz de arcos y ciclos,
- el conjunto de corte de menor orden y número de arcos.

2. Analice, de acuerdo a los conceptos expuestos en este capítulo, la solución elegida para la propuesta 2 del capítulo 6.

CAPÍTULO 8

PROCESOS DE TRANSFERENCIA DE CALOR

Algunas consideraciones generales

Las transferencias de calor en las plantas de proceso se realizarán entre una corriente de proceso y otra corriente o un servicio auxiliar. Para lograr esta transferencia será necesario que consumamos parte de la energía disponible en mover los fluidos a través de los equipos de intercambio, lo que implica que, en todos los casos, deberemos estimar la pérdida de carga que se produce como consecuencia de ese movimiento.

Desde el punto de vista del cálculo, es decir, de la simulación en sí misma, no es lo mismo un intercambio entre dos corrientes de proceso que entre una de ellas y un servicio auxiliar.

En el último caso, solo tendremos interacción con otros puntos de la simulación, a través de las modificaciones en la corriente de proceso. Esto, siempre y cuando no se encuentren especificadas las condiciones de entrada y salida de la misma, porque, en tal caso, el equipo queda, numéricamente, aislado del resto.

En el servicio auxiliar se tendrá en cuenta, exclusivamente, el incremento del consumo, en un valor proporcional a la energía puesta en juego.

En cambio, cuando se trata de un intercambio entre dos corrientes, la propagación de los efectos se producirá, al menos, sobre uno de los fluidos que circulan por el equipo, circunstancia que, como es obvio, ha de generar una mayor complejidad en el cálculo del sistema.

En ciertas circunstancias podemos obviar el inconveniente. Cuando tenemos especificadas las temperaturas de entrada y salida de las dos corrientes, el esquema de proceso será similar al que se indica en la figura 1, donde realizamos los ajustes finales mediante el uso de calefacción y enfriamiento

auxiliar. Aquí, y al sólo efecto de determinar las cantidades de calor necesarias para lograr las especificaciones de proceso, podemos reemplazar todo el esquema por dos intercambios, uno con el servicio auxiliar caliente y otro con el frío.

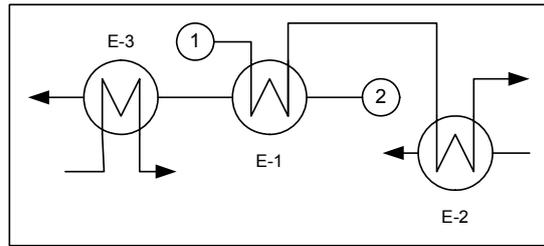


Figura 1. Ajustes con servicios auxiliares

Si los requerimientos de la simulación no nos permiten esa simplificación, tendremos que lidiar, en principio, con el acople numérico que produce la existencia del equipo E-1.

Debemos tener en cuenta, primero, que nunca utilizaremos un simulador de procesos para diseñar, en detalle, un equipo de intercambio térmico. Existen excelentes programas para hacerlo, solos o agrupados con simuladores estáticos y dinámicos para procesos continuos y discontinuos y software adicional para abordar una problemática más específica.

Por otra parte, el uso habitual de un simulador de procesos es el análisis de alternativas, en un estadio muy preliminar del diseño, donde se manejan valores que admiten un grado de aproximación relativo. En ciertos casos, es más importante el comportamiento de la tendencia que los valores que se obtienen.

Obviamente que el cálculo de una Ingeniería Básica no encaja dentro de estos parámetros y ese cálculo se lleva a cabo con un simulador. Este sería otro modo de uso, en el que debemos extremar los recaudos. Pero aún así, el diseño detallado de los equipos ha de ocurrir en una instancia posterior.

Vamos a abordar la simulación de los procesos de transferencia de calor a través de un ejemplo sencillo, al que lo hemos de encarar por distintas vías de aproximación, que van desde la simplificación del intercambio con servicios hasta la consideración del diagrama de proceso real.

En la figura 2 podemos ver el esquema del calentamiento de una corriente en una planta de etileno con la misma corriente, después de pasar por otro sector de la planta.

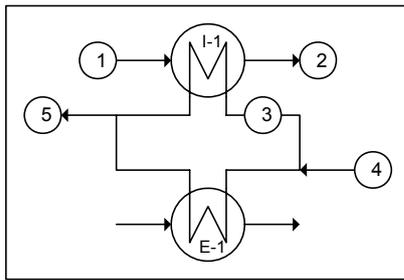


Figura 2. Caso propuesto

Esta última, a su vez, se termina de enfriar en el equipo E-1, hasta la temperatura especificada, utilizando un servicio auxiliar.

En la tabla 1 aparecen las características principales, temperatura, presión, caudal molar y composición, de las corrientes de entrada y salida del sistema.

Como parte de un estudio de optimización, le daremos el valor 3970 kgmol/h al flujo molar de la corriente 3, con lo cual agotamos el grado de libertad que existe.

Corr	T [°C]	P [bar]	FM [kgmol/h]	Composición (Fracc.molar)			
				H2	CH4	C2H4	C2H6
1	19.0	28.0	8300	0.247	0.125	0.398	0.230
2	35.0	27.7	8300	0.247	0.125	0.398	0.230
4	66.5	26.4	8270	0.243	0.125	0.399	0.233
5	32.5	26.2	8270	0.243	0.125	0.399	0.233

Tabla 1. Datos del sistema a simular

Las diferencias entre las corrientes 2 y 4 son consecuencia del proceso al que han sido sometidas en el sector de la planta no representado.

Podemos ver que se ha aceptado, implícitamente, una pérdida de carga de 0.3 bar en I -1 para la corriente fría y 0.2 bar para la caliente en ambos equipos. Teniendo en cuenta que ambas corrientes tienen especificadas tanto las temperaturas de entrada como las de salida nos podemos plantear la simulación simplemente calentando y enfriando con servicios auxiliares o con la consideración del mutuo intercambio en el equipo I -1.

Empecemos por lo más simple.

Las operaciones más simples

Todos los simuladores de proceso poseen módulos que modelan el intercambio con fuentes o sumideros no especificados, lo que permite considerar la transferencia de calor en cualquier tipo de equipo, desde un intercambiador con aire hasta un horno.

En el caso de UniSim Design, el simulador que estamos usando, disponemos de un calentador (Heater) y un enfriador (Cooler) como operaciones elementales de intercambio térmico.

Obviamente, el único valor que se tendrá en cuenta será la cantidad de calor puesta en juego, por lo que, si se requiere cierto tipo de datos vinculado al equipo particular que se está simulando, básicamente, el área de intercambio, este tipo de módulos no resulta adecuado.

Tanto el uso de estos elementos básicos como el de todos los equipos que veremos en los próximos apartados, requieren que fijemos la pérdida de carga que se produce en los mismos, debido al movimiento de los fluidos. Para ello, haremos uso de valores típicos: alrededor de 0.1 bar si existe vaporización y 0.2 a 0.7 bar en otros casos.

Comencemos por estructurar la simulación del sistema de la figura 2 como se indica en la figura 3a, donde la corriente 1 es calentada, con servicios auxiliares, en el calentador C-1 y la *totalidad* de la 4 se enfría en E-1, también con servicios.

Si queremos tener en cuenta el real consumo de fuentes externas, podemos considerar, luego, que la cantidad de calor Q suministrada en C-1 es aportada,

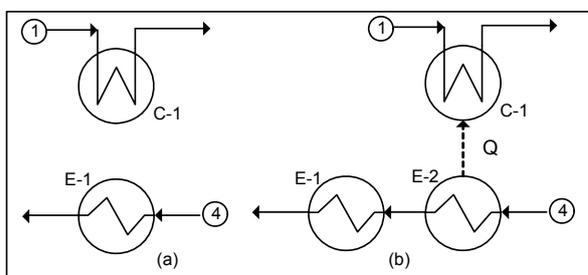


Figura 3. Usando servicios auxiliares

en realidad, desde la etapa de enfriamiento.

Esta situación la podemos ver en la parte b de la figura 3, donde la corriente 4 cede Q desde E-2 y completa su enfriamiento en el equipo E-1.

Estructuremos una nueva simulación, borrando, como siempre, si fuera necesario, nuestro trabajo anterior.

Seleccionemos, como paquete termodinámico, una ecuación de estado, Peng-Robinson, por ejemplo, e incorporemos los compuestos presentes en nuestro problema.

Acto seguido, agreguemos, al Diagrama de Flujo, dos corrientes de materia, S1 y S4, y especifiquemos en ellas los correspondientes datos que figuran en la tabla 1. Agreguemos, además, las corrientes S2 y S5, y demos en ellas sólo los valores de temperatura y presión.

Esta información la vamos a volver a utilizar cuando estructuremos la simulación considerando el esquema mostrado en la figura 2. Conviene, entonces, que la guardemos para evitar tener que ingresarla de nuevo. Para fijar ideas, supongamos que al archivo le damos el nombre TransfCal_0.usc.

Agreguemos al Diagrama de Flujo un calentador, C-1, un enfriador, E-1 y dos corrientes de energía, E-1_OutQ y C-1_InQ.

Hagamos las conexiones, de manera que nos queden los equipos aislados, como en la figura 4.

Podemos ver que el flujo de calor transferido en C-1 es del orden de 1.7 MW y en E-1 de unos 3.6 MW.

Es decir que, en realidad, sólo se necesitan retirar, a través de una fuente externa, unos 1.9 MW.

A fin de poder analizar distintas situaciones, tanto en la corriente caliente como en la fría, podemos automatizar el cálculo del calor neto requerido a la

fuentes externa agregando al Diagrama de Flujo, una operación especial denominada Balance , que no es otra cosa que un módulo donde se pueden realizar simples balances de calor y materia. Démosle el nombre CalNet y adicionemos, también, una corriente de energía, donde quedará expresado el requerimiento al servicio auxiliar. Demos a ésta el nombre ReqNeto.

En el módulo Balance se debe definir el número de corrientes de materia y energía que ingresan y egresan del mismo. En nuestro caso no hay corrientes de materia, hay una de energía que ingresa (la que sale de E-1, E-1.OutQ) y

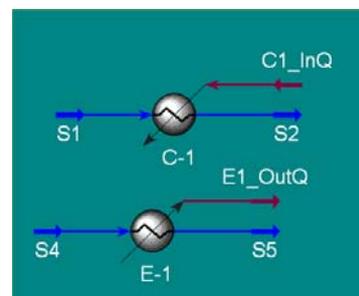


Figura 4. Equipos auxiliares

dos que salen (la entrada al equipo C-1, C-1.InQ, y la corriente de energía ReqNeto).

En la figura 5 podemos ver la definición del número de corrientes de entrada y salida.

Cada una de ellas fue introducida seleccionándolas de una lista desplegable que aparece al posicionar el mouse en la celda donde se encuentra la leyenda <<Stream>>. Se puede observar,

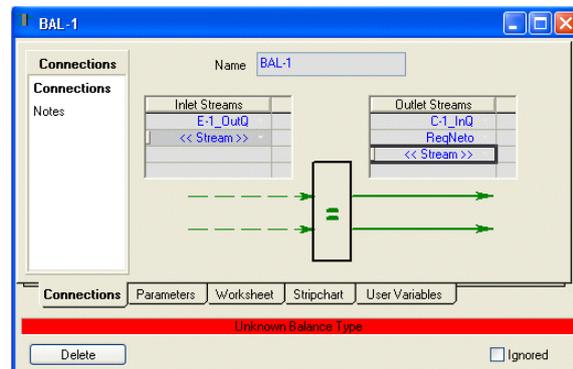


Figura 5. Conexiones de la operación Balance

además, que existe un mensaje informando que se desconoce el tipo de balance que se debe determinar. Para remediar este inconveniente, vayamos a la solapa Parameters y elijamos la opción Heat.

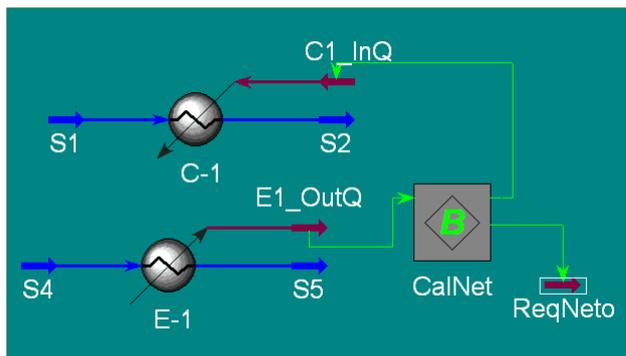


Figura 6. Simulando con los servicios auxiliares

En la figura 6 podemos ver el esquema de cálculo adoptado, donde la corriente ReqNeto representa al enfriador E-1 de la figura 3 y C1_InQ es el calor Q cedido por E-2. En este ejemplo sencillo podemos observar que no siempre la simulación se

corresponde exactamente con el diagrama de proceso; pero lo que importa es que sea capaz de resolver el problema planteado.

Aprovechando la posibilidad del cálculo por parte del simulador, determinen que caudal debería tener S4 para que el requerimiento neto sea cero.

Veamos ahora el otro enfoque posible, modelando el equipo I-1 con el módulo Intercambiador.

El intercambiador de calor

Básicamente, el modelado de un intercambiador de calor plantea, por una parte, un balance entálpico para cada una de las dos corrientes que circulan por el equipo:

$$Q = Fm_{CC} [He_{CC}(\{X_{CC}\}, Te_{CC}, Pe_{CC}) - Hs_{CC}(\{X_{CC}\}, Ts_{CC}, Ps_{CC})]$$
$$Q = Fm_{CF} [Hs_{CF}(\{X_{CF}\}, Ts_{CF}, Ps_{CF}) - He_{CF}(\{X_{CF}\}, Te_{CF}, Pe_{CF})]$$

donde:

Fm : flujo molar	Q : calor transferido
H : entalpía molar	e : entrada
{X} : composición	s : salida
T : temperatura	CC : corriente caliente
P : presión	CF : corriente fría

La otra relación considerada es la conocida ecuación de transferencia de calor

$$Q = U A \Delta T_{ml}$$

Analicemos los grados de libertad que, con esta formulación, presenta nuestro sistema. Existen 2 N caudales molares, 4 temperaturas, otras tantas presiones, una cantidad de calor y un parámetro geométrico. Esto hace un total de variables igual a 2N + 10, con lo cual, el máximo número de grados de libertad es 2 N + 7.

Normalmente tendremos especificadas las entradas de las dos corrientes: composición, presión, temperatura y caudal de cada fluido.

Nosotros fijaremos la pérdida de carga en ambos lados, ya que, al desconocer la geometría del sistema, nos resulta imposible resolver el balance de cantidad de movimiento correspondiente.

Con ello, habremos consumido 2 N + 6 grados de libertad.

Nos queda, entonces, la posibilidad de fijar el valor de una sola variable: el calor transferido o una de las temperaturas de salida o el producto del coeficiente global de transferencia U por el área de intercambio A o el valor de

otra variable, que resulte adecuada para el problema particular que se está simulando.

Cada una de estas alternativas implica un grado diferente de complejidad en el cálculo y, consecuentemente, de tiempo para obtener los resultados.

Todavía debemos considerar una cuestión más.

Por definición, la capacidad calorífica molar resulta ser $Cp = (\partial H / \partial T)_P$, lo cual conduce a $\Delta H = \int_{T_1}^{T_2} Cp dT$.

La ecuación de transferencia $Q = UA \Delta T_{ml}$ presupone que los valores de Cp y del caudal molar son constantes en el entorno [T1, T2]. Obviamente, esta es una situación, sobre todo la primera, que difícilmente encontremos en los problemas reales.

Esto significa que, en estos casos, pareciera que carecemos de una ecuación confiable para realizar el cálculo del UA de nuestro equipo.

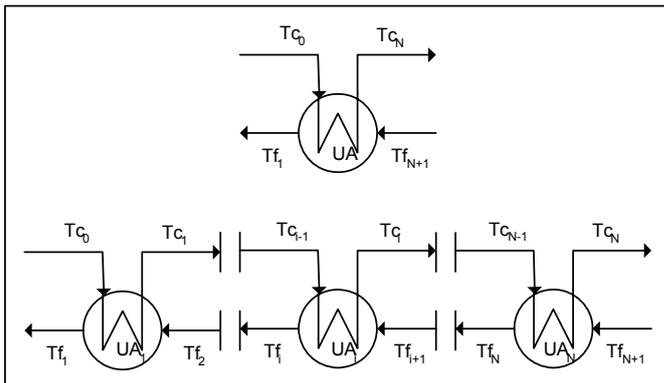


Figura 7. Dividiendo el intercambiador en segmentos

El modo de abordar el problema es, como se muestra en la figura 7, dividir el intercambiador en segmentos, generando un conjunto de equipos en serie, donde podamos admitir, en cada uno, la constancia de los valores de las capacidades caloríficas.

Para cada intervalo se puede plantear:

$$Q_i = Fm_C^i Cp_C^i (T_C^{i-1} - T_C^i) = Fm_F^i Cp_F^i (T_F^i - T_F^{i+1})$$

$$Q_i = (UA)_i \frac{\Delta T_i - \Delta T_{i+1}}{\ln\left(\frac{\Delta T_i}{\Delta T_{i+1}}\right)}$$

siendo $\Delta T_i = T_C^{i-1} - T_F^i$

operando se llega:

$$\ln \Delta T_i - \ln \Delta T_{i+1} = (UA)_i \left[\frac{1}{Fm_C^i Cp_C^i} - \frac{1}{Fm_F^i Cp_F^i} \right]$$

y el valor de UA para el equipo se obtiene sumando los productos individuales $(UA)_i$ de cada intervalo. Advertimos que, si en la última relación, el término entre corchetes es una constante, la suma propuesta conduce a la habitual expresión de la ecuación de transferencia, extendida a todo el equipo.

Habilitemos nuestro simulador para una nueva corrida y recuperemos el archivo TransfCal_0.usc. Analizaremos el funcionamiento del intercambiador que disponemos en UniSim, simulando el equipo I -1 de la figura 2.

Cambiamos el nombre y el flujo molar de la corriente S4 para transformarla en la corriente S3.

Hecho esto, tenemos definidas las dos corrientes que ingresarán al equipo.

Agreguemos al Diagrama de Flujo un objeto Intercambiador de Calor con el nombre I -1. Conectemos el lado de los tubos con las corrientes S1 y S2. Antes de hacer las conexiones del lado de la carcaza, borremos el valor de la temperatura de la corriente S5, para que el simulador no nos indique que está sobredimensionado, ya que al tener totalmente especificadas las entradas, S1 y S3, y la temperatura de una de las corrientes de salida, S2, el simulador está en condiciones de calcular. Ahora sí, conectemos S3 y S5 a la entrada y salida de la carcaza.

La temperatura de S5 resulta ser, aproximadamente, de unos 33°C. Si bien el simulador fue capaz de determinar esta temperatura, podemos ver que indica que, en el equipo falta ingresar el dato para una especificación activa y, además, que el mismo está sobreespecificado. Para solucionar el inconveniente, ingresemos a I -1 y desde la opción Specs de la solapa Design, desactivemos la especificación de UA, activa por defecto.

Si se elige la opción Details de la solapa Performance se puede ver que la energía transferida es de unos $6.163 \cdot 10^6$ kJ/h (1.71 MW) –algo que ya habíamos averiguado- y que el valor de UA calculado es alrededor de $3.829 \cdot 10^5$ kJ/°C h (106.36 kW/°C).

Si bien el simulador resolvió el caso, aparece un borde amarillo en el equipo, indicando la presencia de un inconveniente. En la ventana de mensajes aparece la advertencia “Ft Correction Factor is Low”.

Ft es un factor de corrección de la diferencia de temperatura que debe usarse cuando las configuraciones de flujo son distintas para ambas corrientes y se define como:

$$\Delta T = \Delta T_{ml} F_t$$

Puede considerarse que ΔT es una diferencia efectiva de temperaturas entre las corrientes. Obviamente, Ft debe ser inferior a uno, ya que $\Delta T < \Delta T_{ml}$.

En consecuencia, la ecuación de diseño se transforma en:

$$Q = U A \Delta T_{ml} F_t$$

El valor de Ft depende del tipo de intercambiador (número de pasos en los tubos y en la carcasa, así como de las temperaturas de entrada y salida). Un equipo con un paso en la carcasa y dos pasos en los tubos (1-2), tiene aproximadamente el mismo factor Ft que un equipo 1-4 ó 1-6 ó 1-8, con las mismas temperaturas de entrada y salida.

Es decir que, en realidad, Ft tiene una débil dependencia con el número de pasos en los tubos (siempre que sea par). Por esta razón, en la bibliografía sólo suelen encontrarse valores de Ft para configuraciones 1-2, 2-4, 3-6, 4-8, etc., por lo cual, en cualquier otro caso debe usarse el valor que corresponda a igual número de pasos en la carcasa.

Si bien cualquier intercambiador con $F_t > 0$ puede funcionar, se aconseja que el diseño se haga con un valor superior a 0.75.

En UniSim el valor de Ft se encuentra en la opción Details de la solapa Performance y en este caso es de 0.748, lo que justifica el aviso recibido.

Puede verse, en las curvas para determinar Ft, que para determinadas temperaturas de entrada y salida, a medida que aumenta el número de pasos en la carcasa, Ft también aumenta. De esta manera, si un equipo 1-2 tiene un factor Ft inferior a 0.75 para las condiciones de proceso elegidas, puede mejorarse la performance utilizando un intercambiador 2-4 ó 3-6 ó 4-8, etc.

En la opción Sizing de la solapa Rating, podemos ver la configuración del equipo además de otra información adicional (figura 8). Las normas TEMA proporcionan una codificación que permite describir un tipo de intercambiador valiéndose de tres letras.

La primera letra designa al cabezal de entrada o anterior; la segunda, se refiere al tipo de carcasa y la tercera designa al cabezal de retorno o posterior. Por ejemplo, un intercambiador tipo AEL tendrá un cabezal de entrada del tipo A, una carcasa tipo E y un cabezal posterior tipo L. Podemos ver la caracterización de los diferentes tipos en el Anexo de este capítulo.

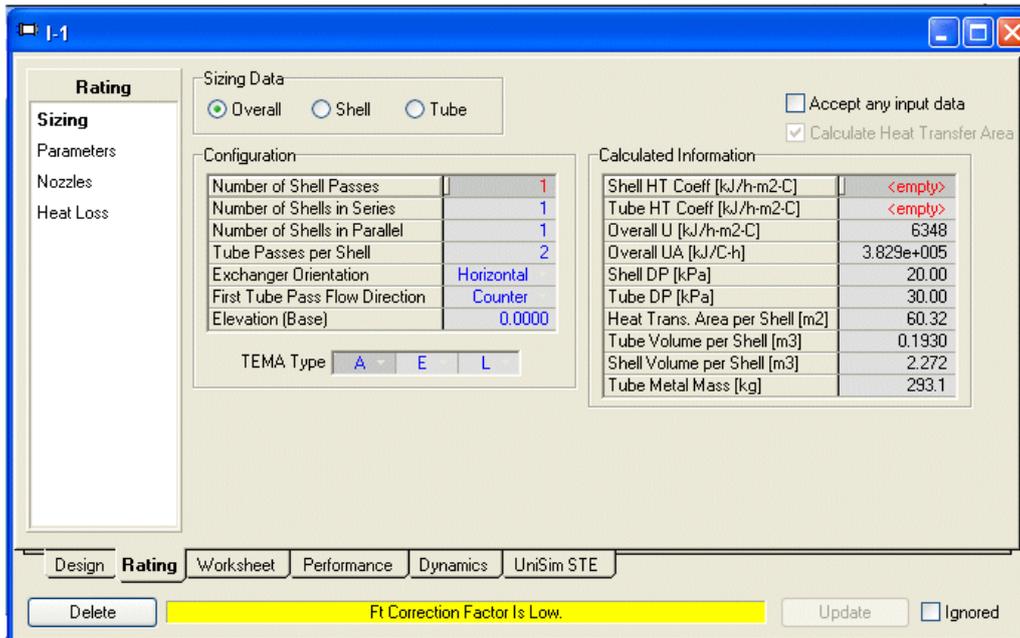


Figura 8. Opción Sizing de la solapa Rating

Volvamos a la simulación y cambiemos, entonces, la segunda letra. Al elegir F, vemos que inmediatamente el número de pasos por carcasa cambia a 2. El intercambiador se resuelve sin problemas pero, de acuerdo a la información suministrada por UniSim, debería haber, al menos, 4 pasos por tubos. De hecho, si cambiamos a 4 y luego queremos volver a 2, se produce un mensaje de error. Ingreseemos el valor 4 en el número de pasos por tubos.

En lugar de especificar la presión en las corrientes de salida, podríamos haber fijado los valores de las pérdidas de carga de ambos lados, desde la opción Parameters de la solapa Design del intercambiador, como se puede ver en la figura 9.

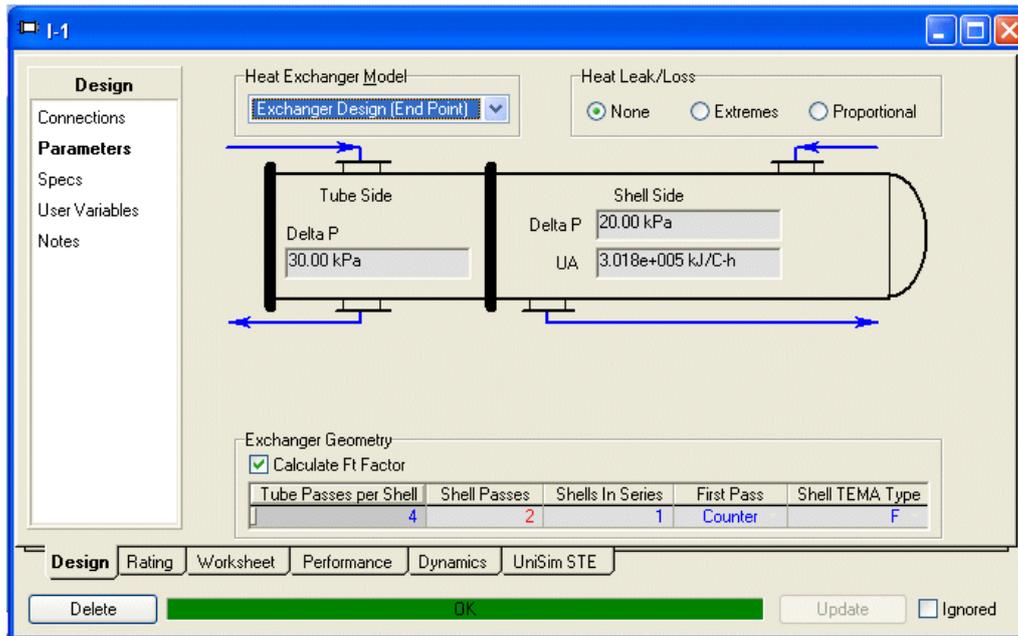


Figura 9. Opción Parameters de la solapa Design

En este mismo lugar es posible seleccionar el modelo que el simulador usará para el cálculo. Una lista desplegable permite seleccionar uno de los cuatro modelos disponibles:

- Exchanger Design (Endpoint)
- Exchanger Design (Weighted)
- Steady State Rating
- Dynamic Rating.

Veremos las particularidades de los dos primeros, ya que los últimos están fuera del alcance de este libro.

El modelo Exchanger Design (Endpoint) está basado en la ecuación estándar de diseño:

$$Q = U A \Delta T_{ml} F_t$$

Supone que, tanto el coeficiente global de transferencia como los calores específicos (C_p) de las corrientes de ambos lados del intercambiador, son constantes. Por lo tanto, no debe usarse en casos donde haya cambios de fase o los C_p presentan variaciones importantes.

Al elegir este método, se dispone, como puede verse en la parte inferior de la figura 9, información de la geometría del equipo.

El modelo Exchanger Design (Weighted) se debe usar en problemas donde la curva de calentamiento es no lineal, por ejemplo, donde se producen cambios de fase en uno o en ambos lados del intercambiador o los Cp de las corrientes son variables. El método divide el equipo en varios segmentos, donde se puede admitir constancias en las condiciones, y calcula para cada uno de ellos el producto UA y el ΔT_{ml} , para finalmente determinar el coeficiente global de transferencia.

Está sólo disponible para equipos en contracorriente y al seleccionarlo aparece la tabla de la figura 10, que reemplaza a la información de la geometría del intercambiador de la figura 9. En ella podemos modificar el número de intervalos que usará el método para calcular el UA, para cada lado del intercambiador. Además, si se activa la casilla de verificación Dew/Bubble Pt, se agrega, en la curva de calentamiento, el punto de rocío, de burbuja o ambos. Si hay cambio de fase, o es posible que ello ocurra, la casilla debe estar activada.

En la columna Step Type, podemos seleccionar una de las tres opciones: Equal Enthalpy, Equal Temperature y Auto Interval. En las dos primeras, todos los intervalos tienen la misma variación de entalpía o temperatura, respectivamente. En la opción Auto Interval, UniSim Design determina el número y tamaño de los intervalos de modo de representar la curva de calentamiento, con la menor cantidad de intervalos posible.

Individual Heat Curve Details				
Pass Name	Intervals	Dew/Bubble Pt	Step Type	Pressure Profile
S1-S2	5	<input checked="" type="checkbox"/>	Equal Enthalpy	Const dPdH
S3-S5	5	<input checked="" type="checkbox"/>	Equal Enthalpy	Const dPdH

Figura 10. Información del método Weighted

Retomando el tema de las alternativas en las especificaciones, si en lugar de dar la temperatura de la corriente de salida S2, deseamos ingresar otro tipo de especificación que no sea UA, la que, como ya vimos, está por defecto, deberíamos comenzar por borrar el valor ingresado en esa temperatura.

Si quisiéramos, por ejemplo, especificar la menor aproximación entre las temperaturas caliente y fría en cualquier punto del equipo, se requerirá un

modo específico de incorporarla. Para ello, en la opción Specs de la solapa Design debemos accionar el botón Add. Al hacerlo, se abre una ventana, en la cual, en Type, debemos elegir el tipo de especificación, MinApproach en este caso y demos 10 °C como valor definido para la diferencia. El tipo elegido determina el o los restantes ingresos en la ficha; en este caso aparece el paso sobre el que se fijará la aproximación mínima y la única opción existente es Overall. Al seleccionarla, la ficha quedará como la de la figura 11, tras haberle dado el nombre Min Appr Spec.

Podemos ver que hay una especificación, E-100 Heat balance = 0.00 kW, que no puede modificarse. Asimismo, la que se está ingresando figura desactivada.

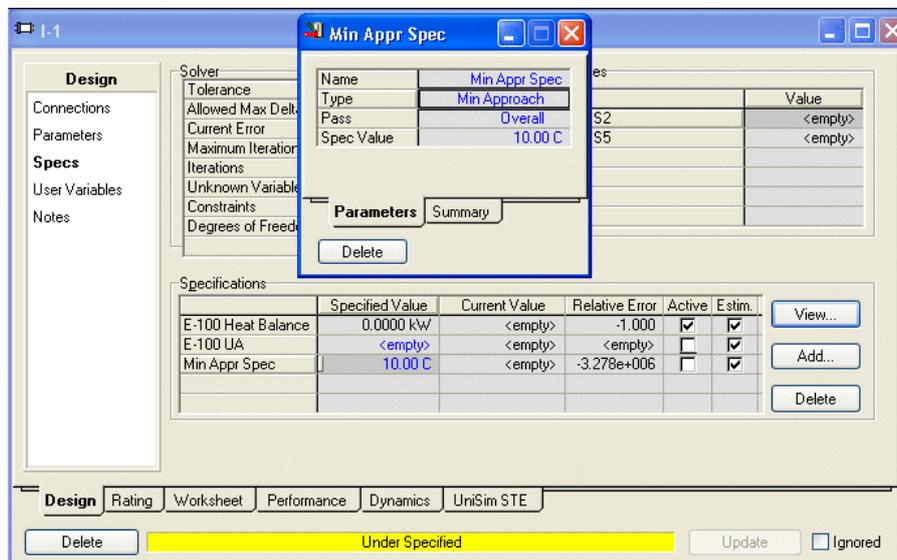


Figura 11. Ingreso de especificaciones

Al cerrar la ventana de ingreso de la especificación, debemos activarla para que el equipo pueda resolverse.

Uniendo los elementos y otros cálculos adicionales

Resolvamos ahora el problema tal y como queda planteado en la figura 2. Para ello, recuperamos el archivo con los datos de base, TransfCal_0.usc.

Vamos a hacer que la corriente S4 se divida en dos, donde una de las ramas corresponderá a la corriente 3 de la figura. Esta corriente intercambiará, igual que antes, con la 1 en el equipo I -1.

La otra rama se enfriará en E-1 y, una vez producidos los intercambios, ambas corrientes se mezclarán para alcanzar la temperatura de la corriente 5.

Ya tenemos las corrientes S1, S2, S4 y S5. Agreguemos, al Diagrama de Flujo, un divisor (Div), un mezclador (Mix), un intercambiador de Calor (I -1), un enfriador (E-1) y una corriente de energía (Q -1).

En un divisor ingresará una corriente y saldrán N. Para que el módulo se resuelva deberán estar definidos N datos, caudales o relaciones entre caudales.

En un mezclador, en cuanto a ingresos y egresos, la situación es inversa; pero aquí debe especificarse también como se consideran las presiones. Si se puede asegurar que todas las corrientes tendrán la misma presión, bastará con que quede fija el valor de una de ellas y, al seleccionar, en la opción Parameters de la solapa Design, la opción Equalize All, las restantes tomarán ese valor.

La otra opción disponible es Set Outlet To Lowest Inlet, donde se fija la presión de la salida con el valor mas bajo de las entradas. Esta opción requiere el conocimiento de la totalidad de las presiones de entrada.

Realicemos las conexiones que indica la figura 12 para estructurar el esquema de simulación, teniendo cuidado que las corrientes S1 y S2 circulan por los tubos de I -1, en tanto que la corriente que proviene del divisor ingresa por carcasa. Las conexiones generarán las corrientes intermedias entre los equipos de intercambio, el mezclador y el divisor. Cambiemos los nombres de estas corrientes a los que se indica en la figura. Fijemos el caudal molar de la corriente S3 en 3970 kgmol/h; con esto, la otra rama quedará totalmente determinada.

modelo dinámico que no puede usarse en simulación estática. Tampoco hace falta un módulo tan complejo para resolver el problema que nos hemos planteado y basta con un calentador al que se le agreguen los cálculos necesarios para tener en cuenta la eficiencia.

También tenemos que considerar que, en UniSim, las corrientes de materia no incluyen, entre sus propiedades, el poder calorífico de las mezclas, con lo cual, si bien podremos saber la cantidad de calor a suministrar en el horno, no la podremos vincular con la cantidad de combustible capaz de entregarla.

En este caso, estas falencias las podremos resolver haciendo uso del objeto Spreadsheet  donde realizaremos los cálculos necesarios.

Estructuremos una nueva simulación, borrando, como siempre, si fuera necesario, nuestro trabajo anterior.

Seleccionemos, como paquete termodinámico, una ecuación de estado, Peng-Robinson, por ejemplo, e incorporemos los compuestos presentes en nuestro problema, CH₄ y Dowtherm A.

Acto seguido, agreguemos, al Diagrama de Flujo, dos corrientes de materia, una de energía y un Heater. y démosle un nombre, H-1, por ejemplo. Realicemos las conexiones, considerando que las corrientes de materia corresponden al Dowtherm A a calentar en H-1.

Ingresemos, en las corrientes de entrada y salida de Dowtherm A los datos del problema.

Con esto, UniSim Design calcula la cantidad de calor transferido en H-1, del orden de 30 kW.

Para poder determinar el consumo de CH₄, debemos tener en cuenta la eficiencia del horno y el poder calorífico del combustible, en este caso, 50.03 MJ/kg. El cálculo es extremadamente simple y, como ya dijimos, utilizaremos un objeto Spreadsheet para hacerlo.

Este tiene la funcionalidad de las planillas de cálculo convencionales, siendo una herramienta muy potente que permite además de los cálculos comunes, importar y exportar variables del flowsheet. Los valores en las celdas se actualizan automáticamente en cuanto se modifican las variables del diagrama de proceso.

Retornemos a nuestro problema, e incorporemos la operación Spreadsheet desde la paleta de objetos. Llamémosla Calc_Comb. Como dijimos, para realizar el cálculo del flujo másico de CH₄, necesitaremos el valor de la energía transferida, la eficiencia del horno y el valor del poder calorífico del CH₄. Nosotros ingresaremos estos últimos dos valores, de acuerdo a los datos del problema, en tanto que la energía transferida es calculada por el simulador.

En la solapa Spreadsheet de Calc_Comb vamos a utilizar las cuatro primeras celdas de la columna B para contener los valores de la energía requerida por el Dowtherm A, la eficiencia del horno, el poder calorífico y el flujo másico del metano, en ese orden.

Ingrese los valores de la eficiencia y poder calorífico del CH₄ en las celdas correspondientes. Si lo deseamos podemos agregar, además, rótulos para identificar las variables como podemos ver en la figura 13.

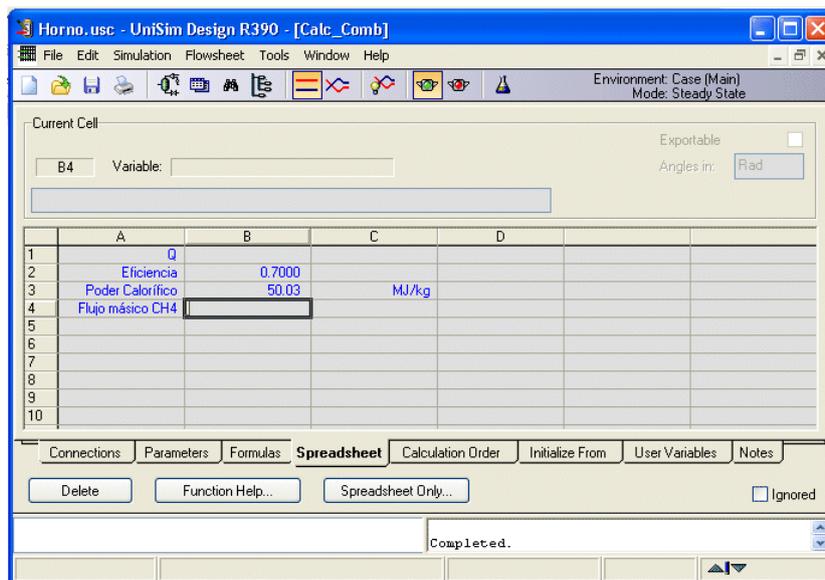


Figura 13. Ingresando valores en la Spreadsheet

Ahora debemos tomar, del flowsheet, el valor de la energía transferida. Para ello, posicionamos el mouse en la celda B1 y elegimos la opción Import Variable que aparece al oprimir el botón derecho; tras lo cual accedemos a una nueva ventana. En ella, se encuentra una lista de objetos y las variables vinculadas al objeto elegido como vemos en la figura 14.

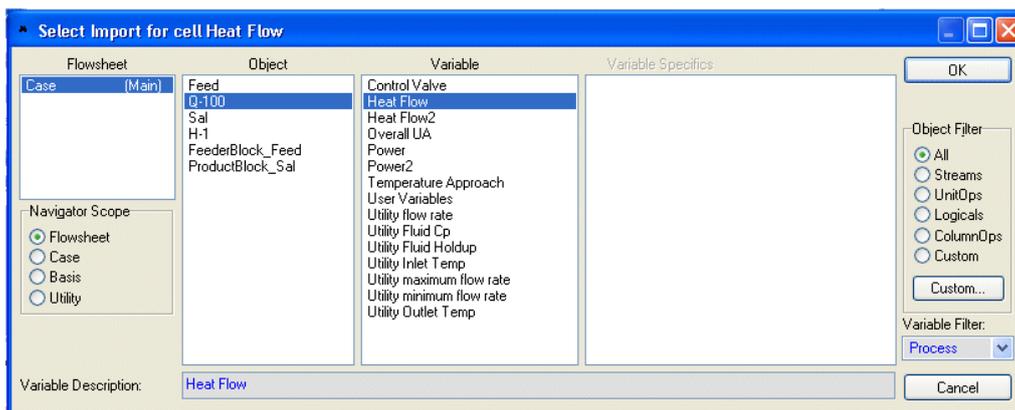


Figura 14. Importando una variable

Allí deberemos elegir Q-100 dentro de los objetos y Heat Flow como tipo de variable, tras lo cual daremos OK. Al hacerlo, en la celda B1 aparece el valor 29.85 kW.

Nos falta aún, ingresar una expresión que nos permita determinar el flujo másico de CH₄. Ingreseemos, entonces, en la celda B4 la expresión $3.6 \cdot B1 / (B2 \cdot B3)$, como podemos observar en la figura 15.

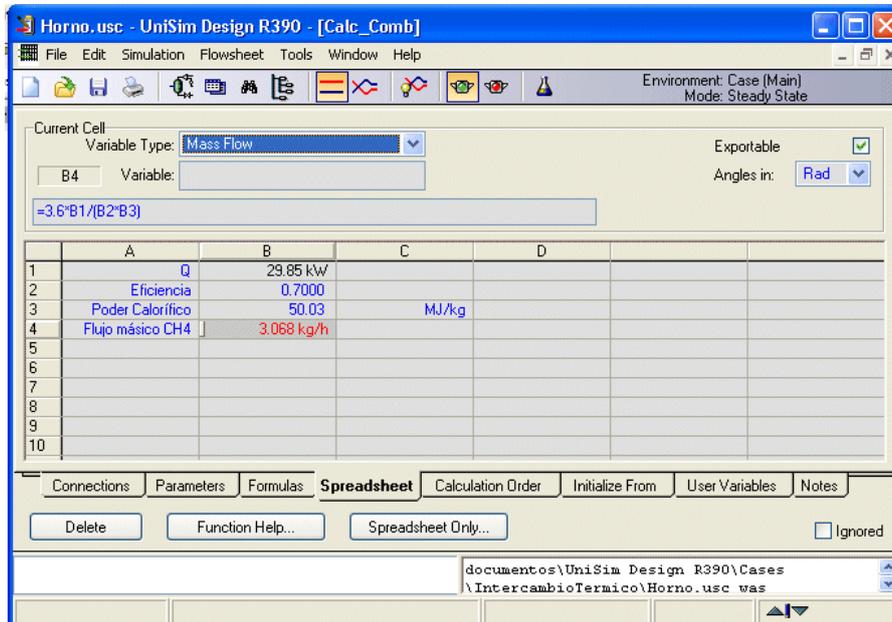


Figura 15. Aspecto final de la Spreadsheet

El factor 3.6 que aparece es para compatibilizar las unidades. Para que esté expresada en kg/h, debemos elegir Mass Flow desde la lista desplegable del cuadro Variable Type.

En este caso la fórmula a ingresar es muy sencilla pero para aquellos casos de mayor complejidad, el botón Function Help nos permite conocer las expresiones admitidas y las funciones disponibles.

Una vez que se ingresa toda la información requerida, queda determinado el valor del flujo másico de CH₄, del orden de 3 kg/h. Cualquier variación que produzcamos en las condiciones de proceso se verá reflejada, inmediatamente, en la cantidad de gas a utilizar.

Si la información obtenida fuese necesaria en otro punto de la simulación deberíamos exportarla. Entonces, estando activa la celda B4, accionando el botón derecho del mouse, seleccionaríamos la opción Export Formula Result, tras lo cual aparecería una ventana similar a la de la figura 14, donde deberíamos elegir el objeto que recibe la información, en este caso será una corriente de materia, y el tipo de variable, obviamente, Mass Flow.

Otra aplicación que podríamos haberle dado a la Spreadsheet en equipos de transferencia de calor es para el cálculo del área de intercambio.

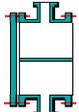
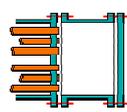
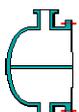
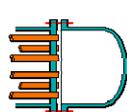
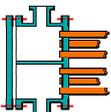
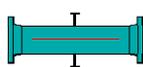
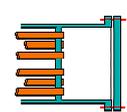
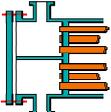
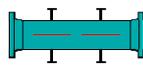
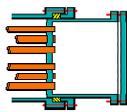
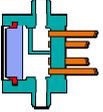
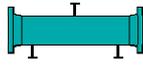
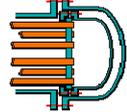
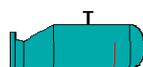
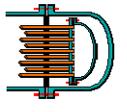
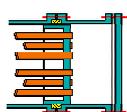
El simulador calcula en forma exacta el producto UA y estima un valor de U para un valor de área típica de estos equipos, con lo cual el cociente UA/U, usando los valores del simulador, será una constante.

Si nosotros quisiéramos una estimación del área, deberíamos importar en una planilla el valor calculado de UA; ingresar en forma independiente un U estimado y entonces, en la Spreadsheet, realizar el cociente.

Bibliografía

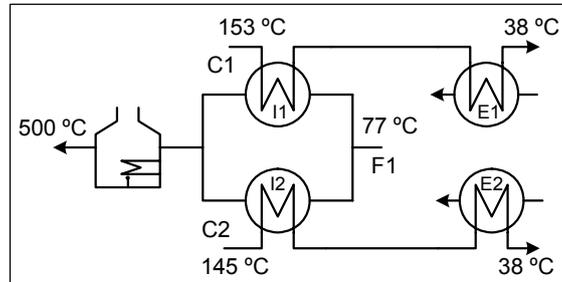
- “Experienced-Based Rules of Chemical Engineering”, Cheresources.com, <www.cheresources.com/exprules.shtml>.
- Kao E., “Intercambiadores de Calor”, Edigem S.A., 1983.
- “U in Heat Exchangers”, Cheresourdes.com, <www.cheresources.com/uexchangers.shtml>.
- UniSim Design Operations Guide.

NORMAS TEMA: CÓDIGOS PARA DESIGNAR INTERCAMBIADORES DE TUBO Y CORAZA

Tipo de cabezal anterior	Tipo de coraza	Tipo de cabezal posterior
		
<p>A Canal y tapa frontal</p>	<p>E Un paso en la coraza</p>	<p>L Mazo de tubos fijos (tipo C anterior)</p>
		
<p>B Canal y tapa frontal integrada (bonete)</p>	<p>F Dos pasos en la coraza (bafle longitudinal)</p>	<p>M Mazo de tubos fijos (tipo B anterior)</p>
		
<p>C Tapa frontal y mazo de tubos removible</p>	<p>G Flujo separado</p>	<p>N Mazo de tubos fijos (tipo A anterior)</p>
		
<p>N Tapa frontal removible – mazo de tubos integrado</p>	<p>H Flujo separado doble</p>	<p>P Cabezal flotante con sello o empaquetadura externa</p>
		
<p>D Con cierres especiales de alta presión</p>	<p>J Flujo dividido</p>	<p>S Cabezal flotante con dispositivo de respaldo</p>
		
	<p>K Rehervidor tipo marmita</p>	<p>T Cabezal flotante de arrastre</p>
		
	<p>X Flujo cruzado</p>	<p>U Tubo en U</p>
		
		<p>W Cabezal flotante con sello y anillo tipo linterna</p>

Propuestas de trabajo

1. Realice la simulación de la red de intercambio térmico de la figura.



Las corrientes C1 y C2 están disponibles a una presión de 200 kPa y la corriente F1 a 525 kPa. Los flujos molares de las 3 corrientes se muestran en la tabla siguiente:

Flujos molares en kgmol/h			
	C1	C2	F1
Metanol			596.4
Tolueno	1.3		596.4
Etilbenceno	136.2		3.8
Estireno	3.9	346.7	

Para completar los datos necesarios para la simulación utilice valores típicos que figuran en la bibliografía.

2. Modifique la propuesta 2 del capítulo 6, transformando los enfriadores y calentadores por intercambiadores de calor, en el primer caso, con agua de proceso disponible a 35 °C y con un salto permitido de 10 °C y para los segundos, con vapor saturado a 10 bar que cede su calor latente.

CAPÍTULO 9

SIMULANDO EL TRANSPORTE DE FLUIDOS

Consideraciones generales

No existe planta de proceso alguna donde no se produzcan movimientos de fluidos. Estas circulaciones ocurren como consecuencia de una diferencia de presión entre los extremos del conducto.

En el simulador disponemos de varias operaciones unitarias para representar equipos capaces de generar o aprovechar una diferencia de presión: bombas para el manejo de líquidos, compresores para impulsar gases o expansores para recuperar energía disponible. También es posible el movimiento de fluidos mediante la creación de vacío, utilizando eyectores, por ejemplo. Adicionalmente, tenemos a nuestra disposición una operación unitaria para determinar caudales o pérdidas de carga en tramos de cañería.

No siempre deberemos considerar los equipos de movimiento de fluidos.

En el caso de los líquidos, el incremento de presión producido por una bomba no modificará, sustancialmente, las propiedades de la corriente, lo cual, sumado al hecho de que ni el costo del equipo ha de afectar el monto de la inversión total ni su consumo de energía los costos operativos, podemos obviar la consideración de estos equipos.

Para ver la incidencia de la presión sobre las propiedades de una corriente líquida los invitamos a realizar la determinación de una mezcla equimolecular de metanol, etanol y agua a 25°C y, por ejemplo, 1, 5 y 10 bar.

No ocurre lo mismo con equipos que mueven gases y vapores. En este caso el costo es significativo así como su consumo energético y, además, las propiedades de las corrientes se verán absolutamente afectadas por el nivel de presión que se alcance.

Otro caso lo constituyen los equipos de vacío, donde las inversiones y, sobre todo, los costos operativos son altos.

Debemos hacer una mención especial sobre las operaciones unitarias que representan tramos de cañería. Podremos obviarlas en una simulación cuando las longitudes son cortas y los caudales bajos; de otro modo, las deberemos tener en cuenta.

Todas ellas calculan el cambio en las condiciones de las corrientes que circulan por el sistema y, cuando corresponde, el trabajo que demanda. Con excepción de los tramos de cañería, será necesario que fijemos una eficiencia para el funcionamiento del equipo de impulsión, lo que permitirá que el simulador calcule, a partir del valor del trabajo teórico (termodinámico) necesario, un requerimiento “real” de potencia.

La determinación del consumo real de energía no sólo es necesaria para una correcta evaluación de los costos operativos sino, además, para un cálculo ajustado de las condiciones operativas. En efecto, el exceso de energía por sobre los valores teóricos se disipará modificando la entalpía de la corriente fluida procesada en el equipo, con lo cual la condición de salida será función, entre otras variables, del valor de la eficiencia.

Vamos ahora a considerar el uso de algunas de las operaciones unitarias disponibles en nuestro simulador, comenzando por los tramos de cañerías.

Cañerías y bombas

Vamos a tratar de simular varias situaciones del sistema de cañería de la figura 1, construida en hierro galvanizado y considerando que el diámetro nominal es 1” Sch 40, por la que circula agua que ingresa a 50 °C.

Podemos considerar el sistema compuesto por tres tramos, dos horizontales (el primero y el último) y uno, trepando una pendiente de 45° sobre la horizontal, unidos por codos a 45°.

El simulador que disponemos nos permite considerar cada tramo y seleccionar los accesorios desde una lista desplegable.

Con nuestro simulador activado, comencemos por elegir como paquete de propiedades ASME Steam y como único componente el agua.

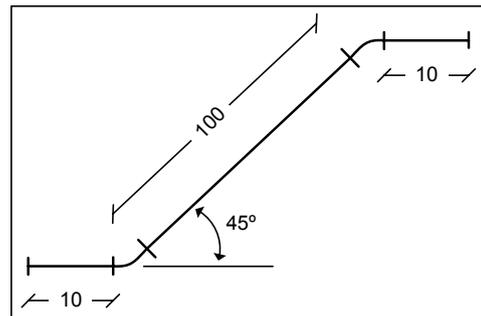


Figura 1. Sistema propuesto

Ingresems, ahora, la información que es común a todos los casos que vamos a analizar.

Agreguemos, desde el PFD, dos corrientes de materia, S1 y S2, y la operación unitaria *Pipe Segment* . Conectemos las corrientes al segmento de cañería e ingresemos en S1, los valores de temperatura y composición (fracción molar o másica igual a 1).

El segmento de cañería necesita además, una corriente de energía. Incorporemos una y conectémosla.

Para establecer la “forma” de la cañería lo hacemos desde la solapa Rating como se ve en la figura 2. Recordemos que ingresamos a las pantallas de los objetos oprimiendo dos veces el mouse sobre el ícono que lo representa en el PFD.

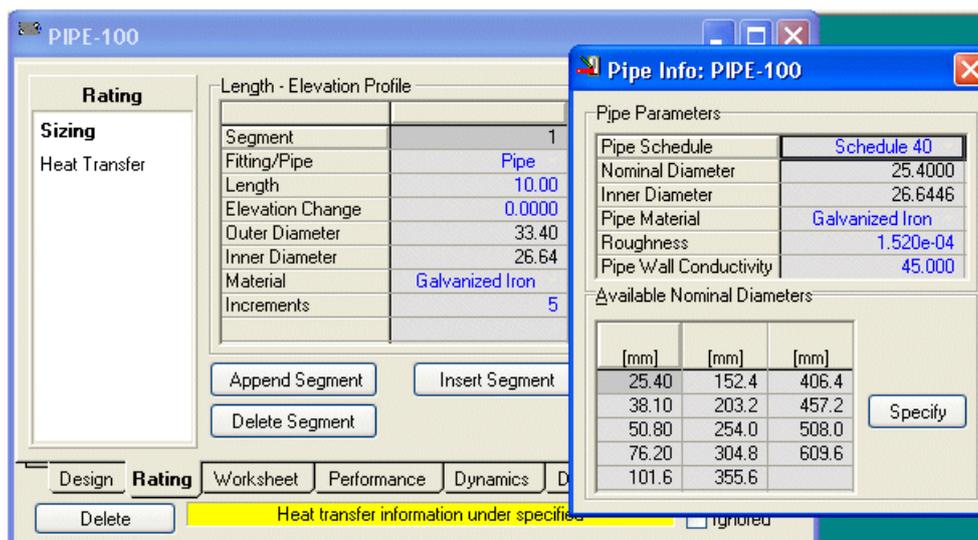


Figura 2. Selección de los parámetros del segmento de cañería

Al oprimir el botón *Append Segment* se incorpora el tramo 1.

Desde Fitting/Pipe podemos seleccionar si es un tramo recto, un accesorio o una reducción. Dejemos Pipe, en este caso. Ingreseemos 10 m para la longitud del tramo y 0 en cambio de elevación. Seleccionemos el material desde la lista desplegable. Al oprimir el mouse sobre el uno que identifica al tramo, se abre una ventana donde se pueden seleccionar sus parámetros. Al elegir Schedule 40, aparece la tabla Available Nominal Diameters; elijamos 25.40 mm y oprimamos el botón Specify. De esta manera, quedan fijados los diámetros interno y externo. Además, podemos ver que al elegir el material, queda establecido el valor de la rugosidad.

Agreguemos, luego, un codo de 45°, para lo cual, con *Append Segment* generamos el nuevo elemento de la cañería. De la lista desplegable de Fitting/Pipe, elegimos Elbow 45 Std, uno de los tres valores que podemos ingresar como usuario (en azul en la columna correspondiente al accesorio). Los otros dos son el material y el valor del diámetro interno. Para el primero procedemos igual que antes, eligiéndolo de la lista desplegable. Para el diámetro, debemos ingresar el valor manualmente, repitiendo, en este caso, el del tramo anterior.

En la figura 3, podemos ver el ingreso de todos los segmentos de la cañería. Allí podemos ver que, en cada tramo recto, la presión y la temperatura son calculadas considerando un número de 5 intervalos. Sobre esta cuestión volveremos más adelante.

	1	2	3	4	5
Segment					
Fitting/Pipe	Pipe	Elbow: 45 Std	Pipe	Elbow: 45 Std	Pipe
Length	10.00	0.0000	100.0	0.0000	10.00
Elevation Change	0.0000	0.0000	70.71	0.0000	0.0000
Outer Diameter	33.40	<empty>	33.40	<empty>	33.40
Inner Diameter	26.64	26.64	26.64	26.64	26.64
Material	Galvanized Iron				
Increments	5	1	5	1	5

Figura 3. Ingreso completo de la cañería

Como primer ejemplo, supongamos que tenemos aislada la cañería, que la presión a la salida es de 1 atm y que deseamos conocer la presión a la entrada del tramo para que circulen 2400 kg/h.

Fijemos, entonces, en la corriente de energía, el flujo de calor igual a cero y el flujo másico en S1. Para la presión de salida, escribamos, exactamente, 1 atm. Podemos ver que el simulador realiza la conversión en forma automática, colocando el valor 101.3 kPa.

Hecho esto, el simulador está en condiciones de calcular el tramo. El dato que nos preocupa, la presión de entrada al segmento de cañería, resulta ser de 895.9 kPa, un valor enteramente razonable, si se tiene en cuenta que debe vencerse una columna de 70 m de agua para descargar, luego, a 1 atm.

Siempre que nos sea posible, es conveniente realizar esta verificación del orden de magnitud de los resultados obtenidos. Así podremos mantener bajo control la simulación que estamos llevando a cabo y detectar eventuales errores en la estructuración o el cálculo de la misma.

Podemos ver, también, que, en virtud de haber definido una aislación perfecta, la temperatura de salida del agua es igual a la de entrada.

Finalmente, si bien el simulador calcula el caso, aparece una advertencia en la ventana de mensajes donde dice que la variación de presión en ciertos segmentos es superior al 10% de la presión de entrada a los mismos. Esto es lógico, ya que la pérdida de carga se debe no sólo a las fuerzas de fricción sino, también, a la diferencia de altura.

En rigor, la diferencia de nivel establece una cota mínima para el número de intervalos. Si no se tienen en cuenta las pérdidas por fricción, para que la pérdida de carga en cada tramo del cálculo, no supere el 10% de la presión a la entrada de los mismos, el número de intervalos debe ser superior a $9/((P_0 - P_F)/\rho gh - 1)$, donde $P_0 - P_F$ es la diferencia de presión total en la cañería y h el desnivel total. En el caso del ejemplo, el valor que arroja la fórmula es de algo menos de 60 intervalos y unos 65 son suficientes, para tener en cuenta la pérdida por fricción.

Distinto sería que la pérdida de carga superase el límite sin que hubiera diferencias de presión por variación de altura. En este caso podría tratarse de

El valor del flujo de calor, también puede darse en el cuadro Duty de la opción Parameters de la solapa Design.

un problema en el cálculo, por haberse considerado un número insuficiente de incrementos para la longitud del caño, lo cual se soluciona aumentándolos. Otra posibilidad es que el diámetro de la cañería sea demasiado pequeño y la solución, obviamente, es incrementarlo.

Ahora, modifiquemos levemente el problema, haciendo que *la cañería no esté aislada del aire que la rodea, el que se encuentra a unos 25 °C*.

Para ello, borramos el dato que habíamos ingresado para la energía de salida y fijamos, desde la opción Heat Transfer de la solapa Rating del segmento de cañería, un valor adecuado para el coeficiente global de transferencia. Para ello debemos elegir, primero, la opción Overall HTC, con lo cual se habilita el cuadro para ingresar la temperatura ambiente y el coeficiente de transferencia, como vemos en la figura 4. Tomemos $U = 60 \text{ W/m}^2\text{K}$, con lo cual el simulador resuelve el caso.

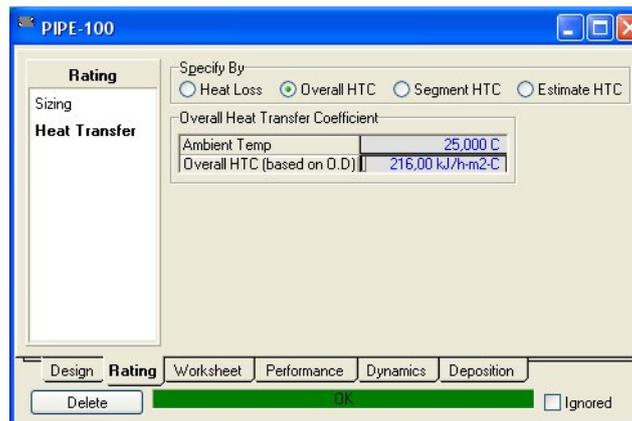


Figura 4. Información para la transferencia de calor

Ahora, la presión a la entrada resulta ser un poco superior a la anterior, 897 kPa, en tanto que la temperatura ha descendido algo menos de 6 °C, como consecuencia de la falta de aislación.

Modifiquemos, una vez más, el problema. Supongamos, ahora, que volvemos a tener aislada la cañería y que deseamos calcular el caudal de agua que circula por el sistema cuando la presión a la entrada es de 900 kPa, manteniendo el resto de los datos inalterados.

Para poder simular el nuevo caso, debemos, primero, remover el valor de caudal en la corriente de entrada y la información relacionada con la

transferencia de calor que habíamos ingresado en la opción Heat Transfer de la solapa Rating. Luego, asignemos el valor cero al flujo de calor de la corriente de energía y 900 kPa a la presión de entrada del tramo. Si bien se está en condiciones de realizar el cálculo, UniSim Design nos avisa que no se logra la convergencia.

Lo que sucede es que, en forma transparente al usuario, UniSim trata de encontrar el caudal que circula en forma iterativa.

Para ayudar en esa búsqueda, debemos modificar el valor inicial del flujo molar a suponer y el paso en la búsqueda. Esto se hace desde la opción Calculation de la solapa Design del segmento de cañería. En la figura 5, se encuentran los valores que el simulador usa por defecto. Podemos ver que el flujo inicial y, sobre todo, el paso, resultan grandes para nuestro problema.

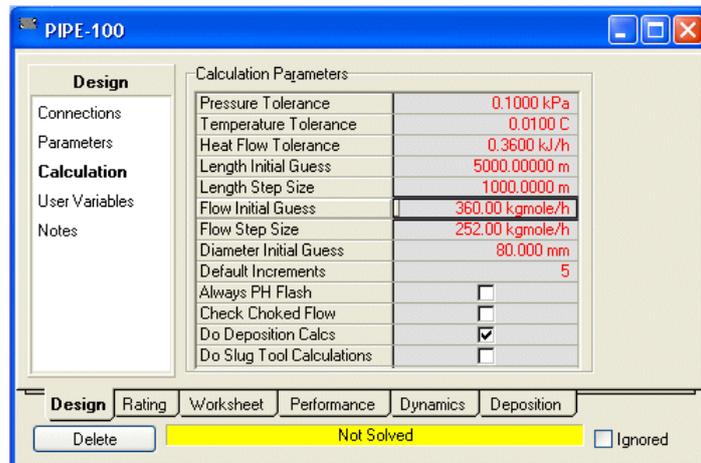


Figura 5. Parámetros para el cálculo de la cañería

Antes de modificar estos valores, congelemos el cálculo con el botón correspondiente, para evitar que el simulador realice operaciones antes que hayamos completado el ingreso de información. Pongamos 100 kgmol/h para el valor inicial del flujo supuesto y un paso de 10 kgmol/h. Cuando habilitemos el cálculo, encontraremos que el mismo converge a un valor de caudal de 2445 kg/h (2.45 m³/h).

Como último caso, supongamos una bomba conectada a la entrada del tramo de cañería, la que aspira 2400 kg/h a una presión de 1 atm y a una temperatura de 50 °C para impulsar el agua hasta una presión final de 1 atm.

Queremos saber cual es la potencia consumida cuando la eficiencia de la bomba es del 70%.

Desconectemos la corriente S1 del segmento de cañería. Luego, fijemos su presión en 1 atm y su flujo másico en 2400 kg/h.

Agreguemos una bomba al diagrama de flujo. Al igual que en la cañería, necesitamos definir las corrientes de materia de entrada, S1, otra de salida y una corriente de energía. Incorporaremos estas dos últimas al PFD.

No olvidemos especificar, en la bomba, la eficiencia igual a 70%, desde la opción Parameters de la solapa Design.

Hagamos, entonces, las conexiones. Podemos ver que el simulador es incapaz de realizar el cálculo, aunque un análisis conceptual del problema nos indica la ausencia de grados de libertad. Aparecen sendos mensajes en la bomba y el tramo de cañería, donde se dice que el simulador no está en condiciones de realizar el cálculo. Lo que ocurre es que UniSim no es capaz de determinar la presión de salida de la bomba. Esa presión no puede ser inferior a 800 kPa. Borremos, primero, el valor de la presión en la corriente de salida de la cañería. Luego, vayamos a la bomba y demos un incremento de presión de 750 kPa. El sistema se resuelve pero la presión al final de la cañería es aproximadamente la mitad de la especificada y aparece un aviso de exceso de pérdida de carga en uno de los intervalos del cálculo de la cañería.

Para encontrar el valor del ΔP en la bomba que se requiere para tener una presión de salida igual a 1 atm, debemos hacer uso de una operación Adjust.

Agreguemos uno al PFD y completemos la información del módulo, indicando cual es la variable de ajuste (el salto de presión de la bomba), la variable cuyo valor se quiere hacer igual a la especificación (presión de la corriente de salida) y el valor objetivo (1 atm). Desde la solapa Parameters, cambiemos el paso de búsqueda a 10 kPa.

Al oprimir Start en el Adjust el sistema se resuelve, obteniendo un salto de aproximadamente 795 kPa. En la corriente de salida podemos notar que, en virtud de la no idealidad de la operación de impulsión, existe un leve calentamiento del agua que circula, lo que no altera, sustancialmente, los resultados obtenidos previamente.

Por último, podemos agregar que, en todos los casos analizados, por tratarse de flujo en una sola fase, UniSim utiliza la ecuación de Darcy. Si hubiese flujo en dos fases, el simulador tiene por defecto el método de Beggs y Brill. Lo podemos cambiar desde la opción Parameters de la solapa Design. Allí

encontraremos una lista desplegable con los distintos métodos disponibles. Algunos sirven tanto para tramos horizontales como verticales y otros, sólo para un único tipo de tramo. Las distintas opciones figuran en la tabla 1.

Modelo	Flujo Horizontal	Flujo Vertical
Aziz, Govier y Fogarasi	No	Si
Baxendell y Thomas	Usar con cuidado	Si
Beggs y Brill	Si	Si
Duns y Ros	No	Si
Gregory, Aziz y Mandhane	Si	Usar con cuidado
Hagedorn y Brown	No	Si
Orkisewski	No	Si
Poettman y Carpenter	No	Si
Slurry Pipe Correlation	Si	No
Tulsa99	No	Si
UniSim, Homogeneous Flow	Si	Si
UniSim, Liquid Slip	Si	Si

Tabla 1. Opciones de modelos

Algunas consideraciones sobre accesorios

UniSim dispone de un conjunto amplio de accesorios para cañerías. Ya hemos visto el uso de los codos a 45°, existen otros a 90°, curvas, diversos tipos de válvulas con distinto grado de apertura, retornos, uniones, etc.

Dos tipos de estos accesorios merecen una consideración especial: la T y la reducción o expansión.

En el primero de ellos siempre se verificará una bifurcación del flujo del fluido y la asignación de la pérdida de carga la realizaremos sobre las ramas. Debemos tener en cuenta el modo en el que están vinculadas con la cañería principal, a través de la T.

En la figura 6 podemos ver los dos modos posibles de vínculo. En la parte (a), la dirección de la corriente en una de las ramas sigue la del ingreso; en la parte (b) ambas se bifurcan a 90°.

El simulador dispone de dos opciones para el accesorio: Tee Branch Blanked y Tee as Elbow. Obviamente, en el caso (b), para ambas ramas deberemos escoger esta última.

Con respecto a las expansiones o reducciones (Swage), las únicas que se consideran son a 45° o abruptas, como vemos en la figura 7.

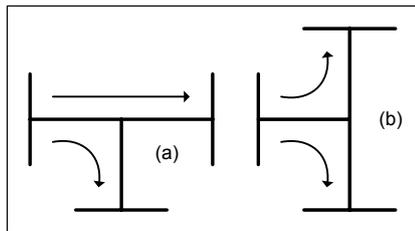


Figura 6. Bifurcaciones de flujo

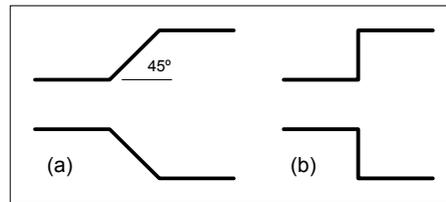


Figura 7. Expansiones o reducciones

Para el cálculo de la cañería, el simulador usa automáticamente los diámetros de los tramos a los cuales está unido la expansión o el estrangulamiento.

UniSim Design admite que este accesorio sea el primero en el tramo de cañería, lo que correspondería a la salida de un tanque, o el último, para el caso en que la descarga se efectuase a un tanque o, directamente, al exterior. Obviamente, si se agrega el accesorio sin la presencia de un tramo de cañería, el simulador dará un mensaje de error. Para evitarlo, conviene agregar dos tramos de cañería y modificar, luego, el que corresponda.

Gases en movimiento

Es momento de dedicarnos a considerar el movimiento de gases y vapores. Como dijimos anteriormente, estas operaciones no pueden dejarse de tener en cuenta, tanto por las importantes modificaciones que producen en las corrientes de proceso como por los costos, fijos y operativos, asociados a ellas. Vamos a trabajar sobre el siguiente ejemplo: Se deben comprimir 5300 kgmol/h de una mezcla de H₂ (35% molar), CH₄ (8%), C₂H₆ (22%) y C₂H₄ (35%) desde una presión de 2.5 bar hasta 12.8 bar. La mezcla se dispone a 94 °C y a la salida debe tener una temperatura de 38 °C.

Para suministrar la energía necesaria para la compresión vamos a utilizar una turbina que trabajará con vapor sobrecalentado de media presión, a 11 bar y 230°C, al que le admitiremos una expansión hasta 4 bar. UniSim calculará las compresiones como isentrópicas y las expansiones como adiabáticas.

En los compresores no resultan convenientes relaciones de compresión superiores a cinco, ya que esto produce un excesivo calentamiento del gas efluente, con el correlativo aumento de la energía requerida. Tampoco resulta admisible una alta temperatura en la corriente de entrada al equipo.

Todo esto nos obliga a considerar compresión por etapas con enfriamientos

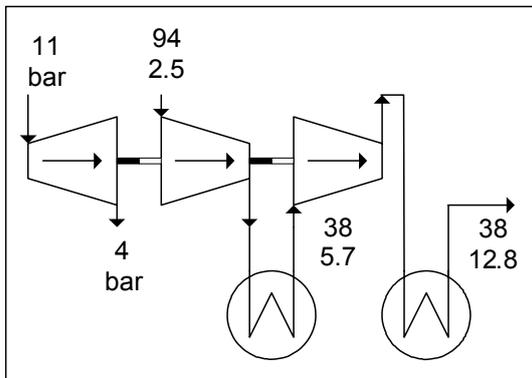


Figura 8. Sistema de compresión

intermedios (puede requerirse, después de cada enfriamiento, un separador de la eventual fase líquida generada).

Los requerimientos del problema y las consideraciones efectuadas nos llevan a proponer el esquema de proceso de la figura 8.

Dado que la relación de compresión total, $12.8/2.5$, es superior a cinco

deberemos usar dos etapas de compresión, siendo la presión intermedia aproximadamente igual a $(2.5 \times 12.8)^{1/2}$, lo que permite relaciones de compresión similares en ambas etapas, minimizando el consumo total de energía (Edgar y Himmelblau, 1988, por ejemplo). La temperatura intermedia la hemos fijado, arbitrariamente, igual a la de disposición final.

En este problema vamos a echar mano de un recurso que se dispone en los simuladores de proceso: el manejo de varios paquetes de propiedades en una misma simulación. Podremos, así, simular con mayor precisión los comportamientos de la corriente de hidrocarburos y del vapor de agua. Si bien podríamos prescindir del uso de distintos métodos de predicción, podremos ver, en un ejemplo sencillo, el modo de hacerlo y los recaudos que debemos tomar. Para el sector de compresión utilizaremos una ecuación de estado, Peng-Robinson, por ejemplo y para la turbina, ASME Steam.

Comencemos por abrir nuestro simulador y prepararlo para un nuevo problema, borrando la simulación anterior, si fuera necesario.

Agreguemos el paquete ASME Steam, dándole un nombre a la instancia particular, por ejemplo, TermoTurb y agreguemos el agua como compuesto asociado al paquete.

Para agregar otro paquete y los compuestos asociados, generemos primero la lista de compuestos (Hydrogen, Methane, Ethane y Ethylene) situándonos en la solapa *Components* y luego asociémosle el paquete Peng-Robinson, y démosle el nombre TermoCompr a la instancia. Si lo hubiéramos hecho a la inversa, eligiendo primero el paquete, UniSim le asignará, automáticamente, el grupo de compuestos previamente seleccionado; agua, en este caso.

Ahora vamos a estructurar nuestro esquema de simulación, comenzando por el sector de compresión. Agreguemos dos corrientes de materia, Alim y Sal, dos compresores, Compr-01 y Compr-02 y dos enfriadores Enfr-01 y Enfr-02, en los que no consideraremos pérdida de carga.

Podemos observar que los cuatro equipos requieren corrientes de energía, incorporémoslas y hagamos las conexiones necesarias.

En Alim, en la opción Conditions de la solapa Worksheet, debemos verificar que esté seleccionado el paquete TermoCompr e ingresemos la temperatura, presión, composición y caudal molar de la corriente a comprimir.

En el primer compresor, vamos a admitir una compresión adiabática con una eficiencia del 75%, para lo cual debemos ingresar a la opción Parameters de su solapa Design. Fijemos, además, la presión a la salida del equipo. Al hacerlo, el simulador completa el cálculo para el equipo. La temperatura a la salida resulta ser de unos 172 °C, con un consumo de potencia de 5317 kW.

Los invitamos a que modifiquen el valor de la eficiencia, haciendo que el comportamiento sea ideal ($\eta = 1$), y vean el valor de la energía requerida y la temperatura de salida. Debemos cuidar que la eficiencia que introduzcamos no sea 100%, porque ese valor no es técnicamente posible y no lo acepta el simulador.

Conectemos la salida de Compr-01 con la entrada de Enfr-01 y establezcamos, desde la opción parameters de la solapa Design, la pérdida de carga en el

enfriador igual a cero y 38 °C la temperatura a la salida del equipo. Podemos ver que la corriente se encuentra totalmente en fase vapor, por lo que no se requiere un separador de fase.

Continuemos estructurando nuestro sistema y agreguemos la segunda etapa de compresión conectada con Enfr-01. Fijemos la eficiencia en el 75% y establezcamos la presión de salida en el valor 12.8 bar.

Tendremos un consumo de unos 4400 kW y una temperatura a la salida de la etapa cercana a los 110 °C.

El posterior enfriamiento a 38 °C en Enfr-02 (pérdida de carga igual a cero) no genera fase líquida, por lo que, una vez más, no se requiere un separador de fases.

Ahora debemos incorporar la turbina, para la que también supondremos una eficiencia del 75%.

Pero en este equipo solamente estará presente el vapor y el paquete de propiedades a utilizar será TermoTurb.

Empecemos por agregar, en el PFD, dos corrientes para el vapor de entrada y salida de la turbina, V1e y V1s y una operación Expander, a la que llamaremos Turb-01. Asegurémonos que en todas las operaciones esté seleccionado el paquete TermoTurb. La turbina, al igual que el resto de los equipos de impulsión, necesita una corriente de energía. La generamos y hacemos las conexiones necesarias.

Ingresemos ahora toda la información conocida. Sabemos que utilizaremos vapor de agua de 11 bar y 230 °C, valores que entraremos en la corriente V1e, además de la fracción molar igual a 1. Entremos una presión de 4 bar para V1s y dejemos en la turbina el valor por defecto de la eficiencia adiabática, 75%.

Al introducir todos estos datos vemos que el simulador resuelve parcialmente el equipo y nos informa que la temperatura de salida es de unos 146 °C. La temperatura del vapor saturado seco a 4 bar es de 143.6 °C, lo que implica que la salida de la turbina está levemente sobrecalentada, evitando, de este modo, la eventual formación de una fase líquida que podría afectar mecánicamente a los álabes.

No sabemos, y será lo que averiguaremos usando el simulador, la cantidad de vapor que se necesita para mover los compresores y compensar las pérdidas en la propia turbina.

Para ello haremos uso de la operación Balance, que vimos al tratar los procesos de transferencia de calor.

En el módulo Balance, como ya vimos, se debe definir el número de corrientes de materia y energía que ingresan y egresan del mismo. En nuestro caso no hay corrientes de materia, hay dos corrientes de energía que ingresan (los consumos conocidos en los compresores) y una que sale (la energía que se genera en la turbina, valor que queremos calcular).

En la figura 9 podemos ver la definición de las corrientes de entrada y salida.

Recordemos que debemos seleccionar la solapa Parameters y allí elegir la opción Heat.

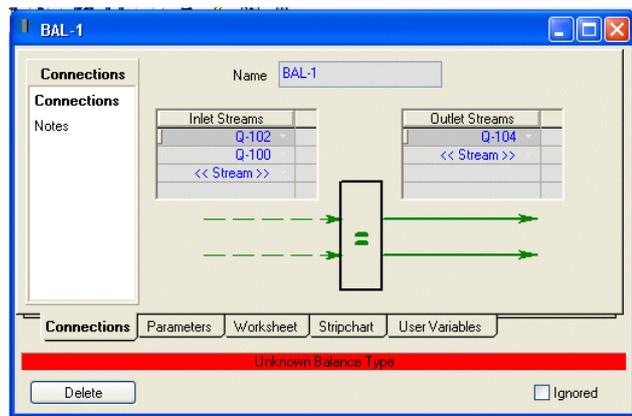


Figura 9. Conexiones de la operación Balance

Al hacerlo, el simulador procede a realizar el cálculo y vemos que en la corriente de vapor se necesitan unas 232 t/h para satisfacer los requerimientos del proceso, que era la información que nos faltaba.

Una operación lógica en el uso de varios paquetes termodinámicos

En el apartado anterior hemos trabajado con dos paquetes de propiedades en forma simultánea; aunque, si observamos cuidadosamente, la aplicación de cada uno se ha limitado a sectores prácticamente independientes, que comparten sólo la información de la energía generada en uno de los sectores y consumida en el otro.

Pero esto no siempre es así. Existen simulaciones donde es inevitable la interacción.

Puede ocurrir, por ejemplo, que un determinado grupo de operaciones requiere ser modelado con un paquete en particular, que sólo es aplicable a ese grupo, mientras que el resto de la simulación utiliza un segundo método, de un alcance más general.

En este caso nos encontraremos con corrientes de materia que pasan de un sector a otro, llevando consigo información, calculada en origen, que no resulta coherente en el punto de destino.

Veamos un ejemplo muy sencillo, sin duda arbitrario pero que resulta ilustrativo de lo que queremos decir.

Consideremos dos corrientes exactamente iguales pero que se modelan con distintos paquetes termodinámicos. En cada una de ellas tenemos 10 kgmol/h de una mezcla equimolecular de etano, n-butano y n-hexano a 35 °C y 1 bar de presión.

Abramos, una vez más, nuestro simulador. Definamos dos paquetes de propiedades, PTermo1 y PTermo2, usando Peng-Robinson y SRK, respectivamente. Hemos elegido, a propósito, dos ecuaciones de estado perfectamente aplicables para el problema.

Generemos, ahora, dos corrientes de materia, S1 y S2, cada una de ellas con los mismos datos de presión, temperatura, composición y caudal pero utilizando distintos modelos termodinámicos, para fijar las ideas, S1 con PTermo1 y S2 con PTermo2.

Advirtamos que las corrientes aparecen con diferencias, no demasiado notorias pero diferencias al fin. La fracción vaporizada, por ejemplo, es del orden del 90% en una y del 91% en la otra.

Con todo rigor: el paquete de propiedades termodinámicas que se está utilizando debería considerarse como una variable más en la simulación que estamos realizando. Así, una corriente de materia quedaría absolutamente definida si se estableciese su composición, los valores de dos variables intensivas y de una extensiva y *el método termodinámico utilizado*.

Con esto, las corrientes S1 y S2 de nuestro problema *no son las mismas*.

Esta diferencia, no de una naturaleza física sino informativa, conduce a situaciones incoherentes, desde el punto de vista del proceso simulado, como podemos ver en el trabajo de Agarwal y otros, 2001.

Este problema lo hemos generado con una intención didáctica pero, como hemos dicho, en determinadas situaciones puede ser inevitable el tener que trabajar con más de un paquete termodinámico en distintos sectores de un diagrama de flujo, interconectados por corrientes de materia.

En tales casos es preciso que remedemos las incoherencias surgidas como resultado del cálculo de la misma variable por diferentes métodos, a uno y otro lado de la “frontera” que separa dos sectores en los que operan distintos paquetes.

Cada simulador maneja esta cuestión con su propia metodología: algunos, como UniSim, agregan el elemento compatibilizador en forma automática, en otros, hay que hacerlo en forma explícita. Pero siempre debemos tener presente la necesidad de conocer la forma en que nuestro programa aborda la cuestión.

Recurramos, nuevamente, a un caso sencillo. Vamos a mezclar dos corrientes, S1 y S2, pero, en este caso, a S2 le modificamos la temperatura y composición. Consideremos que está a 25°C, y cuya fracción molar es 0.5 de etano y 0.25 de n-butano y n-hexano.

Agreguemos, al diagrama de flujo, un Mixer y una corriente de salida S3. Ya sabemos que, ambos, tienen un paquete termodinámico por defecto. Verifiquemos que sea el que deseamos mantener para el cálculo, por ejemplo, PTermo1.

Conectemos S1 y S3 al mezclador. El simulador calcula sin problemas, como es obvio, la salida es igual a la entrada.

Al conectar S2, UniSim agrega automáticamente el objeto Stream-Cutter (S2-Cutter) para realizar la compatibilización de información, como podemos ver en la figura 10.

En esta operación unitaria, además

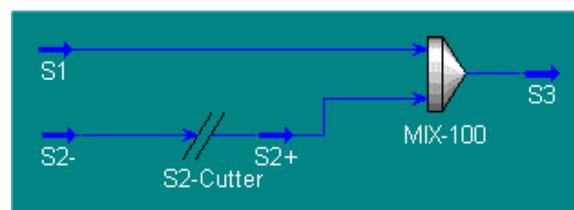


Figura 10. Stream-Cutter

de la composición y el caudal molar o másico, se han de conservar dos variables intensivas, que podemos elegir. Obviamente, deberemos seleccionar aquellas que hemos fijado como datos. Esto lo podemos hacer en el grupo Transfer Basis de la solapa Transitions del objeto S2-Cutter, como se muestra en la figura 11. Podemos observar, además, que está indicado el paquete termodinámico de entrada, SRK, en este caso, y el de salida, PR.

Una vez hecha la selección, el simulador calcula sin inconvenientes. La corriente S3 resulta con una fracción vaporizada levemente superior al 90% y una temperatura de 30.39 °C.

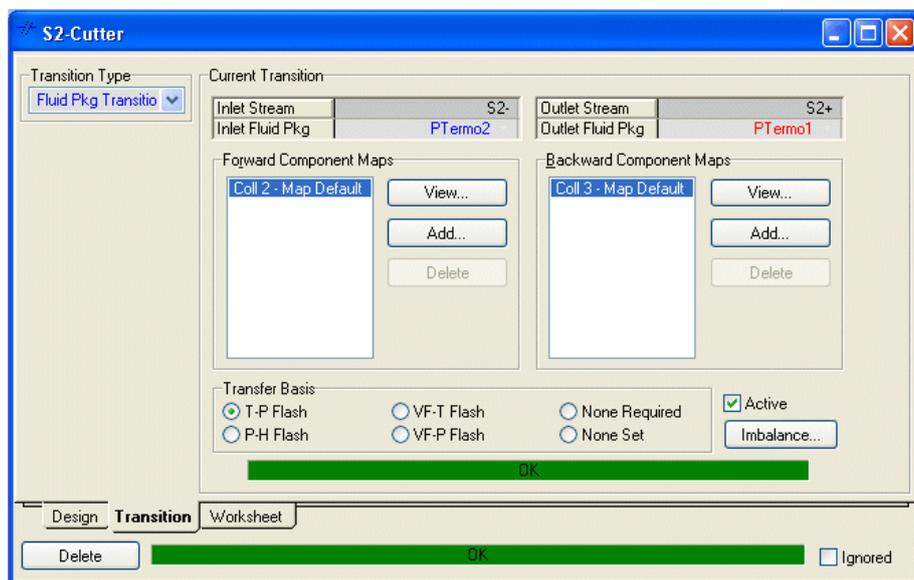


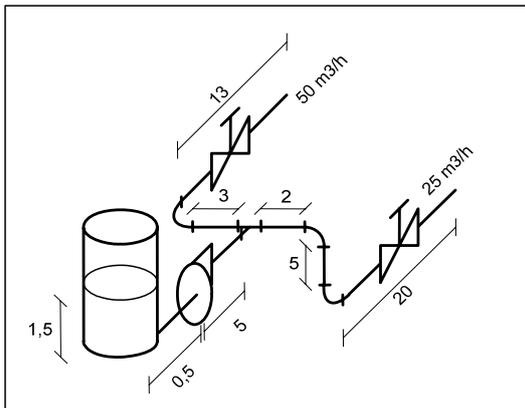
Figura 11. Definición del objeto Stream-Cutter

Bibliografía

- Agarwal R., Li Y.K., Santollani O., Satyro M.A., Vieler A., “Uncovering the Realities of Simulation”, CEP, May 2001.
- Edgar T.F., Himmelblau D.M., “Optimization of Chemical Processes”, McGraw-Hill, 1988.
- Turton, R., Bailie, R.C., Whiting, W.B., Shaeiwitz, J.A., “Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes”, Prentice Hall PTR, New Jersey, 1998.
- UniSim Design Operations Guide.

Propuestas de trabajo

1. Simule el sistema de la figura considerando que a la bomba ingresan 75 t/h de agua a 25 °C, provenientes del tanque abierto a la atmósfera ubicado aguas arriba.



La cañería es de hierro galvanizado y se encuentra aislada.

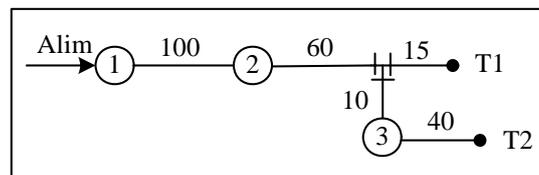
El diámetro nominal del primer tramo es de 4" (Sch 40).

La presión al final del tramo por el que circulan 25 m³/h debe ser de 4 bar y el diámetro nominal es de 2½" (Sch 40). Al final del otro tramo, la presión es de 10

bar y el diámetro nominal de 3½" (Sch 40).

Determine el mínimo consumo energético en la bomba que permite satisfacer los requerimientos fijados para las presiones en ambos extremos de la cañería (Esto implica que no existirá una de las dos válvulas indicadas).

2. Simule el sistema de la figura que representa un sector simplificado de un gasoducto. Los círculos corresponden a las estaciones de compresión y están constituidas por un separador, un compresor y un enfriador.



La corriente de alimentación al sistema es de 16750 kgmol/h, se dispone a 40 °C y 3500 kPa y su composición es:

CO ₂	Metano	Etano	Propano	i-Butano	n-Butano
0.02	0.93	0.035	0.01	0.0025	0.0025

La pérdida de carga de los enfriadores es de 20 kPa y la temperatura de salida de los mismos debe ser de 40°C.

En el punto terminal T1 se debe disponer un flujo de 6700 kgmol/h a una presión de 2000 kPa. La presión en T2 debe ser de 4000 kPa.

La cañería es de acero de bajo contenido en carbono (Mild Steel) y se encuentra aislada. Los dos primeros tramos tienen un diámetro nominal de 24", el del tramo de T1 es de 14" y los restantes de 16", siendo todos Sch 40.

Las longitudes de los segmentos de cañería están en km.

Realice un estudio de las demandas de energía en cada etapa de compresión, variando la relación de compresión del primer compresor entre los valores 1.8 y 2.1.

CAPÍTULO 10

SIMULACIÓN DE OPERACIONES DE DESTILACIÓN

Algunas consideraciones previas

Como quedó dicho cuando tratamos el equilibrio flash, los procesos de separación, al igual que los de compresión de gases, requieren una inversión realmente importante y su contribución al costo operativo general suele ser alto, con una incidencia, en algunos casos, del orden del 50% de ese costo.

Dentro del sector de separación, la operación más frecuente, y, sin duda, una de las más tradicionales, es la destilación. Por lo dicho en el párrafo anterior, su tratamiento detallado reviste una singular importancia.

El principio básico en el que se basa es la diferencia en los puntos de ebullición, o presión de vapor, de los componentes de la mezcla a tratar. La operación del equipo, torre o columna de destilación, se realiza mediante el agregado de energía térmica en el rehervidor (reboiler) de fondo y la remoción de calor en el condensador de tope.

El uso de un simulador de procesos en las operaciones de destilación tiene, como siempre, dos alcances: la verificación del comportamiento de una columna existente frente a nuevas condiciones operativas o el diseño de una nueva columna para cumplir con determinadas especificaciones.

La mayor parte de los simuladores, por no decir la totalidad, están estructurados para realizar la primera de las operaciones, lo que implica que, para poderlos usar en modo diseño, deberemos realizar una especificación tentativa del equipo y luego verificar si el mismo permite alcanzar los requerimientos planteados.

En las columnas de destilación, un parámetro que resulta clave es la presión a la que opera la torre. Entre otras cosas, ha de influir sobre el tipo de

refrigerante que podremos usar en el condensador de tope y, por ende, sobre el perfil de temperaturas a todo lo largo de la columna.

En la operación de los equipos de proceso, todo apartamiento de las condiciones ambientales (presión y temperatura) implica un incremento de costo, fijo y operativo, tanto mayor cuanto más se aparte de esas condiciones. Debemos tener en cuenta, también, que desplazarnos por encima del ambiente (calentar o comprimir) es más económico que un desplazamiento de igual magnitud hacia abajo (enfriar o producir vacío).

Estas consideraciones de índole general pueden verse alteradas por un esquema de integración energética dentro del proceso, con un ahorro neto global, a costa de ciertos encarecimientos en algunos sectores de la planta.

En el presente capítulo vamos a analizar las posibilidades existentes en UniSim para realizar tanto el diseño tentativo a que hacíamos referencia más arriba como el cálculo riguroso de la columna.

En lo que sigue habremos de privilegiar, salvo que digamos lo contrario, el enfoque de diseño por sobre el de verificación.

Siempre que podamos nos vamos a plantear el uso de agua de enfriamiento como primera alternativa para el condensador y una presión operativa en el tope de la columna lo más baja posible, compatible con la operación de la torre. Advertimos que no solamente habremos de elegir la presión de trabajo de la columna sino también el tipo de condensador que resulta más adecuado.

Según Henley y Seader, un criterio orientativo para definir el tipo de condensador, la presión de trabajo y el medio refrigerante se basa en el comportamiento del destilado a 50°C. Si su presión de burbuja, P_B , es menor a 15 bar se utilizará un condensador total, agua como medio de enfriamiento y la presión a la salida del equipo será P_B ; siempre que no resulte inferior a 2 bar, usando este valor cuando ello ocurra. Cuando P_B sea superior a 15 bar, siempre usaremos condensación parcial. Si la presión de rocío del destilado, P_R , es menor a 25 bar, podremos usar agua para enfriar, de otro modo, deberemos recurrir a un medio refrigerante especial. La presión a la salida del equipo siempre será P_R , salvo que resulte superior a 28 bar, en cuyo caso adoptaremos este valor.

En el cálculo riguroso de una torre de destilación, como en casi cualquier simulador de procesos, se deberá especificar, además de la presión de trabajo y el tipo de condensador, el número de platos que tiene la columna y la posición del plato de alimentación.

Para estimar estos valores haremos uso de la operación Short Cut Column



, módulo que restringe el análisis a columnas de destilación simples, con una única entrada y sin salidas laterales. El cálculo se lleva a cabo utilizando las ecuaciones de Fenske y Underwood y la correlación de Gilliland, procedimiento englobado bajo el nombre de *método FUG*. Aunque no está documentado, el simulador utiliza una ecuación para la determinación de la posición del plato de alimentación, probablemente la ecuación de Kirkbride.

El uso de la operación Short Cut Column en UniSim

Nos vamos a proponer estimar los parámetros fundamentales de una columna de destilación simple donde se ha de tratar una mezcla de 100 kgmol/h de hidrocarburos alifáticos, cuya composición es la siguiente:

Compuesto	C3	iC4	nC4	iC5	nC5
Frac. molar	0.05	0.15	0.25	0.20	0.35

La mezcla ingresará a la columna en su punto de burbuja a 650 kPa de presión. Se requiere que recuperemos, por tope, el 94% del n-C4 ingresante y, por fondo, el 84 % de i-C5.

Abramos el simulador y seleccionemos un paquete termodinámico adecuado para la mezcla, Peng-Robinson, por ejemplo, y los compuestos presentes en ella. Aquí podemos escoger cualquier ecuación de estado ya que la mezcla a separar, en las condiciones operativas elegidas, tiene un comportamiento cercano al ideal.

Luego agreguemos, en el Diagrama de Flujo, una corriente de materia que represente la mezcla a tratar. Grabemos el caso, en este momento, para usarlo posteriormente en la simulación rigurosa de la columna.

Incorporemos en el PFD la operación *Short Cut Column*. Este módulo es una operación que ha de trabajar aislada del resto de la simulación. Es lógico que así sea ya que la utilizaremos para estimar los parámetros fundamentales de la columna en el cálculo riguroso de la misma. Por lo tanto, una vez logrado este objetivo, podremos borrar la operación, sin que esto genere ningún problema.

La estimación se realiza en dos etapas. En la primera, a partir de los datos disponibles, se obtienen:

- Relación de reflujo mínima
- Número mínimo de platos
- Temperatura de salida del destilado y del producto de fondo.

En la segunda etapa, al dar la relación de reflujo operativa, se calculan:

- Número de platos teóricos
- Posición del plato de alimentación
- Energías transferidas en el condensador y reboiler
- Flujos internos de líquido y de vapor en la zona de rectificación y en la de agotamiento.

Volvamos a la simulación y desde la solapa Design de la operación Short Cut Column, hagamos las conexiones y establezcamos los nombres de las corrientes, como vemos en la figura 1. En el PFD aparecerán dos nuevas corrientes de materia y dos de energía. En el grupo Top Product Phase podemos seleccionar el tipo de condensador de tope. Si elegimos Liquid, la opción por defecto, el condensador será total; si, en cambio, seleccionamos Vapour será parcial, en tanto que el reboiler siempre será total, como se muestra en la figura 1.

Una vez hechas las conexiones debemos completar el resto de la información requerida por la operación unitaria, por ejemplo, la presión de trabajo y los componentes claves. Para hacerlo, seleccionaremos la opción Parameters de la solapa Design.

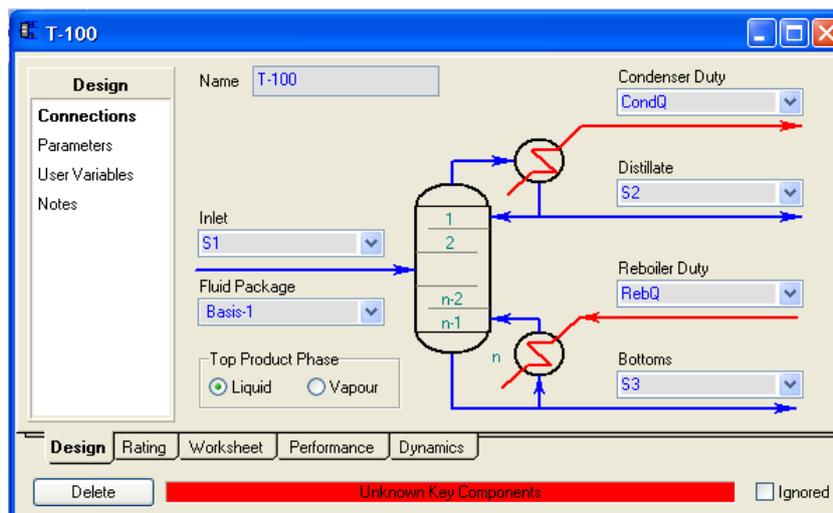


Figura 1. Conexiones de la operación Short Cut

Elijamos, de las listas desplegables del grupo Components, los compuestos claves. Para ingresar sus factores de recuperación, tenemos problemas, ya que el Short Cut pide el ingreso de las fracciones molares. Las podemos estimar considerando que, por tope, salen los compuestos clave de acuerdo a sus factores de recuperación y la totalidad de los compuestos más livianos que el clave liviano. De acuerdo a esto, nos da una fracción igual a 0.028 para el n-C4 en el fondo y el valor 0.068 para el i-C5 en el destilado.

Una vez que disponemos de la composición del destilado, podemos determinar el tipo de condensador y la presión de trabajo. En nuestro caso, la presión de burbuja a 50°C es cercana a 650 kPa, con lo cual esta será la presión a la salida de un condensador total.

A fin de especificar la presión de fondo, podríamos estimar que la columna va a tener unos 20 a 30 platos. Si consideramos que 0.1 psi es una pérdida de presión por plato razonable, tendremos un valor para la pérdida de carga total de $\Delta P_{tot} \cong 17$ kPa, por lo cual la presión en el fondo sería de 667 kPa.

Al introducir estos valores, el simulador calcula los resultados de la primera fase. La relación de reflujo mínima aparece en la misma pantalla en la que habíamos ingresado la información del problema, como podemos ver en la figura 2. El número de platos mínimo y las temperaturas de los productos de tope y fondo se encuentran en la solapa Performance.

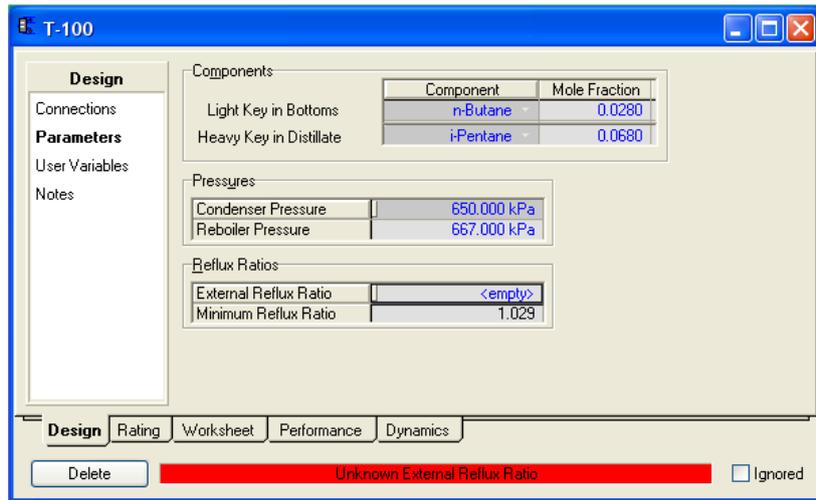


Figura 2. Parámetros de la operación Short Cut

En la solapa Worksheet o, directamente, en las corrientes de salida, podemos ver las composiciones de los productos de tope y fondo. Si lo hacemos encontraremos que hay un leve exceso del clave liviano en el destilado (23.56 kgmol/h frente al 23.5 requerido) y un déficit insignificante del clave pesado en el fondo (un factor de recuperación de 83.5 % en lugar del 84 especificado).

El resto de los parámetros, los que se determinan en la segunda etapa, se calculan luego que ingresamos la relación de reflujo operativa en la solapa Design. Démosle el valor 1.2348, ya que normalmente esta relación se toma un 20% por encima del valor mínimo.

El simulador completa el cálculo de la operación, y en la solapa Performance aparecen los resultados como pueden verse en la figura 3.

Dado que estimamos una pérdida de carga en la columna considerando un número de platos mayor al obtenido, podemos ajustar la presión de fondo (662 kPa aproximadamente, si consideramos nulas las pérdidas de carga en el condensador y el reboiler) y recalculamos la operación. Al hacerlo verificamos que tanto el número

Trays	
Minimum Number of Trays	6.490
Actual Number of Trays	16.085
Optimal Feed Stage	6.455
Temperatures	
Condenser [C]	51.60
Reboiler [C]	100.5
Flows	
Rectify Vapour [kgmole/h]	108.657
Rectify Liquid [kgmole/h]	60.037
Stripping Vapour [kgmole/h]	108.657
Stripping Liquid [kgmole/h]	160.037
Condenser Duty [kJ/h]	2134807.047
Reboiler Duty [kJ/h]	2274370.849

Figura 3. Resultados del Short Cut

de platos teóricos como la posición del plato de alimentación coinciden con la corrida anterior.

Todos los valores que hemos obtenido nos van a permitir simular, en forma rigurosa, la columna de destilación para separar esta mezcla. Ellos son:

- Número de platos teóricos: 17
- Posición del plato de alimentación: 7
- Presión de tope: 650 kPa
- Presión de fondo: 662 kPa
- Relación de reflujo operativa: 1.23
- Temperatura estimada de salida del destilado: 50 °C
- Temperatura estimada del producto de fondo: 100 °C

La experiencia en simulación de columnas indica que la convergencia en el cálculo riguroso se facilita si se considera como información a ingresar solamente las cuatro primeras, a las que se agrega la recuperación de los compuestos claves y el tipo de condensador. El valor obtenido en el Short Cut para el número de platos se puede incrementar entre dos y cinco platos.

Adicionalmente a esto, ajustemos la presión de la alimentación que ingresará a la columna en el valor 654.5 kPa, considerando los seis platos por encima del punto de entrada.

Modelo riguroso de la columna de destilación. Grados de libertad

Ahora estamos en condiciones de abordar el cálculo riguroso de la columna de destilación que tratará la mezcla propuesta.

Antes de hacerlo, veamos brevemente algunas de las posibilidades que se incluyen dentro del módulo.

Los equipos de intercambio admitidos por UniSim en el cálculo riguroso son, en el tope, un condensador total o parcial con un destilado en fases líquida y vapor o esta última solamente. En el fondo, un reboiler tipo kettle o dos tipos de termosifones, cuyos esquemas podemos ver en la figura 4 partes a, b y c.

Las columnas modeladas con el simulador admiten, además de los productos de tope y fondo, corrientes laterales, limitadas en número, obviamente, por la cantidad de platos que tiene la torre. Asimismo, son posibles varias corrientes de alimentación.

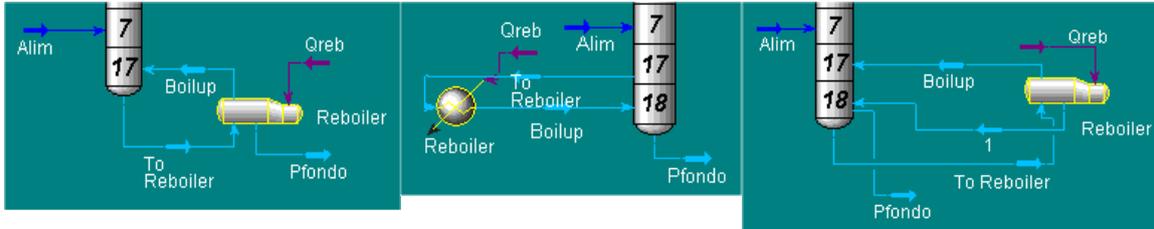


Figura 4a. Marmita (Kettle) **Figura 4b.** Termosifón de un paso **Figura 4c.** Termosifón común

En este capítulo nos limitaremos a las mismas columnas a las que se aplica el Short Cut.

Una cuestión básica que debemos tener en cuenta, al momento de proceder con la simulación, son los grados de libertad que existen en el sistema. Este número determina la cantidad de información que se requiere para proceder con el cálculo.

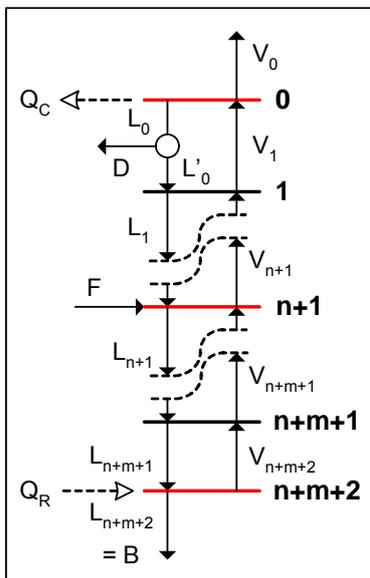


Figura 5. Esquema de una torre de destilación

En la figura 5 hemos esquematizado una columna de destilación con n platos en la zona de rectificación, un condensador parcial con salidas líquida y vapor, m platos por debajo del plato de alimentación y un reboiler tipo kettle, lo cual nos arroja un total de $n+m+3$ etapas en equilibrio. Consideramos, además, que están definidas la presión en el tope, la pérdida de carga por plato y la corriente de alimentación F .

Si no existe V_0 el condensador será total y la temperatura a la que opera la salida del equipo será la de burbuja de la mezcla V_1 , cuya composición es igual a la de L_0 (y a la de D). En caso contrario, la condensación será parcial y la salida líquida D puede existir o no.

Antes de entrar a considerar el tema de los grados de libertad desde un punto de vista formal, hagamos un planteo de índole conceptual.

Si a una columna, donde están determinados el número de platos, la posición del plato de alimentación, la presión de trabajo y la corriente de alimentación, le aportamos una cierta cantidad de calor en el reboiler, retiramos otra en el condensador y refluja una cantidad de líquido, la columna va a funcionar de una manera totalmente determinada, en tanto esos valores no se modifiquen.

Ya que el simulador requiere, obligatoriamente, toda esa información, salvo los tres últimos valores, será, entonces, éste el número de variables que podemos ajustar libremente.

Ahora, desde la formalidad matemática, como siempre, podemos calcular los grados de libertad restando al número de variables el de ecuaciones.

Las ecuaciones que podemos plantear son, suponiendo conocido el perfil de presiones:

Balances de masa por componente (N_C)	$N_C (n+m+3)$
Balances de energía	$(n+m+3)$
Relaciones de equilibrio por componente	$N_C (n+m+3)$
Definición de constantes de equilibrio $K = f(T, P, x, y)$	$N_C (n+m+3)$
Definición de entalpías molares de vapor $H = f(T, y, P)$	$(n+m+3)$
Definición de entalpías molares de líquido $h = f(T, x)$	$(n+m+3)$
Definición de fracciones molares en fase vapor ($\sum y = 1$)	$(n+m+3)$
Definición de fracciones molares en fase líquida ($\sum x = 1$)	$(n+m+3)$
Ecuación de reflujo ($L_0 = D + L'_0$)	1

El número total de ecuaciones es: $(3N_C+5)(n+m+3)+1$. Las variables involucradas son

Fracciones molares y, x en todas las etapas, incluidas D y L'_0	$2N_C (n+m+3)$
Caudales V y L en todas las etapas más D y L'_0	$2(n+m+3)+2$
H y h en todas las etapas y en los productos	$2 (n+m+3)$
Cantidad de calor en reboiler y condensador Q_C, Q_R	2
Constantes K en todas las etapas	$N_C(n+m+3)$

Temperaturas T en todas las etapas

(n+m+3)

El número total de variables es: $(3N_c+5)(n+m+3)+4$ y resultan ser tres los grados de libertad de nuestra columna, tal como lo anticipaba el análisis conceptual que habíamos realizado. Podemos asociar esto al total de corrientes de salida presentes en el esquema de la figura 5.

Si en la columna existiese alguna corriente lateral, la misma estaría ubicada sobre alguno de los flujos internos, líquido o vapor y en ella se repetiría el esquema que, en la figura 5, vincula a L_0 , L'_0 y D: aparecerían dos corrientes adicionales y una ecuación que las vincula, con lo cual se incrementarían en uno los grados de libertad.

La presencia de un pump around implica una entrada o salida de energía adicional, con el consiguiente incremento del número de grados de libertad.

Podemos plantear una expresión general para el cálculo de los grados de libertad de las columnas de destilación, bajo las condiciones que admite el simulador, donde, para una alimentación dada, se conocen la presión de trabajo, el número de platos y la posición del plato de alimentación:

$$GLC = SCM + CE - 2$$

Siendo:

GLC : grados de libertad de la columna

SCM : número total de salidas de corrientes de materia.

CE : número total de flujos de entradas y salidas de energía.

El factor 2 tiene en cuenta la existencia de los balances globales de materia y energía, habida cuenta de que la corriente de alimentación está totalmente definida.

Aplicando la ecuación anterior a la figura 5 vemos que existen 3 salidas de corrientes de materia y 2 flujos de energía, lo que conduce, una vez más, a un número de grados de libertad igual a tres.

Simulación rigurosa de la columna

Aclarar la cuestión de los grados de libertad de una columna no es, como hemos dicho, algo de exclusivo interés académico: debemos tener muy claro este concepto ya que, de lo contrario, podríamos subespecificar nuestro caso y el simulador quedar a la espera de los datos que faltan o sobreespecificarlo y obtener una condición de error. Si bien no es una política general en los simuladores de proceso, en UniSim, ambas condiciones serán motivo de sendos avisos.

Volvamos a nuestro problema y recuperemos el archivo que guardamos al utilizar el módulo Short Cut Column, donde estaba especificado el caso termodinámico y la corriente a tratar. Ahora debemos agregar el equipo.

UniSim Design dispone de varias configuraciones preconstruidas de columnas, "Column Templates", para simplificar la incorporación de las mismas en la simulación. Algunas de las disponibles son: absorbedora, extractor líquido-líquido, absorbedor con reboiler, absorbedor con reflujo y columna de destilación.

Un Column Template contiene las operaciones unitarias y corrientes necesarias para definir el tipo de columna particular, así como un conjunto de especificaciones por defecto. En el caso de la columna de destilación contiene la sección de los platos separada del condensador y el reboiler.

Agreguemos, entonces, una Columna de Destilación .

Si bien para especificar la columna de destilación se lo puede hacer, como en cualquiera de los objetos que hemos visto, desde las distintas solapas que dispone el módulo, UniSim Design posee un sistema experto (Input Experts, IE) que facilita el ingreso de los datos requeridos en los distintos tipos de columnas. Obviamente, haciendo uso de IE se ingresa la información necesaria para proceder al cálculo. Si los datos que se disponen no coinciden con lo solicitado por IE, puede hacerse un ingreso parcial y luego completarse la información accediendo a las solapas del objeto.

Para poder usar IE debe estar seleccionada la opción Use Input Experts que se encuentra en el cuadro General Options de la página Options de la solapa

Simulation del menú Tools|Preferences. El uso del IE es la opción que tiene seleccionada por defecto UniSim. Obviamente, si al ingresar a la columna no está activa la opción Use Expert ... , en ese equipo no se podrá utilizar el sistema experto.

Al hacer un doble clic en la columna, aparece la primera página del IE, en la cual debemos ingresar todas las corrientes de materia y energía, el número de etapas, el plato de alimentación y tipo de condensador. Hagamos los ingresos, de acuerdo a los resultados del Short Cut Column, como podemos ver en la figura 6.

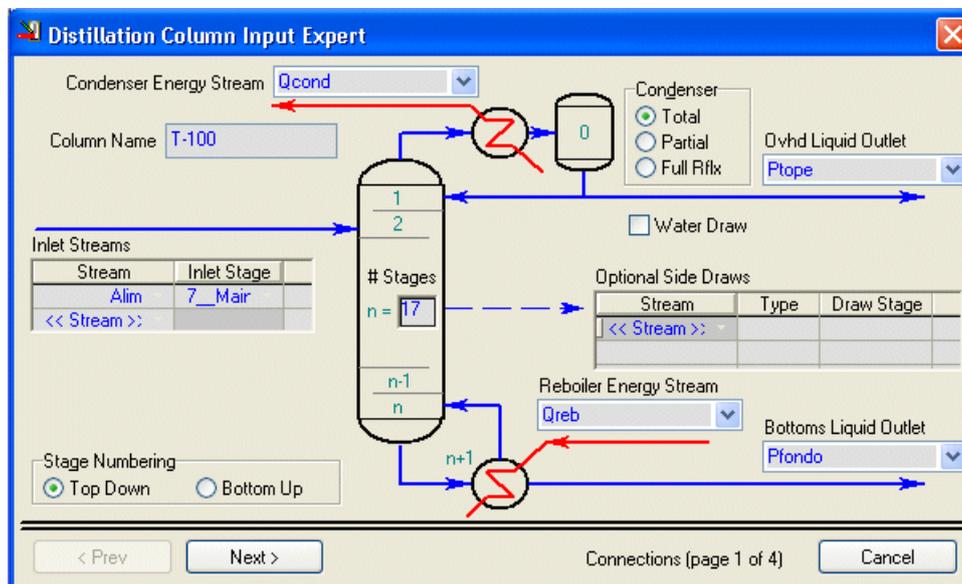


Figura 6. Página 1 del sistema experto

Podemos ver que las etapas se pueden numerar tanto en forma ascendente como descendente. Son etapas teóricas y no incluyen a los equipos de intercambio térmico. Si deseamos especificar etapas reales, podemos luego cambiar la eficiencia de alguna o de todas ellas. La opción Full Rflx corresponde a un condensador parcial donde el destilado está sólo en fase vapor, en tanto que en el Partial el producto de tope se encuentra en las dos fases.

Si existen varias alimentaciones y/o salidas laterales debemos indicarlo en esta página. En todos los casos debemos especificar el plato donde ingresa o egresa la corriente y, para las laterales, si se extrae de la fase líquida o vapor. Con el botón Next, pasamos a la página siguiente donde ingresaremos los valores de las presiones de salida de los productos de tope y fondo y la pérdida de carga del condensador.

Aquí cabría preguntarnos porqué no debemos introducir, también, la pérdida de carga en el reboiler. Como veremos la forma más sencilla de definir el problema es considerar que en el equipo de intercambio del fondo, y también en el tope, bajo determinadas circunstancias, esa pérdida de carga es nula.

En el reboiler, en todos los casos, la alimentación al mismo es un líquido y puede arbitrarse un mecanismo, bomba o columna líquida, que compense la pérdida de carga del equipo. De este modo, el producto de fondo, aún en el caso de una marmita, abandonará la columna a la presión del fondo de la misma.

Queda claro entonces, que podemos considerar una pérdida de carga nula en el conjunto mecanismo de impulsión-intercambiador.

En el caso del condensador no se puede recurrir a este arbitrio ya que la corriente que ingresa es vapor.

Si el condensador fuese total podríamos considerar el esquema de la figura 7a

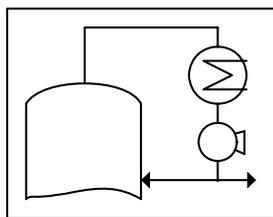


Figura 7a. Cond. total

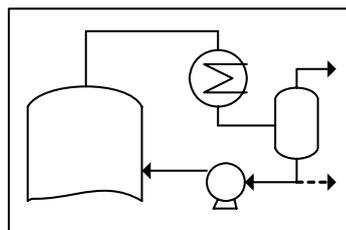


Figura 7b. Cond. parcial

y, en tal caso, admitir que la pérdida de carga es nula, al compensarse con la impulsión en la bomba. En cambio, si el condensador es parcial como el de la figura 7b,

no podremos considerar nula la pérdida de carga del equipo. La bomba será necesaria para impulsar la corriente de reflujo pero siempre el vapor que abandona el condensador lo hará a una presión inferior a la del tope de la columna.

En resumen: sólo consideraremos una pérdida de carga no nula en el condensador cuando éste sea de tipo parcial y siempre será cero en el reboiler. Volvamos a nuestro caso. De acuerdo a los datos del Short Cut, la presión del producto en el tope será 650 kPa con una pérdida de carga nula en el condensador, ya que es total, y una presión para el producto de fondo de 662 kPa.

En la figura 8 podemos ver la página del IE correspondiente al ingreso de los valores de presión.

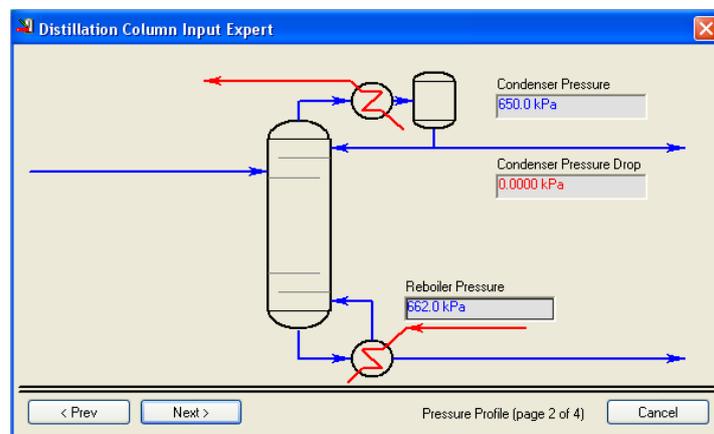


Figura 8. Página 2 del sistema experto

En la página siguiente (figura 9) podemos ingresar las estimaciones de temperaturas para la etapa del tope y de los equipos de intercambio térmico.

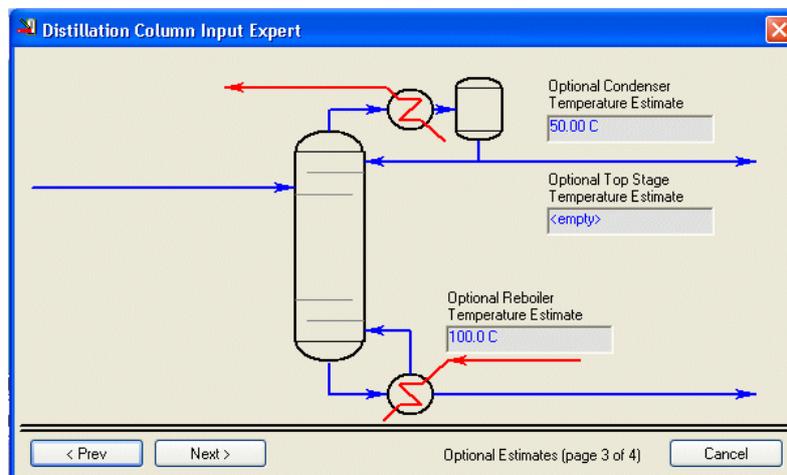


Figura 9. Página 3 del sistema experto

Obviamente, esta página puede saltarse, ya que normalmente el cálculo no requiere de estos valores, aunque una buena estimación de los mismos facilita la convergencia. Introduzcamos como valores estimados 50 °C en el condensador y 100 °C en el reboiler, de acuerdo a los datos obtenidos en el Short Cut.

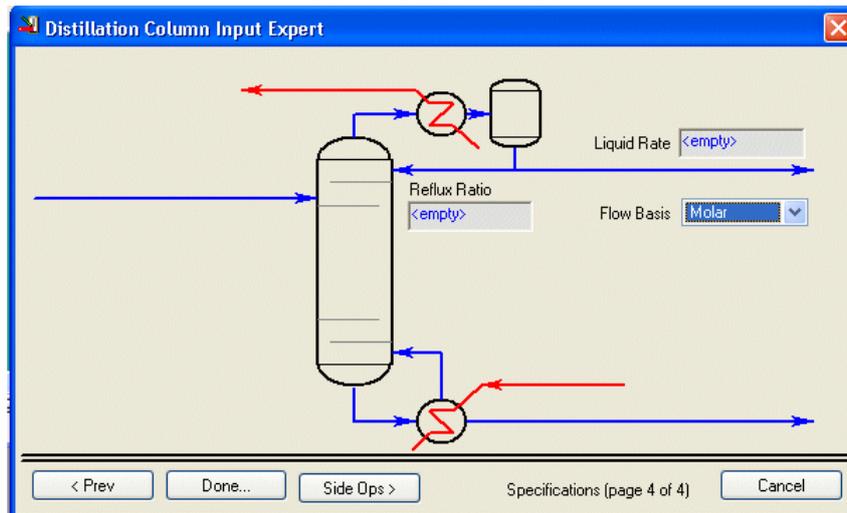


Figura 10. Página 4 del sistema experto

Finalmente en la última página (figura 10) deberíamos ingresar, para agotar los grados de libertad, dos especificaciones: el flujo del destilado y la relación de reflujo. Hemos visto que los grados de libertad son tres, pero el simulador ya agotó uno al indicarle que el condensador es total. ($V=0$). Obviaremos este ingreso porque los datos que disponemos son los factores de recuperación de los compuestos claves, información con la que, según indica la experiencia, se logra una mejor convergencia.

Si hubiésemos tenido sistemas laterales (side strippers o despojadoras, pump arounds, etc.) podríamos ingresar la información correspondiente a los mismos mediante el botón Side Ops.

Ya que no vamos a incorporar más datos, oprimamos el botón Done para abandonar el experto. En este momento, si no hubiésemos ajustado correctamente la presión de la alimentación, podría aparecer el aviso de que la misma está ingresando a una presión diferente a la del plato. Si se produjese,

como, de todos modos, el simulador va a resolver el cálculo, aceptaríamos la advertencia y continuaríamos, para ajustar el valor a posteriori.

Al hacerlo, el simulador nos ubica en la pantalla de la figura 11. En la opción Connections de la solapa Design podemos modificar toda la información ingresada en las dos primeras páginas del IE, con lo cual es posible no usarlo, además de estar disponible el ingreso de otra información como el tipo de reboiler o su pérdida de carga, si fuera necesario.

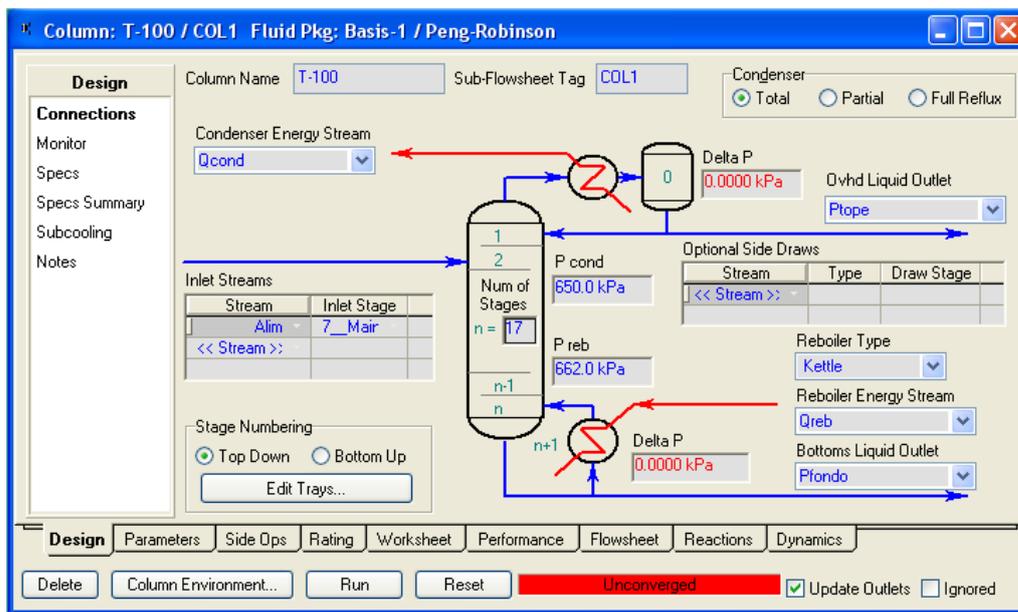


Figura 11. Opción Connections de la solapa Design

Tengamos en cuenta que, al abandonar el IE, el simulador supone que se han agotado los grados de libertad. Sin embargo, aunque estén activas las especificaciones del flujo de destilado y la relación de reflujo, incorporadas por defecto por el IE, nosotros no les hemos dado valor y, por consiguiente, el cálculo no se puede realizar y el simulador lo indica con un mensaje de no convergencia.

Para lograr introducir las especificaciones sobre las recuperaciones de los productos claves, debemos ubicarnos en la opción Monitor o Specs de la solapa Design. Usaremos la primera de las alternativas, aunque es indistinto hacerlo con cualquiera de las dos. Al hacerlo, ingresamos a la pantalla de la figura 12.

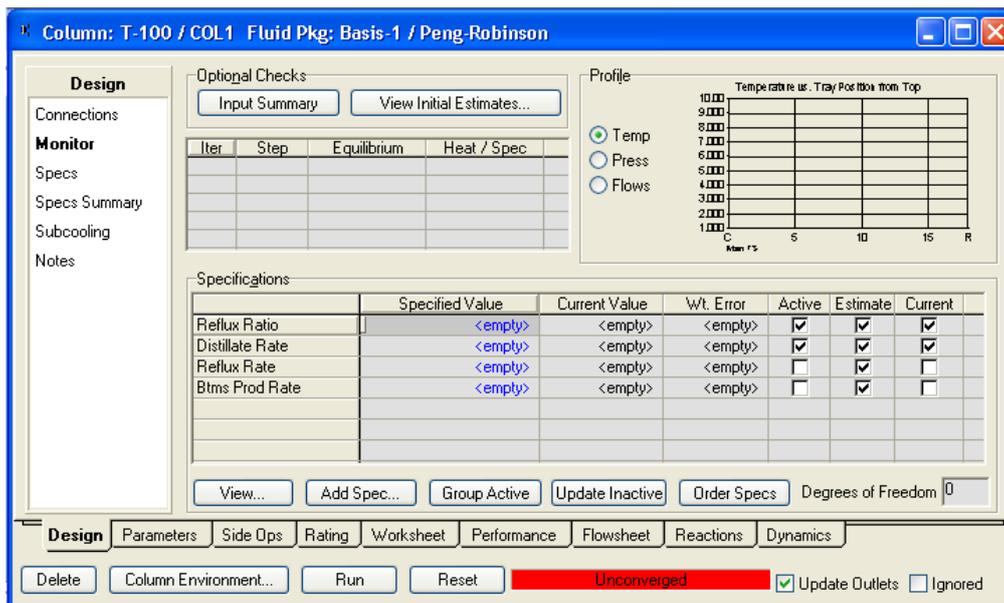


Figura 12. Opción Monitor de la solapa Design

Allí figuran dos especificaciones activas y dos variables estimadas, sin valor ninguna de ellas. Empecemos por desactivar las especificaciones. Luego, agreguemos, oprimiendo el botón Add Spec, la correspondiente al clave liviano en el tope.

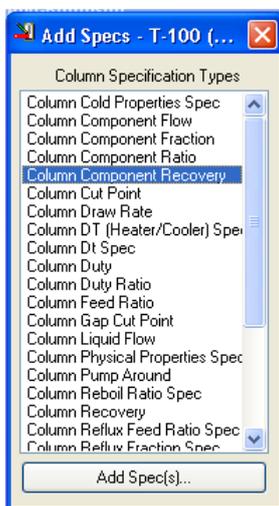


Figura 13a. Agregado de la especificación

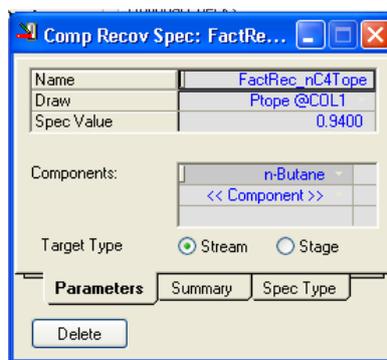


Figura 13b. Definición de la especificación

De la lista de tipos de especificaciones que aparece, elijamos Column Component Recovery (Figura 13a) y oprimamos el botón Add Spec(s), tras lo cual aparece la pantalla de la figura 13b. Allí conviene cambiar el nombre por defecto de la

especificación, para luego elegir si la misma corresponde al destilado (Ptope@COL1) o al fondo ((Pfondo@COL1), ingresar el factor de recuperación y seleccionar el componente de la lista desplegable correspondiente.

Al cerrar la ventana vemos que la especificación se activa automáticamente. Repetamos el procedimiento para agregar el factor de recuperación del i-C5.

Una vez que hayamos hecho esto, la columna quedará sin grados de libertad. Si el proceso de cálculo no comenzara automáticamente, debemos forzarlo oprimiendo el botón Run.

Podemos ver que en pocas iteraciones se alcanza la convergencia de la columna.

En algunas circunstancias, ante la presencia de algún error, puede suceder que el simulador detenga el cálculo. Si nos fijamos en la barra de herramientas veremos que el botón  está activo. Una vez realizados los cambios que, a nuestro criterio, subsanan el error, debemos oprimir el botón  para reanudar el proceso de cálculo.

La opción Monitor de la solapa Design también nos permite conocer el paso utilizado en cada iteración y los valores de los errores en el cálculo del equilibrio líquido-vapor, los balances de energía y los valores de las variables especificadas.

Si bien en distintas solapas podemos elegir representar los perfiles de presión, temperatura, caudales internos, etc. en la columna, donde existen mayores alternativas es en la solapa Performance. Allí, en la opción Column Profiles, podemos seleccionar la variable a representar en función de la posición en la columna, y volcarla en forma de tabla o gráfico.

En la misma solapa, en la opción Summary, se muestran las recuperaciones de todos los compuestos en el destilado y en el producto de fondo.

Los equipos auxiliares

Hasta aquí hemos realizado, exclusivamente, los cálculos referidos a la columna propiamente dicha, sin que hayamos hecho ninguna referencia a los equipos de intercambio, salvo el haber considerado un enfriador genérico como condensador y un calentador como reboiler.

Si estamos interesados en conocer el área del condensador y del reboiler, este es el momento de abordar su determinación; de lo contrario, el cálculo de la columna estaría terminado.

Obviamente, los valores de las áreas deben estar totalmente vinculados a los de la columna, de modo que reflejen cualquier modificación que se registre en ella.

Veremos que parte de la información necesaria para el cálculo del intercambio está disponible, otra parte existe pero no lo está y un tercer grupo de datos directamente no se dispone. Tendremos que trazarnos una estrategia para subsanar todos estos déficits.

Así, por ejemplo, a las temperaturas de los productos se puede acceder sin problemas.

En cambio, la corriente que ingresa al condensador, el vapor que abandona el plato 1, no se encuentra accesible en forma directa, pero puede conocerse. Otro tanto ocurre con el líquido que deja el plato 17 para entrar al reboiler.

Y por último, no existe información sobre las temperaturas de los medios de calefacción y enfriamiento porque, sencillamente, no los hemos definido.

Para resolver ésto, adoptaremos como medio refrigerante el agua, típicamente disponible a unos 35°C y con un salto permitido de 10°C. Admitiremos que, en la red, se encuentra a una presión de 145 kPa.

En el caso del fondo, de acuerdo al cálculo de la columna, la temperatura del producto es cercana a 100 °C. Usaremos, como servicio de calefacción, vapor saturado seco de 4 bar (143.6 °C) que cede su calor latente.

En cuanto a la información existente pero no disponible, el modo de poder acceder a ella depende de la forma en que se expliciten los equipos de intercambio de la columna.

En ambos equipos vamos a admitir que el fluido caliente circula por los tubos.

Incorporando el condensador

Como habíamos dicho, simularemos el sector de condensación como un conjunto externo, vinculado a la columna. Previamente, debemos crear un nuevo caso termodinámico. También se podría usar el existente, incorporando el componente agua ya que el paquete en uso, Peng-Robinson, lo permite. Sin embargo, para considerar el agua como medio refrigerante, seleccionar el paquete ASME Steam es más específico.

Para ello, abramos el ambiente termodinámico, ya sea desde la barra de menú (Simulation| Enter Basis ...) o desde el ícono  en la barra de tareas. Oprimamos el botón Add, en la solapa Components. Al hacerlo se activará una nueva lista de componentes (Components List-2), a la cual agregaremos, como único componente, el agua. Luego, desde la solapa Fluids Pkgs seleccionemos ASME Steam como paquete. Si lo deseamos podemos cambiarle el nombre que le dio el simulador, para facilitar su identificación.

Ahora sí, comencemos agregando, al Diagrama de Flujo, un intercambiador de calor al que llamaremos CondTot. En este equipo, por carcaza circulará el agua, lo que nos obligará a generar las corrientes pertinentes, y por los tubos, el vapor que sale del plato 1, objeto que no se dispone.

Esto último lo podemos resolver, generando una copia externalizada (clon) de esa corriente, a la que, por ser externa, se pueda acceder desde fuera de la columna.

Ello se hace a partir de la opción Internal Streams de la solapa Flowsheet de la columna. Al oprimir el botón Add, el simulador habilita la posibilidad de generar la corriente requerida. Démosle, en la columna Stream, un nombre arbitrario, por ejemplo, Vap_1, tras lo cual, UniSim, le agrega "@COL1". Ahora debemos indicar cual es la corriente. De la lista desplegable de Stage, elijamos 1_Main TS; la fase Vapour en Type y la alternativa Net en Net/Total. En esta última podemos elegir el total de las corrientes que, en la fase indicada, salen del plato (Total) o solo la que va al plato siguiente (Net). En este caso es indistinto elegir Net o Total, ya que no existen salidas laterales.

En este momento, en el equipo resta, todavía, un grado de libertad. Dado que admitimos que es un condensador total, la fracción vaporizada de la corriente de salida de los tubos es cero. Al dar este dato, el condensador se calcula.

El cálculo del área lo podemos realizar, al igual que como hicimos en el capítulo de procesos de transferencia de calor, agregando un objeto Spreadsheet, dando un valor al coeficiente global de transferencia y calculando el área importando el valor de UA determinado en el equipo.

Vemos que, la incorporación de un equipo de intercambio, en reemplazo del enfriador genérico, nos permite conocer el valor del área del equipo así como el consumo de servicio de refrigeración. Otro tanto ocurrirá cuando hagamos lo propio con el reboiler.

Recordemos que, si hay cambio de fase, el método de cálculo del equipo debe ser Exchanger Design (Weighted)

Incorporando el reboiler

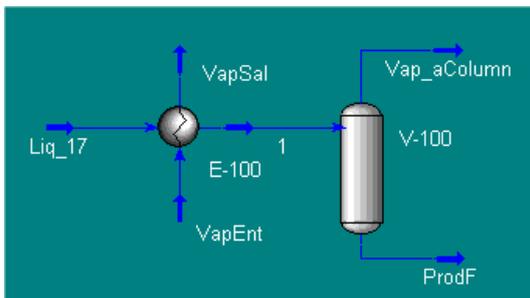


Figura 15. Simulando el reboiler

Para simular el reboiler, se debe considerar un esquema que incluye un intercambiador y un separador de fases, como vemos en la figura 15. Este diagrama sería similar, si en lugar de analizar un condensador total hubiésemos tenido uno parcial.

Por lo tanto, para comenzar, habremos de generar, como ya vimos, un clon de la corriente líquida que sale del último plato, en nuestro caso, Liq_17.

Respetando las suposiciones iniciales, al igual que en el caso del condensador, vamos a admitir que las pérdidas de carga en ambos lados del reboiler son nulas.

Con esa información el sistema tiene un grado de libertad, que podemos quitarlo, haciendo, por ejemplo, que la temperatura de la corriente que ingresa al separador sea la del producto de fondo de la columna. Para ello, ingresemos a dicha corriente, la 1 en la figura 15, y oprimamos el botón Define from Other Stream, que se encuentra en la base de la ventana.

Luego ingresamos a otra, desde la cual podemos seleccionar una corriente, por ejemplo, Pfondo, y distintas condiciones como se muestra en la figura 16, en este caso, la temperatura.

Al oprimir el botón OK, el sistema se resuelve y, por supuesto, ambas corrientes líquidas de salida, la del separador y la del reboiler, coinciden. Esto ocurrirá si, previamente, hemos

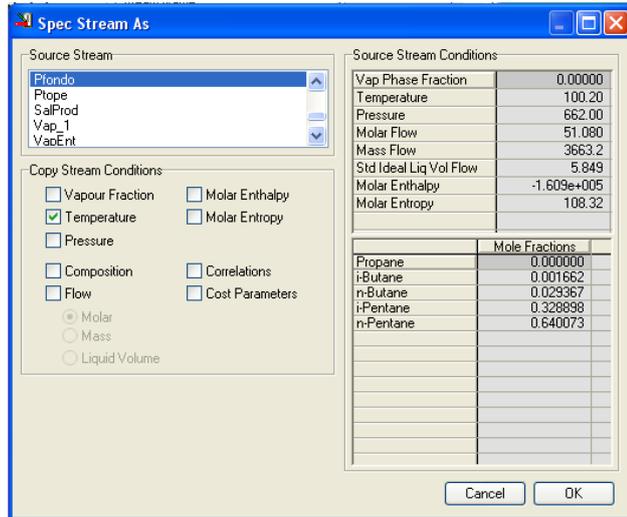


Figura 16. Selección de las condiciones a copiar

desactivado la especificación del parámetro UA, que, como recordaremos, está por defecto en los equipos de intercambio. Si no lo hacemos, ha de existir una sobreespecificación y no procederá el cálculo.

Los equipos genéricos pueden reemplazarse mediante otra vía. En lugar de hacerlo en forma externa, podemos modificar la estructura del equipo, ingresando al denominado “ambiente de la columna”, que no es otra cosa que el flowsheet estructurado para la misma. De esta forma, se conservará la organización compacta en el PFD principal; pero, como veremos a continuación, a costa de una serie de inconvenientes.

Por lo pronto, debemos eliminar los equipos genéricos para proceder a su reemplazo. Al hacerlo, el simulador elimina algunas especificaciones introducidas y, obviamente, se pierden los resultados obtenidos. Ello va a obligar a que adoptemos una estrategia de modificación que afecte, lo menos posible, la estructura compacta a que hacíamos referencia. Debemos tener en cuenta que, en el ambiente de la columna, no se encuentran disponibles objetos como Adjust o Spreadsheet que, de necesitarse, deben ponerse fuera del ámbito.

Otro inconveniente aparece en el manejo de los casos termodinámicos. En el ámbito de la columna, a diferencia de lo que sucede al agregar los equipos en forma externa, solo se admite un único caso termodinámico. Necesariamente,

deberemos agregar el compuesto que disponemos como calefaccionante o refrigerante en el caso correspondiente.

En esta circunstancia, esto no representa un problema, ya que, el paquete Peng-Robinson, que usamos para simular la columna, maneja en forma adecuada el agua que nos planteamos utilizar como servicio auxiliar, tanto en el condensador como en el reboiler.

Pero, cuando esto no suceda, estaremos frente a un problema de difícil solución.

Por todo ello, no vamos a utilizar esta segunda alternativa para explicitar los equipos de intercambio.

Separador de compuestos (Component Splitter)

Volviendo a los modos simples de modelar equipos de separación, en el simulador disponemos de un objeto que nos permite trabajar con las relaciones básicas de cualquiera de ellos, el separador de compuestos (Component Splitter).

Básicamente, al separador podemos ingresar una o más corrientes de alimentación, la que se separará en varias de salida, una o más por tope y una única por fondo, como podemos ver en la figura 17.

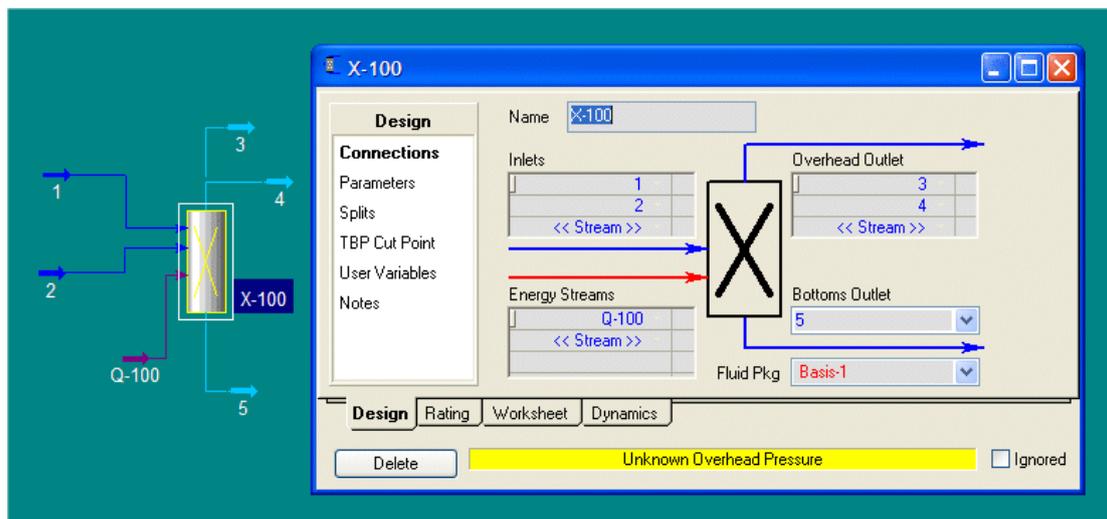


Figura 17. Component Splitter

Podemos ver que, además, se requiere una corriente de energía, para poder cumplimentar el balance de calor en el equipo.

La solapa fundamental es Design, que es la que se encuentra seleccionada en la figura. Las opciones principales son las tres primeras: Connections, Parameters y Splits.

En el caso de la figura, la primera ya la hemos usado. La última nos permite ingresar la distribución de los compuestos alimentados en las distintas corrientes, distribución que es absolutamente arbitraria, de acuerdo a los factores de reparto fijados por nosotros en las de tope, cuya suma, obviamente, no puede superar la unidad. El simulador, con la de fondo, completa la suma a uno.

Por último, la opción Parameters nos permite fijar las condiciones operativas de las corrientes que abandonan el equipo. En la figura 18 se aprecian las principales características.

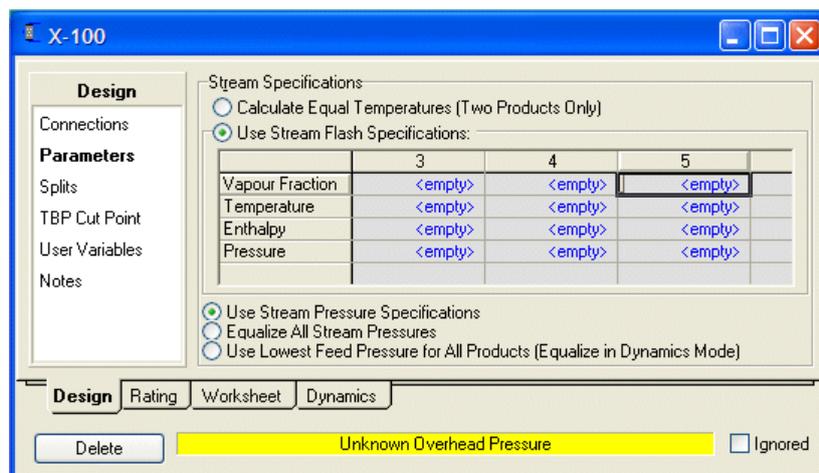


Figura 18. Opción Parameters

Aparecen dos grupos de alternativas: a) en la parte superior se puede establecer que el simulador, en base a la composición que resulta de los factores de reparto introducidos, a1) calcule, usando los valores que le asignemos a dos de tres variables (FV, T, P), la variable restante, además de la entalpía molar o bien, a2) cuando existen sólo dos corrientes de salida, que, en el cálculo, iguale la temperatura de ambas, en base a la primera ingresada; b) en la parte inferior podemos establecer que nosotros fijaremos la presión en

cada corriente, o bien, que todas tendrán la misma, la primera que introduzcamos o el menor valor de todas.

Una vez que ingresamos la información requerida, el separador de compuestos realiza un balance de materia y entalpía, usando la corriente de energía para cerrar este último.

Es evidente la flexibilidad con la que se ha dotado a este objeto, pudiendo utilizárselo como una primera aproximación en el tratamiento de sistemas complejos, que incluyen equipos de separación, reservando el tratamiento riguroso para cuando se disponga de un buen ajuste en las condiciones operativas. Obviamente, el separador de compuestos será el único modo de simular unidades de separación de las que carecemos de módulos que las representen, como sería el caso de separadores por membrana.

Bibliografía

- "Experienced-Based Rules of Chemical Engineering", Cheresources.com, <<http://www.cheresources.com/exprules.shtml>>.
- Henley, E.J, Seader, J.D., "Operaciones de separación por etapas de equilibrio en ingeniería química", Reverté Ediciones, 2000.
- King, C.J., "Separation Processes", McGraw-Hill, 1977.
- Russell, R.A., "A flexible and reliable method solves single-tower and crude-distillation-column problems", Chemical Engineering, October 17, 1983.
- UniSim Design Operations Guide.
- Walas, S.M., "Chemical Process Equipment", Butterworth-Heinemann, 1990.

Propuesta de trabajo

Una corriente, cuya composición, temperatura y presión se muestran en la tabla, entra a un tren de columnas de destilación. En una primera columna se ha de separar el tolueno del resto de los componentes. La columna operará a un moderado vacío, para evitar la polimerización del estireno. El producto de tope debe contener, al menos, 95% del tolueno que ingresa y en el producto de fondo se debe recuperar el 99% del etilbenceno.

Temperatura (°C)	Presión (kPa)	Flujos molares (kgmol/h)		
		Etilbenceno	Estireno	Tolueno
50	100	49.3	29.7	2.38

- a) Realice el cálculo preliminar y determine el número de platos teóricos y la posición del plato de alimentación.
- b) Con la información hallada en el punto anterior calcule la columna en forma rigurosa y los equipos auxiliares.

CAPÍTULO 11

SIMULACIÓN DE REACTORES

Algunas cuestiones generales

El sector de reacción es, en una planta de la industria de procesos, el corazón de la misma, el punto donde se verifica la transformación que da sentido económico al proceso. Sin embargo, rara vez es el sector determinante en lo que a inversión se refiere: otros sectores, como la compresión de gases, algunos circuitos de refrigeración o unidades de separación, por ejemplo, suelen ser mucho más significativos al considerar costos de equipamiento.

En los simuladores ocurre algo parecido. Los modelos disponibles para representar reactores son, en la mayor parte de los simuladores, estructuras sencillas, que van desde un simple reactor de conversión hasta, como caso más complejo, reactores ideales con cinética definida.

En el simulador UniSim podemos trabajar con los siguientes modelos de reactores:

- Reactor de Conversión: aquí debemos definir, para cada una de las reacciones que se producen dentro del equipo, la fracción convertida del compuesto que tomamos como base.
- Reactor de Equilibrio: una o más reacciones reversibles alcanzan su conversión de equilibrio. En este caso debemos ingresar la relación que existe entre la o las constantes de equilibrio con la temperatura.
- Reactor de Gibbs: al igual que en el caso anterior, se admite que en el reactor se alcanza el equilibrio químico en todas las reacciones que allí ocurren. En este equipo, esos equilibrios se calculan a partir de los valores de la energía libre de Gibbs de cada uno de los compuestos intervinientes, por lo cual no se requiere que ingresemos información específica respecto del equilibrio.

- Reactor de Rendimiento: Permite el modelado de reactores usando tablas de datos, cuando no se dispone de un modelo para reactores complejos o cuando esos modelos requieren un esfuerzo de cálculo demasiado importante.
- Reactor Tanque Agitado Continuo: un reactor ideal, donde se admite el mezclado perfecto e instantáneo de reactivos y productos. Aquí deberemos ingresar las expresiones de las velocidades de reacción (factores preexponenciales, energías de activación, funcionalidad con las concentraciones, etc.).
- Reactor Tubular: al igual que en el caso anterior, se trata de un reactor ideal, con flujo pistón. También se requiere el ingreso de las expresiones cinéticas. Este tipo, con el anterior, constituyen lo que llamaremos reactores cinéticos.

En el presente capítulo vamos a considerar solamente algunos tipos de estos reactores y, como siempre, lo haremos en base a un ejemplo.

Ejemplo de aplicación

En la figura 1 se muestra el proceso para la producción de estireno. Una mezcla de etilbenceno y vapor reacciona sobre un catalizador de óxidos metálicos en lecho fijo para dar estireno y otros subproductos, corriente que luego se ingresa al sector de separación donde, básicamente, el estireno purificado abandona la planta y el etilbenceno no reaccionado y el condensado se reciclan.

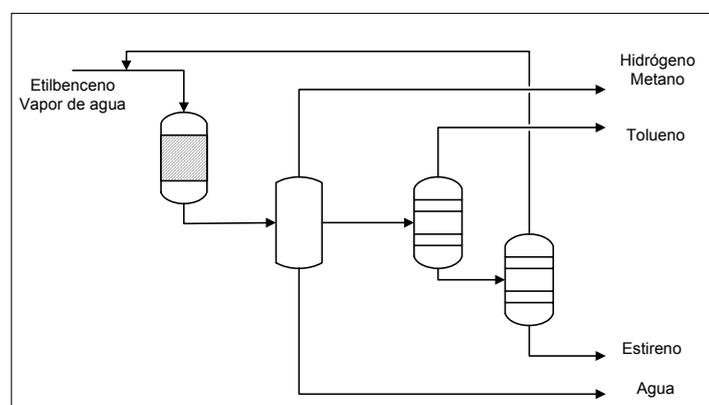
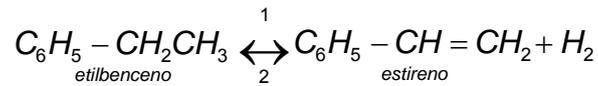


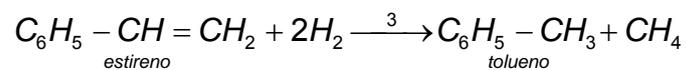
Figura 1. Producción de estireno

El estireno se produce por deshidrogenación, de acuerdo a:



La reacción es endotérmica y está limitada por el equilibrio. Obviamente, conviene trabajar a altas temperaturas (800 - 950 °K) y a bajas presiones (40 - 140 kPa), de modo de favorecer la producción de estireno.

En el proceso se verifican algunas reacciones secundarias. Por simplicidad sólo consideraremos la formación de tolueno, de acuerdo a:



El ingreso de vapor favorece al desplazamiento hacia la derecha de la reacción primaria, además de calentar la mezcla reaccionante. Las relaciones molares entre vapor y etilbenceno típicas están entre 6 y 12.

En este capítulo, vamos a restringir nuestra atención al sector de reacción solamente, simulando un equipo donde se produzca 30 kgmol/h de estireno para lo cual supondremos disponibles una mezcla en cantidad necesaria compuesta de 97% de etilbenceno y 3% de tolueno.

Las condiciones operativas en el reactor son:

- 1) Condiciones a la entrada del equipo
 - a. Relación molar Vapor / Hidrocarburos igual a 10.
 - b. Presión y temperatura de la mezcla reaccionante 50 kPa y 600 °C.
- 2) La operación es adiabática.
- 3) La pérdida de carga estimada en el reactor es del orden de 10 kPa.

Comencemos a estructurar nuestra simulación, definiendo el caso termodinámico. Elegiremos la ecuación de estado Peng-Robinson y agregaremos los compuestos, no olvidándonos de incluir el agua.

Si bien existen otros modos de incorporar la información sobre las reacciones, el más eficiente es hacerlo dentro del caso termodinámico, con lo cual sería éste el momento. Sin embargo, no lo haremos ya que, por razones pedagógicas, vamos a simular el reactor por dos vías diferentes, una, usando reactores no cinéticos y otra, usando un tubular.

Una parte de la simulación es común a ambas formas y es lo que primero vamos a construir, para lo cual debemos ir al ambiente de simulación.

Allí generaremos dos corrientes de materia, una que contenga la mezcla de etilbenceno y tolueno (AlimHC) y otra sólo vapor (Vapor). Ambas con iguales valores de presión y temperatura.

El flujo molar de la corriente de hidrocarburos deberá ser el necesario para producir los 30 kgmol/h deseados de estireno. En su momento, habrá que poner un objeto Adjust para determinar ese valor. Por ahora podemos colocar una primera estimación, considerando que como mínimo se requieren 30 kgmol/h de etilbenceno, esto es, unos 31 kgmol/h de mezcla. La conversión estará limitada por el equilibrio, por lo cual, nunca se podrá alcanzar el 100% de la transformación. Tomaremos un caudal molar de 40 kgmol/h de mezcla como estimación inicial en el proceso de ajuste.

Debemos tener en cuenta que la relación molar entre el vapor y la mezcla de hidrocarburos se tiene que mantener en 10:1. Ya que el caudal de los últimos será determinado por el simulador, debemos lograr que también lo haga con el de vapor, manteniendo la relación establecida.

Para ello, debemos usar la operación lógica Set , vinculando ambas corrientes de acuerdo a la relación genérica $Y = (\text{Multiplier}) * X + (\text{Offset})$.

Al agregar un SET al PFD, desde la solapa Connections, como podemos ver en la figura 2a, elegimos a la corriente Vapor (Target Variable) como la variable para la cual queremos que su caudal molar sea 10 veces el de la corriente AlimHC (Source Variable). El valor 10 para el multiplicador, lo introducimos en la solapa Parameters, como vemos en la figura 2b.

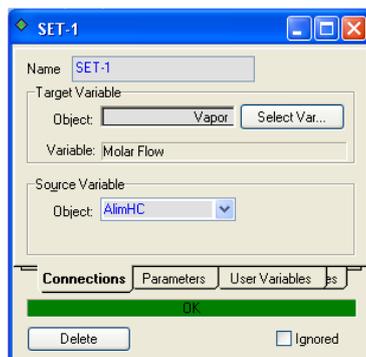


Figura 2a. Conexiones del Set

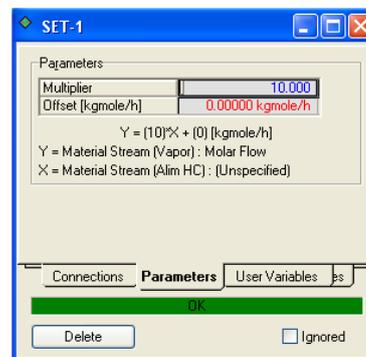


Figura 2b. Parámetros del Set

Notemos que, al igual que en la operación Adjust, al definir un Set disponemos de una serie de variables, de acuerdo al objeto seleccionado, para estructurar la relación. En este caso, es obvio que debemos elegir el caudal molar total pero en otros podría ser necesario elegir, para el mismo objeto, una variable distinta, por ejemplo, el caudal molar de uno de los componentes.

Posteriormente, hagamos que ambas corrientes ingresen a un sumador cuya salida, AlimReact, será la entrada al reactor.

Dado que, como ya dijimos, vamos a simular el reactor por dos vías diferentes, y este sector del PFD es común a ambas, grabemos en este momento el caso con el nombre SectorAlim.usc.

Continuemos la simulación, abordando ahora el tratamiento con reactores no cinéticos.

Tipos de reacciones disponibles

El sistema de reacciones que estamos considerando está compuesto por una reacción reversible y una irreversible. UniSim no admite tratar en un mismo reactor no cinético estos dos tipos en forma conjunta. Para la reacción reversible podremos usar un reactor de equilibrio y para la segunda, uno de conversión, puestos en serie.

La realidad es que ambas reacciones ocurren simultáneamente, por lo cual el orden en que se los introduzca es importante. El efecto de la segunda reacción es secuestrar estireno, bajando el rendimiento, por lo cual es obvio que el reactor de conversión debe ir después del de equilibrio, además de que en la reacción secundaria se usa el H_2 producido en la principal.

Antes de continuar con los reactores, debemos introducir las reacciones que se verifican en ellos. Como ya dijimos, esto lo haremos dentro del caso termodinámico.

Abandonemos el ambiente de simulación para volver al termodinámico, oprimiendo el ícono .

Una vez hecho esto, elijamos la solapa Reactions, que tendrá el aspecto de la figura 3.

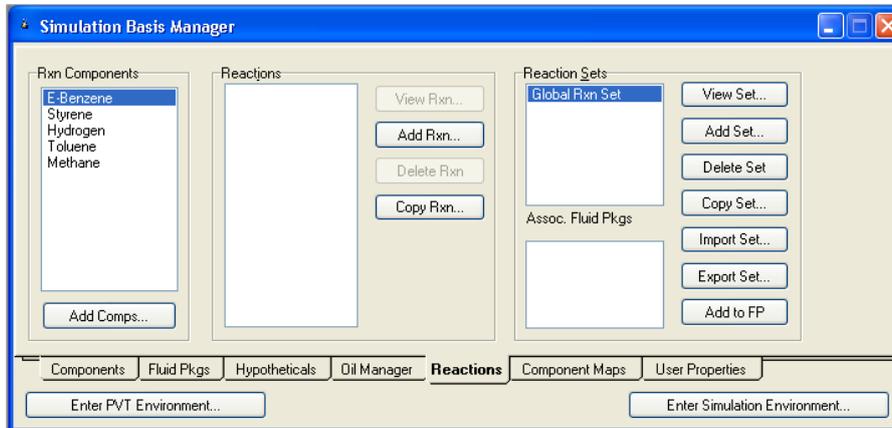


Figura 3. Solapa Reactions

Allí podemos ver que existen distintos grupos:

- Rxn Components, donde están todos los compuestos disponibles. Si nos hubiésemos olvidado de ingresar algún componente, lo podríamos hacer oprimiendo el botón Add Comps.
- Reactions, muestra la lista de reacciones del caso y un conjunto de botones que permiten ver, agregar, borrar o copiar las reacciones.
- Reaction Sets, los distintos botones asociados permiten definir conjuntos de reacciones para cada tipo de reactor y asociarles un paquete termodinámico.

UniSim permite trabajar con los siguientes tipos de reacción:

- Reacción de conversión (Conversion)
- Reacción de equilibrio (Equilibrium)
- Reacción cinética (Kinetic)
- Reacción catalítica heterogénea (Heterogeneous Catalytic)
- Reacción simple (Simple Rate).

En la primera, los moles de cualquier compuesto (N_x) a la salida del reactor se calculan de acuerdo a:

$$N_x = N_x^0 + \frac{c_x}{|c_b|} N_b^0 X_b$$

donde:

c : coeficiente estequiométrico (negativo para reactivos)

b : componente base

0: condición inicial (entrada del reactor)

X_b : conversión del componente base

En la reacción de equilibrio, la conversión se calcula considerando que la constante de equilibrio puede expresarse como:

$$K = \prod_{j=1}^{Nc} \left[([base]_{e_j})^{c_j} \right]$$

donde:

K : constante de equilibrio, que tiene una dependencia con la temperatura que veremos posteriormente.

$[base]_{e_j}$: base de cálculo (concentración, fugacidad, presión parcial, etc.) del componente j en el equilibrio.

c_j : coeficiente estequiométrico del compuesto j

Nc : número de componentes.

Para las reacciones cinéticas se cumplen leyes de tipo Arrhenius para la expresión de la velocidad de reacción:

$$R_v = k_d f_d(base) - k_r f_r(base)$$

siendo $f_x(base)$ una función de la base de cálculo (concentración, presión parcial, etc.) de los componentes de la mezcla reaccionante y k_x una constante que depende de la temperatura, según la ley de Arrhenius, $k_x = k_{0x} \exp(-E_x/RT)$.

El primer término del miembro de la derecha en la expresión de R_v corresponde a la reacción directa Reactivos \rightarrow Productos y es el único obligatorio, en tanto que el segundo, Productos \rightarrow Reactivos, no existe si la reacción es irreversible.

Las expresiones tipo Arrhenius también aparecen en las reacciones catalíticas heterogéneas y las simples.

Para la primera de ellas, UniSim adopta un modelo genérico que se plantea como un cociente de dos expresiones:

$$R_V = \frac{f_d(\text{base}) - f_r(\text{base})}{\left(1 + \sum_{i=1}^M \left[\left\{ k_{0i}^{ad} \exp\left(\frac{E_i^{ad}}{RT} \right) \right\} \prod_{j=1}^M C_j^{\alpha_{ij}} \right] \right)^n}$$

donde el numerador contiene los términos cinéticos de la función y el denominador los correspondientes a la adsorción de las especies químicas presentes (reactivos, productos e inertes).

Una vez seleccionado el tipo catalítico, UniSim habilita, en sendas solapas de la ventana específica, el ingreso de la totalidad de la información para definir tanto la funcionalidad del numerador como la del denominador.

Para reacciones homogéneas reversibles, cuando no se dispone la expresión de k_r se puede utilizar Simple Rate, donde k_r se expresa en función de la constante de equilibrio

$$R_V = k_d f_d - k_r f_r = k_d \left[f_d - \frac{f_r}{K} \right]$$

De acuerdo a lo dicho previamente, comencemos a introducir las reacciones que nos permitirán simular el caso que estamos analizando.

Reacciones de equilibrio y de conversión

Ingresemos primero la reacción de equilibrio. Para ello, usando el botón Add Rxn, abramos una ventana como la de la figura 4a, en la que debemos elegir el tipo de reacción, Equilibrium, en este caso, y oprimamos luego el botón Add Reaction.

En el caso de reacciones de equilibrio, UniSim dispone de una biblioteca con la información completa para un conjunto de reacciones. Lo primero que debemos hacer es verificar si nuestra reacción se encuentra dentro de esa biblioteca. Esa constatación la podemos desde la solapa Library. En este caso, se encuentra la reacción, como podemos observar en la figura 4b. En este momento, podríamos cambiar el nombre con el que UniSim reconocerá la reacción en nuestra simulación. En este caso, la denominaremos DeHidrogen.

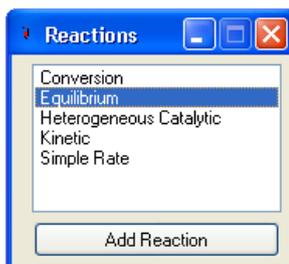


Figura 4a. Seleccionando una reacción

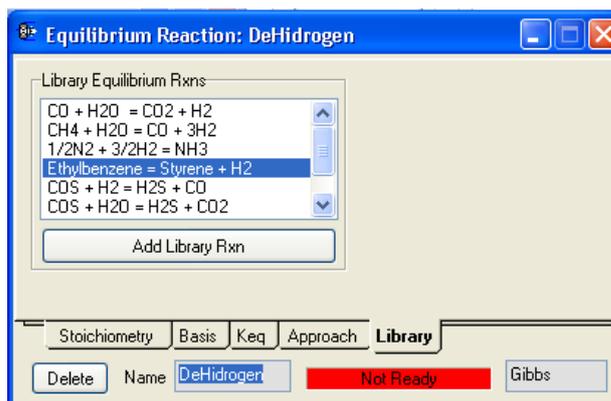


Figura 4b. Eligiendo una reacción de la biblioteca

Al oprimir el botón Add Library Rxn se incorpora la reacción al Reaction Manager y todos los componentes, si no lo están, son agregados automáticamente en el sector de componentes. En este momento, la barra de estado indica que la información está completa. Si nos fijamos en la solapa Keq veremos la tabla con los valores de la constante de equilibrio en función de la temperatura y en la solapa Stoichiometry los coeficientes estequiométricos correspondientes.

Si la reacción no hubiera estado, debemos ingresar la información sobre los coeficientes estequiométricos y la funcionalidad de la constante de equilibrio. La definición de la reacción la hacemos desde la solapa Stoichiometry. Allí, usando la lista desplegable Component, seleccionamos los compuestos y luego, en la columna Stoich Coeff, ingresamos los coeficientes estequiométricos, respetando la convención que los de los reactivos son negativos. En la figura 5 podemos ver la información correspondiente a la reacción reversible. Si se incorporan todos los coeficientes excepto uno, podemos usar el botón Balance para que calcule el restante.

Ahora debemos ingresar la funcionalidad de la constante de

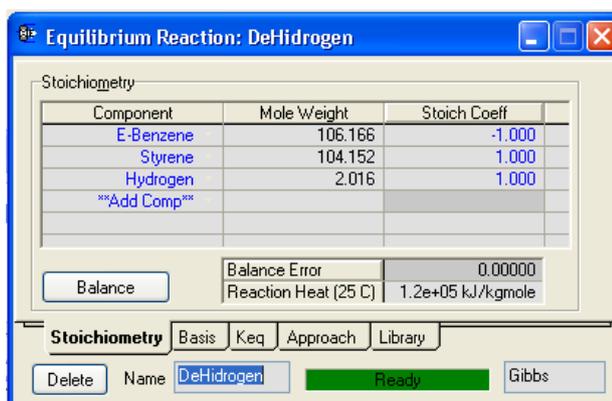


Figura 5. Solapa Stoichiometry

equilibrio. Para el caso que estamos simulando, tiene la forma:

$$K_{eq} = p_{ES} p_H / p_{EB}$$

donde, p_{ES} , p_H , p_{EB} son las presiones parciales de estireno, hidrógeno y etilbenceno. Como podemos ver la constante de equilibrio tiene unidades de presión.

UniSim acepta que la constante de equilibrio sea un valor fijo, se calcule en forma teórica mediante la energía libre de Gibbs, se ingrese en forma de tabla en función de la temperatura o sea una función explícita de la temperatura. En este último caso, la expresión genérica es:

$$\ln K_{eq} = a + b$$

donde :

$$a = A + \frac{B}{T} + C \ln(T) + DT \quad (T \text{ en } ^\circ K)$$

$$b = ET^2 + FT^3 + GT^4 + HT^5$$

$A, B, C, D, E, F, G, H =$ constantes de correlación

Cuando se ingresan los datos en forma de tabla, el simulador los correlaciona respetando la expresión anterior.

La elección del modo en el que se definirá la constante de equilibrio lo debemos ingresar desde la solapa Basis. Allí también definiremos la base cálculo (concentración, presión parcial, actividad, etc.) y la fase en la que se produce el equilibrio. Esta puede ser VapourPhase, LiquidPhase u OverallCombined. Los compuestos sólidos pueden participar en una reacción de equilibrio pero sólo intervienen en la definición de la constante si se elige la última opción.

En nuestro caso, la dependencia de la constante de equilibrio con la temperatura, expresando K_{eq} en bar, viene dada por la siguiente expresión:

$$\ln K_{eq} = \frac{p_{ES} p_H}{P_{ET}} = 15.5408 - 14852.6/T \quad (T \text{ en } ^\circ K)$$

En Basis, elijamos la alternativa de la ecuación para expresar la constante, presiones parciales como base de cálculo, la fase vapor y bar como unidad para expresar las presiones parciales.

Vayamos luego, a la solapa Keq para ingresar los valores de las constantes A y B, en este caso. Las figuras 6a y 6b, muestran los ingresos realizados.

El aspecto de la solapa Keq depende de la selección realizada para expresar Keq.

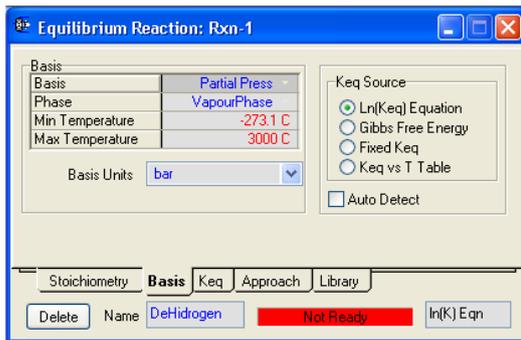


Figura 6a. Selección del ingreso de Keq

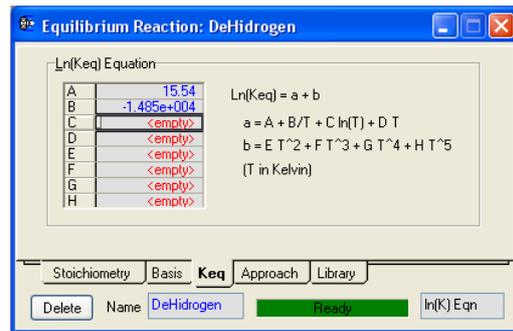


Figura 6b. Ingreso de las constantes A y B

Si bien el mensaje “Ready” nos indica que la información ingresada es suficiente, nos falta incorporar una consideración de tipo técnica. En rigor, la conversión de equilibrio se alcanzaría, excluyendo la reacción secundaria, en un reactor infinitamente grande. Para que ello no ocurra, vamos a considerar que se alcanza una conversión del 80% de la del equilibrio.

UniSim calcula el apartamiento del equilibrio de dos formas:

- como un porcentaje, variable con la temperatura, de la constante de equilibrio que corresponde a la temperatura de reacción (Fractional Approach). De acuerdo a la documentación de UniSim y como se ve en la figura 6b, el Approach modificaría al grado de avance de la reacción. Sin embargo, esto se contradice con los resultados encontrados usando el simulador.
- como si el equilibrio sucediese a una temperatura diferente de la de reacción, mayor o menor en un valor dado, según se trate de una reacción exotérmica o endotérmica (Temperature Approach). Obviamente, este modo no tiene sentido si la constante de equilibrio es un valor fijo.

Si se quisiera, podrían usarse ambos métodos.

En nuestro caso, usaremos Fractional Approach, para lo cual, ingresamos a la solapa Approach, y simplemente, damos el valor 80 al coeficiente C0, como se ve en la figura 7.

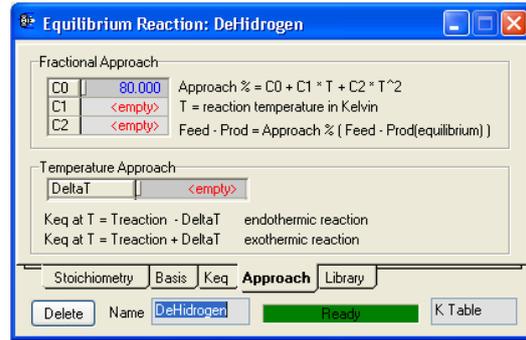


Figura 7. Fractional Approach

En UniSim, los reactores no trabajan con reacciones aisladas sino con conjuntos de ellas, los que pueden estar

constituidos por una única reacción. En estos conjuntos, son compatibles las reacciones de equilibrio (Req) con las cinéticas (Rci), pero ninguna de estas lo son con las de conversión (Rco), que deben estar en grupos exclusivos.

Por defecto, en UniSim está definido el conjunto Global Rxn Set, que contiene todas las reacciones que se han incorporado en el caso, pero divididas en dos subconjuntos, el disponible para su uso (activas) y el compuesto por las restantes, que se encuentran inactivas. Así, si sólo agregamos reacciones Req y Rci, o exclusivamente Rco, todas las reacciones estarán como activas en el conjunto global. Operativamente, UniSim va agregando en la lista activa aquellas reacciones que son compatibles con la primera ingresada.

En nuestro caso, en el conjunto Global Rxn se encuentra activa la reacción que incorporamos, y por lo tanto, el tipo del grupo es de equilibrio. Si bien podríamos usar el conjunto global para trabajar con el reactor de equilibrio, por razones pedagógicas, conviene que definamos uno específico para usarlo allí.

Para crearlo, en la solapa Reactions del Simulation Basis Manager, oprimamos el botón Add Set, tras lo cual se abre una ventana en la que podemos darle el nombre al conjunto y elegir, de la lista desplegable Active List, las reacciones que formarán parte del mismo. En la figura 8, podemos ver que el conjunto, al que hemos denominado Set-Equilibrio, está integrado por la reacción DeHidrogen como único elemento.

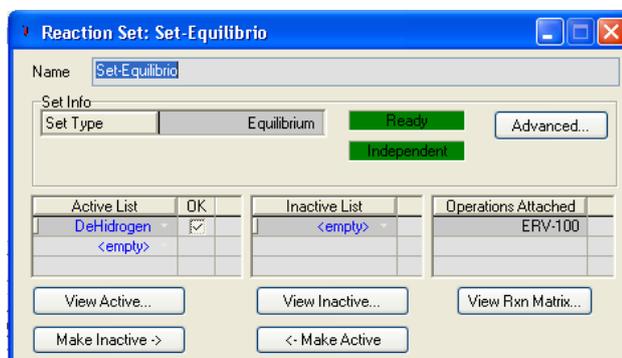


Figura 8. Definiendo el Set

Cerremos la ventana, con lo que volveremos al Simulation Basis Manager, donde tendremos al conjunto Set-Equilibrio dentro del grupo Reactions Set.

Para que el mismo esté disponible para ser usado en un reactor, debemos asociarle un paquete termodinámico. Seleccionémoslo y oprimamos el botón Add To FP, tras lo cual se abre una ventana en la que figuran todos los paquetes disponibles, uno solo, en este caso. Lo seleccionamos y terminamos la operación oprimiendo el botón Add Set to Fluid Package.

Agreguemos ahora la reacción secundaria, para la cual debemos, elegir, en este caso, una de conversión. A continuación ingresemos los coeficientes estequiométricos, como hicimos en la reacción de equilibrio.

En la solapa Basis, debemos especificar al etilbenceno como el reactivo base o limitante, a la fase vapor como aquella donde ocurre la reacción, y fijemos Secund como el nombre de la reacción.

En esta solapa podemos ingresar la especificación de la conversión. UniSim admite que la misma, expresada en %, pueda ser una función cuadrática de la temperatura de la reacción (°K).

Con respecto a la fase en la que ocurre la reacción, además de vapor y total, que vimos para las de equilibrio, existen tres posibilidades en la líquida, considerando que ésta puede ser bifásica: fase líquida liviana (Liquid Phase), fase pesada (Aqueous Phase) y una fase líquida global (Combined Liquid).

Para nuestro caso, además de la información ya mencionada debemos especificar el valor de la conversión. Según Kirk-Othmer, Encyclopedia of Chemical Technology, un valor típico de la conversión es 3%, valor que introducimos como se ve en la

figura 9.

Para completar la definición de la reacción, definamos el conjunto Set-Conversion y asignémosle el paquete termodinámico como hicimos con la reacción de equilibrio. En el caso de conjuntos de reacciones de conversión, con

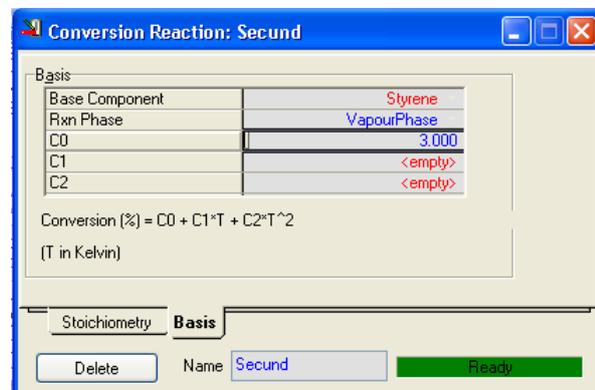


Figura 9. Definición de la conversión

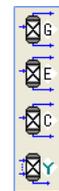
múltiples reacciones, es posible definir un orden de precedencia (Ranking) para las mismas, esto es, cual de ellas sucederá primero y cuales le seguirán. Si la reacción de producción de estireno hubiese sido irreversible, esta y la de formación de estireno podrían haber estado en el mismo conjunto. El orden, en este caso, debe ser primero estireno y luego tolueno.

UniSim, en base al análisis de reactivos y productos en las distintas reacciones del conjunto, asigna un ranking por defecto, con el número menor, comenzando en cero a la reacción de mayor prioridad. Obviamente, nosotros podemos modificar este orden, si fuese necesario.

Reactores no cinéticos: equilibrio y conversión

Una vez concluido el ingreso de las reacciones y definidos los conjuntos, volvamos al ambiente de simulación para incorporar los reactores. Empecemos por el de equilibrio.

En la paleta de objetos, se encuentran juntos el reactor tanque agitado continuo, el tubular y un grupo denominado generales . Al seleccionar el último ícono, se despliega una paleta con los reactores Gibbs, de Equilibrio, de Conversión y de Rendimiento (Yield).



Seleccionemos el reactor de equilibrio y, como ya hemos hecho con todos los equipos, desde la opción Connections de la solapa Design, elijamos como alimentación al mismo, la corriente AlimReact. Este tipo de reactor, al igual que el de conversión o el de Gibbs, necesita que le demos dos corrientes de salida, para permitir diferenciar una fase líquida de otra vapor. Llamemos ProductosRE a la salida de vapor y, por ejemplo, ProdLRE, a la líquida.

En la figura 10 podemos ver los ingresos realizados y un mensaje indicando que debemos ingresar el conjunto de reacciones que se llevarán a cabo en el mismo.

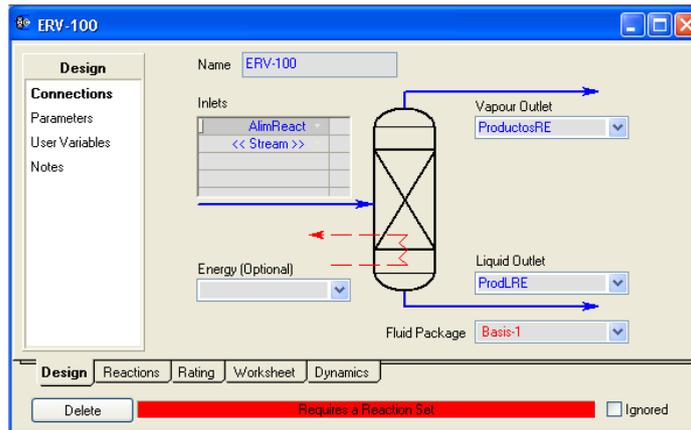


Figura 10. Conectando el reactor

Para hacerlo, vayamos a la opción Details de la solapa Reactions, y seleccionemos desde la lista desplegable Reaction Set, el conjunto que habíamos llamado Set-Equilibrio. El reactor tendrá disponible toda la información correspondiente a las reacciones involucradas y podremos acceder a ella, eligiendo las opciones: Stoichiometry, Basis, Keq, Approach o el botón View Rxn, como vemos en la figura 11.

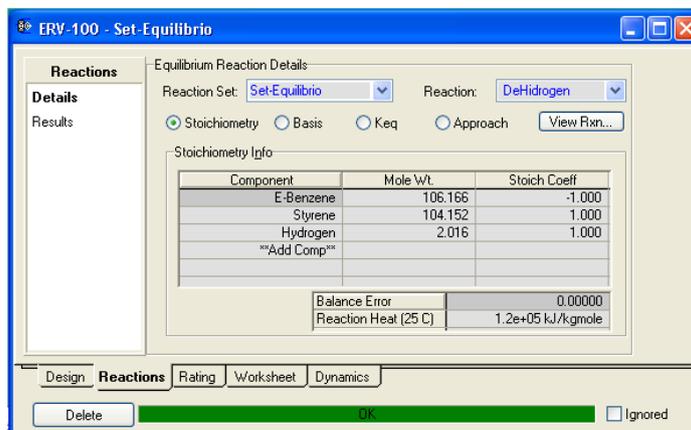


Figura 11. Seleccionando el Set

Si bien el reactor ya se resolvió, no hemos ingresado aún los 10 kPa de pérdida de carga. Hagámoslo desde la opción Parameters de la solapa Design. Finalmente, ingresemos a la opción Results de la solapa Reactions, con Reactions Extents activada, y allí podremos ver el valor de la conversión y el

del grado de avance del componente base, etilbenceno, además del valor de la constante de equilibrio. Esos resultados son los que muestra la figura 12.

	Act. % Conv.	Base Comp	Eqm Const.	Rxn Extent
DeHydrogen	54.48 %	E-Benzene	2.166e-002	21.14

Figura 12. Resultados del reactor de equilibrio

Si seleccionamos la opción Reaction Balance, podremos ver un resumen de resultados para todos los compuestos: flujos molares de entrada y salida y el grado de avance alcanzado, considerando que un valor negativo corresponde al consumo de un reactivo.

Ahora, agreguemos a nuestra simulación, el reactor de conversión y dos corrientes, una para la salida de vapor, ProductosRC y la otra para la líquida, a la que llamaremos, por ejemplo, ProdLRC. La alimentación será la corriente de salida de vapor del reactor de equilibrio, ProductosRE.

Elijamos el conjunto de reacciones, en este caso el Set-Conversion, y dejemos nula la pérdida de carga, ya que se la hemos asignado al reactor donde tiene influencia la presión.

Al igual que en el reactor de equilibrio, podemos ver los resultados en la opción Results de la solapa Reactions, donde aparece, además del valor de la conversión y el grado de avance del componente base, el ranking de la reacción.

Si nos fijamos en la corriente Productos RC tenemos un flujo molar de estireno de 20.5 kgmol/h. Recordemos que nuestro objetivo era alcanzar una producción de 30 kgmol/h. Para ello, como ya sabemos, debemos usar un Adjust. Agreguemos uno y seleccionemos el flujo molar de la corriente AlimHC, como la variable a manipular (Adjusted Variable), el flujo molar del estireno (Comp Molar Flow) de la corriente ProductosRC, como la variable cuyo valor se desea encontrar (Target Variable) e ingresemos 30 a ese valor.

Modifiquemos los valores por defecto de la tolerancia y de los tamaños del paso inicial y máximo, por ejemplo, 0.001, 2 y 10 respectivamente. Podemos ver, desde la solapa Monitor que converge en 15 iteraciones.

Reactores cinéticos: reactor tubular

El reactor más complejo que puede simularse con UniSim es aquel donde se verifican reacciones cuya cinética es conocida. Este tipo de equipos es lo que hemos dado en llamar *reactores cinéticos*.

En el simulador hay dos modelos de reactores cinéticos disponibles, ambos ideales: el tanque agitado continuo (CSTR) y el tubular con flujo pistón (PFR).

Como siempre, en cualquiera de los casos debemos comenzar por definir las reacciones que se llevan a cabo dentro del equipo, básicamente, la estequiometría y la cinética de las mismas.

De los tipos de reacciones disponibles en UniSim, los reactores cinéticos sólo admiten los siguientes:

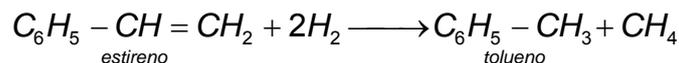
- Reacción cinética (Kinetic)
- Reacción catalítica heterogénea (Heterogeneous Catalytic)
- Reacción simple (Simple Rate).

En nuestro caso, vamos a trabajar usando sólo reacciones cinéticas en un reactor tubular. Al igual que en el acápite anterior, supongamos que se requieren fabricar 30 kmol/h de estireno por dehidrogenación de etilbenceno.

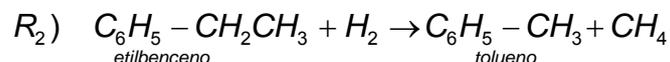
Recordemos que la reacción principal es



Como reacción secundaria considerábamos exclusivamente la producción, a partir del estireno producido, de tolueno y metano, lo que afecta el rendimiento. Esta reacción se puede plantear en serie con R_1 , como lo hicimos antes, cuando disponíamos de información sobre la pérdida de estireno.



La otra posibilidad, es combinar esta última con R_1 y considerar una reacción en paralelo



Nosotros consideraremos esta última formulación, donde disponemos de información sobre velocidades de reacción.

Los datos cinéticos disponibles indican que, para R_1), la velocidad directa se expresa como

$$VR_{1d} = 8.44 \cdot 10^4 \exp(-35500 / RT) p_{eb} \quad (1-d)$$

y la inversa

$$VR_{1i} = 1.503 \cdot 10^{-4} \exp(-5988 / RT) p_{es} p_{H2} \quad (1-i)$$

Para la segunda reacción, la expresión es

$$VR_2 = 0.209 \exp(-43500 / RT) p_{eb} p_{H2} \quad (2)$$

Las unidades de las VR_x son $\text{kgmol/m}^3 \text{ s}$, para lo cual las presiones parciales p_x deben estar expresadas en kPa y las energías de activación E_x en cal/gmol.

Usaremos un reactor tubular, y como antes, operaremos en forma adiabática a 600 °C de temperatura a la entrada y 50 kPa, con una pérdida de carga estimada para todo el equipo de 10 kPa.

Empecemos por recuperar el archivo SectorAlim.usc donde tenemos la corriente mezcla de compuestos que ingresará al reactor.

Antes de continuar definiendo el sistema a simular, abramos el ambiente termodinámico y, en la pestaña Reactions, agreguemos las reacciones R_1 y R_2 . Al oprimir el botón AddRxn deberemos seleccionar, en este caso, en la ventana correspondiente, la opción Kinetic.

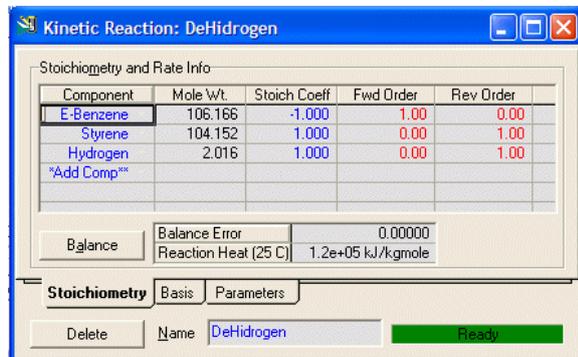


Figura 13. Definiendo la reacción

Luego, al agregar la reacción, en la pestaña Stoichiometry apreciaremos algunos cambios respecto de lo visto hasta aquí, como podemos ver en la figura 13, donde a R_1 le hemos dado, una vez más, el nombre DeHidrogen.

Allí, junto a los coeficientes estequiométricos, aparecen dos columnas que contienen el exponente en la expresión cinética de la velocidad, tanto directa como inversa.

El simulador les ha dado un valor por defecto, que coincide con los coeficientes estequiométricos que hemos introducido. Si fuese necesario, nosotros podemos modificarlos, cosa que no ocurre en este caso.

Al pasar a la pestaña Basis debemos fijar, como base de cálculo, las presiones parciales, expresadas en kPa y las velocidades de reacción en kgmol/m³s. Todo esto lo podemos elegir de la lista que se despliega en cada uno de los items.

Con respecto a la fase donde ocurre la reacción, en nuestro caso es indistinto que fijemos Overall o Vapor, ya que en todo momento no existirá fase líquida alguna.

Por último, en la solapa Parameters podemos ingresar los valores de las distintas constantes de la ley de Arrhenius. Al hacerlo, debemos cuidar que las unidades sean las que correspondan, de acuerdo a la información que disponemos.

En la figura 14 podemos ver los valores ingresados. Los de las constantes preexponenciales, A y A', son los que figuran en las expresiones (1-d) y (1-i), ya que las unidades que hemos fijado en Basis, para expresar las velocidades de reacción, son kgmol/m³s.

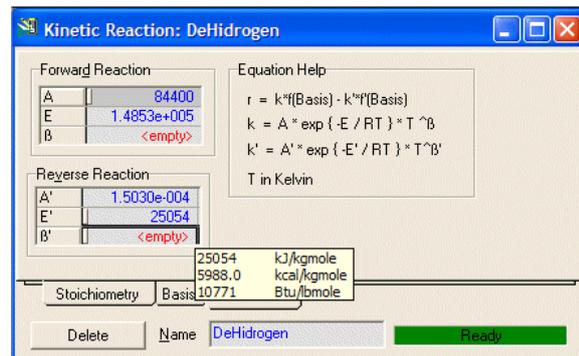


Figura 14. Datos cinéticos

No ocurre lo mismo con las energías de activación, E y E'. El dato disponible está en cal/gmol y el simulador está trabajando en kJ/kgmol. Sin embargo, no existe la necesidad de recálculo alguno, ya que al introducir el dato podemos fijar las unidades y UniSim hará la conversión. Podemos ver que 25054 kJ/kgmol corresponden, exactamente, a 5988 cal/gmol que figura en la expresión (1-i).

Del mismo modo, agreguemos la reacción R₂ y démosle el nombre Secund.

Ahora, en el conjunto Global Rxn Set tenemos las dos reacciones que necesitamos en nuestro reactor y podemos usarlo como tal, sin necesidad de definir uno nuevo.

Antes de abandonar el ambiente termodinámico, debemos recordar asociar al conjunto el paquete de predicción de propiedades que estamos usando.

Una vez hecho esto podemos volver al ambiente de simulación y agregar allí un reactor tubular, escogiendo, en la paleta, el ícono .

Ahora deberemos proceder a efectuar las conexiones con las corrientes de proceso. Esto lo haremos, como en los otros reactores, desde la opción Connections de la solapa Design. Así, la salida del mezclador será el ingreso y en la misma ventana, definiremos una corriente de salida, a la que llamaremos Productos.

Dado que la operación será adiabática no agregaremos una corriente de energía.

Abriremos la opción Parameters para poder fijar la pérdida de carga en el equipo, 10 kPa.

Luego, desde la pestaña Reactions definiremos el conjunto de reacciones que tienen lugar en el equipo, en este caso. Global Rxn Set.

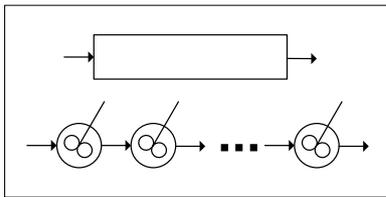


Figura 15. Reactor tubular

En esa pestaña, también, podemos especificar el número de intervalos con los que se calculará el reactor tubular. El equipo es modelado como una serie de tanques agitados ideales, como podemos ver en la figura 15, siendo el número de intervalos

la cantidad de CSTR involucrados en la serie.

Obviamente, una mayor precisión en los resultados requiere incrementar los intervalos, a costa de un mayor tiempo de cálculo.

El valor por defecto es 20 pero nosotros lo subiremos a 100.

En el archivo SectorAlim teníamos definido un caudal de alimentación al reactor de 440 kgmol/h, a 600 °C y 50 kPa.

Este valor no nos asegura la posibilidad de obtener los 30 kgmol/h de estireno requeridos. Tenemos casi 39 kgmol/h de etilbenceno a la entrada del reactor y si la conversión de equilibrio de la reacción R_1 fuese menor al 77% nunca alcanzaríamos el objetivo buscado, esto, sin tener en cuenta los efectos de la reacción secundaria.

Para valores superiores, ha de existir un volumen de reacción donde alcanzar la producción deseada, pero nada asegura que sus dimensiones resulten económicamente viables.

Obviamente, al estar fija la producción, el caudal y las dimensiones del equipo no son independientes, cuestión que debemos considerar en nuestra búsqueda de una solución que resulte técnica y económicamente adecuada.

Un dato disponible en bibliografía, que vincula ambas variables y que nos permite tratar de hallar esa solución razonable, es la relación entre el caudal horario que circula por el reactor, expresado como un líquido, y el volumen neto de catalizador, LHSV o Liquid Hourly Space Velocity. Este valor, según Kirk-Othmer, Encyclopedia of Chemical Technology, en el caso del estireno, es $0.4 - 0.5 \text{ h}^{-1}$.

Podemos utilizar el propio simulador para ir definiendo el equipo y su alimentación, mediante una secuencia de aproximaciones.

Empecemos por terminar de definir un primer intento en el reactor. Hasta este momento el cálculo no puede realizarse porque no se ha especificado la geometría del mismo. UniSim tiene cuatro parámetros para definir la geometría del reactor tubular: volumen, número de tubos, longitud y diámetro de los mismos. Obviamente, sólo tres de estos valores son independientes. La cantidad de tubos que figura por defecto es uno, por lo cual sólo se requiere fijar dos de los otros tres para definir la geometría del equipo.

En nuestro caso, para los cálculos que vamos a realizar, el dato del volumen es suficiente, por lo que podemos dar cualquier valor al largo o al diámetro.

En lo que sigue, vamos a admitir que la fracción de vacíos en el lecho del catalizador es del 40%, un valor típico para este tipo de reactores.

Veamos que valor de volumen de reactor podemos poner. En la corriente AlimRT, para los 440 kgmol/h que hemos definido, el caudal volumétrico de líquido, en condiciones estándar, LiqVol Flow @ Std Cond, es de alrededor de $11.5 \text{ m}^3/\text{h}$, con lo cual, un volumen de catalizador de unos 26 m^3 -algo más de 43 m^3 para el reactor- arroja un valor para la LHSV dentro del rango anotado más arriba. Existe otro flujo volumétrico líquido, Std Ideal Liq Vol Flow, donde el cálculo se realiza considerando la densidad ideal de la mezcla, esto es, sin

interacción entre los compuestos, a diferencia del flujo que usamos, donde el valor de la densidad es el predicho por el paquete elegido.

Vayamos, ahora, a la solapa Rating del reactor e ingresemos 43 m^3 para el volumen y demos un largo cualquiera. El simulador calculará el diámetro que corresponde, para el volumen y largo ingresados.

Si ahora vamos a la corriente de Productos veremos que no hemos alcanzado la producción de estireno requerida.

Para ese volumen de reacción, podemos ajustar, como hemos hecho antes, el caudal molar de AlimHC de modo de alcanzar los 30 kgmol/h deseados.

Agreguemos, pues, un objeto Adjust, donde la variable manipulada sea el caudal molar de AlimHC, la objetivo, el caudal molar de estireno y el valor a conseguir, 30 kgmol/h . Fijemos una tolerancia de 0.01 y un paso de 10 kgmol/h y comencemos la iteración.

Vamos a comprobar que, si calculamos el valor que se obtiene de LHSV, éste va a estar fuera del rango $0.4 - 0.5 \text{ h}^{-1}$.

Podríamos poner un segundo ajuste, ahora para hacer que LHSV sea igual, digamos, a 0.45, pero hay varios problemas.

El primero, y principal, es que esa es una variable que no existe en UniSim. Sin embargo, puede agregársela y asociarle una definición formal, esto es, la fórmula que la expresa.

El agregado lo vamos a hacer en la opción User Variables de la solapa Design del reactor. Allí, oprimiendo el ícono  crearemos la nueva variable, LHSV, cuyas unidades serán User (no existe una categoría 1/tiempo dentro de las disponibles) como podemos ver en la figura 16.

En la parte inferior de la ventana hay un sector para incorporar el código, en Visual Basic, que define la variable que acabamos de crear, cuestión que excede los alcances de este curso. En lugar de ello, vamos a utilizar un objeto Spreadsheet para llevar a cabo esa definición.

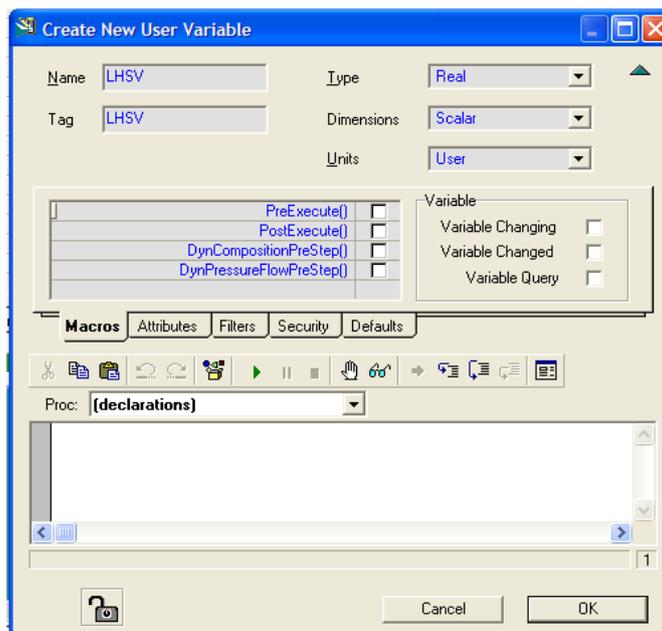


Figura 16. Creando una variable de usuario

Agreguémoslo al PFD sobre el que estamos trabajando e importe las variables *LiqVolFlow* de *AlimRT* y *ReactorVolume* de nuestro reactor tubular. En una tercera celda incorporemos el valor de *fv*, la fracción de vacíos.

Luego, en una cuarta, efectuemos el cociente

$$\text{LiqVolFlow}/((1-fv)*\text{ReactorVolume})$$

y exportemos el resultado, asignándoselo a la User Variable recién creada.

Ahora estaríamos en condiciones de agregar el segundo ajuste pero, debemos tener en cuenta que estaría anidado con el anterior, con los consiguientes problemas de convergencia, por lo cual, haremos de otra forma la determinación del volumen adecuado para el reactor.

Usaremos la herramienta *Databook* y graficaremos los valores de *LHSV* que se obtienen para distintos volúmenes de reactor entre, por ejemplo, 50 a 120 m³, usando intervalos de 10 m³. En la figura 17 podemos ver los resultados obtenidos y encontrar que un volumen de reactor de unos 80 m³ arroja un valor de *LHSV* dentro del rango 0.4 – 0.5 h⁻¹. Este volumen convierte un 40% del etilbenceno ingresado sin efectos apreciables de la reacción secundaria.

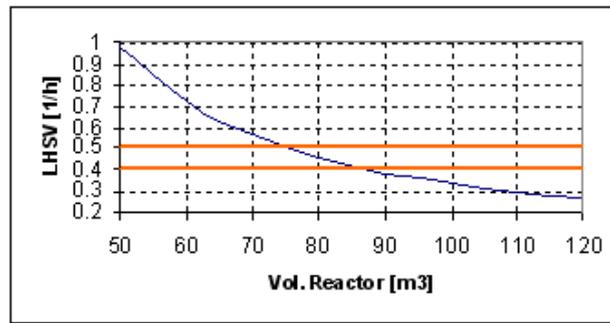
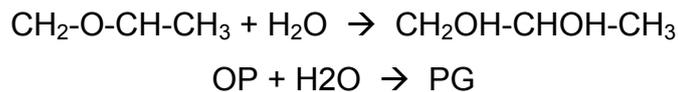


Figura 17. LHSV vs volumen del reactor

Reactores cinéticos: Reactor Tanque Agitado Continuo

El otro reactor cinético que disponemos en UniSim Design es el Tanque Agitado Continuo con mezclado perfecto (CSTR), cuyo manejo es enteramente análogo al del reactor tubular, salvo, obviamente, en lo que refiere a la definición de la geometría del equipo.

Como siempre, para fijar ideas, trabajaremos sobre un ejemplo concreto. Se trata de producir propilenglicol (propano-1,2-diol) por hidratación de 4 t/h de óxido de propileno (1,2-epoxipropano), en un reactor tanque agitado de 1,25 m³ de volumen, ocupado en un 80%, de acuerdo a la reacción



La reacción ocurre en medio ácido, para lo cual el agua contiene un 0,1% en peso de H₂SO₄ y, para evitar reacciones secundarias, en un gran exceso de agua (12-20 mol agua/mol OP según Kirk-Othmer). Las condiciones operativas industriales son 120-190 °C y hasta 21 bar de presión.

Los reactivos se disponen a 25°C y 130 kPa.

En las condiciones anotadas la cinética de la reacción es de orden cero respecto del agua y de orden 1 respecto del OP, $r = k C_{\text{OP}}$, donde el valor de k viene dado por $k = 1.7\text{e}13 \exp(-7.5\text{e}4/\text{RT}) [\text{h}^{-1}]$, habiendo expresado la energía de activación en kJ/kgmol y la temperatura en °K.

Vamos a realizar una serie de estudios de la reacción utilizando el reactor tanque agitado, variando las condiciones de temperatura (25 - 175°C) y presión (130 - 1900 kPa).

Comencemos por definir el caso termodinámico. En razón de los compuestos involucrados y las condiciones operativas previstas, resulta adecuado seleccionar un modelo como NRTL para la fase líquida y una ecuación de estado como PR para el vapor.

Generemos un nuevo caso en nuestro simulador y seleccionemos NRTL/PR como FluidPkgs. Ingrese los compuestos 1,2-Propylene_Oxide, Water, 1,2-Propylene_Glycol y Sulfuric_Acid. Una vez ingresados los compuestos, en la ventana del paquete termodinámico, seleccionemos la pestaña Binary Coeffs y oprimamos el botón Unknowns Only, para predecir los coeficientes de interacción binaria que no se encuentran en la base de datos. Se podrá ver que esa predicción no alcanza al H₂SO₄, por lo cual se tendrá un aviso al abandonar el ambiente termodinámico.

Por último, abramos la pestaña Reactions y allí ingresemos la estequiometría de la reacción, como se muestra en la figura 18.

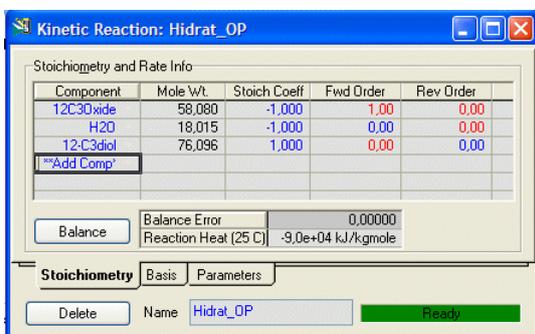
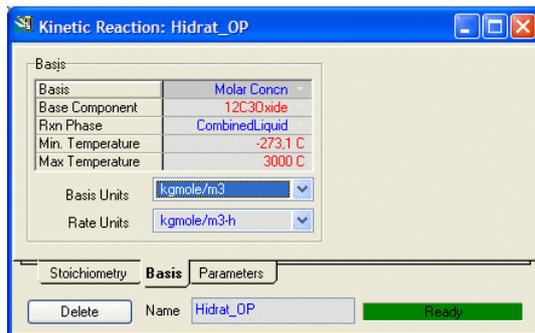


Figura 18. Definiendo la reacción

Advirtamos que hemos modificado el orden de reacción que, por defecto, el simulador les asignara al agua y al propilenglicol, colocando un cero en reemplazo del uno, indicando que la reacción es irreversible y no depende de la concentración del agua.

En la pestaña Basis seleccionemos la concentración molar, en kgmol/m³, como la variable que interviene en la velocidad de reacción, expresada ésta en kgmol/m³h.

Como existe la posibilidad de que aparezca una segunda fase líquida (el óxido



de propileno tiene una relativa solubilidad en agua) debemos seleccionar CombinedLiquid como fase donde se lleva a cabo la reacción.

En definitiva, el ingreso de información en esta pestaña nos debe quedar como podemos ver en la figura 19.

Figura 19. *Parámetros para la reacción*

Por último, en la solapa Parameters

ingresaremos $1.7e13$ como valor de la constante pre exponencial A y $7.5e4$ kJ/kgmol como energía de activación E.

Al volver a la pestaña Reactions del Simulation Basis Manager, no olvidemos agregar, al caso termodinámico, la reacción que hemos definido, oprimiendo el botón Add to FP.

Ya podemos ingresar al ámbito de simulación. Al hacerlo, comencemos por generar dos corrientes de materia, una con H₂O y H₂SO₄ (fracciones másicas 0.999 y 0.001, respectivamente) y la otra con 4000 kg/h de óxido de propileno puro, ambas corrientes a 25 °C y 130 kPa.

Para eventuales estudio de la relación entre el caudal molar del H₂O con el del OP, ingresemos una operación SET y fijemos, inicialmente, el multiplicador en el factor 15. Aquí hemos despreciado la influencia de ácido, pero esto no resulta demasiado significativo.

Para facilitar los estudios de influencia de la temperatura y presión de reacción, antes de incorporar el reactor tanque, agreguemos una bomba y un calentador, con sus respectivas corrientes de energía y las corrientes de materia intermedias.

Agreguemos el reactor tanque agitado seleccionándolo desde la paleta de objetos, usando el ícono , y trasladémoslo al PFD. Hecho esto, al seleccionar el nuevo equipo, se abrirá la ventana Connections en la solapa Design, como vemos en la figura 20.

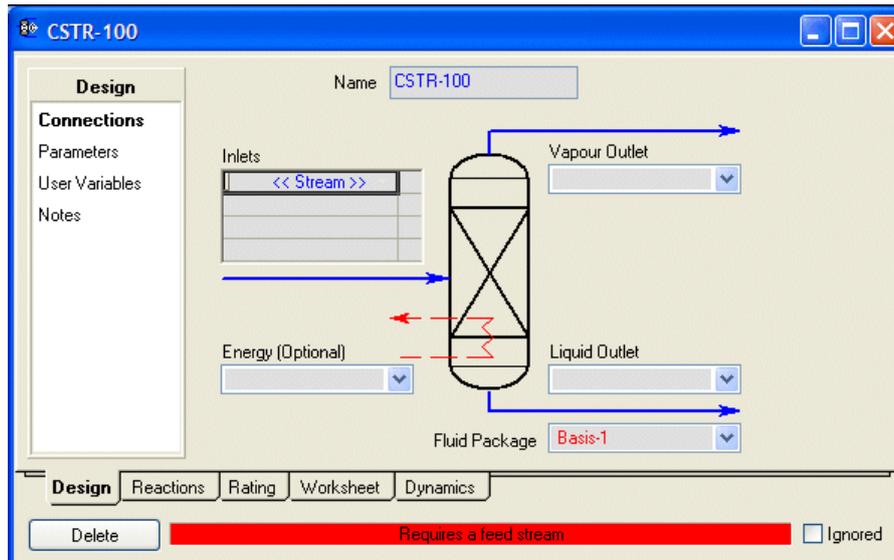


Figura 20. Conexiones del CSTR

Claramente, el reactor podrá tener múltiples corrientes de entrada y dos de salida, una para la fase vapor y otra para la líquida; esto, además de una corriente de energía opcional.

Si no se la agrega, la operación será adiabática. En nuestro caso, la agregaremos.

En la misma pestaña, en la ventana Parameters, podemos ingresar la pérdida de carga en el equipo (nula, en este caso), el volumen del tanque (1.25 m^3) y el porcentaje de ese valor que se encuentra lleno de líquido (80%). En la figura 21 podemos ver esos ingresos.

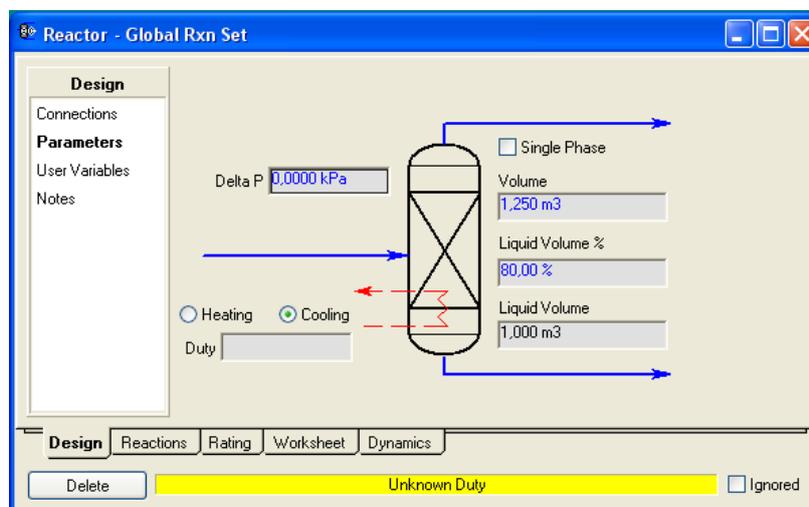


Figura 21. Parámetros del CSTR

Para completar la información básica requerida por el equipo, debemos referir el sistema de reacciones (en este caso única) que se verifica dentro del reactor. Para ello, debemos abrir la ventana Details de la solapa Reactions y allí seleccionar el conjunto Global Rxn Set, el grupo por defecto donde ha quedado incorporada la reacción que ingresamos en el caso termodinámico. Una vez que hayamos agregado todos los equipos y corrientes y efectuado las conexiones, deberíamos obtener algo similar al PFD de la figura 22.

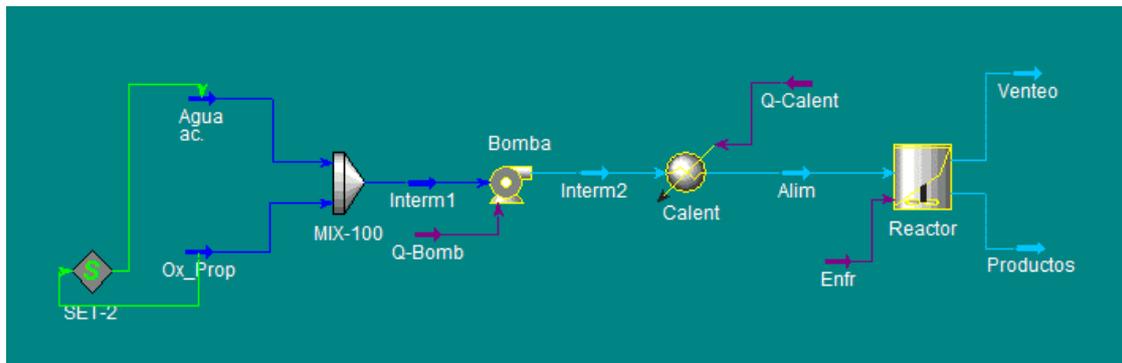


Figura 22. Estado intermedio de la simulación

Allí hemos cambiado alguno de los nombres que el simulador asigna, por defecto, a equipos y corrientes.

Obviamente, sólo el sector inicial se encuentra resuelto ya que aún no hemos establecido la pérdida de carga en el calentador ni las condiciones de presión y temperatura a la entrada y salida del reactor. En todos los casos que siguen vamos a admitir que no se registra caída de presión en Calent y que la eficiencia de la bomba es el valor por defecto, 75%.

En un primer análisis vamos a considerar que las condiciones de entrada al reactor son las mismas que las de la salida del mezclador y que el equipo opera en forma isotérmica. Fijemos la presión y la temperatura de Alim en 130 kPa y 25 °C. Hecho esto, lo único que resta calcular es el Reactor. Por el tipo de operación elegida, hagamos que la temperatura de los Productos sea de 25 °C, con lo que tendremos todo el sistema calculado.

Si en el Reactor abrimos la ventana Results de la pestaña Reactions veremos que se alcanza una conversión del OP del 5.01% y se requiere un enfriamiento de $3.2 \cdot 10^5$ kJ/h.

Veamos qué ocurre si la operación es adiabática. Borremos la temperatura ingresada en Productos y hagamos que el flujo de calor en Enfr sea nulo. La temperatura de salida del equipo ahora es de 90,42°C y la conversión trepa a 92.11%.

Está claro que el incremento de temperatura favorece el desarrollo de la reacción. Volvamos a una operación isotérmica pero a 175 °C, un valor dentro del rango operativo normal. Pero si no modificamos la presión toda la mezcla reaccionante pasará a la fase vapor, por lo que trabajaremos a, digamos, 1900 kPa. Con esto, no hay fase vapor y la conversión es del 99.91%.

También podríamos haber planteado el problema en modo diseño: ¿Qué volumen de reactor, con una ocupación del 80%, se requiere para hidratar 4 ton/h de OP, con 15 mol H₂O/mol OP, en operación isotérmica a 175°C y 1900 kPa, para alcanzar una conversión del 99.9% del OP ingresado.

Aquí, simplemente, utilizaríamos una operación Adjust, tomando el volumen del tanque como variable a manipular para alcanzar un caudal molar de 68.8 kgmol/h de PG.

Bibliografía

- Levenspiel O., "Ingeniería de las Reacciones Químicas", Ed. Reverté, 2001.
- UniSim Design Operations Guide.
- UniSim Design Simulation Basis Guide.

Propuestas de trabajo

1. Para el sistema de reacciones para la producción de estireno ya analizado:

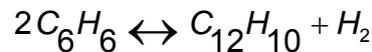
a) En el caso de reactores no cinéticos:

a1) analice, usando la herramienta Databook, el comportamiento de la temperatura de salida de la zona de reacción y el caudal de etilbenceno, al modificar la relación molar vapor/hidrocarburos en el rango 6 a 12;

a2) para la relación molar vapor/hidrocarburos igual a 10, compare la conversión obtenida en el caso adiabático con la que se obtiene en un reactor de equilibrio isotérmico.

b) con el reactor tubular, analice el comportamiento de la conversión versus volumen del reactor, dentro del rango de valores razonables para la LHSV.

2) Se desea producir difenilo por deshidrogenación pirolítica del benceno, según la reacción:



Para ello se dispone de un reactor adiabático tubular, tipo multitubo, con tubos de 1.5 cm de diámetro y 1 m de longitud, además de instalaciones como para poder alimentar a dicho reactor con 6 kgmol/h de benceno vaporizado a 1 atm y 800 °C.

Considerar en el reactor una pérdida de carga total de 10 kPa.

Se conoce que:

- la velocidad de reacción es: $R_V = k[p_{Benc}^2 - p_{Dif}p_{H_2}/K]$ expresada en gmol/cm³h, y las presiones en atm.

- $k = 1.2 \cdot 10^5 \exp(-30190/RT)$ expresada en [gmol/cm³ h atm²] y la energía de activación en cal/gmol.

- La constante de equilibrio es:

$$\ln K = 29.0455 - 2045.001/T - 4.977009 \ln T + 6.1254 \cdot 10^{-3} T$$

¿Cuál es el volumen del reactor, si se desea una conversión del 30% de benceno?

CAPÍTULO 12

ASOMÁNDONOS AL OPTIMIZADOR DE UNISIM

Características generales

En este capítulo vamos a comenzar a conocer el optimizador del UniSim Design. Es una herramienta muy potente, capaz de manejar un amplio rango de variables de decisión incluyendo variables binarias. Permite resolver problemas no lineales restringidos.

Para invocar al Optimizer, se lo hace desde el elemento Simulation de la barra de menú. Al hacerlo, se abre la ventana de la figura 1 donde el número de solapas que aparecen depende de la selección realizada en el grupo Data Model de la solapa Configuration que es común a todas las opciones. Las otras solapas que aparecen en la figura, Variables, Functions, Parameters y Monitor, corresponden a la opción Original, que es la que el simulador toma por defecto.

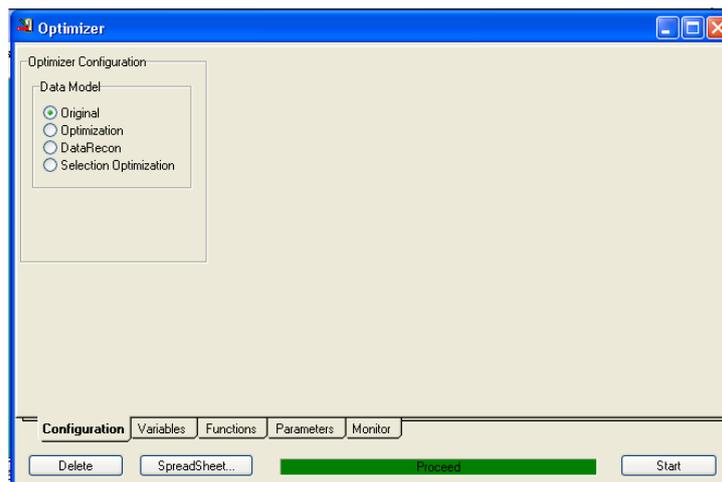


Figura 1. Ventana inicial del optimizador

En el grupo Data Model hay cuatro botones de opción que permiten elegir el conjunto de métodos de optimización posibles de usar:

- Original: aquí se encuentran disponibles los siguientes métodos:
 - 1) BOX: una variante del método Complex de Box
 - 2) SQP: Programación Cuadrática Sucesiva
 - 3) Mixed: una combinación de BOX y SQP, que es la opción por defecto
 - 4) Fletcher Reeves
 - 5) Quasi-Newton.
 Estos dos últimos métodos no permiten el tratamiento de problemas restringidos.
- Optimization: es una versión de Programación Cuadrática Sucesiva desarrollada por Honeywell.
- DataRecon: permite el tratamiento de datos experimentales, por ejemplo, ajuste de parámetros de modelos generales para un caso particular.
- Selection Optimization: comprende dos algoritmos de Programación No Lineal Entera, Branch and Bound y Stochastic (utilizando el método Simulated Annealing). En ambos casos se complementa la búsqueda del óptimo con la versión Honeywell de Programación Cuadrática Sucesiva.

Además de la solapa de configuración, los distintos conjuntos comparten los tres botones que podemos ver en la parte inferior de la figura 1:

- Delete: elimina el Optimizador que se ha agregado;
- Spreadsheet: permite acceder a una planilla asociada al optimizador;
- Start: inicia o detiene los cálculos del optimizador una vez que, previamente, hemos definido el problema.

Caso propuesto

Como siempre, vamos a abordar el tema a través de un problema cuyo esquema de proceso se muestra en la figura 2. Allí, la corriente 1, 150 kgmol/h de tolueno puro a 280 kPa, se enfría de 90 °C a 30 °C y la

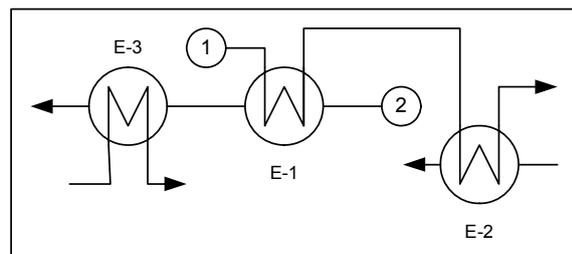


Figura 2. Caso propuesto

corriente 2, 100 kgmol/h de benceno puro a 320 kPa, se calienta desde 40 °C a 95 °C. Hay un aprovechamiento energético en el equipo E-1 y luego se realizan los ajustes finales mediante el uso de calefacción y enfriamiento auxiliar.

En E-1 consideraremos que el toleno circula por tubos y el benceno por camisa.

En todos los equipos adoptaremos una pérdida de carga de 70 kPa y en el intercambiador, consideraremos 10 segmentos para el cálculo del producto del coeficiente global de transferencia y el área. Adoptaremos un valor de 830 kJ/h m²°C para el coeficiente global de transferencia.

Nos proponemos encontrar las condiciones operativas que minimizan el costo total anual, considerando como tal los gastos en servicios y la amortización del equipo E-1 ya que los equipos auxiliares son existentes. Para ello, vamos a considerar que:

- la inversión del intercambiador puede determinarse como: $2900 A^{0.65}$
- el período de amortización será de 5 años.
- el costo de agua de enfriamiento lo tomaremos igual a $8.95 \cdot 10^{-7}$ USD/ kJ
- el costo del calefaccionante será de $3.9 \cdot 10^{-6}$ USD/kJ.

Toda optimización utilizando un simulador comienza por estructurar un caso base, otorgándole valores razonables a las variables de decisión y, si las hubiera, a las supuestas. Estos valores, luego, serán modificados por el algoritmo de optimización.

Comencemos, entonces, a trabajar en esa construcción.

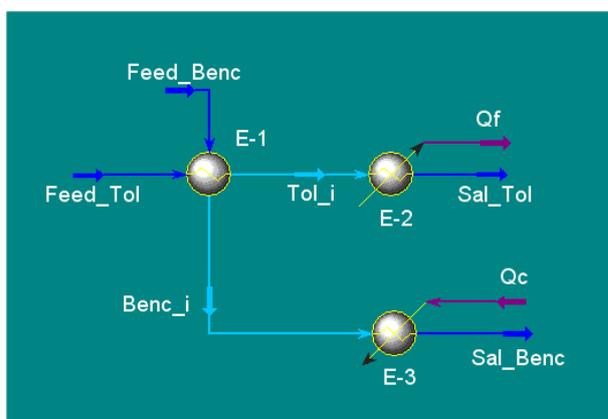


Figura 3. Caso base sin resolver

Para la definición del caso termodinámico utilizaremos la ecuación de estado Peng-Robinson.

En la explicación que sigue, haremos referencia al diagrama de proceso de la figura 3.

Si bien la estructuración del caso base es sencilla, es importante que

antes de hacerlo analicemos sus grados de libertad. Si tuviésemos

especificadas las entradas de las dos corrientes, y además, se conocieran el área del intercambiador E-1, los calores Q_f y Q_c y las pérdidas de carga de los equipos, las salidas podrían calcularse. Como en este caso, no están especificados ni el área ni los calores, pero sí, las dos temperaturas de salida de las corrientes, el sistema nos queda con un grado de libertad. Agotémoslo dando, por ejemplo, el valor 80 °C a la temperatura de la corriente de benceno que sale de E-1, con lo cual el simulador calcula el caso base.

Si bien es posible que la optimización parta de un caso base no factible, siempre es conveniente que en el punto de partida elegido se cumplan todas las restricciones, lo que ocurre al proponer 80 °C para agotar el grado de libertad.

Uso del optimizador

En este momento estamos en condiciones de invocar al optimizador. Al hacerlo, como ya dijimos, se abrirá la ventana de la figura 1 y allí dejaremos la opción Original en el grupo Data Model de la solapa Configuration.

Optimizer Parameters	
Scheme	Mixed
Maximum Function Evaluations	300
Tolerance	1,000e-05
Maximum Iterations	30
Maximum Change/Iteration	0,3000
Shift A	1,000e-04
Shift B	1,000e-04

Figura 4. Solapa Parameters

En la solapa Parameters, como vemos en la figura 4, podemos elegir el método de optimización y definir los parámetros asociados:

- Scheme: es una lista desplegable que permite seleccionar los métodos ya citados, siendo Mixed la opción por defecto.
- Maximum Function Evaluation: permite fijar el máximo número de evaluaciones de la función. En cada iteración, el flowsheet se resuelve varias veces dependiendo de distintos factores como el método y el número de variables de decisión.
- Tolerance: UniSim Design calcula el cambio de la función y de las variables de decisión normalizadas entre una iteración y otra. Si dichos cambios superan el valor de este parámetro, el proceso de cálculo continúa.

- Maximum Iteration: permite fijar el máximo número de iteraciones antes de que el cálculo se detenga.
- Maximum Change/Iteration: corresponde al valor máximo de cambio relativo en las variables de decisión por iteración. Por ejemplo, consideremos que se acepta para este parámetro el valor por defecto, 0.3. Si se tiene un flujo molar como variable de diseño con un rango entre 0 y 200 kgmol/h, el máximo cambio en una iteración será: $200 \cdot 0.3 = 60$ kgmol/h.
- ShiftA y ShiftB: las derivadas de la función objetivo y/o de las restricciones con respecto a las variables de diseño, cuando son requeridas, se calculan usando diferenciación numérica. La perturbación sobre cada variable se calcula de acuerdo a la relación siguiente:

$$\Delta x_n = \text{ShiftA} * x_n + \text{ShiftB}$$

donde:

x_n : variable perturbada normalizada. La normalización de las variables de decisión se hace de acuerdo a la expresión: $x_n = (x - x_{\text{inf}}) / (x_{\text{sup}} - x_{\text{inf}})$

Δx_n : perturbación de la variable normalizada.

Las derivadas se calculan usando: $\partial y / \partial x = (y_2 - y_1) / \Delta x_n$

donde:

y_2 : valor de la variable afectada correspondiente a la modificación $x_n + \Delta x_n$.

y_1 : valor de la variable afectada correspondiente a x_n .

En general, no suele ser necesario cambiar los valores por defecto de ShiftA y ShiftB.

Para determinar las derivadas, el simulador debe resolver el caso varias veces en cada iteración; además del caso base, hay un cálculo extra por cada variable de decisión. Si, por ejemplo, tenemos dos variables de decisión, hay tres evaluaciones de las funciones (objetivo y restricciones) por iteración.

En la solapa Variables vamos a poder definir las variables de decisión y sus límites. Inicialmente tiene el aspecto de la figura 5, donde sólo está activo el botón Add, con el cual podremos comenzar a ingresar la información.

El resto de los botones se activan después que hayamos ingresado alguna información. El botón Edit nos permite sustituir una variable por otra y el botón Delete, borrarla. También podemos guardar, con Save Current, el valor actual de una variable y luego restituirlo con Reset Current, por ejemplo, para reiniciar, desde el mismo punto, una optimización del sistema modificado.

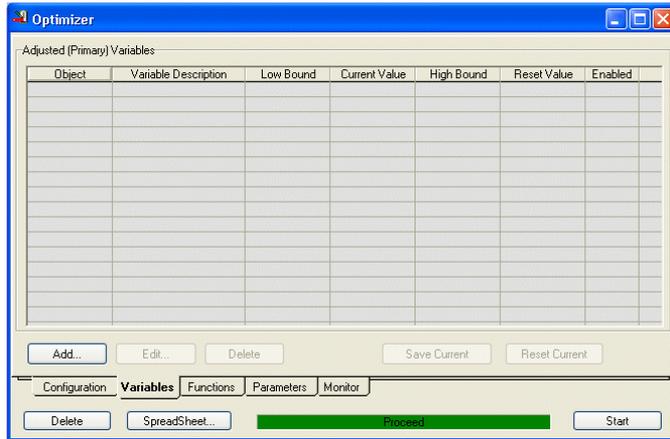


Figura 5. Solapa Variables

Para resolver nuestro caso base, hemos elegido como variable de decisión a la temperatura de la corriente Benc_i. Ahora debemos indicarle nuestra elección al optimizador. Al oprimir el botón Add, se abre una ventana en la cual se encuentra una lista de objetos y las variables vinculadas al mismo, como vemos en la figura 6.

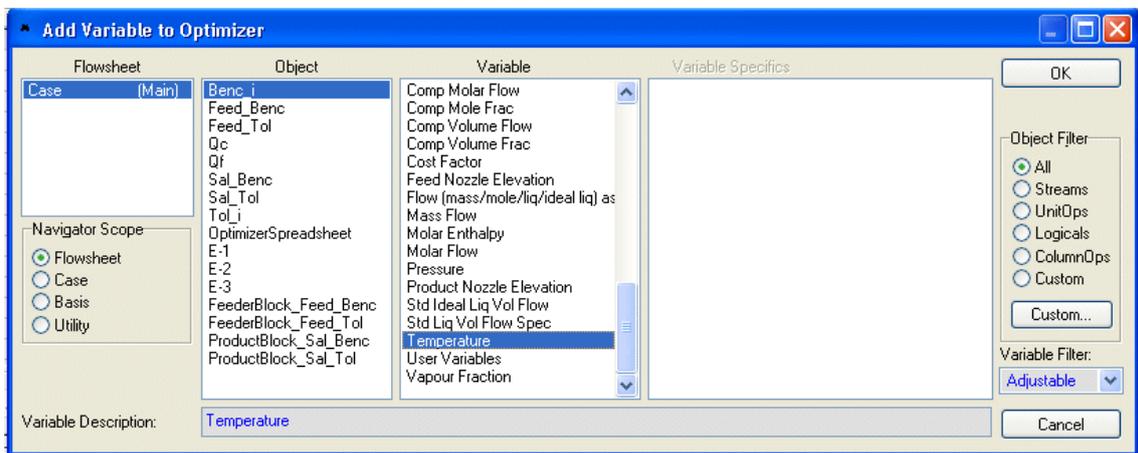


Figura 6. Incorporando una variable de decisión

Allí deberemos seleccionar Benc_i dentro de los objetos y Temperature como variable, tras lo cual, luego de oprimir OK, volvemos a la solapa Variables. Podemos ver que UniSim introdujo, arbitrariamente, límites para la temperatura

de Benc_i. En general, nosotros dispondremos de mejor información y deberemos volcarla, reemplazando los valores asignados.

En este caso, podríamos definir el límite inferior en 40.5 °C y el superior en 89.5 °C. Cuando ingresemos estos valores, obviamente, debemos estar seguros de que el óptimo se encuentre dentro del rango elegido. Si a esto le sumamos la conveniencia de partir de un caso base factible, nos estaremos asegurando que el optimizador obtendrá una solución.

También podríamos haber tomado como variable de decisión a la temperatura de la corriente Tol_i. Los extremos obvios serían, ahora, los mismos que antes pero, si lo hiciésemos, veríamos que se produce un cruce de temperatura.

Al analizar la curva temperatura versus flujo calórico en E-1, se advierte, como vemos en la figura 7, que la temperatura en Benc_i es más restrictiva que la correspondiente en Tol_i.

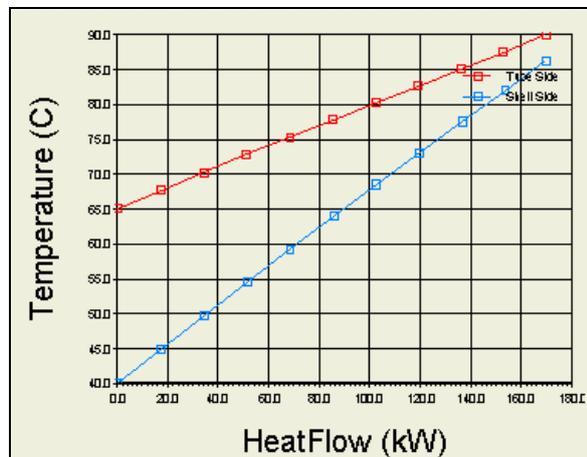


Figura 7. T vs Q en E-1

Recordemos que para acceder a esa curva, debemos hacer uso de la opción Plots de la solapa Performance del intercambiador.

Función objetivo y restricciones

Una vez que hemos definido las variables de decisión de nuestro problema, debemos hacer lo propio con la función objetivo que hemos adoptado y las restricciones a las que están sujetas las variables del sistema.

Esta información, en forma indirecta, la ingresaremos en la solapa Functions del optimizador. Como podemos ver en la figura 8 hay dos sectores claramente diferenciados, uno, para la función objetivo, y otro, para las restricciones.

En ambos casos se hace referencia a celdas de una planilla propia del optimizador, a la que aún no hemos ingresado, y a la que se accede mediante el botón Spreadsheet. En esa planilla construiremos las relaciones que definen

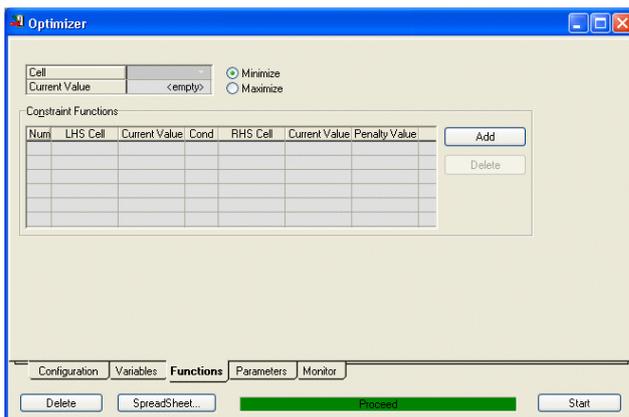


Figura 8. Solapa Functions

tanto a la función objetivo como a cada una de las restricciones, si las hubiera. Para estas últimas podemos ver que se desglosan en dos términos (LHS a la izquierda y RHS a la derecha) separados por el operador Cond. Oprimiendo el botón por primera vez no solo accederemos al

objeto OptimizerSpreadsheet sino que, además, éste se incorporará en el PFD. En ese objeto existen varias solapas, de las cuales vamos a usar, fundamentalmente, Spreadsheet y, en menor medida, Parameters. El resto de ellas carece de interés en este momento.

El ingreso de la información lo haremos desde la solapa Spreadsheet. Al elegirla se abre una planilla como la de la figura 9 con 10 filas y 4 columnas, valores que pueden modificarse, como veremos mas adelante.

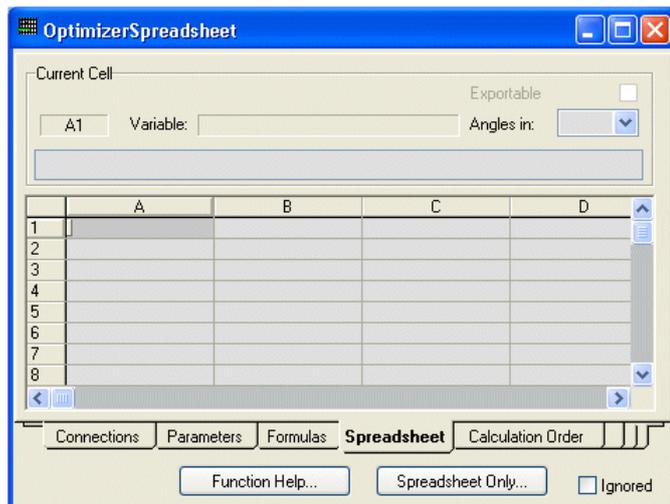


Figura 9. Solapa Spreadsheet

Vamos a utilizar las dos primeras columnas para la definición de la función

objetivo, la columna A con los r tulos y la B para los valores. Luego asignaremos un segundo sector para las restricciones.

La funci n objetivo que hemos adoptado requiere que conozcamos el valor del  rea del intercambiador E-1, la cantidad de energ a removida por la corriente Qf y la entregada por Qc.

Esos valores los vamos a colocar en las tres primeras celdas de la columna B, import ndolos desde el flowsheet.

Para poder determinar el valor del área de E-1 nos falta ingresar información. Debemos conocer el valor del coeficiente global de transferencia, que lo ingresaremos en la celda B4. En la celda B5, pondremos la fórmula que nos permite calcular el área en cuestión.

No olvidemos que, a diferencia de la planilla convencional, debemos escribir las direcciones explícitamente ya que el mouse no permite seleccionarlas.

Al calcular el área, el simulador le dará las mismas unidades del coeficiente UA, ya que al valor de U no le definimos ninguna. Asignemos al contenido de la celda B5 el tipo Área, con lo cual aparecerá la unidad m² junto al resultado.

Continuemos con los costos unitarios anuales de los servicios e ingresemos en las celdas B6 y B7 el del calefaccionante y el de enfriamiento, respectivamente. En la celda B8 escribamos la fórmula $= (B1 * B7 + B2 * B6) * 8000$, para calcular el costo operativo anual.

Nos resta aún, el cálculo de la amortización de E-1. Una de las formas de hacerlo es ingresando en la celda B9 la fórmula $= 580 * B5^{0.65}$.

Finalmente determinemos el costo total anual, nuestra función objetivo, en la celda B10. Con el ingreso realizado hasta ahora, la planilla se verá como la de la figura 10, donde se han agregado, en algunas celdas de la columna C, rótulos para definir unidades.

	A	B	C	D
1	Qf	8.969e+005 kJ/h		
2	Qc	2.112e+005 kJ/h		
3	UA E-1	2.984e+004 kJ/C-h		
4	U	830.0		
5	Area	35.95 m ²		
6	Costo Calefacción	3.900e-006	\$/kJ	
7	Costo Enfriamiento	8.950e-007	\$/kJ	
8	Costo Oper. Total	1.301e+004	\$/año	
9	Amortización	5952	\$/año	
10	FO	1.896e+004		

Figura 10. Definición de la función objetivo

Finalmente usemos algunas celdas para ingresar la información que nos permita definir las restricciones. Antes de ello, generemos un lugar suficiente como para hacerlo, ya que, como dijimos antes, la planilla tiene, por defecto, 4 columnas y 10 filas. Modifiquemos a seis el número de columnas desde la solapa Parameters.

Luego, para construir las restricciones, usemos las dos columnas adicionales que hemos generado.

Solo consideraremos la condición que la temperatura de la corriente Tol_i no debe ser inferior a 40.5 C, un valor levemente por encima de la de entrada de benceno, $Temp_{Tol_i} > 40.5$ C.

Recordemos que para el simulador, toda restricción está constituida por dos términos y cada uno de ellos, ubicado en una celda diferente. Importemos, en F2, la variable Temperatura del objeto Tol_i y coloquemos el valor 40.5 en F3. Completamos la planilla con los rótulos como se ve en la figura 11.

E	F
Restricción	
Temp Tol_i	68.92 C
límite	40.50

Figura 11. Restricción

Ahora si, cerremos la planilla y vayamos a la solapa Functions del objeto Optimizer. Aquí le indicaremos al optimizador que, en la celda B10 de Spreadsheet de OptimizerSpreadsheet está ubicado el valor de la función objetivo y que el tipo de óptimo será un mínimo.

La restricción la ingresaremos oprimiendo el botón Add. Luego, de las listas desplegables de las columnas LHS Cell y RHS Cell, elijamos las celdas F2 y F3, respectivamente y en la columna Cond, seleccionemos el operador >.

Por último, debemos encontrar la solución óptima. Para ello, oprimamos el botón Start, ubicado en el extremo inferior derecho del objeto Optimizer. La temperatura buscada es cercana a 84 °C, resultando un costo total anual de alrededor de 18400 USD/año.

Si nos interesase conocer la evolución de la búsqueda desde el caso base hasta el óptimo, lo podemos hacer revisando la solapa Monitor, donde se muestran los resultados de las iteraciones. Allí aparecen los valores de la función objetivo, de las variables de decisión y el de las variables flojas de las restricciones (diferencia entre el valor que tiene la variable y el valor límite). Los

valores de las variables flojas son positivos si las restricciones se cumplen y negativos en caso contrario.

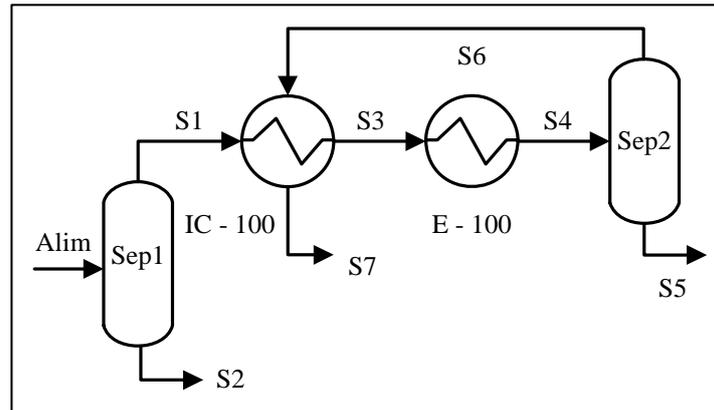
Cada paso que aparece en la planilla del monitor implica que se producen mejoras en el valor de la función objetivo.

Bibliografía

- Edgar T.F. y Himmelblau D.M.; "Optimization of Chemical Processes"; McGraw Hill, 1988.
- UniSim Design Operations Guide

Propuesta de trabajo

En el proceso de la figura se debe acondicionar la corriente S7 de manera que se garantice que su punto de rocío sea -15°C a 6000 kPa.



La alimentación ingresa a 25°C y 6200 kPa, con un flujo molar de 1000 kgmol y las fracciones molares que se detallan en la tabla adjunta.

Las corrientes S2 y S5 ingresan a otro sector del proceso.

Considere nulas las pérdidas de carga de los separadores.

Encuentre las condiciones operativas que maximizan el beneficio, teniendo en cuenta la amortización del intercambiador, el costo del enfriamiento y las ventas de la corriente de gas S7, admitiendo que el enfriador y los separadores están amortizados.

Resuelva en forma gráfica y usando el optimizador.

Resuelva en forma gráfica y usando el optimizador.

Otros Datos:

- Pérdida de carga del enfriador: 35 kPa
- Pérdidas de carga del intercambiador: 35 kPa (tubos) y 5 kPa (carcaza)
- Coeficiente global de transferencia: $830 \text{ kJ/h m}^2 \text{ }^{\circ}\text{C}$
- Poder calorífico gas: 10.82 kWh/m^3

Compuesto	Fracción Molar
N ₂	0.03
SH ₂	0.05
CO ₂	0.10
Metano	0.65
Etano	0.03
Propano	0.06
i-Butano	0.02
n_Butano	0.02
i-Pentano	0.02
n-Pentano	0.01
n-Hexano	0.01

Datos económicos:

- Período de amortización: 5 años
- Período de operación: 8000 horas

Estime el costo del Intercambiador (I) de acuerdo a las expresiones:

$$\log C_1 = 3.4338 + 0.1445 \log(A) + 0.1079 (\log(A))^2 ; \quad I = 3.4 C_1$$

- Costo del agua: 8.95×10^{-7} \$/kJ
- Precio de venta Gas: 0.012 \$/kWh

Ayuda: Para determinar el Pto de rocío de la corriente a las condiciones deseadas se puede proceder de la siguiente forma: 1) generar una nueva corriente, 2) a través de una operación BALANCE copiar la composición de la corriente S7, 3) establecer sobre la nueva corriente las condiciones para determinar la temperatura de rocío. Luego debe ajustarse alguna variable para que la temperatura en la variable generada sea -15°C .

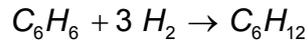
ANEXO

PROPUESTAS DE ANÁLISIS DE UN PROCESO VISTO COMO SISTEMA INTERACTUANTE

1. Producción de Ciclohexano

La producción de ciclohexano se hace a través de la hidrogenación catalítica de benceno.

La mezcla reactiva ingresa al reactor en fase vapor y se pone en contacto con un catalizador de Níquel/Silicio. La reacción es exotérmica, según la estequiometría:

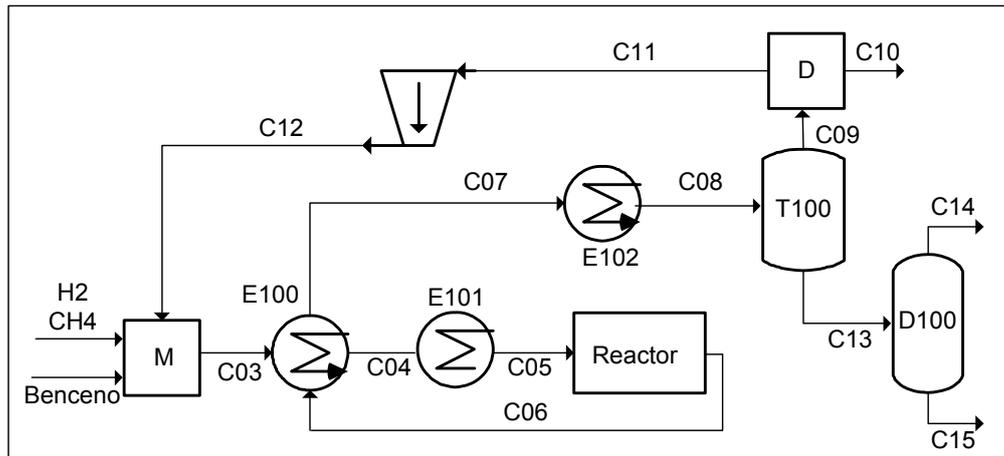


Como corrientes de alimentación fresca se dispone una de benceno puro y otra, una mezcla de hidrógeno (97,5%) y metano (2,5%), ambas a 50 °C y 35 bar.

El reactor opera en forma isotérmica a alta presión y a una temperatura moderada y en él se logra la conversión de la casi totalidad del benceno ingresante. La corriente que sale del reactor precalienta la alimentación. Esta última se termina de calentar, antes de ingresar al reactor, con parte del calor generado en el mismo.

La corriente de productos pasa a un tanque de separación líquido-vapor, previo enfriamiento. La fase vapor, conteniendo el hidrógeno no reaccionado, es reciclada a la alimentación del reactor. Para evitar la acumulación de metano se realiza una purga.

La fase líquida del tanque de separación se alimenta a una columna de destilación a fin de separar los componentes más livianos que el ciclohexano. En la simulación no se considerará esta columna.



En la simulación utilice la siguiente información

Columna D100:

- Caudal de ciclohexano a la salida: 115 kgmol/h.
- Recuperación del ciclohexano ingresante: 95%

Datos en el Reactor:

- Conversión del benceno: 99.9%
- Relación H2 / benceno a la entrada: 12/1
- Pérdida de carga en el reactor: 1 bar
- Temperatura de operación: 225 °C

Compresor:

- Eficiencia adiabática: 0.75

Datos en equipos de intercambio

- Pérdida de carga: 0.2 bar
- Aproximación mínima 5 °C (Cuando sea necesario para la construcción del caso base)

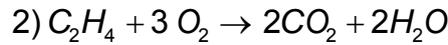
Datos en el separador T100

- Temperatura operación 50°C

2. Producción de Óxido de Etileno

Una de las vías para la producción de óxido de etileno es la oxidación del etileno sobre un catalizador de plata y ocurre isotérmicamente a 240 °C.

Las reacciones que se llevan a cabo son:



El proceso puede describirse de la siguiente manera:

- a) Se desean producir 350 kgmol/h de óxido de etileno.
- b) Al sistema ingresan dos corrientes, una de etileno a -6.3°C y 4 bar y la otra de aire, que después de un proceso de acondicionamiento, se dispone a 195°C y 4 bar. Para el aire se considerará una composición de 21% molar de O_2 y 79 % molar de N_2 .
- c) Ambas corrientes se mezclan con una de reciclo y luego son precalentadas a 240°C antes del ingreso al reactor de oxidación. A la entrada del mismo se deberá asegurar que la relación molar entre O_2 y etileno sea 6:1. La pérdida de carga del reactor se tomará igual a 0.70 bar.
- d) En la primera reacción, se convierte el 35% del etileno, mientras que en la segunda, sólo el 1.5%.
- e) La corriente de salida del reactor es enfriada hasta 45°C .
- f) La corriente enfriada ingresa a una columna lavadora. El agua se dispone a 25°C y a la presión de la entrada a la torre lavadora. Su flujo molar debe ser un 15% superior al de la corriente de salida del reactor. Simularla usando un Component Splitter (CS) donde, por fondo, sale el 93% del óxido de etileno y el 99.7% del agua y por tope todo el resto. Considerar que la salida por tope tiene una pérdida de carga de 0,15 bar y ambas salidas tienen la temperatura que resulta del balance entálpico, considerando un funcionamiento adiabático para la torre.
- g) La corriente que abandona el CS por el tope es dividida en dos, una constituye la purga, y la otra es la corriente de reciclo que se comprime hasta la presión de entrada al proceso. Considerar un factor de división de 0.5.
- h) La corriente de salida líquida del CS pasa a través de una válvula e ingresa a una columna de destilación a 45°C . La presión de tope de la columna es de 2 bar. En la misma se recupera, por tope, el 99% del óxido de etileno y por fondo, 99.9% del agua. La simulación de esta columna se hará en dos

etapas. En la primera, se la simulará con un CS y con este se cerrará el reciclo. Una vez que se disponga del valor definitivo de caudal de alimentación a la columna, se la simulará en forma rigurosa.

Aclaraciones y sugerencias:

- a) Usen como paquete termodinámico NRTL y una ecuación de estado para la fase vapor. Otros paquetes pueden ocasionar problemas en el uso del Short Cut y la columna.
- b) Se recomienda definir una variable de usuario para la relación O_2 /etileno en la corriente de entrada al reactor.
- c) Adoptar una pérdida de carga de 0.30 bar para los equipos de transferencia de calor.
- d) En el eventual uso de las operaciones Adjust o Recycle, modifiquen adecuadamente los parámetros a fin de facilitar la convergencia.
- e) Puede resultar útil el uso de la operación CS para determinar las fracciones molares que deben ingresarse en el Short Cut.

ÍNDICE TEMÁTICO

- Adjust, [15](#), [82](#), [148](#), [208](#)
- Análisis de ciclos
 - conjunto de corte, [109](#)
 - matriz de ciclos y arcos, [106](#)
- Attach Mode, [14](#)
- Balance, [123](#), [154](#)
- Bomba, [93](#)
- Break Connection, [99](#)
- Cálculo activo / detenido, [18](#), [177](#)
- Calentador, [122](#)
- Caracterización de crudo, [60](#)
- Columna de destilación
 - condensador total / parcial, [172](#), [179](#)
 - corrientes internas, [179](#)
 - definición del tipo de condensador / medio refrigerante, [161](#)
 - especificaciones, [174](#)
 - estimación de la presión de tope, [161](#)
 - método FUG, [162](#)
 - método riguroso, [166](#)
 - reboiler, [166](#), [181](#)
 - sistema experto, [170](#)
- Component Splitter, ver separador de compuestos
- Compresor, [151](#)
- Compuesto hipotético, [54](#)
- Corriente de energía, [15](#)
- Corriente de materia, [12](#)
- Databook, [30](#)
- Definición caso termodinámico, [8](#)
- Divisor, [133](#)
- Enfriador, [122](#)
- Envolvente de fases, [83](#)
- Equilibrio líquido-vapor, [34](#)
- Evaporador, [93](#), [96](#)
- Expander, ver turbina
- Horno, [134](#)
- Ingreso a Ambientes
 - caracterización de crudos (Oil Env.), [64](#)
 - simulación (Simulation Env.), [10](#)
 - termodinámico (Basis Env.), [11](#)
- Intercambiador de calor
 - cálculo de UA, [126](#)
 - cálculo del área, [138](#), [181](#), [225](#)
 - configuración, [128](#)
 - especificaciones, [127](#)
 - grados de libertad, [125](#)
 - modelos disponibles, [130](#)
- Mezclador, [133](#)
- Optimizador
 - función objetivo / restricciones, [223](#)
 - ingreso de variables, [221](#)
 - métodos disponibles, [218](#)
 - parámetros, [220](#)
 - Spreadsheet, [224](#)
- Paleta de objetos, [12](#)
- PFD, [11](#)
- Preferencias, [5](#)
- Reacción
 - catalítica heterogénea, [193](#)
 - cinética, [193](#), [204](#)
 - conjunto de reacciones, [198](#)
 - de conversión, [192](#), [199](#)
 - de equilibrio, [193](#), [194](#)
 - homogénea reversible (Simple Rate), [194](#)
- Reactor
 - de conversión, [187](#), [200](#)
 - de equilibrio, [187](#), [200](#)
 - de Gibbs, [187](#)
 - de rendimiento (Yield Shift Reactor), [188](#)
 - tanque agitado continuo (CSTR), [188](#), [210](#)
 - tubular (Plug Flow Reactor), [188](#), [203](#)
- Recycle, [99](#)
 - cotas internas, [100](#)
 - métodos, [101](#)
- Reportes, [27](#)
- Segmento de cañería
 - accesorios, [144](#), [149](#)
 - ingreso de información, [144](#)
 - modelos disponibles, [149](#)
 - variación de presión admisible, [145](#)
- Selección del paquete termodinámico, [40](#)
- Separador (tanque flash)
 - grados de libertad, [75](#)
 - ingreso de información (Separator), [79](#)
 - tipos disponibles, [79](#)
- Separador de compuestos, [183](#)
- Set, [190](#)
- Short Cut, [162](#)
- Spreadsheet, [135](#)
- Stream-cutter, [156](#)
- Summary, [11](#)
- Tablas, [28](#)
- Turbina, [151](#)
- Utility
 - Boiling Point Curves, [87](#)
 - Envelope, [85](#)
 - Property Table, [87](#)
- Variable de usuario, [208](#)
- Workbook, [11](#), [22](#)

**UNIVERSIDAD NACIONAL
DE LA PLATA**

**UNISIM DESIGN SUITE PROPOSAL
FOR ACADEMIC USAGE**

DATE: OCTOBER 13, 2009

ISSUED BY: DARIO POHL

Confidential Information

This proposal contains proprietary information belonging to Honeywell Inc. The information contained herein is provided for the sole use of Universidad Nacional de La Plata. This proposal has been submitted in confidence and contains trade secrets, financial data, and other information Honeywell deems proprietary and confidential. Acceptance of this document constitutes agreement that Universidad Nacional de La Plata shall not disclose information contained in this proposal to any third party and shall not transmit any documents or copies thereof to any third party, except as may be authorized in writing by Honeywell.

This page intentionally left blank.

TABLE OF CONTENTS

PROPOSAL SUMMARY	1
ACADEMIC PROGRAM OVERVIEW	2
END USER LICENSE AGREEMENT	3

PROPOSAL SUMMARY

Honeywell Process Solutions is pleased to submit this UniSim™ Design Suite Software License and Support Agreement proposal to Universidad Nacional de La Plata for the UniSim™ Design Suite software.

UniSim™ Design Suite products are powerful process design and simulation tools. By using UniSim Design Suite tools, your students will better understand the principles they learn in class. Among many things, they can experiment with the column simulation to see how changes in operating conditions impact the product rate and quality, or even environmental issues; learn phase behavior of a specific system governed by thermodynamic principles; find out whether an existing heat exchanger can meet specific process requirements; predict hydrate formation conditions which might be well above the water freezing temperature; etc.

Through this program, Honeywell is looking for

- Opportunities for coordinating training courses if needed;
- Rapid expansion of the UniSim Design user base;
- Close connection to a pool of talents - next generation of the chemical engineers, trained with UniSim Design tools;
- Increased market awareness;
- Acknowledgement in research publications, and
- Potential university partners for model development and possible commercialization of university research achievements.

More information regarding the UniSim Design Suite can be found at [UniSim Design from Honeywell](#).

ACADEMIC PROGRAM OVERVIEW

The standard academic program offered by Honeywell for the UniSim Design Suite includes the following products:

- UniSim Design – the flagship product for steady-state applications;
- UniSim Design Dynamic option – proven technologies for dynamic applications;
- UniSim ThermoWorkbench – for in-depth thermodynamic study;
- UniSim Heat Exchanger programs – for design and simulation of heat transfer equipment:
 - UniSim Shell-Tube Exchanger Modeler
 - UniSim Crossflow Exchanger Modeler
 - UniSim Plate-Fin Exchanger Modeler
 - UniSim Fired Process Heater Modeler
 - UniSim Plate Exchanger Modeler
 - UniSim FeedWater Heater Modeler
 - UniSim Process Pipeline Modeler

The program includes a **100 user** network based license for the products listed above. To coordinate with the standard academic calendar, the expiry of the license will be July 31 of the year after the last date of signature below, provided that the license shall automatically renew for additional one (1) year periods thereafter unless a party provides written notice of termination to the other party at least thirty (30) days prior to the end of any such period.

Additionally, up to 2 standalone licenses can issued as part of the program as well. These licenses are intended primarily for use by professors/instructors with computers with no access to the network.

This program is offered at **no cost** to registered academic institutions to enable and encourage them to educate their students on the usage of UniSim Design Suite tools.

To indicate acceptance of the terms of this proposal, including acceptance of the End User License Agreement attached to this proposal, please sign below.

Universidad Nacional de La Plata

Signed: 
Name: Viviana SALVADORI
Title: Director Area Deptal I.Qa
Date: 14 - Oct - 2009

Honeywell Process Solutions

Signed: 
Name: Dario Pohl
Title: LAR-Academic Program Leader
Date: October 15, 2009

HONEYWELL END USER LICENSE AGREEMENT

This End User License Agreement (“Agreement”) is a legal contract between Honeywell International Inc., acting through its Honeywell Process Solutions business, having an office at 2500 West Union Hills Drive, Phoenix, AZ 85027-5139 (“Honeywell”), and Licensee. The right to use the Licensed Software is granted only on the condition that Licensee agrees to the following terms.

1. DEFINITIONS.

1.1 “Authorized User” means an individual Licensee employee or independent contractor authorized by Licensee to access and use the Software provided by Honeywell, subject to the terms of this Agreement.

1.2 “Confidential Information” means: (i) the Licensed Software; (ii) the technology, ideas, know how, documentation, processes, algorithms and trade secrets embodied in the Licensed Software; (iii) any software keys related to the Software; and (iv) any other information, whether disclosed orally or in written or magnetic media, that is identified (if oral) or marked (if written) as “confidential,” “proprietary” or with a similar designation at the time of such disclosure. Confidential Information shall not include any information that is: (a) published or otherwise available to the public other than by breach of this Agreement by Licensee; (b) rightfully received by Licensee from a third party without confidential limitations; (c) independently developed by Licensee as evidenced by appropriate records; or (d) known to Licensee prior to its first receipt of same from Honeywell as evidenced by appropriate records. If any Confidential Information must be disclosed to any third party by reason of legal, accounting or regulatory requirements beyond the reasonable control of Licensee, Licensee shall promptly notify Honeywell of the order or request and permit Honeywell (at its own expense) to seek an appropriate protective order.

1.3 “Documentation” shall mean Honeywell’s published user documentation for the Licensed Software, which may be in the form of user manuals and/or other related documentation, in written or electronic object code form.

1.4 “Intellectual Property Rights” means all copyrights, trademarks, trade secrets, patents, mask works and other intellectual property rights recognized in any jurisdiction worldwide, including all applications and registrations with respect thereto.

1.5 “Licensee” means the entity that purchased the license to the Licensed Software solely for use of the Licensed Software at the Licensed Site.

1.6 “Licensed Processor” means a Honeywell-approved processor (which may be a control system or product, a computer, or a specific number of computing devices in a network environment), which processor is owned, leased, or otherwise controlled by Licensee and on which Licensee is authorized to install and use the Software pursuant to the terms and conditions of this Agreement.

1.7 “Licensed Site” means the specific address of Licensee’s facility where the Licensed Processor is located, as specified in Licensee’s Purchase Order.

1.8 “Licensed Software” means the Object Code of the Software identified in Licensee’s Purchase Order and/or for which Licensee has purchased a license under this Agreement, including all updates, revisions, modifications, or changes thereto to the extent licensed by Licensee under this Agreement, and all full or partial copies thereof.

1.9 “Licensed Use” means use of the Object Code form only of Licensed Software by the Authorized Users for the particular purpose as described in the Purchase Order.

1.10 “Object Code” means computer programming code in a form not readily perceivable by humans and suitable for machine execution without the intervening steps of interpretation or compilation.

1.11 “Purchase Order” means an order form submitted by Licensee to obtain rights to use Licensed Software under this Agreement. A Purchase Order may include a purchase order, a work order or other written agreement or contract entered into by Licensee and accepted in writing by Honeywell.

1.12 “Software” means computer programming code, in Object Code and/or Source Code, and Documentation, in written or electronic form, including updates (if any), and all modifications thereto and full or partial copies thereof. For the avoidance of doubt, Software may include Licensed Software and Unlicensed Software.

1.13 “Source Code” means computer programming code in human readable form that is not suitable for machine execution without the intervening steps of interpretation or compilation.

1.14 “Unlicensed Software” means Software that may be included on electronic storage media containing the Licensed Software provided by Honeywell that Licensee is not authorized to access or use under this Agreement.

2 LICENSE GRANT. Subject to Licensee’s compliance with the terms and conditions of this Agreement and payment of any applicable fees, Honeywell hereby grants to Licensee and Licensee accepts a restricted, personal, non-transferable, non-exclusive, internal-use only license, without the right to sublicense, to: (i) use Licensed Software, solely for Licensee’s internal purposes in accordance with the Licensed Use, on Licensed Processor(s), at the Licensed Site; and (ii) make up to two (2) copies (or the number of copies allowed under applicable law) of the Licensed Software in non-printed, machine-readable form, to be used solely for archival or backup purposes (“Archival Copies”). Licensee shall include all copyright and trade secret notices and serial numbers on the Archival Copies, which shall be owned solely by Honeywell or its third-party suppliers.

3. RESTRICTIONS.

3.1 General. Except as expressly permitted by this Agreement, Licensee may not: (i) modify the Licensed Software; or (ii) translate, reverse engineer, decompile, disassemble (except to the extent applicable laws specifically prohibit such restriction) or attempt to derive the Source Code of Software provided to Licensee in Object Code, or create derivative works of the Licensed Software or let any third party do any of the foregoing; or (iii) reproduce the Licensed Software other than as specified above; or (iv) sublicense, rent, lease, loan, timeshare, use in the operation of a service bureau, sell, distribute, disclose, publish, assign or transfer any rights, grant a security interest in, transfer possession of the Licensed Software or electronically transfer the Licensed Software from one computer to another over a network other than Licensee's internal network as permitted under this Agreement; or (v) use the Software, or allow the Software to be used to, process the data of any other party except Licensee; or (vi) perform, publish or release to any third parties any benchmarks or other comparisons regarding the Software; (vii) alter or remove any of Honeywell's or its licensors' copyright or proprietary rights notices or legends appearing on or in the Licensed Software. Licensee shall reproduce such notices on any copies of the Licensed Software Licensee is permitted to make. Licensee is responsible for informing all Authorized Users of the restrictions set forth in this Agreement with respect to use of the Licensed Software.

3.2 Keys and Access. Honeywell agrees to provide to Licensee any Software keys necessary to permit Licensee to gain access to the Licensed Software contained on the media shipped to Licensee. Notwithstanding anything to the contrary in this Agreement, Licensee hereby acknowledges that Licensee shall have no right or license to any Unlicensed Software, that any Unlicensed Software is included therein solely as a matter of administrative convenience, and Licensee further agrees not to attempt to gain access to, or permit any third party to attempt to gain access to, such Unlicensed Software. Licensee shall not disclose the Software keys to any third party. Licensee shall not circumvent, or attempt to circumvent, any license management, security devices, access logs, or other measures provided in connection with the Licensed Software, or permit or assist any Authorized User or any third party to do the same. Licensee agrees not to attempt to modify, tamper with, reverse engineer, reverse compile or disassemble the keys. Upon Licensee's use of a new key for the Software, Licensee represents and warrants that it will not use the superseded key to access the Software.

3.3 Third Party Software. The Licensed Software may contain or be derived from materials of third party licensors. Such third party materials may be subject to restrictions in addition to those listed in this Section 3.0, which restrictions, if any, are included in the documents accompanying such third party software. Licensee agrees that any third party supplier shall have the right to enforce this Agreement with respect to such third party's software.

4. OWNERSHIP. Honeywell and its licensors shall retain exclusive ownership of all worldwide Intellectual Property Rights in and to the Licensed Software. Licensee hereby assigns to Honeywell any such rights Licensee may have or obtain in and to the foregoing. All rights in and to the Licensed Software not expressly granted to Licensee in this Agreement are expressly reserved for Honeywell and its licensors.

5. CONFIDENTIAL INFORMATION. Licensee shall not use or disclose any Confidential Information, except as expressly authorized by this Agreement, and shall protect all such Confidential Information using the same degree of care which Licensee uses with respect to its own proprietary information, but in no event with safeguards less than a reasonably prudent business would exercise under similar circumstances. Licensee shall take prompt and appropriate action to prevent unauthorized use or disclosure of the Confidential Information.

6. TERM AND TERMINATION. This Agreement shall continue for so long as Licensee uses the Licensed Software, provided that this Agreement will immediately terminate upon Licensee's entry into bankruptcy, receivership, insolvency or dissolution proceedings; or upon Licensee's breach of this Agreement, unless Licensee cures such breach within ten (10) days after Honeywell provides written notice of such breach. Upon termination, Licensee agrees: (i) not to use the Licensed Software for any purpose whatsoever; (ii) to return or destroy the Licensed Software and any copy then in Licensee's possession, at the direction of Honeywell; and (iii) to certify to Honeywell that such destruction has taken place. Upon termination Honeywell may repossess all copies of the Licensed Software then in Licensee's possession or control. These remedies shall be cumulative and in addition to any other remedies available to Honeywell. The following Sections shall survive any termination of this Agreement: Sections 1, 3.1, 3.3, 4, 5, 6, 8, 9.2, 10, 11, and 12.

7. SUPPORT. The Software license fees do not include support, installation or training. Support, installation and training services, to the extent offered by Honeywell, may be separately purchased at Honeywell's then-current rates.

8. LICENSEE OBLIGATIONS.

8.1 Records. Licensee shall maintain complete, current and accurate records documenting the location of the Licensed Software (in all forms) in Licensee's possession.

8.2 Compliance Verification. To ensure compliance with the terms of this Agreement, Honeywell or its designated representative shall have the right to: (i) request that Licensee send a written certification of compliance with the terms and conditions of this Agreement within thirty (30) days of Honeywell's request; and (ii) conduct an inspection and audit upon reasonable notice of the records set forth in Section 8.1 of this Agreement, electronic logs of access to the Software, and the relevant books and records of Licensee, and to obtain true and correct photocopies thereof, during regular business hours at Licensee's offices and in such a manner as not to interfere unreasonably with Licensee's normal business activities. In no event shall such certifications be requested or audits be conducted hereunder more frequently than once every six (6) months. If any such audit should disclose any underpayment of fees, Licensee shall promptly pay Honeywell such underpaid amount, together with interest thereon at a rate of one and one-half percent (1.5%) per month or partial month during which such amount was owed and unpaid, or the highest rate allowed by law, from the date such amount originally became due until finally paid. If the audit reveals that Licensee has underpaid Honeywell by five percent (5%) or more of the amount owed, Licensee shall immediately reimburse Honeywell for its reasonable costs and expenses associated with such audit.

9. LIMITED WARRANTY; WARRANTY DISCLAIMER.

9.1 Limited Warranty. If the license to the Licensed Software was purchased from a party other than Honeywell, Honeywell disclaims all warranties for the Licensed Software (as further described in Section 9.2) and the warranty, if any, shall be provided solely by the party from which the license was purchased. If the license to the Licensed Software was purchased directly from Honeywell, Honeywell warrants that the media on which the Licensed Software is delivered will be free from defects in materials or workmanship for a period of ninety (90) days from the date of shipment of such media to Licensee ("Warranty Period"). If during the Warranty Period the media on which Licensed Software is delivered proves to be defective, Honeywell will repair or replace such media, at Honeywell's option, as Licensee's sole remedy for any breach of warranty hereunder. Licensee assumes full responsibility for: (i) the selection of the Licensed Software; (ii) the proper installation and use of the Licensed Software; (iii) verifying the results obtained from the use of the Licensed Software; and (iv) taking appropriate measures to prevent loss of data. Honeywell does not warrant that the quality or performance of the Licensed Software will meet Licensee's requirements or that Licensee will be able to achieve any particular results from use or modification of the Licensed Software or that the Licensed Software will operate free from error.

9.2 Warranty Disclaimer. EXCEPT AS EXPRESSLY SET FORTH IN THIS SECTION 9, HONEYWELL AND ITS LICENSORS DISCLAIM ALL WARRANTIES, EXPRESS, IMPLIED AND STATUTORY INCLUDING, WITHOUT LIMITATION, THE IMPLIED WARRANTIES OF MERCHANTABILITY, FITNESS FOR A PARTICULAR PURPOSE, TITLE AND NON-INFRINGEMENT OF THIRD PARTY RIGHTS. NO ORAL OR WRITTEN INFORMATION OR ADVICE GIVEN BY HONEYWELL, ITS DEALERS, DISTRIBUTORS, AGENTS OR EMPLOYEES SHALL IN ANY WAY INCREASE THE SCOPE OF THIS WARRANTY. Some jurisdictions do not allow the limitation or exclusion of implied warranties or how long an implied warranty may last, so the above limitations may not apply to Licensee. This warranty gives Licensee specific legal rights and Licensee may have other rights that vary from jurisdiction to jurisdiction.

10. INFRINGEMENT INDEMNITY. Honeywell will defend any suit against Licensee to the extent based on a claim that the Licensed Software as delivered by Honeywell infringes a valid United States patent or copyright, and indemnify for any final judgment assessed against Licensee resulting from such suit, provided that Licensee notifies Honeywell at such time as it is apprised of the third-party claim, and agrees to give sole and complete authority, information and assistance (at Honeywell's expense) for the defense and disposition of the claim. Honeywell will not be responsible for any compromise or settlement made without Honeywell's consent. The foregoing notwithstanding, Honeywell shall have no liability for any claim of infringement based on: (a) use of other than the current release of the Licensed Software if such claim would have been avoided by the use of the then-current release provided Honeywell has announced the release prior to the initiation of the infringement claim; (b) any modification of the Licensed Software by an entity other than Honeywell; (c) any use or combination of the Licensed Software with any program, data or equipment not supplied by Honeywell; (d) any use of the Licensed Software other than as expressly permitted in this Agreement; (e) products or processes developed pursuant to Licensee's direction, design, or specification; or (f) any settlement or compromise of such claim made without Honeywell's written consent. Further, Licensee agrees to indemnify and defend Honeywell to the same extent and subject to the same restrictions set forth in Honeywell's obligations to Licensee as set forth in this "Infringement Indemnity" section for any suit against Honeywell based upon a claim of infringement resulting from (a), (b), (c), (d), (e), or (f) above. In the event that the Licensed Software is held in any such suit to infringe such a right and its use is enjoined, or if in the opinion of Honeywell the Licensed Software is likely to become the subject of such a claim, Honeywell at its own election and expense will either (i) procure for Licensee the right to continue using the Licensed Software or (ii) modify or replace the Licensed Software so that it becomes non-infringing while giving substantially equivalent performance. In the event that (i) or (ii) above are not, in Honeywell's sole determination, obtainable using reasonable commercial efforts, then Honeywell may terminate this Agreement and refund the amount Licensee paid Honeywell under this Agreement for the Licensed Software which is the subject of such claim, less a reasonable charge for Licensee's past beneficial use based on depreciation of the Licensed Software on a straight line basis over a period of five (5) years from the effective date of this Agreement. THIS SECTION STATES LICENSEE'S SOLE RECOURSE AND EXCLUSIVE REMEDY AND HONEYWELL'S ENTIRE LIABILITY FOR ANY CLAIM OF INFRINGEMENT.

11. LIMITATION OF LIABILITY. HONEYWELL AND ITS LICENSORS SHALL NOT BE LIABLE FOR ANY DIRECT, INCIDENTAL, GENERAL, PUNATIVE, SPECIAL, INCIDENTAL, CONSEQUENTIAL OR INDIRECT DAMAGES OF ANY KIND (INCLUDING DAMAGES FOR INTERRUPTION OF BUSINESS, PROCUREMENT OF SUBSTITUTE GOODS, LOSS OF PROFITS, OR THE LIKE) REGARDLESS OF THE FORM OF ACTION WHETHER IN CONTRACT, TORT (INCLUDING NEGLIGENCE), STRICT PRODUCT LIABILITY OR ANY OTHER LEGAL OR EQUITABLE THEORY EVEN IF HONEYWELL HAS BEEN ADVISED OF THE POSSIBILITY OF SUCH DAMAGES. IN NO EVENT WILL HONEYWELL'S AGGREGATE CUMULATIVE LIABILITY FOR ANY CLAIMS ARISING OUT OF OR RELATED TO THIS AGREEMENT EXCEED THE AMOUNTS PAID BY LICENSEE FOR THE LICENSED SOFTWARE. THE LIMITED WARRANTY, LIMITED REMEDIES, WARRANTY DISCLAIMER AND LIMITED LIABILITY ARE FUNDAMENTAL ELEMENTS OF THE BASIS OF THE BARGAIN BETWEEN HONEYWELL AND LICENSEE. HONEYWELL WOULD NOT BE ABLE TO PROVIDE THE SOFTWARE WITHOUT SUCH LIMITATIONS.

12 GENERAL.

12.1 Governing Law and Forum. This Agreement shall be governed in all respects by the laws of the United States of America and the State of New York without regard to conflicts of law principles. The parties agree that the United Nations Convention on Contracts for the International Sale of Goods is specifically excluded from application to this Agreement. All disputes arising under this Agreement shall be brought exclusively in the state or federal courts in New York, New York, as permitted by law. Licensee consents to the personal jurisdiction of the above courts.

12.2 Injunctive Relief. It is understood and agreed that, notwithstanding any other provisions of this Agreement, breach of the provisions of this Agreement by Licensee may cause Honeywell irreparable damage for which recovery of money damages would be inadequate, and that Honeywell shall therefore be entitled to obtain timely injunctive relief to protect Honeywell's rights under this Agreement in addition to any and all remedies available at law.

12.3 Notices. All notices to Honeywell shall be in writing and shall be directed to:

Honeywell International Inc.

Honeywell Process Solutions

2500 West Union Hills Drive

Phoenix, AZ 85027-5139

Attn: General Counsel

12.4 No Agency. Nothing contained herein shall be construed as creating any agency, employment relationship, partnership, principal-agent or other form of joint enterprise between the parties.

12.5 Force Majeure. Neither party shall be liable hereunder by reason of any failure or delay in the performance of its obligations hereunder (except for the payment of money) on account of strikes, shortages, riots, insurrection, fires, flood, storm, explosions, acts of God, war, governmental action, labor conditions, earthquakes, material shortages or any other cause which is beyond the reasonable control of such party. Except for payment obligations, neither party will be liable to the other for any failure to meet its obligations due to any cause beyond the non-performing party's reasonable control. If the inability to perform continues for longer than 90 days, either party may terminate this Agreement by providing written notice to the other party and Licensee will pay Honeywell for products delivered and services performed prior to termination. Force majeure events may include but are not limited to: (1) government embargoes, (2) blockades, (3) seizure or freeze of assets, (4) delays or refusals to grant an export license or the suspension or revocation thereof, (5) any other acts of any government that would limit the ability for contract performance, (6) fires, earthquakes, floods, severe weather conditions, (7) any other acts of God, (8) quarantines or regional medical crises, (9) labor strikes or lockouts, (10) riots, strife, insurrection, civil disobedience, armed conflict, terrorism or war, declared or not (or impending threat of any of the foregoing, if such threat might reasonably be expected to cause injury to people or property), (11) shortages or inability to obtain materials or components and (12) inability or refusal by Licensee's directed third party suppliers to provide Honeywell parts, services, manuals, or other information necessary to the goods or services to be provided by Honeywell under this Agreement.

12.6 Waiver. The failure of either party to enforce at any time any of the provisions of this agreement shall not be construed to be a continuing waiver of any provisions hereunder nor shall any such failure prejudice the right of such party to take any action in the future to enforce any provisions hereunder.

12.7 Severability. In the event any provision of this Agreement is determined to be illegal, invalid, or unenforceable, the validity and enforceability of the remaining provisions of this Agreement will not be affected and, in lieu of such illegal, invalid, or unenforceable provision, there will be added as part of this Agreement one or more provisions as similar in terms as may be legal, valid and enforceable under applicable law.

12.8 Headings. The section headings appearing in this Agreement are inserted only as a matter of convenience and in no way define, limit, construe, or describe the scope or extent of such section or in any way affect this Agreement.

12.9 Government End Users. The Software is a "commercial item" as that term is defined in 48 C.F.R. 2.101, consisting of "commercial computer software" and "commercial computer software documentation" as such terms are used in 48 C.F.R. 12.212. Consistent with 48 C.F.R. 12.212 and 48 C.F.R. 227.7202-1 through 227.7202-4, Licensee will provide the Software to U.S. Government End Users only pursuant to the terms and conditions therein and herein.

12.10 Assignment. Licensee may not delegate, assign or transfer this Agreement, the license(s) granted or any of Licensee's rights or duties hereunder, including by operation of law or by way of merger (regardless of whether Licensee is the surviving entity) or acquisition, and any attempt to do so, without Honeywell's express prior written consent, which shall not be unreasonably withheld, shall be void. Honeywell may assign this Agreement, and its rights and obligations hereunder, in its sole discretion. Any attempt to assign or delegate in violation of this clause will be void.

12.11 Compliance with Laws Software and technical information delivered under this Agreement is subject to U.S. export control laws and may be subject to export or import regulations in other countries. Licensee agrees to strictly comply with all such laws and regulations. Licensee will obtain import, export, re-export approvals and licenses required for Software, services and technical data delivered and will retain documentation to support compliance with those laws and regulations. Honeywell will not be liable to Licensee for any failure to provide Software, services, transfers or technical data as a result of government actions that impact Honeywell's ability to perform, including (1) the failure to provide or the cancellation of export or re-export licenses; (2) any subsequent interpretation of applicable import, transfer or export law or regulation after the date of any order or commitment that has a material adverse effect on Honeywell's performance; or (3) delays due to Licensee's failure to follow applicable import, export,

transfer, or re-export laws and regulations. Licensee shall not sell, transfer, export or re-export any Software, services or technical data for use in activities that involve the design, development, production, use or stockpiling of nuclear, chemical or biological weapons, or missiles, nor use Software, services or technical data in any facility which engages in activities relating to such weapons or missiles. In addition, Software, services or technical data may not be used in connection with any activity involving nuclear fission or fusion, or any use or handling of any nuclear material until Licensee, at no expense to Honeywell, has insurance coverage, indemnities, and waivers of liability, recourse and subrogation, acceptable to Honeywell and adequate in Honeywell's opinion to protect Honeywell against any type of liability.

12.12 Language. This Agreement is in the English language only, which language shall be controlling in all respects, and all versions of this Agreement in any other language shall be for accommodation only and shall not be binding on the parties to this Agreement. All communications and notices made or given pursuant to this Agreement, and all documentation and support to be provided, unless otherwise noted, shall be in the English language.

12.13 Delivery. Honeywell, in its discretion, will deliver all Software either (i) by physical delivery, in which case F.O.B. Origin, freight allowed, shall apply or (ii) by electronic means, in which case Honeywell's obligation to deliver the Software is completed at such time as Honeywell makes the Software available on a specific Honeywell server and gives Licensee a method of accessing and downloading Software.

12.14 Independent Contractors. The parties specifically acknowledge and agree that, in the exercise of their rights and the performance of their duties under this Agreement, they are and will be independent contractors. Neither party will bind or attempt to bind the other party to any contract or other obligation. Neither party will represent to any third party that it is authorized to act on behalf of, or bind, the other party.

12.15 Country Specific Terms. If due to local law Honeywell may not enforce the prohibitions in Section 3.1(ii), then 3.1(ii) shall be deleted and the following shall be added to the end of Section 3.1: Licensee agrees that it will not, and shall not authorize others to, translate, reverse engineer, decompile, disassemble or otherwise decode or alter, or create derivative works based on the Software without Honeywell's express written consent, except to the extent expressly permitted by mandatory provisions of applicable law (including national laws implementing Directive 91/250/EEC on the legal protection of computer programs) in order to gain certain information for certain limited purposes specified in such laws, provided that Licensee shall not exercise its rights under such laws, unless and until the Licensee has first requested the required information from Honeywell in writing, and Honeywell, at its sole discretion, has not complied with Licensee's request within a commercially reasonable period of time.

12.16 Entire Agreement; Modification. This Agreement constitutes the entire agreement between Licensee and Honeywell and supersedes in their entirety any and all oral or written agreements previously existing between Licensee and Honeywell with respect to the subject matter hereof. The terms and conditions of any purchase order or other instrument issued by Licensee in connection with this Agreement shall be of no force or effect. This Agreement may only be amended or supplemented by a writing that refers explicitly to this Agreement and that is signed by duly authorized representatives of Licensee and Honeywell. The preprinted terms and conditions of any Purchase Order issued by Licensee in connection with this Agreement shall not be binding to Honeywell and shall not be deemed to modify this Agreement.

THE LICENSED SOFTWARE AND ACCOMPANYING DOCUMENTATION ARE PROTECTED BY UNITED STATES COPYRIGHT LAW AND INTERNATIONAL TREATY. UNAUTHORIZED REPRODUCTION OR DISTRIBUTION IS SUBJECT TO CIVIL AND CRIMINAL PENALTIES.

BY INSTALLING OR USING THE LICENSED SOFTWARE, YOU ACKNOWLEDGE THAT YOU HAVE READ THIS AGREEMENT, UNDERSTAND IT AND AGREE TO BE BOUND BY ITS TERMS AND CONDITIONS.

AMENDMENT TO THE HONEYWELL END USER LICENSE AGREEMENT FOR ACADEMIC USE ONLY

This amendment (the "Amendment") to the Honeywell End User License Agreement (the "HEULA") is a legal agreement between Honeywell International Inc. ("Honeywell") and an Academic User approved by Honeywell to receive the academic offering ("Academic Program").

This Amendment allows for the not-for-profit instructional and non-commercial research use by an Academic User of the Software provided under the HEULA.

By installing, copying, or otherwise using the Software, the Academic User agrees to be bound by the terms of the HEULA and this Amendment. IF THE ACADEMIC USER DOES NOT AGREE TO BE BOUND BY THE AGREEMENT AND THE AMENDMENT, DO NOT INSTALL, COPY OR USE THE SOFTWARE, AND LICENSEE MAY RETURN THE PACKAGE WITHIN THIRTY (30) DAYS AFTER SHIPMENT TO THE ENTITY FROM WHICH THE LICENSE WAS PURCHASED, FOR A REFUND OF THE AMOUNT LICENSEE PAID FOR THE LICENSED SOFTWARE.

1. **Definitions.** Capitalized terms shall have the same meaning in this Amendment as they have in the HEULA, except as may be otherwise set out herein. The following definitions are added for the purposes of this Amendment:
 - 1.1 **"Academic User"** shall mean a Department within a not-for-profit educational institution that (a) has been duly accredited by a widely-recognized accreditation authority as an educational institution organized and operated exclusively for the sole purpose of teaching its matriculating students; and (b) has been accepted by Honeywell, in its sole discretion, for participation in the Academic Program.
 - 1.2 **"Department"** shall mean any department or other reasonably discernable division within an accredited educational institution which is led by one or more chairperson(s) or department head(s), as may be designated by such accredited educational institution. A Department may be identifiable, for example, by having specific administrative responsibilities for the delivery of educational majors and minors, such as an electrical engineering department or a computer science department.
 - 1.3 **"Faculty"** shall mean any personnel duly engaged by the Academic User to teach or instruct Students and/or to conduct research on behalf of the Academic User.
 - 1.4 **"Instructional Use"** shall mean conducting educational classes, labs or related programs for teaching and/or learning the Software or concepts related to the Software.
 - 1.5 **"Research Use"** shall mean conducting not for profit research projects.
 - 1.6 **"Staff"** shall mean persons providing IT support to Academic User.
 - 1.7 **"Students"** shall mean students duly enrolled for educational courses offered for credit and made available or administered by the Academic User.
 - 1.8 **"Use"** shall mean the non-commercial use of the Software by Faculty and/or Students solely for Instructional Use or Research Use. "Use" under this Amendment shall not include the use of the Software for general business purposes or in the performance of paid services.
2. **Amended HEULA Paragraphs.** Solely for the purposes of this Amendment, the HEULA is amended as follows:
 - 2.1 Paragraph 2 of the HEULA is deleted in its entirety and replaced by the following:
 2. **Grant of Educational and Research Use License.** Subject to Licensee's compliance with the terms and conditions of the Agreement and Amendment, and payment of any applicable fees, Honeywell hereby grants to Licensee and Licensee accepts a restricted, personal, non-transferable, non-exclusive, internal-use only license:
 - (a) to use Licensed Software, solely for Licensee's internal purposes in accordance with the Use, on Licensed Processor(s), at the Licensed Site;
 - (b) to install the Software on Licensed Processor(s) or personal computers (e.g. hard drives) located on Academic User premises and permit access to the Software on such Licensed Processor(s) or personal computers by Faculty and Students solely for the Use; and

(c) to make no more than ten (10) additional copies of the Software to use as backup copies or be loaned free of charge to Students and Faculty solely for the Use, provided that all such copies shall be owned solely by Honeywell or its third-party suppliers. The additional copies specified in this Section may be loaned by Academic User to Faculty and/or Students (a) for installation on personal computers on Academic User premises; and/or (b) for installation on personal and/or off site computers of Faculty and/or Students. No copies of the Software may be loaned or otherwise distributed to any parties other than those specifically designated herein. No Faculty Member or Student may loan or further distribute a copy of the Software which has been loaned to them. Academic User will stop providing the Software to anyone who ceases being one of Academic User's Staff, Faculty, or Student and will demand return or destruction of the Software by such Staff, Faculty or Student. Academic User must have all Staff, Faculty, and Students to whom Academic User provides any copies of the software agree in writing that the use of the Software is strictly governed by the terms of the Agreement and Amendment and that the Software is to be used solely pursuant to the Use right granted herein, regardless of any license agreement accompanying the Software. Academic User must keep records of the number of downloads of the Software from Academic User's servers, and records of the Staff, Faculty, and Students to whom Academic User provides media containing the Software. Academic User will permit Honeywell to inspect such records upon request. Academic User will use its best efforts to prevent use of the Software by anyone other than Academic User's Staff, Faculty, and Students or for any purpose not permitted in these terms. If Honeywell notifies Academic User or Academic User learns that any Staff, Faculty, or Student has violated these terms, Academic User shall demand immediate return of or confirm destruction of any Software in the possession or under the control of such Staff, Student or Faculty member. Academic User will be held responsible for unauthorized use of the Software.

(d) All rights not expressly granted herein are reserved to Honeywell.

2.2 Section 6 of the Agreement is deleted in its entirety and replaced with the following paragraph:

6. TERM AND TERMINATION. This Agreement will expire on July 31 of the year after the Licensed Software is initially shipped to the Academic User, provided, however, that it will automatically renew for additional one (1) year periods thereafter unless a party provides written notice of termination to the other party at least thirty (30) days prior to the end of any such period. This Agreement will also terminate immediately if the user no longer qualifies as an Academic User. Whether Licensee qualifies as an Academic User will be in Honeywell's sole discretion. This Agreement may also be terminated by Honeywell if Licensee breaches this Agreement and Licensee does not cure such breach within ten (10) days after Honeywell provides written notice of such breach. Finally, Honeywell may terminate this Agreement if Academic User does not enforce the compliance of its Staff, Faculty or Students with the terms of the Agreement and Amendment. Upon termination, Licensee and the user agree: (i) that all licenses granted in the Agreement will terminate immediately; (ii) not to use the Licensed Software for any purpose whatsoever; (iii) that Academic User may no longer distribute the Software to Students or Faculty for installation on off site personal computers; (iv) that Academic User will discontinue use of the Software on Academic User internal servers and on Academic User on-site lab machines; (v) to return or destroy the Licensed Software and any copy then in Licensee's possession, at the direction of Honeywell; and (vi) to certify to Honeywell that such destruction has taken place. Upon termination Honeywell may repossess all copies of the Licensed Software then in Licensee's possession or control. These remedies shall be cumulative and in addition to any other remedies available to Honeywell. The following Sections shall survive any termination of this Agreement: Sections 1, 3.1, 3.3, 4, 5, 6, 8, 9.2, 10, 11, and 12.

2.3 Section 12.10 of the Agreement is deleted in its entirety and replaced with the following paragraph:

12.10 Assignment. Licensee may not delegate, assign or transfer this Agreement, the license(s) granted or any of Licensee's rights or duties hereunder, including by operation of law or otherwise, and any attempt to do so shall be void. Honeywell may assign this Agreement, and its rights and obligations hereunder, in its sole discretion. Any attempt to assign or delegate in violation of this clause will be void.

3. **Additional Paragraphs.** The following restrictions are added to the HEULA:

3.1 Academic User shall ensure that each copy of the Software made under this Amendment shall be a true and complete copy, and include all copyright and trademark notices.

3.2 Academic User shall not sell, rent, lease, or transfer the Software to any third party and may not lend the Software other than as authorized by the HEULA and this Amendment.

3.3 Honeywell shall deliver the Software to one (1) person who is a full time employee of Academic User department which has been accepted into the Academic Program and such employee will administer or manage Academic User use of the Software under the HEULA and this Amendment.

3.4 In order to install certain components of the Software, Academic User may need an Academic Alliance Software Key ("Software Key"). The Software Key will be assigned to Academic User and must be kept secure. Academic User may disclose the Software key to those Student(s) and Faculty members to whom Academic User distributes copies of the Software as provided in Section 2 if required. It is Academic User's responsibility to make the Staff, Student(s) and Faculty aware of the restrictions and security issues related to use of the

Software key. Academic User will be held responsible for unauthorized use of the Software key by such Staff, Student(s) and/or Faculty members.

- 3.5 In no event shall Academic User use the Software (i) in any processing operations; (ii) to control a live process; (iii) in any for-profit or commercial activities; or (iv) to develop or maintain its own administrative or IT systems.
- 3.6 If the Software requires a key to install or access it, Academic User is responsible for the use of the keys assigned to it. Academic User may only disclose keys to your Staff, Faculty, and Students. Academic User will use best efforts to make those persons are aware of the restrictions on use of the keys. If Honeywell informs Academic User or Academic User learns that any of its Faculty, Students, or Staff are improperly using keys, Academic User will notify them that may not use the Software or keys any more, and that they must return or destroy all copies of the Software in their possession.
- 3.7 Academic User shall not disclose or otherwise make known to any third party any information pertaining to Software performance, function, use, quality, defects, bugs, or deficiencies of any kind without prior written consent from Honeywell

4. **Effect of Amendment.**

Except as amended herein, all terms and conditions of the HEULA shall remain in full force and effect. To the extent any terms or conditions of the conflict with or are inconsistent with this Amendment, the terms of this Amendment shall prevail to the extent needed to fulfill the limited purposes of this Amendment.