

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR
FACULTAD DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA E INGENIERÍA DE ALIMENTOS



**APLICACIÓN DEL PROGRAMA “COCO SIMULATOR” EN LA
SIMULACIÓN DE COMPONENTES DE PROCESOS DE
INDUSTRIAS QUÍMICAS EN EL SALVADOR, COMO UNA
HERRAMIENTA DIDÁCTICA PARA LA INGENIERÍA QUÍMICA**

PRESENTADO POR:

**CRISTINA MARCELA CORTEZ DE LA O
NOEMÍ ABIGAIL SABALLOS SÁNCHEZ
FABIO MATEO SORTO MERINO**

PARA OPTAR AL TÍTULO DE:

INGENIERO QUÍMICO

CIUDAD UNIVERSITARIA, ENERO 2017

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR

RECTOR INTERINO:

LIC. JOSÉ LUIS ARGUETA ANTILLÓN

SECRETARIA GENERAL:

DRA. ANA LETICIA ZAVALETA DE AMAYA

FACULTAD DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA

DECANO:

ING. FRANCISCO ANTONIO ALARCÓN SANDOVAL

SECRETARIO:

ING. JULIO ALBERTO PORTILLO

ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA E INGENIERÍA DE ALIMENTOS

DIRECTORA:

INGA. TANIA TORRES RIVERA

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR
FACULTAD DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA
ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA E INGENIERÍA DE ALIMENTOS

Trabajo de Graduación previo a la opción al Grado de:

INGENIERO QUÍMICO

Título:

**APLICACIÓN DEL PROGRAMA “COCO SIMULATOR” EN LA
SIMULACIÓN DE COMPONENTES DE PROCESOS DE INDUSTRIAS
QUÍMICAS EN EL SALVADOR, COMO UNA HERRAMIENTA
DIDÁCTICA PARA LA INGENIERÍA QUÍMICA.**

Presentado por:

**CRISTINA MARCELA CORTEZ DE LA O
NOEMÍ ABIGAIL SABALLOS SÁNCHEZ
FABIO MATEO SORTO MERINO**

Trabajo de Graduación Aprobado por:

Docente Director:

ING. JOSÉ ANIBAL ERAZO

San Salvador, Enero 2017

Trabajo de Graduación Aprobado por:

Docente Director:

ING. JOSÉ ANIBAL ERAZO

DEDICATORIA

Todo lo puedo en Cristo que me fortalece (Filipenses 4:13).

Las palabras sobran para expresar la felicidad que siento de poder culminar esta etapa en mi vida. Primero que nada, agradecer a Dios Todo Poderoso, nada de esto hubiera sido posible sin la ayuda de Él que me brindó sabiduría y me ha guiado a lo largo de mis veinticuatro años, gracias a Él que me ha permitido llegar hasta donde estoy y darme la fuerza siempre para seguir adelante.

También quiero dedicar este triunfo a mis papás: Dora Cristina de Cortez y Santos Adalberto Cortez, porque este logro también es de ustedes, todo su sacrificio valió la pena. Gracias mamá por ser mi amiga, por siempre escucharme y darme tu consejo, por todas esas veces que te levantaste temprano para ponerme almuerzo, gracias por siempre llevarme en tus oraciones, sos una madre ejemplar. A mi papá por siempre apoyarme en cada una de mis decisiones, por siempre cuidar de mi, y es que a pesar de todo siempre has brindado lo mejor de vos a tu familia y nunca nos ha hecho falta nada, sé que siempre puedo contar con vos. Los amo con el alma.

A mis hermanos Edgar, Tito y René, por siempre ofrecerme su consejo y sabiduría, porque siempre me han animado a ser mejor cada día. Me siento orgullosa de tener hermanos mayores como ustedes. Los admiro un montón, cuando sea grande quiero ser como ustedes.

A mi amiga, compañera de carrera, compañera de tesis y ahora colega: Abigail. Quien iba a pensar que después de tantas desveladas, risas, llantos, enojos, decepciones, ilusiones y tantas cosas más, lo hemos logrado. Sos una gran persona y me alegra podamos compartir este triunfo juntas, te lo he dicho muchas veces pero no importa recordarlo una vez más: gracias por siempre estar ahí para mí, la universidad no hubiese sido lo mismo sin vos. Ahora solo nos queda conseguir el vestido y rogar a Dios que el día de la graduación no esté la moda que el Lic. Gálvez pronosticó.

Mil gracias también a vos Ingeniero Carlitos Cruz. Gracias por ser un gran compañero, amigo y hasta asesor. Siempre te voy a agradecer la paciencia que me tuviste este tiempo y por siempre estar dispuesto a explicarme todo lo que no entendía.

A todas esas personas que conocí a lo largo de este trayecto y con las cuales compartí bellos momentos. Porque gracias a ustedes el estrés de la universidad era más llevadero y porque de alguna u otra forma se ganaron una parte de mí. Siempre voy a estar agradecida con la vida por haberlos puesto en mi camino y haberme brindado su amistad. En especial a ustedes Emily, Xenia, Jocelyn y Pamela.

A mis amigas del alma: Gabriela, Hazel, Kathia, Jessica, Giselle y Gabriela A. Gracias por la paciencia que me han tenido, por comprender las veces que tuve que decir no a alguna salida por quedarme estudiando, el esfuerzo ha dado sus frutos y de ahora en adelante espero recompensarles todas esos momentos que no estuve presente. Que la vida nos alcance para compartir más tiempo juntas.

A los docentes de la Escuela de Ingeniería Química e Ingeniería de Alimentos, por haber compartido y transmitido sus conocimientos, en especial a la Inga. Rico por su apoyo y ayuda en este trabajo de graduación.

Y a toda mi demás familia y amigos que de alguna u otra forma estuvieron presentes a lo largo de este caminar.

“No sólo no hubiera sido nada sin ustedes, sino con toda la gente que estuvo a mi alrededor desde el comienzo; algunos siguen hasta hoy. ¡Gracias... totales!”.

Cristina Marcela Cortez de la O.

DEDICATORIA

Desde el inicio de mi carrera puse todos mis sueños en las manos de Dios y gracias a Él he llegado a este momento. Su mano me sostuvo en todo momento. Agradezco a mi familia por el apoyo emocional y espiritual que me han brindado, porque a pesar de las dificultades mi educación siempre fue su prioridad. Darme la oportunidad de estudiar es el mejor regalo que pudieron otorgarme. Doy gracias a **mi papá**, por poner de lado sus necesidades y comodidades para que yo pudiera cumplir mi sueño de ser ingeniera química. A mi hermano **Fabio**, por hacer mis días más felices y estar siempre a mi lado para celebrar cada logro obtenido.

A mi mami, le doy gracias por dibujarme puntitos para que yo aprendiera a dibujar la letra “O”, por desvelarse para hacer maquetas y carteles, le agradezco por creer en mí cuando decidí iniciar esta carrera y nunca dudar en que la terminaría, por intentar desvelarse conmigo cuando estudiaba para los parciales más difíciles. Su esfuerzo y amor me mantienen en pie siempre, ella fue que quien me guio a través de estos 24 años, es mi modelo a seguir y mi inspiración en cada paso que doy.

Doy gracias por todos los amigos que pude conocer a lo largo de esta carrera, con los cuales crecimos, aprendimos, lloramos y celebramos juntos. A **Carlitos** por su asesoría y paciencia. **A Marisela**, que es un ángel por absorber todo mi mal humor y devolverme alegrías, le agradezco por brindarme su Gran amistad y compartir nuestros enojos (siempre entre risas).

A mi amiga y compañera en este trabajo, **Cristina**, le doy gracias por su amistad **incondicional**, con su ejemplo ella me ha motivado e impulsado a ser mejor cada día, todos los momentos de tristeza vividos a su lado terminan en risas y unas cuantas lágrimas, cada materia que superamos juntas representa un cúmulo de buenos recuerdos; me siento afortunada por finalizar este trabajo y esta carrera a su lado. Solo me queda decir: Gracias por tu gran corazón Cris.

“Pon en manos del Señor todas tus obras, y tus proyectos se cumplirán. Proverbios 16:3”.

Noemí Abigail Saballos Sánchez.

DEDICATORIA

A mi familia,

Por apoyarme y guiarme a lo largo de ésta y todas las etapas de mi vida.

A mis amigos,

Porque siempre me muestran con claridad lo mejor de mí y todo lo que aún me falta por crecer.

A las personas,

A todas las que formaron parte de este proyecto en mi vida y que de una u otra manera me hicieron crecer como ser humano.

Fabio Mateo Sorto Merino.

RESUMEN

COCO Simulator es un programa de simulación de uso libre y su utilización a nivel académico representa una oportunidad accesible para estudiantes y docentes.

En el trabajo se realizó la simulación de componentes de dos procesos industriales utilizando el programa COCO Simulator, siendo estos:

1. Proceso de producción de ácido sulfúrico.
2. Proceso de producción de azúcar a partir de caña.

La metodología de simulación desarrollada fue la siguiente: selección y estudio del proceso, determinación de variables relevantes, identificación de las sustancias que participan en el proceso, selección, parametrización y adecuación del equipo así como la identificación de otros parámetros requeridos para poder desarrollar la simulación.

Posteriormente se introdujo la información requerida al programa, de forma ordenada y sistemática, procediéndose a realizar la simulación respectiva.

Al tener los resultados de las simulaciones se realizaron comparaciones de los datos obtenidos contra datos reales, además, se analizó en base a criterios objetivos, la conveniencia de utilizar este programa con fines educativos.

Como un complemento al trabajo desarrollado se elaboró una guía introductoria sobre el uso de COCO Simulator aplicado a procesos industriales.

ÍNDICE GENERAL

RESUMEN.....	i
ÍNDICE GENERAL	ii
ÍNDICE DE FIGURAS.....	viii
ÍNDICE DE TABLAS.....	xi
OBJETIVOS.....	1
CAPÍTULO I	
1.0. Generalidades de la industria química	2
1.1. Definición de industria química	2
1.2. Panorama mundial de la industria química	3
1.3. Situación actual: industrias químicas que utilizan procesos automatizados en El Salvador	4
CAPÍTULO II	
2.0. Descripción de procesos.....	6
2.1. Generalidades de los procesos.....	6
2.2. Clasificación de los procesos.....	7
2.2.1. Clasificación de los procesos por su naturaleza	7
2.2.2. Clasificación de los procesos por su tamaño	8
2.3. Documentación de los procesos	9
2.3.1. Diagrama de flujo	9
2.3.2. Ficha de proceso o de sub proceso	11
2.3.2.1. Contenido de la ficha de proceso o de sub proceso	12
2.3.3. Procedimientos.....	15

2.4. Medición.....	15
--------------------	----

CAPÍTULO III

3.0. Descripción de industrias seleccionadas	17
3.1. Descripción de la industria de producción de ácido sulfúrico.....	17
3.1.1. Propiedades y aplicaciones del ácido sulfúrico	17
3.1.2. Proceso de producción del ácido sulfúrico	19
3.1.2.1. Obtención de SO ₂ en una mezcla de gases.....	21
3.1.2.2. Oxidación del SO ₂ para convertirlo en SO ₃	22
3.1.2.3. Absorción de SO ₃	25
3.2. Descripción de la industria azucarera	28
3.2.1. Definición y estructura química del azúcar	28
3.2.2. Variedades de la caña de azúcar	30
3.2.3. Composición química de la caña de azúcar	30
3.2.4. Siembra y cosecha de la caña de azúcar.....	32
3.2.5. Procesos de producción de azúcar a partir de caña	33
3.2.5.1. Extracción del jugo.....	35
3.2.5.2. Purificación del jugo.....	37
3.2.5.3. Evaporación.....	38
3.2.5.4. Cristalización del azúcar.....	40
3.2.5.5. Purga, envasado y almacenamiento del azúcar	44
3.2.5.6. Bagazo y su aprovechamiento: ciclo de potencia.....	46

CAPÍTULO IV

4.0. La simulación de procesos: generalidades	49
4.1. Antecedentes	49
4.1.1. Clasificación de los métodos de simulación	51
4.2. Simuladores actuales para procesos químicos.....	52

4.2.1. Simuladores comerciales	52
4.2.2. Simuladores de código abierto	56
4.3. Ventajas de usar simuladores	57

CAPÍTULO V

5.0. COCO Simulator	58
5.1. Historia.....	58
5.2. Ventajas y desventajas de COCO Simulator	61
5.2.1. Ventajas	61
5.2.2. Desventajas.....	62
5.3. Metodología implementada para la simulación de procesos.....	63
5.4. Guía introductoria a la simulación de procesos industriales con COCO Simulator	65
5.4.1. Metodología de simulación.....	65
5.4.2. Paquetes de reacción.....	67
5.4.3. Equipo disponible	71
5.4.4. Presentación de resultados	79
5.4.5. Agregar una sustancia nueva a COCO Simulator	83
5.4.6. Operaciones unitarias complejas	86

CAPÍTULO VI

6.0. Simulación de componentes dentro del proceso de la industria del ácido sulfúrico	88
6.1. Segmentación del proceso para fines de análisis	88
6.1.1. Componente uno: Combustión de flor de azufre para producir SO ₂	88
6.1.2. Componente dos: Oxidación del SO ₂ para convertirlo en SO ₃	90
6.1.3. Componente tres: Absorción del SO ₃ para formar H ₂ SO ₄	92
6.2. Metodología implementada para la simulación de procesos de	

la industria del ácido sulfúrico	94
6.2.1. Metodología implementada para el componente uno:	
Combustión de flor de azufre para producir SO ₂	95
6.2.2. Metodología implementada para el componente dos:	
Oxidación del SO ₂ para convertirlo en SO ₃	96
6.2.3. Metodología implementada para el componente tres:	
Absorción del SO ₃ para formar H ₂ SO ₄	97
6.3. Descripción de variables	98
6.3.1. Descripción de variables en componente uno: Combustión de flor de azufre para producir SO ₂	98
6.3.2. Descripción de variables en componente dos: Oxidación del SO ₂ para convertirlo en SO ₃	99
6.3.3. Descripción de variables en componente tres: Absorción del SO ₃ para formar H ₂ SO ₄	101
6.4. Descripción de equipos.....	103
6.4.1. Descripción de equipos en componente uno: Combustión de flor de azufre para producir SO ₂	103
6.4.2. Descripción de equipos en componente dos: Oxidación del SO ₂ para convertirlo en SO ₃	105
6.4.3. Descripción de equipos en componente tres: Absorción del SO ₃ para formar H ₂ SO ₄	107
6.5. Resultados obtenidos.....	109
6.6. Discusión de resultados.....	113

CAPÍTULO VII

7.0. Simulación de componentes dentro del proceso de producción de azúcar a partir de caña	116
7.1. Segmentación del proceso para fines de análisis	116
7.1.1. Componente uno: Ciclo de potencia	117
7.1.2. Componente dos: Evaporación	119

7.2.	Metodología implementada para la simulación de procesos de producción de azúcar a partir de caña	121
7.2.1.	Metodología implementada para el componente uno: Ciclo de potencia.....	122
7.2.2.	Metodología implementada para el componente dos: Evaporación	123
7.3.	Descripción de variables	124
7.3.1.	Descripción de variables en componente uno: Ciclo de potencia.....	124
7.3.2.	Descripción de variables en componente dos: Evaporación ..	126
7.4.	Descripción de equipos.....	127
7.4.1.	Descripción de equipos en componente uno: Ciclo de potencia.....	127
7.4.2.	Descripción de equipos en componente dos: Evaporación....	128
7.5.	Resultados obtenidos.....	129
7.6.	Discusión de resultados	131

CAPÍTULO VIII

8.0.	Incorporación de COCO Simulator como una herramienta didáctica para la ingeniería química.....	134
8.1.	Evaluación de COCO Simulator.....	135
8.2.	Criterio de aceptación	138

CONCLUSIONES	141
REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS	143
GLOSARIO	149
ANEXOS.....	150
Anexo A: Fichas de proceso o de sub proceso	150
Anexo B: Cálculos y procedimientos necesarios para la simulación de la industria del ácido sulfúrico	168

Anexo C: Cálculos y procedimientos necesarios para la simulación de la producción de azúcar a partir de caña	181
---	-----

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1.	Desglose de procesos.....	8
Figura 2.2.	Documentación de los procesos	9
Figura 2.3.	Representación de simbología utilizada en industrias químicas	11
Figura 3.1.	Diagrama del proceso de producción de la planta de ácido sulfúrico por el método de contacto.....	20
Figura 3.2.	Esquema de un reactor con cuatro etapas.....	24
Figura 3.3.	Curva de equilibrio de conversión de SO ₂ para un proceso de producción de H ₂ SO ₄ por absorción simple	24
Figura 3.4.	Fotografía de piezas de catalizadores. Anillos, anillos de estrella y pellets.....	25
Figura 3.5.	Diagrama del proceso de absorción simple.....	27
Figura 3.6.	Estructura molecular de la sacarosa	29
Figura 3.7.	Diagrama de operación de un ingenio azucarero.....	34
Figura 3.8.	Sistema de evaporación de múltiple efecto	39
Figura 3.9.	Sistema de cristalización en tachos	42
Figura 5.1.	Componentes de COCO Simulator	59
Figura 5.2.	Diagrama de flujo con la metodología general de cómo simular en COCO	64
Figura 5.3.	Ventana principal de la configuración de paquetes	67
Figura 5.4.	Selección de la opción CORN Reaction Package Manager	68
Figura 5.5.	Edición del paquete de reacción.....	68
Figura 5.6.	Creación de la plantilla para el paquete de reacción	69
Figura 5.7.	Datos generales a completar para el paquete de reacción.....	69
Figura 5.8.	Configuración de los componentes a utilizar en el paquete de reacción.....	70

Figura 5.9.	Configuración de la reacción	70
Figura 5.10.	Listado de equipos disponibles en COCO Simulator	71
Figura 5.11.	Menú Insert (Insertar)	79
Figura 5.12.	Cuadro para la creación de un reporte de parámetro en una unidad.....	80
Figura 5.13.	Reporte de parámetros en un reactor.....	81
Figura 5.14.	Cuadro para la creación de un reporte de un flujo.....	81
Figura 5.15.	Cuadro para la creación de un reporte de un flujo.....	82
Figura 5.16.	Reporte de flujo en la simulación de un reactor.....	82
Figura 5.17.	Pantalla principal de ChemSep	83
Figura 5.18.	Nombramiento de un componente en ChemSep.....	84
Figura 5.19.	Información general de componentes	84
Figura 5.20.	Propiedades críticas del ácido sulfúrico.....	85
Figura 5.21.	Correlaciones de temperatura del ácido sulfúrico.....	86
Figura 5.22.	Diagrama reactor catalítico.....	87
Figura 6.1.	Representación de la simulación en COCO Simulator del componente uno.....	89
Figura 6.2.	Representación de la simulación en COCO Simulator del componente dos.....	91
Figura 6.3.	Representación de la simulación en COCO Simulator del componente tres.....	93
Figura 6.4.	Diagrama de flujo con la metodología implementada para el componente uno.....	95
Figura 6.5.	Diagrama de flujo con la metodología implementada para el componente dos	96
Figura 6.6.	Diagrama de flujo con la metodología implementada para el componente tres.....	97
Figura 7.1.	Representación de la simulación en COCO Simulator del componente uno.....	118
Figura 7.2.	Representación de la simulación en COCO Simulator del	

	componente dos.....	120
Figura 7.3.	Diagrama de flujo con la metodología implementada para el componente uno.....	122
Figura 7.4.	Diagrama de flujo con la metodología implementada para el componente dos.....	123

ÍNDICE DE TABLAS

Tabla 3.1.	Propiedades físicas del ácido sulfúrico	18
Tabla 3.2.	Composición química promedio de los tallos y los jugos de la caña de azúcar.....	31
Tabla 3.3.	Valores promedio de los principales parámetros de operación en el área de molinos	36
Tabla 3.4.	Valores promedio de los parámetros de operación en la estación de evaporación.....	40
Tabla 3.5.	Valores promedio de las variables fisicoquímicas de las corrientes de proceso en las etapas de cocimiento y cristalización.....	43
Tabla 3.6.	Valores promedio de los parámetros de operación en el control de masa cocida C	44
Tabla 3.7.	Valores promedio de propiedades fisicoquímicas de los productos en el proceso de centrifugación	45
Tabla 3.8.	Poder calórico de los combustibles	46
Tabla 5.1.	Equipos disponibles en COCO Simulator.....	72
Tabla 6.1.	Resumen de las variables utilizadas en el componente uno.....	98
Tabla 6.2.	Resumen de las variables utilizadas en el componente dos	99
Tabla 6.3.	Resumen de las variables utilizadas en el componente tres.....	101
Tabla 6.4.	Resumen de los equipos utilizados en el componente uno.....	104
Tabla 6.5.	Resumen de los equipos utilizados en el componente dos.....	105
Tabla 6.6.	Resumen de los equipos utilizados en el componente tres.....	107
Tabla 6.7.	Resumen de los resultados obtenidos de las corrientes simuladas	110
Tabla 6.8.	Desviación en las corrientes simuladas del componente uno ...	111
Tabla 6.9.	Desviación en las corrientes simuladas del componente dos ...	111

Tabla 6.10.	Desviación en las corrientes simuladas del componente tres ...	112
Tabla 7.1.	Resumen de las variables utilizadas en el componente uno	124
Tabla 7.2.	Resumen de las variables utilizadas en el componente dos	126
Tabla 7.3.	Resumen de los equipos utilizados en el componente uno.....	127
Tabla 7.4.	Resumen de los equipos utilizados en el componente dos.....	128
Tabla 7.5.	Resumen de los resultados obtenidos de las corrientes simuladas	130
Tabla 7.6.	Desviación en las corrientes simuladas del componente uno ...	131
Tabla 7.7.	Desviación de la composición peso del componente dos	131
Tabla 8.1.	Evaluación de COCO Simulator	135

OBJETIVOS

OBJETIVO GENERAL:

- Evaluar la implementación del programa “COCO Simulator” para simular componentes de los procesos que se desarrollan en industrias químicas salvadoreñas, como una herramienta del proceso de enseñanza y aprendizaje de la carrera de Ingeniería Química.

OBJETIVOS ESPECÍFICOS:

- Desarrollar criterios para evaluar la funcionalidad del programa “COCO Simulator” en base a fundamentos bibliográficos sobre pedagogía e Ingeniería Química.
- Simular el funcionamiento de componentes de los procesos que se desarrollan en la industria azucarera así como en la producción de ácido sulfúrico utilizando el programa “COCO Simulator”.
- Analizar los resultados de la simulación comparándolos con los parámetros básicos de operación de los procesos dentro de las industrias estudiadas.
- Elaborar un manual donde se presente la metodología de simulación implementada en “COCO Simulator”, aplicado a procesos de la industria química y sirva como herramienta didáctica.

CAPÍTULO I

1.0. GENERALIDADES DE LA INDUSTRIA QUÍMICA

La industria química a lo largo de los años ha sufrido muchos cambios, todo con el propósito de satisfacer las necesidades de las personas mejorando su calidad de vida. Para ello, se transforman las materias primas en productos intermedios o finales con propiedades o características diferentes. Este proceso de transformación debe seguir una secuencia lógica preestablecida y estar parametrizado de forma correcta. Muchas industrias se valen de herramientas tales como la simulación de procesos para tal fin. La simulación de procesos se ha convertido en una herramienta adecuada y oportuna de apoyo para el diseño, caracterización, optimización, así como el monitoreo del funcionamiento de procesos industriales.

1.1. DEFINICIÓN DE INDUSTRIA QUÍMICA

La industria química se ocupa de las transformaciones químicas y físicas de la materia prima con la finalidad de obtener productos útiles para otras industrias o para la vida cotidiana. Los productos químicos se obtienen a partir del procesamiento de materias primas (minerales, metales e hidrocarburos, entre otros), en una serie de etapas en las cuales se producen las transformaciones respectivas, obteniendo como resultado productos finales o intermedios. Así pues, la industria química no se limita exclusivamente a los denominados productos químicos, sino que abarca otros productos, como las fibras artificiales, las resinas, los jabones, las pinturas y otros.

Los productos químicos se clasifican en tres grupos que corresponden a las principales etapas de fabricación (Stellman y McCann, 1998):

- Productos químicos básicos, producidos normalmente a gran escala y por lo general son convertidos en otros productos químicos.
- Productos intermedios, obtenidos a partir de los productos químicos básicos, en su mayoría requieren un tratamiento posterior en la industria química.
- Productos químicos terminados, que requieren tratamientos químicos posteriores.

El objetivo fundamental de una industria química es la de lograr utilidades mediante la compra de materias primas, transformación fisicoquímica de las mismas, venta de productos elaborados, inversión en instalaciones de producción, contratación de recursos humanos de todos los niveles y todo lo que las demás industrias deben realizar para estar en operación (Suárez B., 2004).

1.2. PANORAMA MUNDIAL DE LA INDUSTRIA QUÍMICA

La industria química es de suma importancia para la economía de una nación desarrollada. En la primera mitad del siglo XIX el desarrollo industrial de una nación se podía medir por su producción de ácido sulfúrico. En la actualidad se puede utilizar de manera similar la producción de etileno como medida de complejidad industrial (Suárez B., 2004). Su impacto en la economía y en nuestro estándar de vida es evidente. La elaboración de prendas de vestir, partes de automóviles, juguetes, resinas, cosméticos, etc. provienen de las operaciones basadas en procesos químicos. El ingeniero químico debe estar capacitado para el análisis y diseño de procesos que satisfagan una necesidad de la sociedad (Jiménez Gutiérrez, 2003).

Acorde con García, Martínez y Rodríguez (2013), la historia de la industria química en el mundo es especial, pues a pesar de que sus bases científicas son anteriores a la Revolución Industrial, tomó su forma actual a comienzos del siglo XX al establecer procesos de fabricación a gran escala de productos de bajo valor agregado.

En el marco del desarrollo industrial, la industria química no fue una excepción. Algo que resulta comprensible si se tienen en cuenta los siguientes factores:

- a) El desarrollo industrial general originó una gran demanda de materias primas.
- b) La influencia de la ciencia sobre la industria se hizo evidente en aquellas industrias que estaban en evolución constante.
- c) El crecimiento de la población y la mayor necesidad de alimentos, fueron poderosos estímulos para la aparición de nuevas industrias.

La industria química actual nace aproximadamente en la segunda mitad del siglo XVIII avanzando desde entonces a pasos agigantados, considerándose en la actualidad que el 97 % de los productos que usamos en nuestra vida contienen materiales y sustancias producidos en alguna industria química. Un dato que respalda la importancia de la industria química es que, en 2007, el volumen de negocio de esta industria en el mundo se situó por encima de los 3.14 billones de dólares, acumulando un incremento de casi 1.3 billón de dólares en la última década.

1.3. SITUACIÓN ACTUAL: INDUSTRIAS QUÍMICAS QUE UTILIZAN PROCESOS AUTOMATIZADOS EN EL SALVADOR

En la actualidad, son muchas las industrias químicas que optan por automatizar sus procesos, esto con el objetivo de analizar posibles escenarios que conduzcan a mejorar y/o incrementar la eficiencia de los mismos. Los sistemas de

automatización permiten visualizar condiciones de operación en los procesos, antes de que ocurran en la realidad, los resultados obtenidos pueden ser utilizados para predecir el comportamiento de los procesos y/o sustancias con la que se está trabajando, así como las variables que se ven involucradas.

En El Salvador se han identificado diversas industrias químicas que utilizan procesos automatizados, entre estas industrias podemos mencionar:

- Grupo Fertica
- Ingenio El Ángel
- Ingenio La Cabaña
- Central de Izalco
- Industrias La Constancia
- Unilever
- LaGeo
- Holcim

CAPÍTULO II

2.0. DESCRIPCIÓN DE PROCESOS

2.1. GENERALIDADES DE LOS PROCESOS

Existen muchas definiciones de lo que es un proceso, algunas de ellas son:

“Una actividad o un conjunto de actividades que utiliza recursos, y que se gestiona con el fin de permitir que los elementos de entrada se transformen en resultados, se puede considerar como un proceso (Norma ISO 9001:2008).”

“Conjunto de los recursos y de las actividades, interrelacionadas, repetitivas y sistemáticas, mediante los cuales unas entradas se convierten en unas salidas o resultados (Pardo, 2012).”

“Un proceso se puede definir como un conjunto estructurado y completo de actividades que se desarrollan en una organización, con el objetivo de conseguir un resultado para un cliente (interno o externo) que satisfaga plenamente sus requerimientos. Un conjunto estructurado de actividades que, a partir de las entradas suministradas por un proveedor, mediante actividades intermedias se obtienen unas salidas o productos para un cliente (UES-FIA-EIQA, 2015).”

Todas las definiciones anteriores son acertadas y precisas sin embargo para la sección presente y futuras referencias en este documento se adoptará la definición de proceso que describe Pardo. Reconociendo que en un proceso las entradas se pueden convertir en salidas intermedias, resultados o servicio final y que toda actividad que se realiza dentro de una organización es considerada un proceso. Es importante resaltar que el proceso existe esté o no documentado, a los

procesos que no están documentados, pero si existen dentro de la organización se les conoce como procedimientos de hecho y por no estar documentados son susceptibles a mayor variabilidad.

Los procesos deben ser flexibles y enfocados a producir productos o servicios de calidad que cumplan las necesidades (implícitas y explícitas) de los clientes, así como las especificaciones, todo esto haciendo un uso racional de los recursos.

2.2. CLASIFICACIÓN DE LOS PROCESOS

Establecer una tipología de los procesos es muy útil, pues se puede emplear para dar forma a la estructura global de procesos de la organización, que habitualmente se conoce como mapa de procesos. Las diferentes formas de clasificar un proceso responden a su naturaleza, tamaño o interfuncionalidad, en este trabajo solo se describirá la clasificación por su naturaleza y por su tamaño (Pardo, 2012).

2.2.1. CLASIFICACIÓN DE LOS PROCESOS POR SU NATURALEZA

El objetivo de cada proceso es satisfacer una necesidad dentro la organización, esta clasificación se realiza en función de la necesidad cubierta por un proceso. Y se divide de la siguiente forma (UES-FIA-EIQA, 2015):

- Procesos estratégicos: están relacionados con las estrategias empresariales, cubren necesidades de planificación, mejora y crecimiento.
- Procesos de negocio o misionales: a través de estos procesos la organización produce los servicios o productos y los resultados principales. Son muy específicos para cada organización o industria.
- Procesos de apoyo o soporte: son los procesos que proveen todos los insumos necesarios para que los procesos de negocios funcionen, por ejemplo: Gestión de recursos humanos, instalaciones, compras, gestión de recursos informáticos, gestión administrativa financiera, mantenimiento.

2.2.2. CLASIFICACIÓN DE LOS PROCESOS POR SU TAMAÑO

Existe una jerarquía para clasificar los procesos por su tamaño y es la siguiente (UES-FIA-EIQA, 2015):

- Macroproceso: Es el agrupamiento de procesos en base a unas características afines. Por lo general, los macroprocesos en una organización son pocos.
- Proceso: es un acercamiento más detallado del macroproceso, en los procesos se describen todas las actividades que realiza una organización.
- Sub proceso: Los procesos a su vez pueden comprender procesos de menor tamaño o de ejecución más simple, a estos procesos se les denomina sub procesos.

Lo anterior se resume en la Figura 2.1.

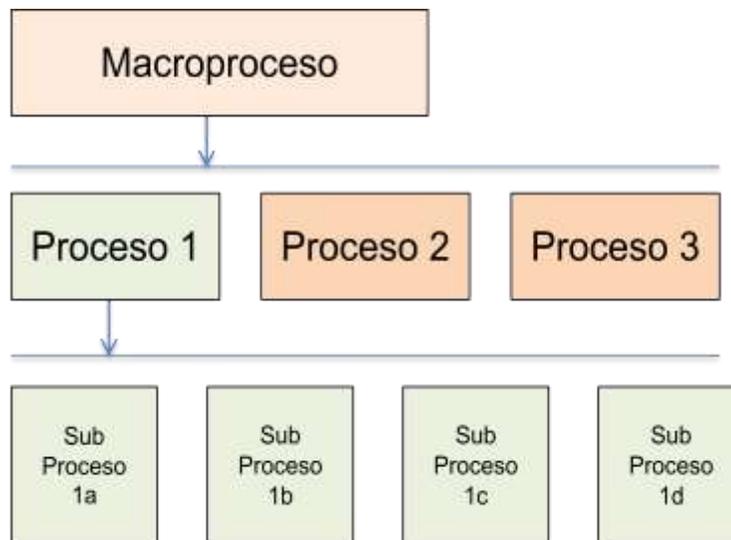


Figura 2.1. Desglose de procesos (UES-FIA-EIQA, 2015).

2.3. DOCUMENTACIÓN DE LOS PROCESOS

Es importante recalcar que los procesos existen estén o no documentados, sin embargo, una forma de ordenar, esclarecer dudas sobre los procesos y sobre todo disminuir la variabilidad de los procesos en una organización es documentándolos. Documentar un proceso consiste en escribir lo que se hace, definir las interacciones que se dan en este, su parametrización y medición.

Los procesos se documentan de la siguiente forma:

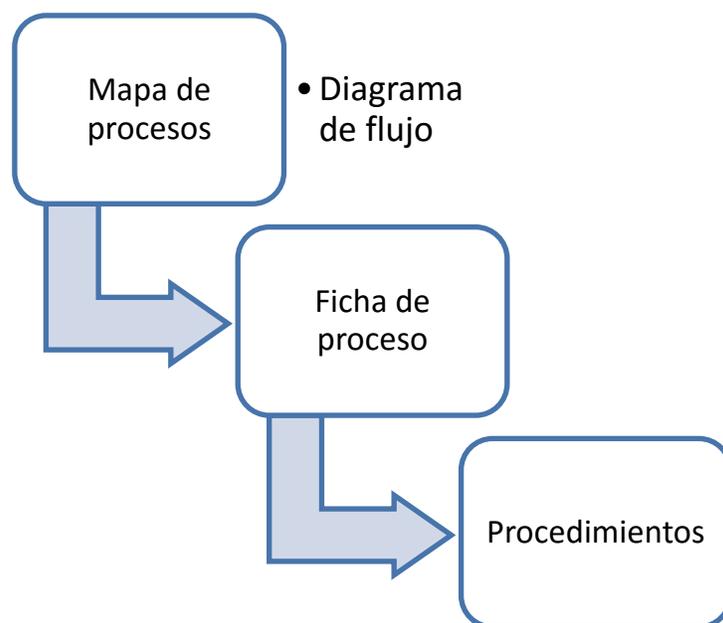


Figura 2.2. Documentación de los procesos (UES-FIA-EIQA, 2015).

2.3.1. DIAGRAMA DE FLUJO

Esta herramienta gráfica fue ideada por programadores informáticos en la década de 1940, aprovechando métodos de representación ya existentes. Dada su facilidad de interpretación, y a pesar de que su popularidad en el campo informático disminuyó, fue aprovechada en el mundo empresarial y demostró ser

de gran utilidad para ilustrar gráficamente los procesos y, con ello, hacer más visible y evidente este concepto abstracto (Pardo, 2012).

Un diagrama de flujo es una representación gráfica del conjunto de actividades, decisiones y acciones que definen un proceso. Es decir, la secuencia de etapas o acciones que se llevan a la práctica (UES-FIA-EIQA, 2015). Su elaboración es un paso básico para documentar los procesos ya que permiten comprender el funcionamiento de los procesos de forma sencilla, un diagrama de flujo debe ser comprendido por personas con conocimientos básicos del proceso. Define las funciones y responsabilidades de todos los involucrados en el proceso, mostrando las relaciones cliente-proveedor interno.

Normalmente se utiliza simbología básica para su elaboración, tales como cuadros de dialogo, rombos de decisión y elipses para representar el inicio o finalización. Sin embargo, en las industrias químicas se suele utilizar una simbología especial, tal y como se observa en la Figura 2.3.

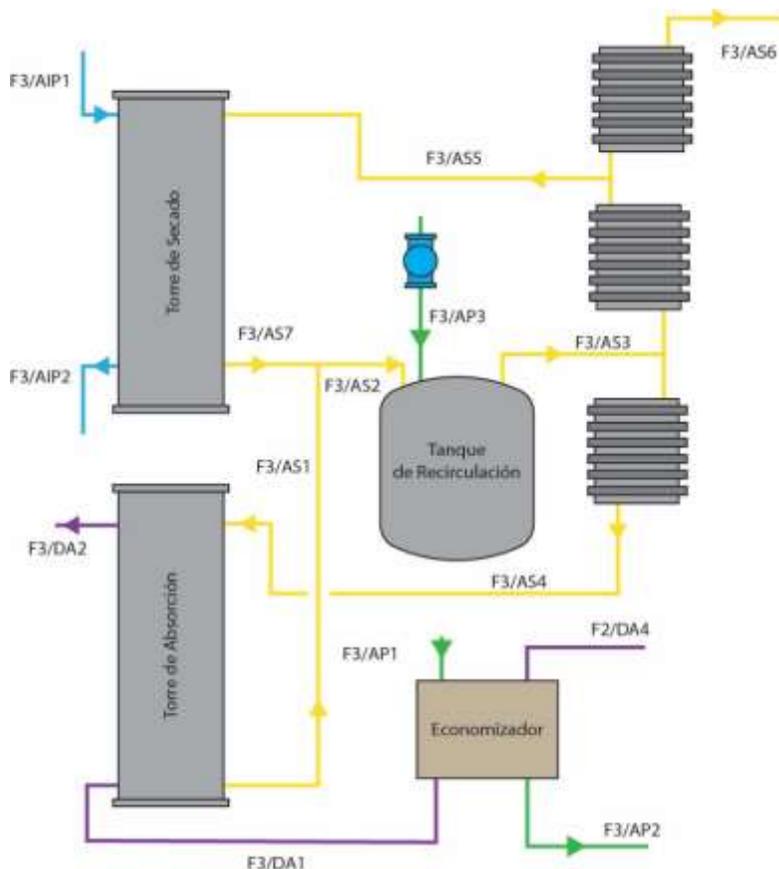


Figura 2.3. Representación de simbología utilizada en industrias químicas (Autor, 2016).

2.3.2. FICHA DE PROCESO O DE SUB PROCESO

Dentro de este trabajo, la ficha de procesos o sub procesos estará definida como una herramienta documental que se asigna a cada subproceso dentro del proceso global y que contiene toda la información necesaria para identificar, describir y caracterizar el proceso así como los equipos y variables inherentes. La ficha de procesos o de sub procesos, se hace por cada proceso o por cada subproceso, dependiendo del objetivo que se persigue (Ver Anexo A).

2.3.2.1. CONTENIDO DE LA FICHA DE PROCESO O DE SUB PROCESO

a) Diagrama de proceso o de sub proceso e interconexión de los equipos utilizados

En este apartado se hará un esquema en el cual se ilustrarán los equipos involucrados en el proceso o sub proceso y como están conectados entre sí. Además, se identificarán con códigos cada componente dentro del proceso o subproceso (flujos, equipos, equipos secundarios, etc.)

b) Información general

Contiene información que permite identificar al subproceso cuya finalidad tiene un carácter administrativo u organizativo. Las categorías a llenar en esta sección son:

INFORMACIÓN GENERAL	
Responsable del sub proceso:	
Objetivo del sub proceso	
Descripción del sub proceso	
Nombre del proceso al que pertenece	

- **Responsable del sub proceso:**

Este espacio tiene un valor puramente administrativo, y se ha incluido en esta ficha para darle utilidad más allá de la simulación del correspondiente sub proceso.

- **Objetivo del sub proceso:**

Se presenta de manera concisa cual es el objetivo de este sub proceso dentro del proceso global.

- **Descripción del sub proceso:**

Se describe qué se hace en el proceso, cómo se hace y cuáles son sus principios de funcionamiento, entre otros.

- **Nombre del proceso:**

Se incluye el nombre del proceso al cual pertenece este sub proceso con el objetivo de mantener una organización que permita un acceso eficiente a la información de cada ficha.

c) Entradas y salidas del sub proceso

Contiene información sobre las entradas y salidas generales del sub proceso; quién las provee y quién las recibe al entrar y salir respectivamente del sub proceso.

Proveedor	Entrada		Salida	Receptor

d) Variables de operación de las entradas y salidas

En esta tabla se hace una lista de todas las variables de operación involucradas en cada entrada y salida del sub proceso.

Entrada	Variable / especificación		Salida	Variable / especificación

e) Flujos internos en el sub proceso

Consiste de una lista de los flujos internos dentro del sub proceso, identificados por un código y acompañados de una descripción y los parámetros involucrados en cada uno y que son de importancia para el funcionamiento del sub proceso.

Código	Descripción del flujo	Parámetros requeridos

f) Descripción de equipos y parámetros

Se recopilan en esta sección, ordenados de acuerdo al código que los identifica, todos los equipos involucrados en el sub proceso, su descripción y los parámetros involucrados en su funcionamiento.

Código	Equipos requeridos	Parámetros requeridos

g) Procedimientos asociados

Son los procedimientos creados bajo una administración de la calidad para mejorar el control sobre los sub procesos.

Código	Nombre

h) Leyes, normativas asociadas, firmas y sellos

Espacio de uso administrativo y legal, que contiene información complementaria para hacer de esta ficha un documento funcional a nivel profesional.

2.3.3. PROCEDIMIENTOS

Según UES-FIA-EIQA (2015) procedimiento es una descripción escrita de un proceso, es cuando se dice como se hacen las cosas, para ello se describen las diferentes actividades específicas que se ejecutan para su realización, y esta descripción queda plasmada en un “Procedimiento escrito”. Se puede decir que el proceso indica qué hace una organización y el procedimiento indica cómo lo hace. Como parte de la documentación de una organización también se tienen manuales, instructivos, formatos y registros.

2.4. MEDICIÓN

La forma de medir un proceso o los resultados que este produce es fijando criterios, que son características a medir, para ello se utilizan indicadores de proceso e indicadores de resultados y se fija una meta a donde se quiere llegar. De acuerdo a UES-FIA-EIQA (2015), un indicador es una medida cuantitativa que puede usarse como guía para controlar y valorar la calidad de las diferentes actividades, es decir, la forma particular (normalmente numérica) en la que se mide o evalúa cada uno de los criterios de calidad.

Los indicadores sirven para evaluar un proceso, ayudan a identificar oportunidades de mejora, miden el cumplimiento de los objetivos en el tiempo, así como las desviaciones que el proceso pueda presentar.

En cualquier organización o industria los indicadores deben presentar ciertas características básicas, deben ser: cuantificables, adecuados a la realidad del proceso, representativos, fiables y finalmente útiles ya que es un error común colocar indicadores cuyo resultado no indica ninguna oportunidad de mejora.

Existen indicadores que miden desviaciones intermedias en el proceso, indicadores que miden la satisfacción del usuario, otros que miden la efectividad del sistema de gestión, entre otros.

En las industrias químicas los indicadores suelen colocarse al inicio, en medio y al final de los componentes críticos de los procesos, ya que se debe tener un control riguroso del comportamiento de las sustancias o materia prima y de esa forma garantizar que el resultado final sea el esperado por el cliente (Sánchez, 2013).

CAPÍTULO III

3.0. DESCRIPCIÓN DE INDUSTRIAS SELECCIONADAS

3.1. DESCRIPCIÓN DE LA INDUSTRIA DE PRODUCCIÓN DE ÁCIDO SULFÚRICO

En El Salvador, la única empresa dedicada a la producción de ácido sulfúrico es la planta productora de producción y comercialización de fertilizantes sintetizados del Grupo Fertica. La planta de producción se encuentra ubicada en el occidente del país, en la zona industrial de Acajutla, Sonsonate. Esta planta abastece a Guatemala y Honduras, mientras que la planta de producción ubicada en Costa Rica, abastece a Nicaragua y Panamá.

3.1.1. PROPIEDADES Y APLICACIONES DEL ÁCIDO SULFÚRICO

El ácido sulfúrico es el producto de la industria química más empleado, dado su relativo bajo precio y versatilidad, siendo por tanto el producto químico más fabricado en el mundo con una producción de aproximadamente 200 millones de toneladas en 2009 y una producción estimada de 285 millones de toneladas para 2020 (Ros Moreno, 2012).

En la Tabla 3.1 se muestran las propiedades del ácido sulfúrico.

Tabla 3.1. Propiedades físicas del ácido sulfúrico

Nombre	Ácido Sulfúrico
Fórmula molecular	H ₂ SO ₄
Peso molecular	98.08 g/mol
Densidad	1.8342 g/ml
Estado físico	Líquido viscoso
Color	Incoloro-marrón
Punto de ebullición (760 mmHg)	290 °C; 100 % (310-335) °C; 98 %
Punto de fusión	(10.4-10.5) °C; 100 % 3 °C; 98%
pH	0.3; Solución 1 N 1.2; Solución 0.1 N 2.1; Solución 0.01 N
Solubilidad en agua (g/ml)	Total

Fuente: Ros Moreno, 2012.

La razón por la cual el ácido sulfúrico es tan importante se encuentra en la amplia gama de aplicaciones, entre las que se destacan (Sánchez, 2011):

- **Obtención de otros productos químicos**, como es el caso de los procesos de producción del ácido clorhídrico y el ácido nítrico.
- **Obtención de abonos y fertilizantes**, entre los que cabe destacar al sulfato amónico y los derivados de los superfosfatos de calcio.
- **Fabricación de colorantes**, algunos de los cuales son sulfatos metálicos.
- **Actuación como electrolito**, especialmente en baterías como las empleadas en los automóviles.
- **Desatascador** de tuberías tanto de uso doméstico como industrial.
- **Blanqueador** en la industria textil.
- **Purificador** de la mayoría de las fracciones que se obtienen de la destilación del petróleo (gasolinas, disolventes, naftas, kerosenos).

3.1.2. PROCESO DE PRODUCCIÓN DEL ÁCIDO SULFÚRICO

Existen dos métodos para obtener H_2SO_4 , el método de las cámaras de plomo y el método de simple contacto. A continuación, se explicará el segundo método, puesto que es el método utilizado en la planta de producción de El Salvador.

El método de simple contacto utiliza una catálisis heterogénea, es decir, el catalizador empleado está en una fase de agregación distinta a la de los reactivos. Este método permite obtener un ácido sulfúrico con una concentración en torno al 98 %p/p, es decir, 98 gramos de ácido sulfúrico por cada 100 gramos de disolución. Este método supone un mayor rendimiento y menor tiempo para las materias primas (Ros Moreno, 2012; Sánchez, 2011).

La fabricación de ácido sulfúrico se puede englobar en tres etapas o fases generales, las cuales se describirán a continuación (Ros Moreno, 2012):

1. **Obtención de gases conteniendo anhídrido sulfuroso (SO_2)** y preparación de estos gases para ser destinados a la fabricación de ácido sulfúrico. Generalmente, la corriente gaseosa de SO_2 debe someterse a un proceso de purificación en el que se eliminen componentes (como restos de arsénico) que pueden interferir en etapas posteriores.
2. **Oxidación del SO_2 para convertirlo en anhídrido sulfúrico (SO_3)** con la ayuda de un reactor catalítico.
3. **Absorción del anhídrido sulfúrico (SO_3)** en una solución de óleum ($\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7$), **para formar el ácido sulfúrico.**

En la Figura 3.1 se muestra el esquema general de la producción de ácido sulfúrico mediante el método de contacto.

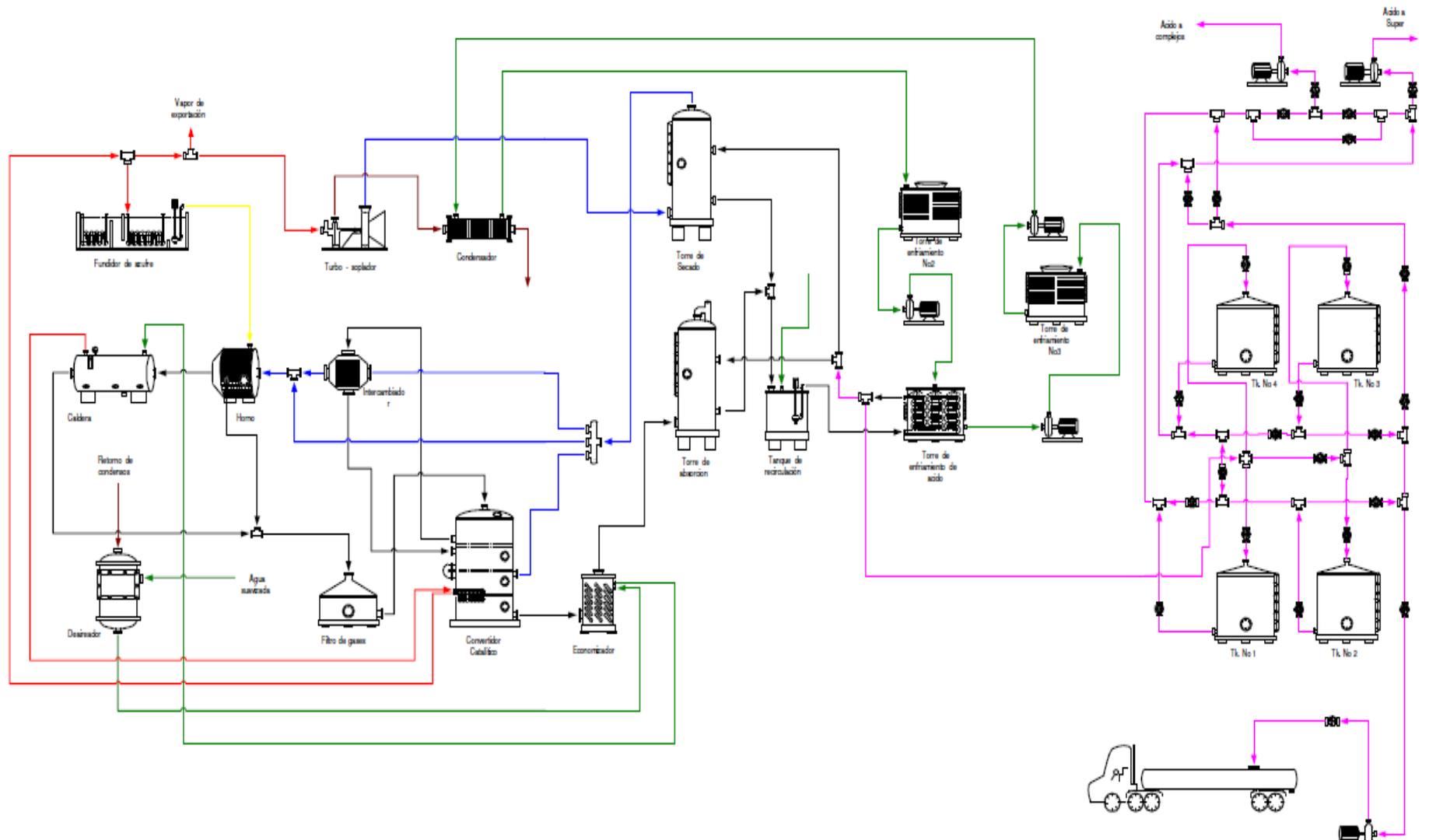


Figura 3.1. Diagrama del proceso de producción de la planta de ácido sulfúrico por el método de contacto. (Grupo Fertica, 2016).

3.1.2.1. OBTENCIÓN DE SO₂ EN UNA MEZCLA DE GASES

- **PROCESO DE COMBUSTIÓN**

La generación de SO₂, dióxido de azufre, se realiza partiendo de la fundición de flor de azufre. La flor de azufre es una presentación del azufre en forma de polvo fino de color amarillo.

En un inicio, se alimenta el azufre en pilas de fundición. En una primera etapa, estas pilas funden el azufre, además tienen como función limpiar y remover cualquier tipo de partícula que pudiese llevar el azufre al haber estado expuesto al aire libre. Por último, siempre dentro de las pilas, el azufre pasa a una etapa de sedimentación, para remover las partículas que no hayan sido eliminadas previamente.

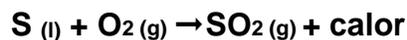
Al salir de las pilas, el azufre se hace pasar a través de tuberías enchaquetadas, en donde también se hace circular vapor para evitar que el azufre se enfríe y vuelva a solidificarse. Este azufre fundido se alimenta hacia el horno quemador para la etapa de combustión, en la cual se transforma el azufre en SO₂ gaseoso. Este proceso es exotérmico, hay desprendimiento de calor, por lo que cuando se ha encendido una carga en el horno, la combustión continua mientras se sigue añadiendo materia prima y aire seco. La temperatura en el horno se mantiene alrededor de 900 °C - 1000 °C (Guzmán, 2016).

Los hornos más empleados en este proceso son los de tubo giratorio en los que el azufre se carga por el extremo superior, y por el extremo inferior se introduce aire seco en exceso. En una vasija cilíndrica de acero, revestida de material refractario, se pone el material a tostar sobre una parrilla de malla fina, y en cuanto se enciende el azufre se sopla desde abajo una fuerte corriente de aire que, de una parte, mantiene la combustión, y de otra, levanta los finos granos de azufre y los

mantiene flotando. De esta manera, el azufre queda rodeado de aire por todas las partes y se quema rápida y completamente (Guerrero y Rivas, s.f.).

Al finalizar la combustión, la corriente gaseosa de SO₂ se pasa por una caldera piro tubular, la cual aprovecha las altas temperaturas de los gases para generar energía. Los tubos de la caldera están rodeados de agua, donde los gases calientes transfieren calor al agua y generan vapor saturado. El diámetro promedio de los tubos es de 0.05 m.

La reacción que se produce en esta etapa es (King, Davenport & Moats, 2013):



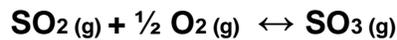
- **PURIFICACIÓN DEL GAS**

En todos los métodos de fabricación de ácido sulfúrico es preciso purificar el SO₂. En el método de contacto, las impurezas, especialmente el arsénico, actúan como venenos del catalizador y, por ello, se requiere una purificación especialmente fina (Guerrero y Rivas, s.f.).

Los gases que se hicieron pasar previamente por el intercambiador de calor para aprovechar su energía, salen fríos. Estos gases se hacen pasar en un filtro de gases, el cual está recubierto de cuarzo de diferente tamaño de grano, esto permite atrapar electrostáticamente las impurezas que aun pudieran llevar los gases (Guzmán, 2016).

3.1.2.2. OXIDACIÓN DEL SO₂ PARA CONVERTIRLO EN SO₃

La reacción de conversión de SO₂ en SO₃ está basada en la siguiente reacción de equilibrio en presencia de catalizador.



Esta reacción es exotérmica, y se puede maximizar su rendimiento teniendo en cuenta (IHOBE, 2006):

- Que el incremento de la cantidad de O_2 hará que el equilibrio de la reacción se desplace produciendo más SO_3 .
- Que incrementando la presión también se favorece la formación de SO_3 .
- Que un mayor tiempo de reacción favorece así mismo la conversión.

Esta reacción toma lugar en un reactor compuesto, por lo general, de 3 ó 4 etapas (Ver Figura 3.2.). Según lo establece Guzmán (2016), el catalizador se empaca en diferentes capas de lecho soportado en una rejilla, donde el tamaño de las camas de catalizador aumenta de arriba hacia abajo, a medida que el SO_2 reacciona con el aire, necesita de un mayor tiempo de contacto para que la reacción sea favorable. El aire seco se introduce por la parte superior del reactor para que pueda reaccionar con el SO_2 . En la primera etapa del reactor, los gases entran a una temperatura promedio de $390\text{ }^\circ\text{C}$ y salen a $560\text{ }^\circ\text{C}$ aproximadamente. Entre cada capa de lecho se ubica un intercambiador de calor para retirar excesos de calor perjudiciales para los equipos y para la reacción en sí, ya que es una reacción exotérmica y por tanto favorecida en la termodinámica por las temperaturas bajas. Así, se vuelven a enfriar los gases para favorecer nuevamente la reacción. Se ha establecido empíricamente que el delta de temperatura de la segunda etapa es aproximadamente la mitad del delta de temperatura de la primera etapa, el delta de temperatura de la tercera etapa es un tercio del delta de temperatura de la segunda etapa y en la cuarta etapa el delta es un cuarto del delta de temperatura de la tercera etapa. La conversión de SO_2 a SO_3 es parcial, es decir que en cada etapa del reactor solo se convierte una porción hasta que se alcanza el 98 % de conversión global en el reactor (Ver Figura 3.3.).

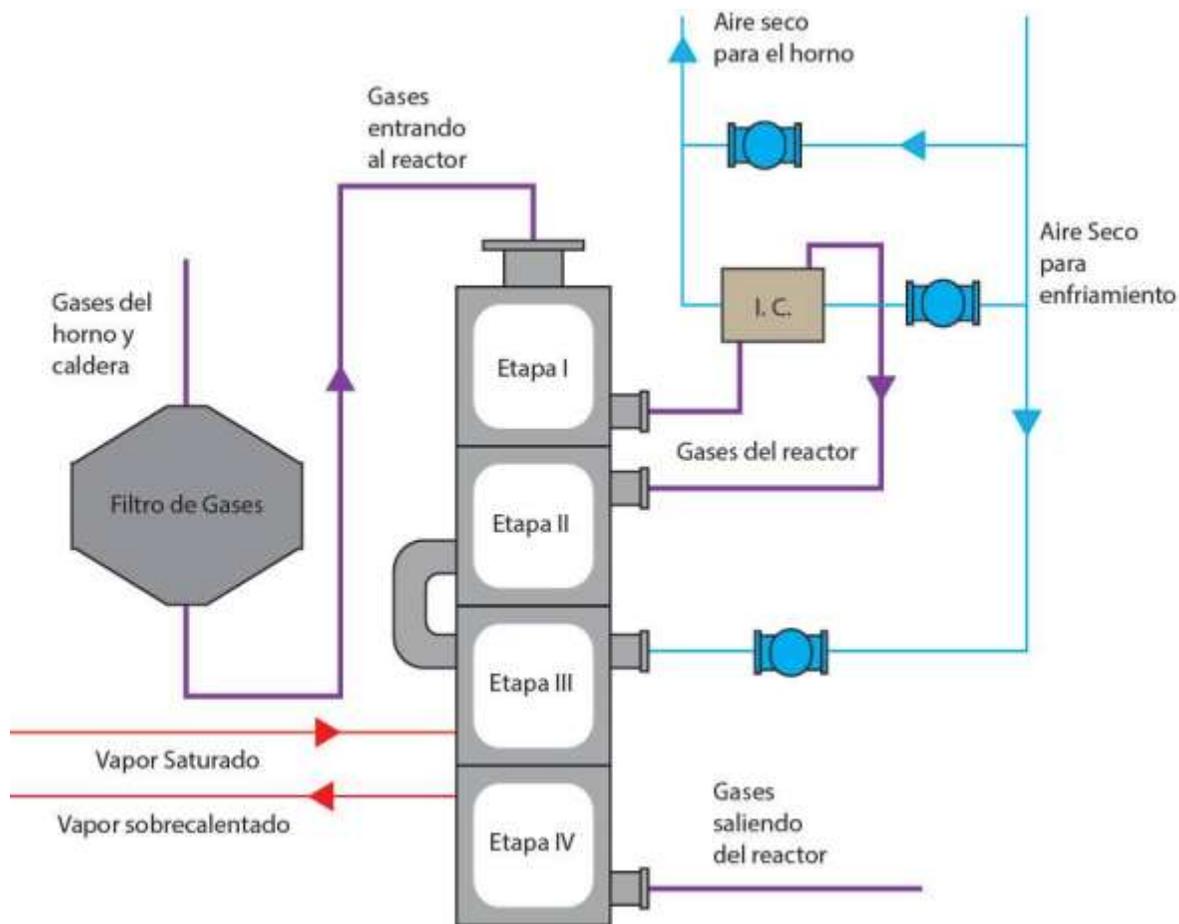


Figura 3.2. Esquema de un reactor con cuatro etapas (Autor, 2016).

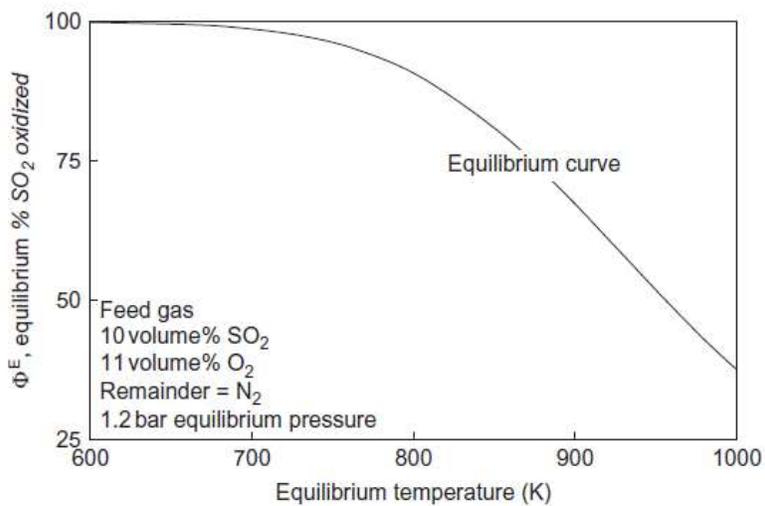


Figura 3.3. Curva de equilibrio de conversión de SO₂ para un proceso de producción de H₂SO₄ por absorción simple (King et al, 2013).

Los lechos de catalizador utilizados contienen pellets de forma anillo estrella, puesto que dan una buena distribución del flujo en convertidores con una baja velocidad de gases y permiten incrementar la superficie de contacto entre el gas y el catalizador. El tamaño de partícula es aproximadamente 10 mm. El catalizador consiste en sales de vanadio con tierras diatomáceas como elemento soporte, en la siguiente proporción:

- 5 % compuesto activo
- 95 % substrato de tierras diatomáceas (sílice)



Figura 3.4. Fotografía de piezas de catalizadores. Anillos, anillos de estrella y pellets (King et al, 2013).

3.1.2.3. ABSORCIÓN DE SO_3

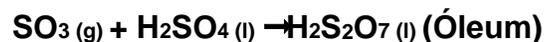
El ácido sulfúrico se obtiene absorbiendo SO_3 en agua en presencia de H_2SO_4 (con una concentración de al menos el 98 %). La eficiencia de este paso está relacionada con (IHOBE, 2006):

- La concentración de H_2SO_4 (98.5 - 99.5 %) en el líquido absorbente.
- El rango de temperatura del líquido (normalmente entre 70 °C – 120 °C).
- La técnica de distribución del ácido.
- El tipo separador de gotas o filtros de nieblas.
- La temperatura del gas de entrada.
- Que el flujo de gas sea en contracorriente o no.

La reacción que procede es:



Acorde a Guzmán (2016), en la práctica el SO_3 no se absorbe sobre agua, porque la niebla formada está compuesta por pequeñas gotas de ácido sulfúrico que no son absorbidas y la reacción es demasiado violenta, mientras que sobre ácido sulfúrico concentrado al 98.5 % esta absorción tiene lugar rápidamente, debido, probablemente, a que a esta concentración el ácido presenta un mínimo en su presión de vapor. Es por eso que se emplea ácido de esta concentración para realizar el proceso:



Antes de ingresar a la torre de absorción, los gases ingresan a un economizador (un intercambiador de calor gas-liquido), el cual permite enfriar los gases a la salida del reactor, pasando de 400 °C a 160 °C aproximadamente. En la torre de absorción se recircula ácido sulfúrico a una concentración de 98.5 %, de manera que tenga un mayor tiempo de residencia y pueda ser absorbido. Una vez se ha obtenido óleum en la torre de absorción, esta corriente se alimenta a un tanque de recirculación donde además se mezcla con ácido diluido de la torre de secado. Un medidor de concentración ajusta la concentración al 98.5 % dosificando el agua que sea necesaria, luego este ácido es el que se recircula a ambas torres y que también se manda a los tanques de almacenaje. Finalmente, se obtiene ácido sulfúrico a una concentración de 98.5 %. Este proceso se conoce con el nombre de absorción simple (Ver Figura 3.5).

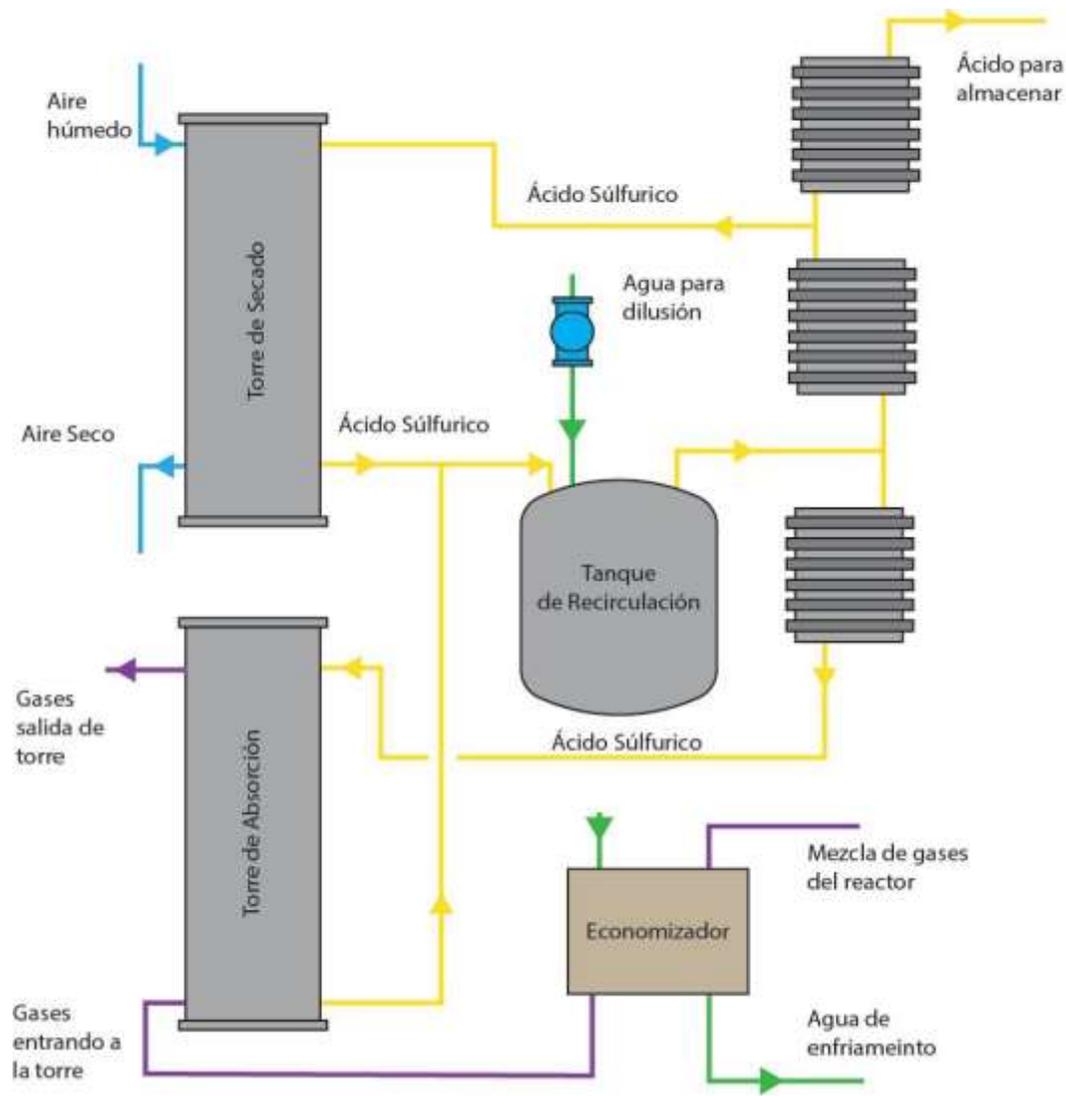


Figura 3.5. Diagrama del proceso de absorción simple (Autor, 2016).

El enfriamiento del ácido juega un papel importante en la determinación de la eficiencia y operación segura de toda la planta de producción de ácido sulfúrico. Los principales equipos de enfriamiento lo constituyen los intercambiadores de coraza y tubos, así como los intercambiadores de placas, ambos refrigerados con agua de proceso, o, en casos excepcionales con aire (Ros Moreno, 2012).

3.2. DESCRIPCIÓN DE LA INDUSTRIA AZUCARERA

Actualmente El Salvador, cuenta con seis ingenios azucareros, los cuales son:

- Central Azucarera de Izalco
- Ingenio Chaparrastique
- Ingenio El Ángel
- Ingenio La Cabaña
- Ingenio Jiboa
- Ingenio La Magdalena

3.2.1. DEFINICIÓN Y ESTRUCTURA QUÍMICA DEL AZÚCAR

Tal y como lo describe Zepeda Guardado (2012), el azúcar es un endulzante de origen natural, sólido, cristalizado, constituido esencialmente por cristales sueltos de sacarosa, obtenidos a partir de la caña de azúcar (*Saccharum officinarum*) o de la remolacha azucarera (*Beta vulgaris*) mediante procedimientos industriales determinados.

La sacarosa es un carbohidrato de origen natural compuesto por 12 átomos de carbono, 22 átomos de hidrógeno y 11 de oxígeno. Su fórmula molecular condensada es $C_{12}H_{22}O_{11}$ (oxígeno 51.42 %, carbono 42.10 %, hidrógeno 6.48 %). Posee un peso molecular de 342.30 g/mol, es un sólido cristalino que carameliza a 160 °C, es un azúcar no reductor y polialcohol que tiene 3 grupos hidroxilos primarios (-CH₂OH 6, 1'y 6') y 5 en posición secundaria (-CH-OH, 2, 3, 3', 4 y 4'). La sacarosa de la caña de azúcar es un disacárido natural formado por el enlace bioquímico (enlace glucosídico) de los monosacáridos glucosa (azúcar de uvas o dextrosa) y fructosa (azúcar de frutas o levulosa).

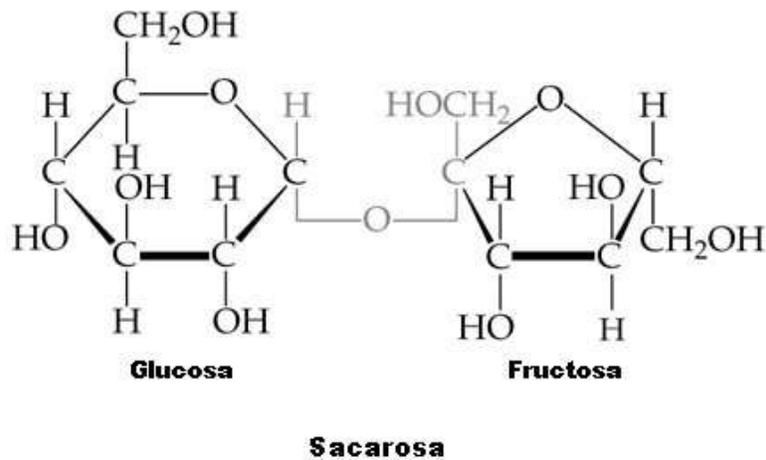


Figura 3.6. Estructura molecular de la sacarosa (Zepeda Guardado, 2012).

El azúcar comercial es sacarosa de diferentes grados de pureza. La azúcar refinada es una de las sustancias orgánicas más puras que se conocen, contiene 99.96 % de sacarosa y el resto consiste de humedad, por lo que también se le llama simplemente sacarosa, para distinguirla de los demás azúcares.

El azúcar se obtiene industrialmente de la caña de azúcar, remolacha azucarera, sorgo dulce, palma datilera, maíz dulce, así como de otras fuentes con un alto contenido en sacarosa. La caña de azúcar contiene entre 8 y 15 %p/p de sacarosa. El jugo obtenido mediante el proceso de la molienda de la caña, es concentrado y posteriormente la sacarosa es cristalizada al evaporar el agua por calentamiento. Los cristales formados son el azúcar crudo, o de ser refinados, el azúcar blanco.

El azúcar pocas veces se consume en forma directa, siendo lo usual adicionarlo a otros alimentos para mejorar su sabor, textura y cuerpo (bebidas, jugos, helados), utilizarlo como preservante (leche, frutas, jamones) y como mejorador de la apariencia (panadería, pastelería).

3.2.2. VARIEDADES DE LA CAÑA DE AZÚCAR

La caña de azúcar es una gramínea tropical que pertenece a la misma variedad (Andropogoneae) que la del sorgo, el pasto Johnson y el maíz. La caña de azúcar que se cultiva actualmente es un híbrido complejo de dos o más de las cinco especies del género *Saccharum*: *S. barberi* Jeswiet, *S. officinarum* L., *S. robustum* Brandes y Jesw. Es Grassl, *S. sinense* Roxb. y *S. spontaneum*. Muchas formas de estas especies hibridizan, originando un género muy diverso.

Algunos investigadores piensan que *Saccharum* se desarrolló en el área de Birmania, China e India en el Asia Meridional. *Saccharum spontaneum*, *S. sinense* y *S. barberi*, son típicas de esta región; las formas relativamente jugosas de las dos últimas especies fueron utilizadas en los comienzos del cultivo y procesamiento de aquellas con *Miscanthus*, y evoluciono a *S. officinarum* en el área de Nueva Guinea (Chen, 1997).

3.2.3. COMPOSICIÓN QUÍMICA DE LA CAÑA DE AZÚCAR

La composición química de la caña de azúcar es la resultante de la integración e interacción de varios factores que intervienen en forma directa e indirecta sobre sus contenidos, variando los mismos entre lotes, localidades, regiones, condiciones climáticas, variedades, edad de la caña, estado de madurez de la plantación, grado de despunte del tallo, manejo incorporado, períodos de tiempo evaluados, características fisicoquímicas y microbiológicas del suelo, grado de humedad (ambiente y suelo), fertilización aplicada y otros (Zepeda Guardado, 2012). La Tabla 3.2 muestra la composición química promedio de la caña de azúcar.

Tabla 3.2. Composición química promedio de los tallos y los jugos de la caña de azúcar

CONSTITUYENTE QUÍMICO		PORCENTAJE (%)
EN LOS TALLOS:		
Agua		73 – 76
Sólidos		24 – 27
	Sólidos solubles (Brix)	10 – 16
	Fibra seca	11 – 16
EN EL JUGO:		
Azúcares	Sacarosa	75 – 92
	Glucosa	70 – 88
	Fructosa	2 – 4
Sales	Inorgánicas	3.0 – 3.4
	Orgánicas	1.5 – 4.5
Ácidos orgánicos		1 – 3
Aminoácidos		1.5 – 5.5
Otros no Azúcares	Proteína	0.5 – 0.6
	Almidones	0.001 – 0.050
	Gomas	0.3 – 0.6
	Ceras, Grasas, etc.	0.15 – 0.50
	Compuestos fenólicos	0.10 – 0.80

Fuente: Zepeda Guardado, 2012.

En términos globales la caña está constituida principalmente por jugo (conteniendo agua y sacarosa) y fibra, siendo la fibra la parte insoluble en agua formada por celulosa, la que a su vez se compone de azúcares simples como la glucosa (dextrosa). A los sólidos solubles en agua expresados como porcentaje y representados por la sacarosa, los azúcares reductores y otros componentes, comúnmente se les conoce como Brix. La relación entre el contenido de sacarosa presente en el jugo y el Brix se denomina pureza del jugo. El contenido “aparente” de sacarosa, expresado como un % en peso y determinado por polarimetría, se conoce como “Pol”. Los sólidos solubles diferentes de la sacarosa, que contempla los azúcares reductores como la glucosa y la fructuosa y otras sustancias orgánicas e inorgánicas, se denominan usualmente “No Pol” o “No Sacarosa”, los

cuales corresponden porcentualmente a la diferencia entre Brix y Pol (Zepeda Guardado, 2012).

3.2.4. SIEMBRA Y COSECHA DE LA CAÑA DE AZÚCAR

En áreas tropicales, se puede plantar o bien la parte superior de la caña o segmentos cortos del tallo (“semilla”) con dos o tres yemas. En las áreas templadas, donde las estacas deben sobrevivir el invierno en un estado de latencia, se plantan tallos enteros a fin de disminuir la descomposición de estos. La tasa de crecimiento de las plantas jóvenes está directamente relacionada con el tamaño del trozo que sirve de semilla y la cantidad disponible de azúcar. La caña se siembra en un agujero poco profundo o en hileras de surcos y se cubre de tierra por medio de un azadón o de una rastra de discos, además se añaden herbicidas especiales poco después de la siembra. La siembra ya sea a mano o con maquina cumple con el doble propósito de apilar tierra contra el vástago en desarrollo y remover o cubrir las malas hierbas. El tiempo más apropiado para la fertilización es el inicio del gran periodo de crecimiento y se pueden utilizar aplicaciones parciales en las temporadas largas de crecimiento.

A medida que se acerca la época de la cosecha en las áreas de regadío, es posible retardar el crecimiento y aumentar el contenido de sacarosa limitando el nitrógeno y el agua. La cosecha tiene como meta entregar al molino tallos de caña de azúcar de buena calidad. Hay dos formas de recolectar la caña: recolección a mano y recolección mecánica, se dice que un cortador experto puede cortar, descogollar y desmontar 1000 lb de caña por hora, mientras que la recolección mecánica corta en promedio 50 toneladas de caña por hora (Chen, 1997).

3.2.5. PROCESOS DE PRODUCCIÓN DE AZÚCAR A PARTIR DE CAÑA

El proceso de producción de azúcar se encuentra estandarizado en todos los ingenios del país. Si existen diferencias, se deben únicamente a los modelos de los equipos utilizados. Los principales procesos de un ingenio azucarero partiendo de caña de azúcar se muestran en la Figura 3.7 y serán descritos posteriormente.

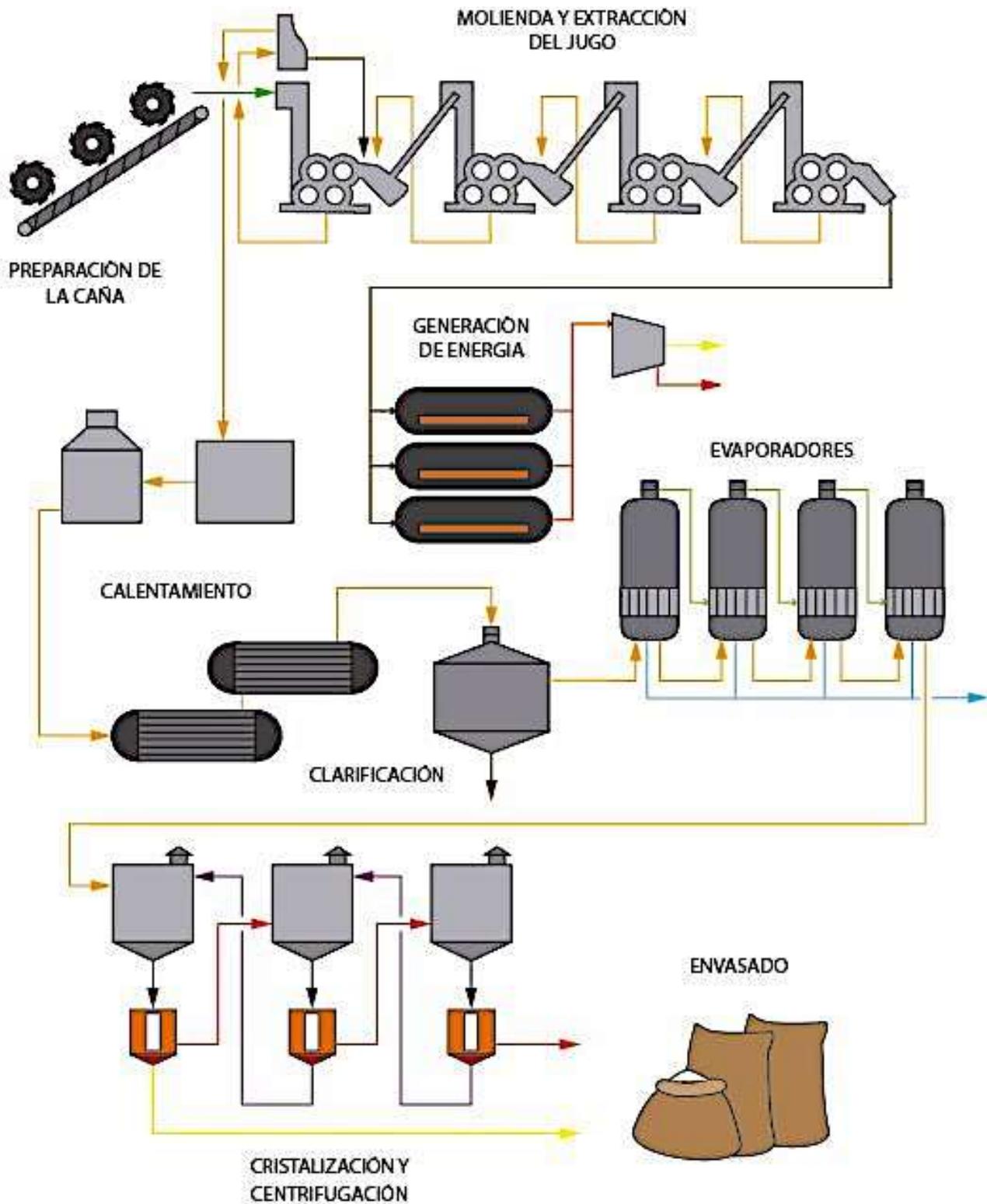


Figura 3.7. Diagrama de operación de un ingenio azucarero (Autor, 2016)

3.2.5.1. EXTRACCIÓN DEL JUGO

La extracción del jugo se realiza moliendo la caña, haciéndola pasar entre pesados rodillos y constituye la primera etapa del procesamiento del azúcar crudo.

En el área de recepción y preparación se encuentra un juego de chuchillas donde se introduce la caña, la función de las cuchillas es exponer la fibra y reducir el tamaño de los tallos. De esta forma se obtiene una mejor extracción de jugo en los molinos.

Los juegos de molinos varían de acuerdo a la capacidad de la planta, cada molino está compuesto por cuatro rodillos, en algunos ingenios los molinos funcionan a base de vapor y energía eléctrica, sin embargo, los más modernos funcionan únicamente con energía eléctrica.

En el primer molino se obtiene el jugo primario y a medida que la caña pasa por todos los molinos de la serie, el jugo obtiene mayor porcentaje de sacarosa; en el último molino se agrega el agua de imbibición para aumentar la velocidad de transferencia de masa y obtener mayor extracción de sacarosa. Una vez el jugo ha sido mezclado con el agua de imbibición se hace pasar por los molinos en sentido contrario al que lleva la caña, esto contribuye a extraer el azúcar por lixiviación (Anónimo, 2016).

En las prácticas de molienda más eficientes, más del 95 % del azúcar contenido en la caña pasa al guarapo; este porcentaje se conoce como la extracción de sacarosa (Pol de la extracción).

El bagazo final que sale del último molino contiene azúcar no extraído, fibra leñosa y de un 45 a 55 % de agua. Por lo general, este material pasa a las calderas como combustible o utilizan el bagazo como cama para el ganado, o cualquier otra utilización comercial de los productos secundarios (Zepeda Guardado, 2012).

El resumen de los principales parámetros de operación en el área de molinos se muestra en la Tabla 3.3.

Tabla 3.3. Valores promedio de los principales parámetros de operación en el área de molinos

PUNTO DE CONTROL	PARÁMETROS DE CONTROL	RANGO PROMEDIO DE OPERACIÓN
CAÑA PREPARADA	Índice de preparación (%)	69.0 – 73.0
	Pureza % Jugo	84.0 – 88.0
	Fibra % Caña	11.5 – 14.5
	Pol % Caña	12.0 – 14.5
JUGO PRIMARIO	Pol	16.5 – 18.5
	Brix	22.0 – 29.0
	% Pureza	85.5 – 88.0
	pH	5.0 – 6.0
	T(°C)	23.5 – 26.5
JUGO DILUIDO	Pol	12.5 – 15.0
	Brix	15.0 – 17.5
	% Pureza	84.0 – 86.0
	pH	5.0 – 5.5
	T(°C)	25.0 – 30.0
BAGAZO MOLINO N°7	Brix	41.0 – 43.0
	pH	10.0 – 12.0
	T (°C)	50.0 – 55.0
SACARATO DE CALCIO	Brix	41.0 – 43.0
	pH	10.0 – 12.0
	T (°C)	50.0 – 55.0
AGUA DE IMBIBICIÓN	T(°C)	60.0 – 70.0
DESARENADORES	Presión entrada desarenadores primarios (psig)	30.0
	Presión entrada desarenadores secundarios (psig)	15.0

Fuente: Zepeda Guardado, 2012.

3.2.5.2. PURIFICACIÓN DEL JUGO

La purificación del jugo consiste de dos partes, la purificación y la clarificación:

- **PURIFICACIÓN**

Los procedimientos recientes indican la necesidad de eliminar la mayor cantidad de los sólidos en suspensión, especialmente si la caña se cosecha por medios mecánicos. El material a extraer consiste principalmente en tierra, arena y roca molida que no extrajo el tamizador preliminar. Los dispositivos de decantación de tipo continuo son efectivos para eliminar las partículas más gruesas, pero no eliminan la arcilla y las tierras finas. (Chen, 1997).

El proceso inicia cuando el jugo se bombea hasta los tanques de floculación, donde se dosifica floculante, que es una solución de polietilamida al 0.05 %, esto permite que todos los coágulos, flóculos y partículas que tienen carga aniónica se unan con las de carga catiónica y de depositen en el fondo de los tanques, formando lodos.

Los lodos se hacen pasar por filtros en forma de tambores que trabajan al vacío, para extraer el contenido de sacarosa remanente, a esto se le llama jugo sucio y es regresado a los procesos para ser tratado, la parte de los lodos que contienen un mínimo de sacarosa es llamada cachaza y es utilizada en los campos de cultivo (Anónimo, 2016).

- **CLARIFICACIÓN**

En la producción del azúcar crudo, generalmente, la cal y el calor son los únicos agentes que se utilizan con el fin de clarificar el jugo. Debido a que la cal tiene poca solubilidad, en algunos ingenios, se mezcla con una solución azucarada para formar sacarato, que tiene una mayor solubilidad.

La solución de sacarato neutraliza la acidez natural del jugo, cambiando su pH de 5.6 a 7, aproximadamente. El calentamiento de jugo alcalizado hasta el punto de ebullición o ligeramente arriba coagula la albúmina y algunas grasas, ceras y gomas; el precipitado que se formó de esta manera atrapa los sólidos en suspensión al igual que las partículas más finas. Los lodos se separan del jugo clarificado por sedimentación y se filtran en tambores rotativos de filtración. El jugo filtrado regresa al proceso o pasa directamente al jugo clarificado y la torta de la cachaza es desechada o regresada a los campos como fertilizante. El Jugo clarificado transparente y de un color parduzco pasa por los evaporadores sin tratamiento adicional (Anónimo, 2016).

3.2.5.3. EVAPORACIÓN

Tanto la fabricación como la refinación del azúcar crudo de caña requieren evaporar el agua presente en la solución de azúcar a fin de obtener un producto final cristalino.

El sistema de evaporación elimina alrededor de 75 a 80 % del agua presente en el jugo clarificado, aumentando la concentración de los sólidos presentes en el jugo desde aproximadamente 15 a 65 °Brix. El jugo proveniente del tanque de jugo claro es bombeado a los evaporadores de primer efecto o pre-evaporadores para el inicio de la concentración del jugo hasta alcanzar una concentración de 23 - 28 °Brix y una temperatura entre 240 y 250 °F. Los primeros efectos trabajan con vapor de escape a 20 psi y temperatura de saturación proveniente de los turbogeneradores 228 °F (109 °C).

El jugo que sale de los primeros efectos llega al tanque de primer efecto desde donde es bombeado hacia los evaporadores de segundo efecto. El vapor vegetal (vapor proveniente de la evaporación del jugo) que se genera en los primeros efectos es utilizado para calentar el jugo en los evaporadores de segundo efecto y

el que se genera en estos sirve para calentar el jugo de los terceros efectos y de igual forma con los evaporadores de cuarto efecto o meladores. El jugo en los segundos efectos se concentra hasta 30 - 37 °Brix. El jugo que sale de los segundos efectos se alimenta a los cuerpos de tercer efecto por medio de vacío generado por los condensadores de los meladores donde se concentra hasta 40-46 °Brix. En los meladores el jugo se concentra hasta obtener la meladura (60 - 65 °Brix) calentándola con el vapor que proviene de los terceros efectos. Por efecto del trabajo de los evaporadores de múltiple efecto, al final de toda la operación se evapora aproximadamente el 65 - 75 % del agua presente en el jugo reduciendo su contenido de agua hasta 35 - 40 %. Estos parámetros se encuentran resumidos en la Tabla 3.4 (Zepeda Guardado, 2012).

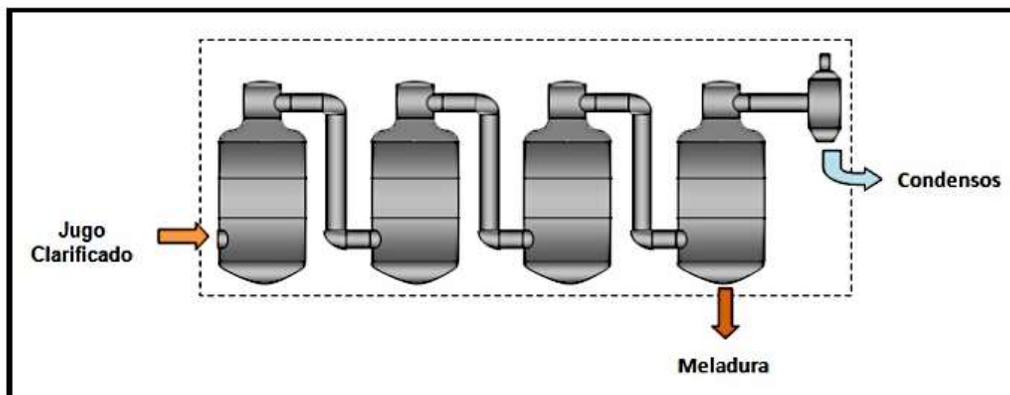


Figura 3.8. Sistema de evaporación de múltiple efecto (Zepeda Guardado, 2012).

Se utilizan evaporadores tipo calandria con tubos de cobre o acero inoxidable. Largo de 4 a 6 pies y diámetro de 1 a 1.25 pulg. El cobre es preferido porque tiene mayor coeficiente de transferencia de calor (UES-FIA-EIQA, 2014).

Durante la época de zafra los evaporadores trabajar de manera continua, por lo tanto, en los ingenios se suele tener dos juegos de evaporadores, uno en operación y otro en mantenimiento, para limpiar los tubos y evitar que se

produzcan incrustaciones que reducen el coeficiente de transferencia de calor y la eficiencia del evaporador (Anónimo, 2016).

Tabla 3.4. Valores promedio de los parámetros de operación en la estación de evaporación

ETAPA	CORRIENTE DE PROCESO	PARÁMETRO DE OPERACIÓN	VALOR PROMEDIO DE OPERACIÓN
PRIMER EFECTO (Pre-evaporadores)	Jugo claro	Pol	12.0 – 14.5
		Brix	15.0 – 17.0
		% Pureza	84.0 – 85.0
		pH	6.9 – 7.1
	Jugo primer efecto (Vaso)	T (°F)	240 – 250
		Brix	23 – 28
	Vaso primer efecto (Calandria)	T (°F)	240
Brix		20	
SEGUNDO EFECTO	Jugo segundo efecto (vaso)	T (°F)	220 – 225
		Brix	30 – 37
	Vapor segundo efecto (calandria)	T (°F)	220 – 230
		Presión (psi)	3 – 5
TERCER EFECTO	Jugo tercer efecto (Vaso)	T (°F)	200 – 210
		Brix	40 – 46
	Vapor tercer efecto (Calandria)	T (°F)	180 – 190
		Presión (psi)	12 – 13
CUARTO EFECTO (Meladores)	Meladura	pH	6.3 – 6.5
		Brix	60 – 65

Fuente: Zepeda Guardado, 2012.

3.2.5.4. CRISTALIZACIÓN DEL AZÚCAR

Es el proceso en el cual la meladura obtenida es sometida a evaporación hasta su concentración máxima, por lo que a medida que la meladura se concentra su viscosidad aumenta rápidamente y luego comienzan a aparecer los cristales de azúcar.

Esta pérdida de fluidez del material hace necesario que se realice un manejo diferenciado del mismo, ya que no es posible circularlo en tubos angostos de un cuerpo a otro; por lo tanto, la evaporación debe realizarse en un solo efecto, el equipo es similar al de los evaporadores, pero adaptado para manejar el producto viscoso que debe concentrar.

Los cristalizadores, o mejor conocidos con el nombre de tachos, operación de la cual depende la calidad del azúcar final. Los tachos son equipos de evaporación de simple efecto que operan al vacío efectuando la evaporación a baja temperatura para procesar la meladura con el objeto de producir azúcar cristalizada mediante la aplicación de calor, evitando con esto la caramelización del azúcar. El material resultante denominado masa cocida contiene líquido o miel y cristales de azúcar.

La etapa de cocimiento se lleva a cabo mediante un sistema de tres cocimientos. El primer cocimiento se lleva cabo en tachos de primera donde se obtiene masa cocida A, a partir de la cual se obtiene el azúcar de primera o comercial, en los tachos de segunda se produce la masa cocida B y en los de tercera la masa cocida C.

Las masas cocidas se conducen a una serie de cristalizadores que consisten en tanques de agitación horizontal equipados con serpentines de enfriamiento. Aquí se deposita más sacarosa sobre los cristales ya formados y se completa la cristalización (Ver Figura 3.9).

En los cristalizadores de primera, segunda y tercera se descargan las plantas de masa cocida A, B y C respectivamente. En los cristalizadores se busca maximizar el agotamiento de las mieles de las masas cocidas, depositándose la sacarosa en los cristales de azúcar obtenidos en los tachos por sobresaturación. Las masas cocidas A (MCA) después de descargar los tachos, se depositan en cuatro

diferentes cristalizadores, mientras que las masas de segunda o MCB se depositan en otros dos cristalizadores. Debido al menor grado de pureza y mayor viscosidad de las masas de tercera o MCC, la cristalización de las mismas se lleva a cabo empleando un sistema compuesto por tres tipos de cristalizadores (Zepeda Guardado, 2012).

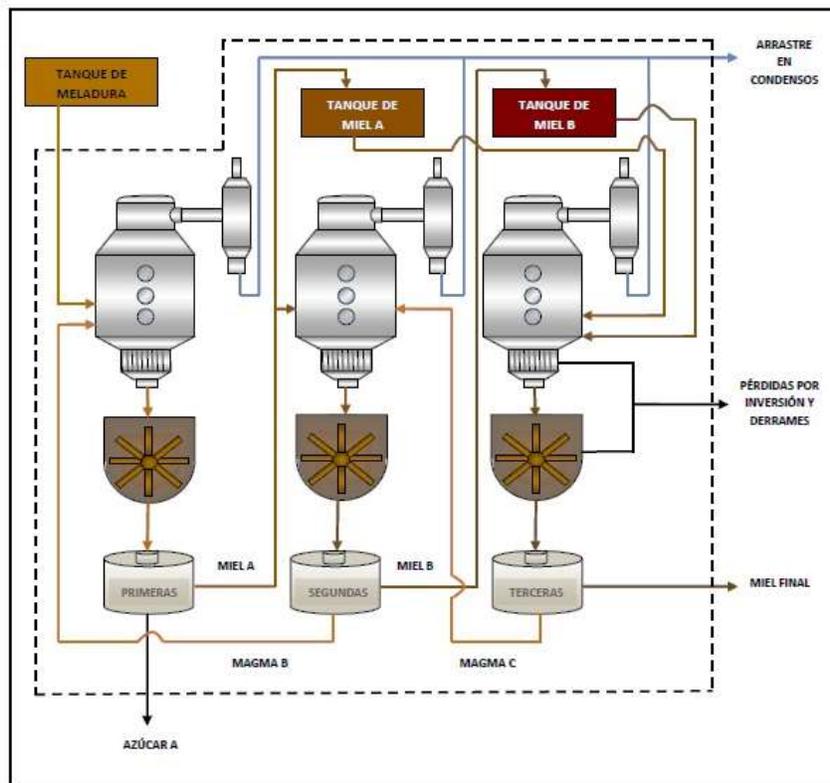


Figura 3.9. Sistema de cristalización en tachos (Zepeda Guardado, 2012)

Los valores promedio de las principales variables fisicoquímicas de los productos que se manejan en las etapas de cocimiento y cristalización se muestran en la Tabla 3.5.

Tabla 3.5. Valores promedio de las variables fisicoquímicas de las corrientes de proceso en las etapas de cocimiento y cristalización

ETAPA	CORRIENTE DE PROCESO	PARÁMETRO DE OPERACIÓN	VALOR PROMEDIO DE OPERACIÓN
COCIMIENTO Y CRISTALIZACIÓN	Meladura cruda	Pureza	83 – 86
		pH	6.1 – 6.5
		Brix	6.0 – 6.7
	Meladura clarificada	Pureza	83 – 87
		pH	5.9 – 6.2
		Brix	64 – 67
	Miel A	Pol	52 – 56
		Brix	81 – 84
		Pureza	64 – 67
	Miel B	Pol	43 – 45
		Brix	86 – 89
		Pureza	49 – 51
	Masa cocida A	Pol	77- 79
		Brix	92 – 94
		Pureza	83 – 85
	Masa cocida B	Pol	63 – 65
		Brix	95 -96
		Pureza	67 – 68
	Masa cocida C	Pol	51 – 54
		Brix	99 – 99.6
		Pureza	51 – 55
Magma B	Pol	78 – 83	
	Brix	89 – 91	
	Pureza	87 – 92	
Magma C	Pol	71 – 76	
	Brix	88 – 90	
	Pureza	80 – 84	

Fuente: Zepeda Guardado, 2012.

Tabla 3.6. Valores promedio de los parámetros de operación en el control de masa cocida C

CORRIENTE DE PROCESO	PARÁMETRO DE OPERACIÓN	VALOR NORMAL DE OPERACIÓN	
		°F	°C
Masa cocida C (MCC)	Temperatura MCC a la salida de cristalizadores	120 – 125	48.8 – 51.6
	Temperatura MCC en el mezclador de centrifugas	131 – 134	55.0 – 56.7
	Temperatura del agua de calentamiento de la MCC	149.0	65.0

Fuente: Zepeda Guardado, 2012.

3.2.5.5. PURGA, ENVASADO Y ALMACENAMIENTO DEL AZÚCAR

La purga o centrifugación es el proceso por medio del cual se separan los granos o cristales de azúcar de las aguas madres (mieles), para lograr esta separación se utiliza la fuerza centrífuga y una diversidad de mallas que retienen los granos de azúcar (Chen, 1997).

En la práctica el proceso de centrifugado y la cristalización funcionan en conjunto. De cada separación se obtiene azúcar y mieles que tienen una función en la cristalización. La purga ocurre en tres etapas (Zepeda Guardado, 2012):

- A) Purga de primera: en esta etapa se separan el azúcar A, que sale del proceso como producto terminado, de la miel A, que es enviada a los tanques de mieles para ser utilizada nuevamente en los tachos.
- B) Purga de segunda: en esta etapa se separan el azúcar B, que se mezcla con agua para formar Magma B, de la miel B, que es enviada a los tanques de mieles para ser utilizada nuevamente en los tachos.
- C) Purga de tercera: en esta etapa se separan el azúcar C, que se mezcla con agua para formar Magma C, de la miel C, que es enviada a los tanques de miel final y puede comercializarse.

Los valores promedio de propiedades fisicoquímicas de los productos que participan en el proceso de centrifugación se muestran en la Tabla 3.7.

Tabla 3.7. Valores promedio de propiedades fisicoquímicas de los productos en el proceso de centrifugación

ETAPA	CORRIENTE DE PROCESO	PARAMETRO DE OPERACIÓN	RANGO PROMEDIO DE OPERACIÓN
CENTRIFUGACIÓN	Miel final	Pol	51 – 54
		Brix	99 – 99.6
		Pureza	51 - 53
	Azúcar crudo	Pol	98.3 – 98.9
		%Humedad	0.1 – 0.5
		Color (UI)	500 - 2000
	Azúcar blanco	Pol	99.45 – 99.55
		%Humedad	0.05 – 0.06
		Color (UI)	150 - 400

Fuente: Zepeda Guardado, 2012.

La centrifugación también tiene un papel fundamental y complejo en el proceso de refinación.

El azúcar se deposita con tolvas en las bandas, y por este medio se transporta hasta su lugar de almacenamiento. El azúcar es almacenado de diferentes maneras de acuerdo a la forma en que va a comercializarse. Por lo general, se utilizan sacos cuyo contenido se ajusta a las necesidades del cliente y procuran mantener las condiciones de exportación para azúcar crudo: pol mínima 98.3, pol máxima 99.4, humedad 0.2 %, color 1200 - 1600 y ceniza 0.2 %. (Zepeda Guardado, 2012). También puede almacenarse a granel como lo explica Chen (1997), por lo general con paredes reforzadas muy resistentes de 3 metros de altura.

3.2.5.6. BAGAZO Y SU APROVECHAMIENTO: CICLO DE POTENCIA

En las centrales azucareras, el uso más común del bagazo y de mayor difusión es el aprovechamiento de su capacidad calórica mediante su combustión en las calderas del propio ingenio azucarero, produciendo energía térmica para la generación de vapor, el cual se utiliza en la fabricación del azúcar crudo y en el proceso de refinación del azúcar (Zepeda Guardado, 2012). El poder calórico del bagazo y otros combustibles se presenta en la Tabla 3.8.

Tabla 3.8. Poder calórico de los combustibles

COMBUSTIBLE	P.C. (KJ/kg)	P.C. (Kcal/ kg)
Gasolina	46,054.8	11,000
Diésel	45,670	10,908
Petróleo	41,868	10,000
Carbón Vegetal	28,461.9	6,798
Carbón Mineral	28,051.6	6,700
Etanol	26,795.5	6,400
Metanol	19,678	4,700
Biodiesel	42,760	10,213
Metano (GLP)	46,100	
Metano (biogás)	Promedio entre 18.8 y 23.4 MegaJulios por m ³	
Propano	46,433.6	P.C.I. 11,082
	50,497.9	P.C.S. 12,052
Butano	45,830.2	P.C.I. 10,938
	49,722.73	P.C.S. 11,867
Bagazo de caña 12 % Hm	16,956.5	4,050
Bagazo de caña 45 % Hm	10,592.6	2,530.0
Cascarilla de café	17,584.6	4,200

Fuente: UES-FIA-EIQA, 2013.

P.C.I. Poder calórico inferior

P.C.S. Poder calórico superior

Cuando el trabajo de los molinos es deficiente, el contenido de humedad del bagazo será de aproximadamente 50 %, mientras que con un buen trabajo su contenido será del 40 %. Los valores más frecuentes de humedad son: 42-48 %.

La cantidad del bagazo varía entre 24 a 30 % del peso de la caña, por ejemplo: la cantidad de bagazo que se espera de 1 tonelada de caña es 200 kg hasta 300 kg (González, 2013).

CONFIGURACIÓN DE LA PLANTA DE POTENCIA

Algunas de las configuraciones de plantas de potencia más comunes en los ingenios azucareros de El Salvador consisten en: una serie de calderas, en las que se utiliza el bagazo como combustible para producir vapor de agua, uno o más turbinas de múltiples etapas, un turbogenerador, condensador y bombas.

En los ingenios en los cuales los molinos aun funcionan a base de vapor y energía eléctrica, una parte del vapor producido en las calderas es dirigido a los molinos y el resto es inyectado a la turbina para generar energía eléctrica.

La energía producida por el turbogenerador muchas veces sobrepasa la cantidad de energía que los procesos del ingenio demandan, por lo tanto, cierto porcentaje es inyectado a la red local de energía eléctrica.

DESCRIPCIÓN DE LOS EQUIPOS (UES-FIA-EIQA, 2013)

- **Caldera:** Generación de vapor de agua a partir de agua en estado líquido a alta presión, con el aprovechamiento del calor de reacción de un combustible.
- **Turbina:** Generación de potencia por el intercambio de energía calórica a energía mecánica. Se da intercambio de energía con los alrededores en forma de trabajo, tomando el trabajo generado como negativo por estar saliendo del sistema. El vapor saliente con menor contenido energético se conoce como vapor exhausto, puede ser vapor saturado seco o con calidad arriba del 90 %, para no afectar el aspecto mecánico de las partes móviles

del equipo. Luego con los mecanismos adecuados se aprovecha la conversión de la potencia generada para su conversión a energía eléctrica.

- **Bombas:** Su función básica es el transporte de un fluido y elevar la presión del mismo. Para operar, requieren del suministro de energía en forma de trabajo.
- **Intercambiador de calor:** Su función general es el calentamiento de un fluido o enfriamiento de un fluido con o sin cambio de fase. No requieren de trabajo mecánico.

CAPÍTULO IV

4.0. LA SIMULACIÓN DE PROCESOS: GENERALIDADES

4.1. ANTECEDENTES

Podemos considerar a la tarea de simulación como aquella en la cual proponemos ciertos valores de entrada al programa de simulación para obtener ciertos resultados o valores de salida, tales que estiman el comportamiento del sistema real bajo esas condiciones (Scenna y col., 1999).

La simulación de un proceso químico tiene como objetivo representar las transformaciones químicas o físicas a través de un modelo matemático que implica el balance de masa y los balances energéticos acoplados con el equilibrio de fases y con la cinética de las ecuaciones. Todo se hace con el fin de establecer (predecir) un comportamiento para un proceso determinado de estructura conocida, en el que algunos datos de los equipos utilizados son de conocimiento general. Los modelos matemáticos utilizados en la simulación incluyen ecuaciones lineales, no lineales y diferenciales, que representan a los equipos o las operaciones del proceso, sus especificaciones y las propiedades fisicoquímicas (Gil, García & Rodríguez, 2016).

En los primeros pasos, la simulación de procesos se basaba principalmente en circuitos analógicos. En efecto, la teoría de sistemas nos muestra que diversos principios físicos tienen asociados modelos matemáticos equivalentes o isomórficos, es decir que tienen la misma forma. Por ejemplo, ciertos circuitos eléctricos, circuitos hidráulicos, procesos de transferencia tanto de materia como

energía y cantidad de movimiento, son descritos por el mismo conjunto de ecuaciones diferenciales. Consecuentemente, podría resultar conveniente analizar (simular analógicamente) el comportamiento de un sistema (proceso químico) observando la evolución de las variables *equivalentes* en un circuito eléctrico (cuyo modelo es equivalente al proceso estudiado), ya que son fácilmente medibles. Posteriormente, a partir del uso masivo de la computadora digital, y de la revolución que implica la informática en todos los campos de la ingeniería, se evoluciona lentamente de la simulación analógica a la digital, habiendo prácticamente desaparecido la primera en muchas aplicaciones. Una computadora se caracteriza simplemente por el hecho de realizar cálculos velozmente luego de ser programada. Almacena, manipula y da acceso rápido a enorme cantidad de información, permitiendo además realizar manipulaciones simbólicas. Independientemente de la forma en que esto es logrado, lo importante en este caso es comprender las consecuencias; es decir, las implicancias de este fenómeno en el campo de la Ingeniería.

Si bien en 1946 se desarrolla la primera computadora electrónica operativa (la ENIAC en la Universidad de Pensilvania), recién en 1951 se presenta la primera computadora comercial. A partir de esta década se incorpora a la mayoría de las universidades de los países desarrollados un centro de cómputos.

Un hecho relevante es la aparición de los microprocesadores a partir de la década de los setenta, cuya consecuencia inmediata resultó ser la masificación de las computadoras, al introducirse comercialmente en los ochenta las computadoras personales. Este hecho produce una revolución *informática*, en el sentido de tener acceso prácticamente a bajo costo; tanto los profesionales como los estudiantes y docentes, a una computadora relativamente eficiente, hecho que anteriormente solo estaba permitido a pocas personas con acceso a centros de cómputos, cuyo costo de mantenimiento era elevado.

Como consecuencia de estos sucesos, se comienza a cubrir la brecha entre los métodos pre computadora y los algoritmos numéricos programados aplicados a la ingeniería química; como da testimonio, por ejemplo, el libro de Lapidus (1962). En el año 1974 aparece el primer simulador de procesos químicos, (el FLOWTRAN). A partir de allí se ha generado una sucesión de acontecimientos que permiten en la actualidad la existencia de varios y eficientes simuladores comerciales como por ejemplo ASPEN PLUS, PRO II, HYSYS, CHEMCAD, y otros (Scenna y col., 1999).

4.1.1. CLASIFICACIÓN DE LOS MÉTODOS DE SIMULACIÓN

Las herramientas de simulación pueden clasificarse según diversos criterios, por ejemplo, según el tipo de procesos (batch o continuo), si involucra el tiempo (estacionario o dinámico, el cual incluye a los equipos batch), si maneja variables estocásticas o determinísticas, variables cuantitativas o cualitativas, etc.

A continuación, se expondrán las características de los distintos tipos de herramientas de simulación generalmente utilizadas (Scenna y col., 1999).

- **Simulación cualitativa:** tiene por objeto principalmente el estudio de las relaciones causales y las tendencias temporales cualitativas de un sistema, como así también la propagación de perturbaciones a través de un proceso dado.
- **Simulación cuantitativa:** es aquella que describe numéricamente el comportamiento de un proceso, a través de un modelo matemático del mismo. Para ello se procede a la resolución de los balances de materia, energía y cantidad de movimiento, junto a las ecuaciones de restricción que imponen aspectos funcionales y operacionales del sistema. La simulación cuantitativa abarca principalmente la simulación en estado estacionario y la simulación en estado dinámico.

- **Simulación en estado estacionario**: implica resolver los balances de un sistema no involucrando la variable temporal, por lo que el sistema de ecuaciones deseará estudiar o reflejar en el modelo las variaciones de las variables de interés con las coordenadas espaciales (modelos a parámetros distribuidos); entonces deberá utilizarse un sistema de ecuaciones diferenciales a derivadas parciales (según el número de coordenadas espaciales consideradas). Un ejemplo puede ser la variación radial de la composición en un plato en una columna de destilación.
- **Simulación en estado dinámico**: plantea los balances en su dependencia con el tiempo, ya sea para representar el comportamiento de equipos batch, o bien para analizar la evolución que se manifiesta en la transición entre dos estados estacionarios para un equipo o una planta completa. En este caso, el modelo matemático estará constituido por un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias cuya variable diferencial es el tiempo, en el caso de modelos a parámetros concentrados.

4.2. SIMULADORES ACTUALES PARA PROCESOS QUÍMICOS

Los simuladores de procesos químicos son herramientas básicas en la mayoría de los programas universitarios de ingeniería química y de las industrias químicas.

4.2.1. SIMULADORES COMERCIALES

Existen programas de simulación privados, es decir, que han sido desarrollados por empresas privadas y son de uso exclusivo para ellas o se paga una membresía para acceder a estos; y académicos que poseen características de simulación específicas que pueden superar muchas veces a los paquetes comerciales. Algunos de los simuladores comerciales actuales son (Mendivil, 2012):

- **Aspen Plus**

Simulador de Procesos Aspen Plus, utilizado fundamentalmente en la esfera industrial. El Sistema Avanzado para Ingeniería de Procesos - Advanced System for Process Engineering (ASPEN), es un mercado líder en herramientas de modelado de proceso de diseño conceptual, optimización y monitoreo de desempeño para la industria química, polímeros, especialidades químicas, metales y minerales. Desarrollado en la década de 1970 por investigadores del Massachusetts Institute of Technology (MIT) y comercializado desde 1980 por una compañía denominada AspenTech. Aspen Plus es un simulador estacionario, secuencial modular (en las últimas versiones permite la estrategia orientada a ecuaciones). Actualmente es posible que sea el más extendido en la industria. Se ha utilizado para modelar procesos en industrias: química y petroquímica, refino de petróleo, procesamientos de gas y aceites, generación de energía, metales y minerales, industrias del papel y la pulpa y otros. Aspen Plus tiene la base de datos más amplia entre los simuladores de procesos comerciales, e incluye comportamiento de iones y de electrolitos. Además, modela y simula cualquier tipo de proceso para el cual hay un flujo continuo de materiales y energía de una unidad de proceso a otra. Posee herramientas para cálculos de costes y optimizaciones del proceso, generación de resultados en forma gráfica y en tablas y otros.

- **CHEMCAD**

Nace en 1984 cuando un profesor universitario formó un equipo para desarrollar un simulador de procesos para computadoras personales. El simulador fue vendido a la sección de software de McGraw Hill (COADE) y luego siguió siendo desarrollado y distribuido por Chemstations Inc. CHEMCAD ha venido evolucionando durante estos años para convertirse en un paquete de módulos que abarca cálculo y diseño de intercambiadores de calor (CC-THERM), simulación de destilaciones dinámicas (CC-DCOLUMN), simulación

de reactores por lotes (CC-ReACS), simulación de destilaciones por lotes (CC-BATCH), simulación de redes de tuberías (CC-SAFETY NET). Este sistema es muy usado en todo el mundo para el diseño, operación y mantenimiento de procesos químicos en una gran variedad de industrias incluyendo la exploración de petróleo y gas; y naturalmente en procesos químicos, farmacéuticos, biocombustibles y procesos de fábricas industriales. De forma general este software, como una herramienta de productividad tiene muchas ventajas entre las que cabe mencionar las siguientes:

- Incremento en la productividad por el uso de información obtenida a partir de la simulación diaria de cálculos relacionados con las condiciones de operación.
- Maximizar la rentabilidad de las operaciones por el diseño más eficiente de nuevos procesos y equipos.
- Reducción de costos e inversiones de capital por la optimización y solución de los cuellos de botella existentes en los procesos y en los equipos.

- **HYSYS**

Utilizado fundamentalmente en la esfera industrial. HYSYS es un programa interactivo enfocado a la ingeniería de procesos y la simulación, que se puede utilizar para solucionar toda clase de problemas relacionados con procesos químicos. Este simulador cuenta con una interfaz muy amigable para el usuario, además de permitir el empleo de operadores lógicos y herramientas que facilitan la simulación de diversos procesos. Fue adquirido por AspenTech en el 2004 por lo que es desarrollado en la actualidad por Aspen Technology. Es un simulador bidireccional, ya que el flujo de información va en dos direcciones (hacia delante y hacia atrás). De esta forma, puede calcular las condiciones de una corriente de entrada a una operación a partir de las correspondientes a la corriente de salida sin necesidad de cálculos iterativos. Posee un entorno de simulación modular tanto para estado estacionario como

para régimen dinámico. Es un software para la simulación de plantas petroquímicas y afines.

- **SuperPro Designer**

El simulador de Plantas de Tratamiento de Efluentes Industriales SuperPro Designer de Intelligen, Inc. (USA), es un simulador de procesos de carácter ambiental vinculado con el acondicionamiento de los efluentes líquidos, gaseosos y sólidos producidos en las distintas industrias de proceso. Incluye un balance de materia global de la planta con la posibilidad de un balance térmico, distintos modelos que representan las etapas de tratamiento de un efluente en particular, una salida con las corrientes intervinientes y sus parámetros asociados (presión, temperatura, densidad, caudales totales e individuales por componente), una salida con los costos de los equipos principales, un análisis global de costos asociados al sistema de tratamiento, una salida con el impacto ambiental de las corrientes que ingresan y egresan del sistema y un análisis de factibilidad económica de la alternativa planteada. Posee un banco de datos de propiedades fundamentales (básicas y ambientales) de 350 componentes, las propiedades derivadas de las mismas son calculadas cuando la simulación lo requiere. Existe la posibilidad además de la incorporación de nuevos componentes a la base de datos o de modificar las propiedades relacionadas a los existentes. Incluye reactores químicos y biológicos, columnas de separación (cromatográficas y de intercambio iónico), secadores de fases y componentes, equipos de impulsión de gases y líquidos, entre otros (Palladino & Navarro, s.f).

- **Pro II**

El software PRO II (de Simulations Sciences, USA) es un simulador de estado estacionario que posibilita un análisis operacional y diseño de proceso mejorado. Está diseñado para realizar cálculos rigurosos de equilibrio de energía y masa para una amplia variedad de procesos químicos. Desde la

separación de gas y petróleo hasta la destilación reactiva, PRO II ofrece a las industrias del procesamiento de sólidos, gas natural, petróleo, químicos y polímeros la solución de simulación de procesos más integral disponible en la actualidad (Schneider Electric, s.f.).

4.2.2. SIMULADORES DE CÓDIGO ABIERTO

Los simuladores de código abierto presentan una alternativa al momento de desarrollar proyectos y trabajos de ingeniería química cuando se cuenta con presupuesto limitado, sin embargo, se han desarrollado pocos simuladores gratuitos, algunos de ellos son:

- **COCO Simulator**

Es un simulador secuencial gratuito, de estado estacionario, desarrollado por la empresa Amsterchem con estándares abiertos CAPE-OPEN. Incluye un entorno para diagramas de flujo de proceso, operaciones unitarias, paquete de cinética de reacciones y paquete termodinámico. Incluye también la funcionalidad para graficar distintos tipos de variables. Está integrado con varios componentes que se describirán con detalle en el capítulo V.

- **ChemSep**

ChemSep es un simulador de columna para las operaciones de destilación, absorción y extracción, con una interfaz fácil e intuitiva. Permite un máximo de 40 componentes y 300 etapas de equilibrio utilizando una base de datos que abarca más de 300 productos químicos. ChemSep viene incluido en la descarga de COCO y puede ser utilizado desde COFE (Interfaz gráfica de COCO).

Además, ofrece una amplia variedad de formas de analizar los resultados de la simulación, como McCabe-Thiele y diagramas operativos, e incluye un modo

de exportación completamente configurable para visualizar los resultados en una gran variedad de formatos, hoja de cálculo, texto, y html.

4.3. VENTAJAS DE USAR SIMULADORES

Como ya se mencionó previamente, el uso de los simuladores tanto en la industria química como en los programas universitarios de ingeniería química, resulta cada vez más necesario puesto que es una herramienta adecuada y oportuna de apoyo para el diseño, caracterización, optimización, monitoreo y estudio del funcionamiento de procesos químicos.

Entre las ventajas que ofrece la simulación de procesos químicos se tiene (Mendivil, 2012):

- Realiza cálculos de balances de materia y energía, equilibrio químico y entre fases.
- Reduce el tiempo de diseño de una planta.
- Permite al diseñador examinar rápidamente varias configuraciones de planta.
- Ayuda a mejorar procesos actuales.
- Mejora la eficiencia detectando fallas originadas por la descoordinación entre secciones de una misma planta.
- Permite cambiar las condiciones de operación y analizar los comportamientos.
- Determina condiciones óptimas del proceso dentro de las restricciones dadas.

Se debe tener en cuenta que los resultados de una simulación no son siempre fiables y estos se deben de analizar críticamente. Hay que tener en cuenta que los resultados dependen de: la calidad de los datos de entrada y de los paquetes termodinámicos que se elijan para modelar la sustancia.

CAPÍTULO V

5.0. COCO SIMULATOR

5.1. HISTORIA

COCO (CAPE-OPEN to CAPE-OPEN) Simulator es un simulador de uso libre y gratuito, funciona en estado estacionario, gráfico y modular. Se trata de un diagrama de flujo abierto, con un entorno de modelación que permite a cualquiera poder añadir nuevas operaciones unitarias o paquetes termodinámicos. Ha sido desarrollado por la empresa Amsterchem con estándares abiertos CAPE-OPEN. Incluye el simulador de procesos de separación ChemSep (destilación, extracción, absorción) (Cruz, 2015 y Herz, 2012).

CAPE-OPEN surgió como una idea en 1994 por Richard Baur, con el concepto de obtener modelos de funcionamiento de una estantería y enchufarlos en cualquier simulador de procesos. La idea fue moldeada en la forma del proyecto CAPE-OPEN que funcionó desde enero de 1997 hasta la mitad de 1999. Pero no es hasta 2002, luego de varias pruebas y modificaciones, que la unidad de CAPE-OPEN fue públicamente mencionado (Baur, 2011).

El programa de simulación COCO contiene los siguientes componentes principales (Cocosimulator.org, 2016):

- **COFE:** es una interfaz gráfica de usuario intuitiva para la construcción de diagramas de flujo. COFE tiene un algoritmo de solución secuencial utilizando corrientes automáticas. COFE muestra propiedades de las corrientes, se ocupa de la unidad de conversión y puede realizar trazados de corrientes de una forma sencilla.

- **TEA (Thermodynamics for Engineering Applications por sus siglas en inglés, o Termodinámica para Aplicaciones de Ingeniería):** se basa en el código de la biblioteca termodinámica de ChemSep e incluye un banco de datos de más de 430 compuestos de uso común. El paquete exhibe más de 100 métodos de cálculo de las propiedades.
- **COUSCOUS:** Es una unidad de operaciones, un paquete simple incluido con COCO. Contiene un divisor, un mezclador, intercambiadores de calor, bombas y reactores entre otras operaciones unitarias. También incluye ChemSep-LITE, una versión limitada de ChemSep con un máximo de 40 compuestos y 300 etapas, posee columnas de destilación, destilación azeotrópica, absorbedor, extracción simple, entre otras.
- **CORN:** es el paquete de reacciones que viene con COCO y facilita especificar el tipo de reacción cinética o de equilibrio. Contiene reactores simples, como los reactores de conversión, CSTR y reactores de flujo pistón.

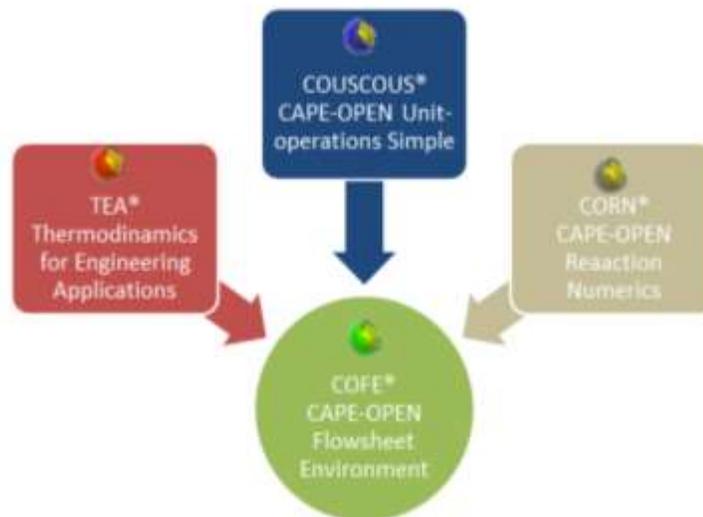


Figura 5.1. Componentes de COCO Simulator (Cruz, 2015).

También son parte de la distribución de COCO los siguientes componentes secundarios (Cocosimulator.org, 2016):



Water: es un paquete utilitario *CAPE-OPEN* de propiedad independiente para el cálculo del agua y el vapor, basados en el estándar industrial IAPWS-97¹. El código fuente y su licencia están disponibles en el sitio web de COCO Simulator.



OATS (*Out-of-process Application Thermo Server*): este componente permite el funcionamiento de paquetes de propiedades físicas. También incluye un amplio registro de la comunicación *CAPE-OPEN* entre el entorno de simulación y el usuario. Incluye COULIS, la unidad de operación del registrador *CAPE-OPEN*.



COFE.xlt: es una plantilla de hoja de cálculo en Excel diseñada para incluir un *COFE Flowsheet document* (es decir, el archivo de COCO) en un libro de Excel. Esto permite el acceso a datos de la secuencia y funcionamiento de la unidad de un diagrama de flujo, así como la realización de cálculos de propiedades termodinámicas y físicas en Excel.



JUICE (*Just a Unit-operation Icon Editor*): su función es la creación y mantenimiento de los iconos de las operaciones unitarias utilizadas con el componente COFE.

¹ IAPWS es una asociación internacional sin ánimo de lucro de organizaciones nacionales que se ocupa de las propiedades del agua y vapor de agua, propiedades particularmente termo físicas, las directrices de la química del ciclo, y otros aspectos de vapor a alta temperatura, agua y mezclas acuosas correspondientes a los ciclos de energía térmica y otros industriales y aplicaciones científicas. El IAPWS-97 es un documento industrial formulado en 1997 para las propiedades termodinámicas del agua y vapor.



TERNYP: este componente permite la creación de diagramas de fase, parcelas de propiedad y curvas residuales de propiedades ternarias.



ConfigureTEA: su función es configurar y mantener paquetes de propiedad TEA.



ConfigureCORN: su función es configurar y mantener paquetes de reacción CORN.



Online help: contiene una extensa documentación en línea.



COFEStand: es una utilidad independiente de línea de comandos para resolver diagramas de flujo.



CUP-COCO Update: su función es llevar a cabo las actualizaciones en línea para todos los paquetes incluidos en COCO.

5.2. VENTAJAS Y DESVENTAJAS DE COCO SIMULATOR

Las ventajas y desventajas del uso de este programa se plantean en comparación con otros programas de la misma naturaleza y tomando en cuenta que los objetivos de este trabajo consisten en evaluar el uso didáctico de dichos programas para la simulación.

5.2.1. VENTAJAS

COCO Simulator es un programa de código libre, esto significa que sus usuarios tienen acceso tanto al programa como un recurso didáctico y de investigación; como al código para hacer contribuciones y optimizar el funcionamiento y

capacidad de simulación del mismo. El programa está en actualización constante lo que conlleva a una evolución consistente.

La disposición de herramientas del interfaz de usuario es bastante amigable y deductiva, por lo que a pesar de la escasez de material didáctico el aprendizaje del programa no es demasiado complejo, con la guía adecuada es una herramienta muy útil al alcance de cualquier estudiante o docente.

Como en otros programas, se trabaja con base de datos de sustancias, estas bases de datos quedan almacenadas en un archivo que se puede transferir de un usuario a otro lo que permite un enriquecimiento cooperativo del programa.

La metodología de trabajo de COCO Simulator, específicamente el uso de paquetes (sustancias, reacción, etc.), permite la reutilización de los paquetes creados previamente en nuevos proyectos, sin tener que repetir demasiadas partes del proceso de simulación.

Se especializa en operaciones unitarias simples y procesos cortos, esto es positivo desde el punto de vista didáctico porque permite una aproximación más amigable y constructiva a diferentes problemas con los que los estudiantes y docentes de ingeniería química se enfrentan.

5.2.2. DESVENTAJAS

El equipo disponible en COCO Simulator es limitado, en especial en comparación con otros programas que requieren del pago de una licencia. A pesar de la apertura del código y su complementariedad con otros programas como MATLAB, la adición de más equipos resulta bastante compleja y poco didáctica.

Al igual que con el equipo, las sustancias de trabajo preestablecidas son bastante básicas y el proceso de agregar nuevas sustancias es complejo y requiere de una amplia recopilación de información. Con otros programas la mayoría de bases de datos están a la venta y están diseñadas específicamente para los procesos que se desean simular.

El programa en ocasiones resulta inestable, puede cerrarse inesperadamente si se lo somete a procesos de cálculo que no tienen solución o que requieren de una capacidad de cómputo demasiado grande.

La actualización constante es en general una ventaja, sin embargo cuando se cambian aspectos fundamentales de la metodología de trabajo representa una dificultad ajustarse al cambio, esto se vuelve importante en la medida de la periodicidad de las actualizaciones.

5.3. METODOLOGÍA IMPLEMENTADA PARA LA SIMULACIÓN DE PROCESOS

Cada vez que se utiliza un programa de simulación, es necesario interactuar con la interfaz de usuario y así poder construir el proceso que se desee. Al entrar en el entorno de COCO Simulator, el usuario debe tener en cuenta aspectos como: que proceso simulará, que sustancias están involucradas, el comportamiento termodinámico de las sustancias, si existe o no alguna reacción química, que equipos son parte del proceso, entre otras.

Si bien es cierto no existe un único camino a la hora de resolver un problema, en la Figura 5.2 se muestra la metodología implementada para la simulación de procesos en COCO. Esta metodología se implementará para resolver los componentes de las industrias de ácido sulfúrico y de producción de azúcar a partir de caña. Se demostrará su aplicación en los capítulos VI y VII de este trabajo.

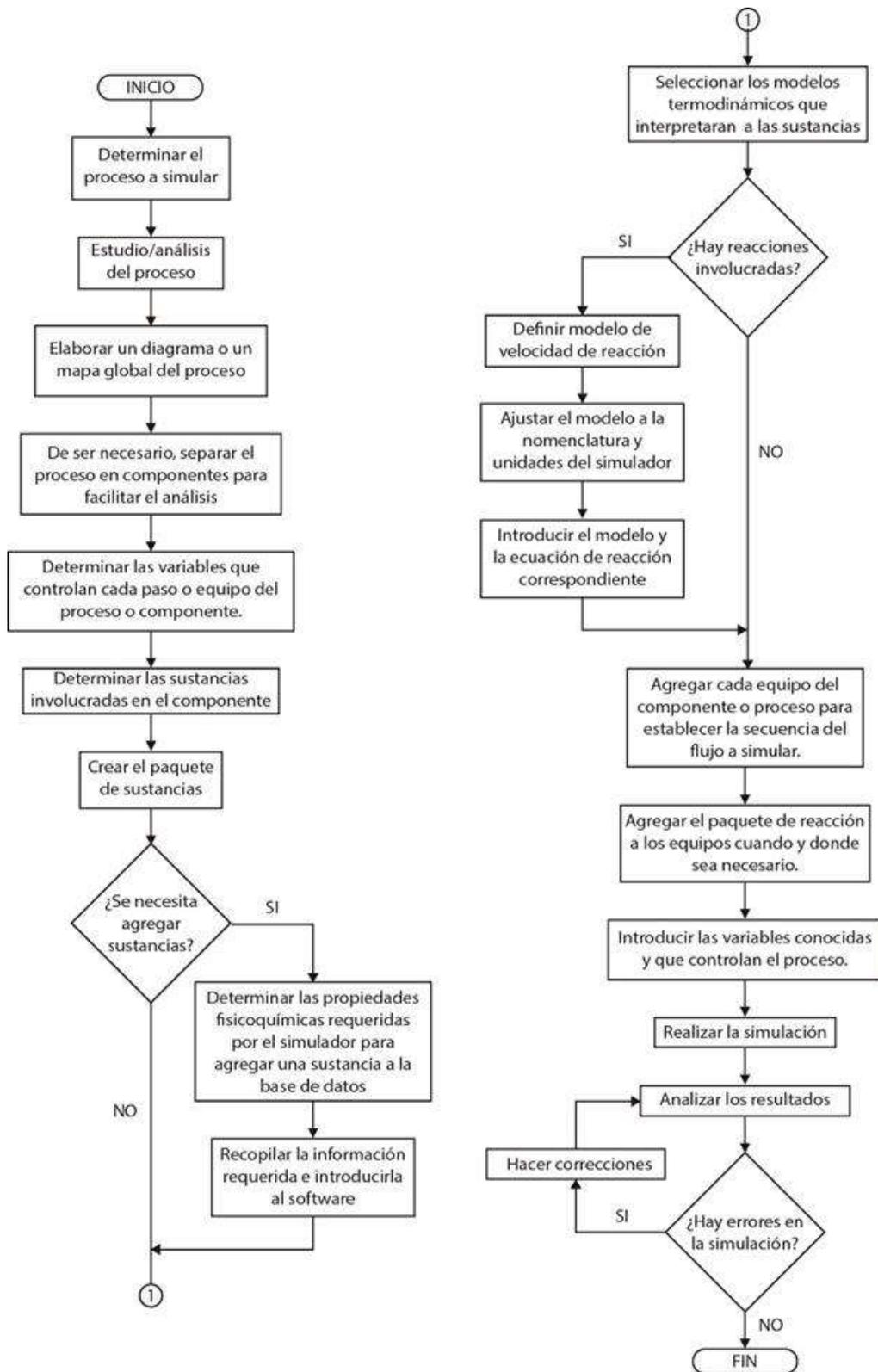


Figura 5.2. Diagrama de flujo con la metodología general de cómo simular en COCO (Autor, 2016).

5.4. GUÍA INTRODUCTORIA A LA SIMULACIÓN DE PROCESOS INDUSTRIALES CON COCO SIMULATOR

5.4.1. METODOLOGÍA DE SIMULACIÓN

Cuando se piensa simular una operación unitaria específica, la metodología de simulación puede ser tan simple como introducir la información disponible y resolver el sistema. Sin embargo, cuando se planean simular procesos extensos se necesita organizar la información disponible y segmentar el proceso para que la simulación se pueda resolver.

Es por esto que se desarrolló una metodología para la aproximación a procesos que requieren de segmentación. A continuación se presenta la secuencia de pasos a seguir:

I. Estudio y análisis del proceso

En esta primera sección se define el proceso a simular, se establecen alcances y limitaciones; es decir, que se puede y que no se puede simular de acuerdo a las capacidades de simulación del programa.

Además se deben establecer los parámetros que permitan demostrar la fiabilidad del resultado obtenido.

La investigación bibliográfica y de campo del proceso permite organizar todo en un diagrama que contenga cada una de las partes o componentes que conforman el proceso global.

II. Segmentación y organización

Cuando se ha estructurado todo el proceso se divide en segmentos o componentes que se puedan simular, que trabajen de forma independiente y/o

secuencial. Para cada uno de estos componentes se deben determinar: sustancias participantes, operaciones unitarias involucradas, variables de control y cualquier otra información que sea relevante al funcionamiento del proceso.

III. Crear paquete de sustancias

Cuando se han determinado las sustancias involucradas en el proceso que se planea simular, se debe verificar que todas estén presentes en el paquete de sustancias creado. Si es necesario agregar una sustancia, se determinan las propiedades fisicoquímicas requeridas por el simulador y se introduce la información requerida (Ver sección Agregar una Sustancia Nueva a COCO Simulator de esta guía).

IV. Crear paquete de reacción

Si hubiese reacciones químicas involucradas en el proceso se debe definir el modelo de velocidad y entalpía de reacción, asegurando que las unidades del simulador y el modelo concuerden.

V. Construcción del esquema de trabajo en el programa

En base a la información ordenada en el diagrama y utilizando los paquetes de sustancias y reacción creados, se construye el esquema de trabajo en el programa introduciendo equipos, flujos y parámetros de operación conocidos.

VI. Ejecución y correcciones

Cuando el programa se ejecute correctamente, se deben verificar los resultados y hacer correcciones si es necesario. Una vez corregidos todos los errores se puede dar por terminada la simulación.

5.4.2. PAQUETES DE REACCIÓN

COCO Simulator permite al usuario introducir paquetes de reacción a través del componente CORN. Algunos equipos, como los reactores, requieren de un paquete de reacción para poder ejecutarse sin problema. En esta sección se explicará paso a paso como introducir un paquete de reacción, utilizando como ejemplo la reacción de oxidación de SO_2 a SO_3 .

1. Primero, se debe acceder a *Flowsheet Configuration*, enseguida aparecerá una ventana como la que se muestra en la Figura 5.3.

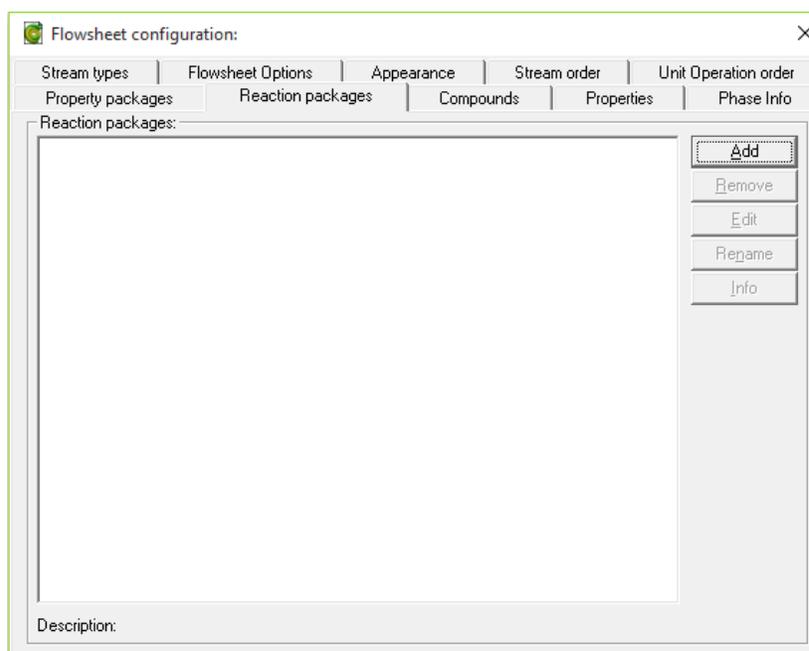


Figura 5.3. Ventana principal de la configuración de paquetes (Cocosimulator.org, 2016).

2. Dar clic en la opción *Add* y se selecciona la opción *CORN Reaction Package Manager*. Ver Figura 5.4.

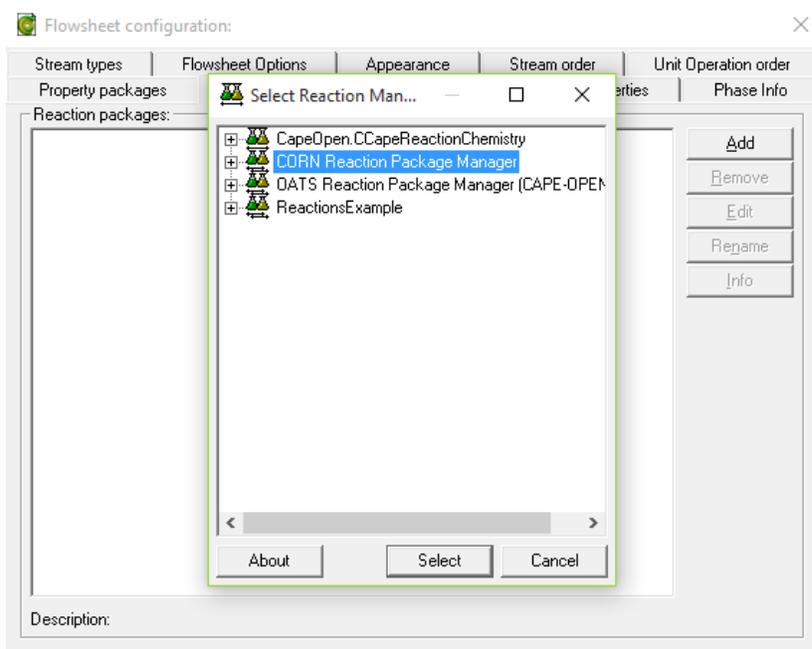


Figura 5.4. Selección de la opción CORN Reaction Package Manager (Cocosimulator.org, 2016).

3. A continuación se mostrará una ventana como la que se muestra en la Figura 5.5. Se selecciona la opción *Packages*, pues de esta forma quedara almacenado en la biblioteca de COCO y estará disponible en toda ocasión. COCO solo incluye el paquete llamado HDA. En la opción *Packages*, se da clic en *Create template*, como se observa en la Figura 5.6.

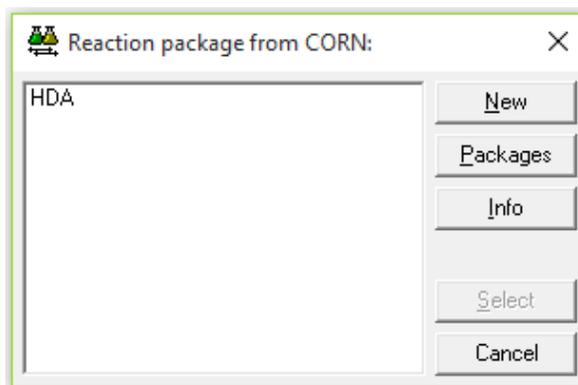


Figura 5.5. Edición del paquete de reacción (Cocosimulator.org, 2016).

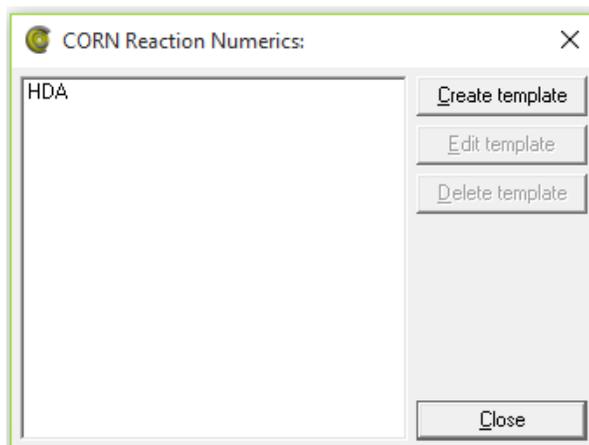


Figura 5.6. Creación de la plantilla para el paquete de reacción (Cocosimulator.org, 2016).

4. Tomando el ejemplo de la reacción de oxidación de SO_2 , se procede a completar todos los datos que sean necesarios para su funcionamiento.

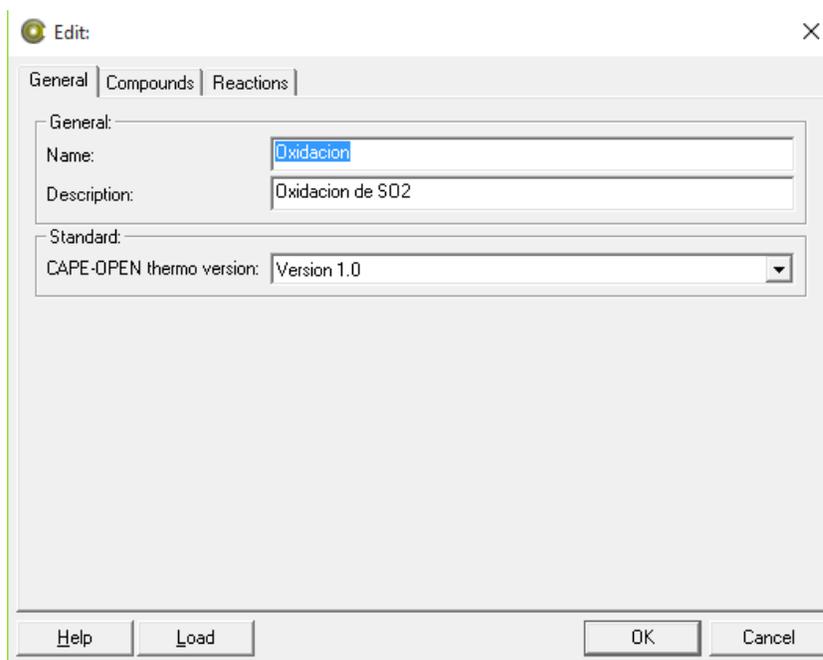


Figura 5.7. Datos generales a completar para el paquete de reacción (Cocosimulator.org, 2016).

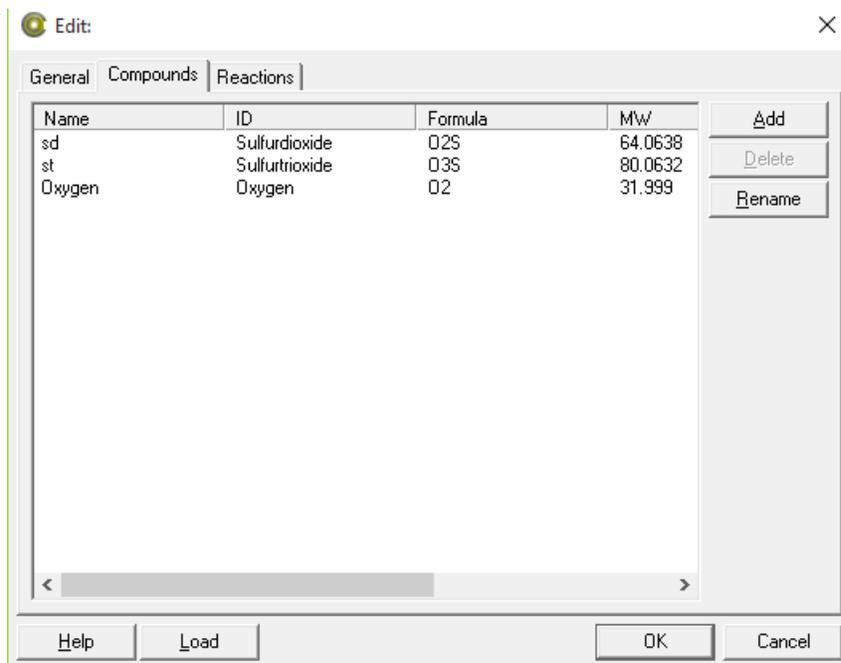


Figura 5.8. Configuración de los componentes a utilizar en el paquete de reacción (Cocosimulator.org, 2016).

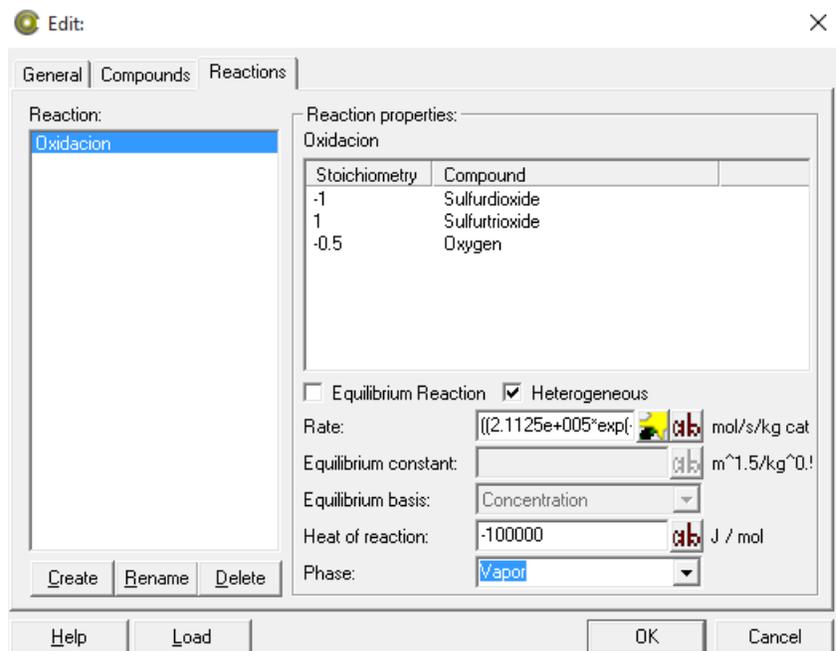


Figura 5.9. Configuración de la reacción (Cocosimulator.org, 2016).

Tanto la velocidad de reacción como el calor de reacción se obtuvieron de bibliografía. Para más detalle de estos datos ver Anexo C.

5.4.3. EQUIPO DISPONIBLE

En la barra de herramientas se debe buscar la opción *Insert Unit Operation*. COCO mostrará una ventana al momento de querer introducir un equipo u operación unitaria como la que se observa en la Figura 5.10. En la Tabla 5.1. se encuentra la descripción de los equipos más utilizados en la ingeniería química, así como los parámetros a completar para su funcionamiento.

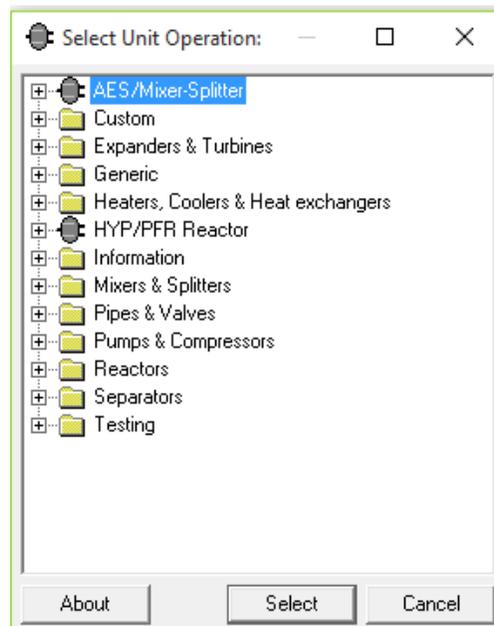
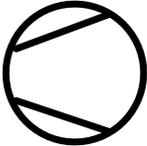
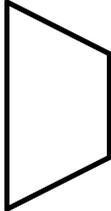
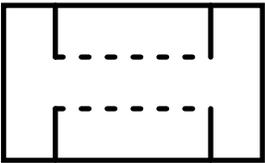


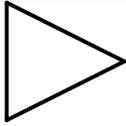
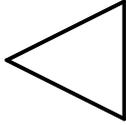
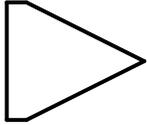
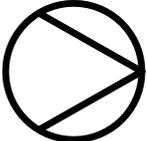
Figura 5.10. Listado de equipos disponibles en COCO Simulator (Cocosimulator.org, 2016).

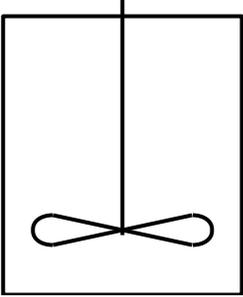
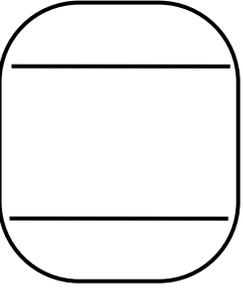
Además, COCO permite cambiar la figura de los equipos por aquella que lo represente de una mejor manera.

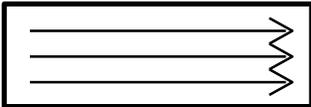
Tabla 5.1. Equipos disponibles en COCO Simulator

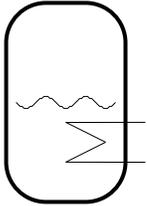
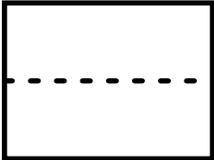
EQUIPO	FIGURA	DESCRIPCIÓN	PARÁMETROS
Válvula de expansión		<p>Este equipo permite la liberación de presión en un flujo de materia. Un expansor se utiliza para obtener energía a partir de una caída de presión de un gas. Un expansor tiene una entrada y una salida. Si el trabajo no se especifica por medio de una corriente de entrada de energía, se puede conectar una corriente de salida de energía que recibirá un valor para el trabajo producido por el expansor.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Presión de salida • Caída de presión • Generación de energía • Eficiencia isoentrópica
Turbina		<p>Una turbina genera energía a partir de una diferencia de presión entre la entrada y la salida. Posee una sola entrada y una sola salida. La caída de presión o presión de salida deben ser especificadas. Ya sea la energía generada, o la eficiencia adiabática necesitan ser especificadas. La energía generada se puede especificar directamente, o a través de una corriente de entrada de energía. Si la energía no se especifica a través de una corriente de entrada de energía, se puede conectar una corriente de salida de energía que ha de recibir un valor para la energía generada por la turbina.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Presión de salida • Caída de presión • Generación de energía • Eficiencia adiabática

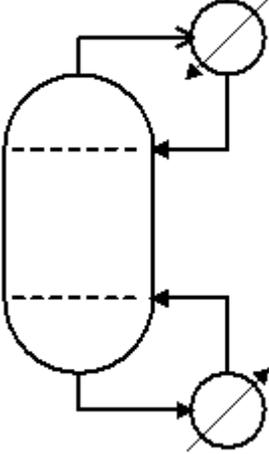
Calentador/ Enfriador		Su propósito es cambiar la temperatura de un flujo. Tiene una entrada y una salida. O bien la temperatura de salida o una entrada de calor deben ser especificadas. El calor se puede especificar directamente, o a través de una corriente de entrada de energía.	<ul style="list-style-type: none"> • Temperatura de salida • Entrada de calor específica • Entrada de calor definida por flujo de energía • Caída de presión
Intercambiador de calor		Equipo diseñado para permitir la transferencia de energía entre dos flujos con diferentes temperaturas. Por lo tanto, posee dos entradas y dos salidas. El intercambiador de calor opera adiabáticamente. Puede operar ya sea en flujo paralelo o a contracorriente.	<ul style="list-style-type: none"> • Tipo (Intercambio de calor, temperatura, LMDT, Máx. intercambio de calor, Efectividad) • Caída de presión en ambos flujos
Calculadora de información		Calcula información sobre el flujo en base a sus variables de entrada definidas. Se puede obtener información de múltiples flujos de entrada de información. El valor de salida se calcula por una fórmula especificada por el usuario. La calculadora de información requiere una fórmula para el resultado de la salida.	<ul style="list-style-type: none"> • Entradas (variables, unidades) • Fórmula
Unidad de medición		El propósito de la unidad de medición es exponer valores que están presentes en la corriente (temperatura, presión, flujo, etc.) como un puerto de información. Requiere de un flujo de materia de entrada y uno de salida. Se copia el contenido de la corriente de entrada a la corriente de salida y realiza un cálculo de equilibrio.	<ul style="list-style-type: none"> • Presión normal • Temperatura normal • Variable/variables a medir

Mezclador		Combina dos o más flujos de materia en uno. Trabaja adiabáticamente y a composición constante.	<ul style="list-style-type: none"> • Caída de presión
Separador		Separa un flujo de materia en dos o más.	<ul style="list-style-type: none"> • Caída de presión • Factores de división
Make-up mixer		El <i>make-up mixer</i> es una herramienta en la que se pueden mezclar flujos en exceso, que posteriormente no afectaran el balance global, esto con el objetivo de iniciar un proceso que requiere corrientes de reflujo.	<ul style="list-style-type: none"> • Flujo de reciclo • Flujo en exceso
Compresor		Se utiliza para obtener un aumento de presión en el sistema. Un compresor tiene una entrada y una salida. Se puede especificar una relación de compresión, ya sea como la relación entre la entrada y la presión de salida, o como la relación entre la salida y el volumen de entrada. Se debe especificar el aumento de presión o una presión de salida absoluta. Por otra parte, ya sea una eficiencia isoentrópica o el trabajo real requerido tiene que ser especificado.	<ul style="list-style-type: none"> • Incremento de presión • Presión de salida • Razón de presión • Razón de volumen • Demanda de energía • Eficiencia isoentrópica • Energía definida por flujo energético
Bomba		Aumenta la presión en el sistema. Posee una entrada y una salida. Se debe especificar la presión absoluta o el incremento de presión, la demanda de energía o la eficiencia. La temperatura de salida se calcula a partir de un balance de	<ul style="list-style-type: none"> • Incremento de presión • Presión de salida • Demanda de energía • Eficiencia adiabática • Energía definida por flujo de energía

		energía.	
Reactor tipo RCTA		<p>El RCTA (Reactor de Tanque Continamente Agitado) es un modelo de reactor simplificado en el que el contenido del reactor se asume en una sola fase y bien mezclado. Tiene una entrada y una salida. Antes de ejecutarlo, se debe especificar un paquete de reacción. Trabaja con reacciones de equilibrio, así como con reacciones cinéticas, homogéneas o heterogéneas.</p> <p>Si se seleccionan las reacciones cinéticas homogéneas, el volumen del reactor necesita ser especificado. Si se seleccionan las reacciones cinéticas heterogéneas, ya sea la masa de catalizador necesita ser especificado, o bien, la densidad y el volumen de catalizador.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Caída de presión • Temperatura • Generación de calor • Generación de calor a partir del flujo de entrada • Entalpía • Fase de la reacción
Reactor de equilibrio		<p>El reactor de equilibrio es un modelo de reactor simplificado y donde solo reacciones de equilibrio pueden ser especificadas. Tiene una entrada y una salida. Antes de ejecutar el reactor de equilibrio, se debe asignar un paquete de reacción.</p> <p>El reactor de equilibrio implementa un flash reactivo: el equilibrio de fase se calcula junto con el equilibrio reactivo. Las reacciones están en equilibrio en las fases</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Caída de presión • Temperatura • Generación de calor • Entalpía

		en el que las reacciones tienen lugar.	
Reactor tipo RFP		<p>El RFP (Reactor de Flujo en Pistón) es un modelo de reactor uni-dimensional simplificado en el que en cada punto a lo largo del reactor, la velocidad de la fase reactiva, las concentraciones, la temperatura y la presión son constantes a lo largo de la sección transversal. También, se debe de establecer la fase en que se da la reacción.</p> <p>El RFP solo tiene una entrada y una salida. Es necesario asignar un paquete de reacción para poder ejecutar este equipo. Para reacciones heterogéneas es necesario especificar las propiedades del catalizador.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Fase de la reacción • Longitud y diámetro del reactor • Dirección de flujo • Cortes transversales • Tolerancia de integración
Divisor de Componentes		<p>El divisor de componentes es un dispositivo de separación ideal; pues divide en fracciones específicas de los compuestos definidos. Tiene una entrada y dos salidas. Puede ser útil para representar una separación para la que no se dispone de otro equipo, pero para los que se conoce el rendimiento. Una caída de presión puede ser especificada. La unidad opera isotérmicamente.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Caída de presión • Factores de división por componente

<p>Separador Flash</p>		<p>Separa el flujo de vapor del resto de fases del flujo de entrada. Tiene una entrada, y dos o tres salidas.</p> <p>Los cálculos de equilibrio se realizan a la presión de salida, es decir, después de una caída de presión.</p> <p>Los cálculos se realizan utilizando la termodinámica que se aplica al flujo de entrada.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Caída de presión • Presión de salida • Generación de calor • Temperatura de salida • Fracción de vapor
<p>Separador de Sólidos</p>		<p>El objetivo del separador de sólidos es separar los sólidos de otras fases (es decir, un modelo muy simple para representar un filtro o ciclón). La unidad tiene una entrada y dos salidas (una salida de sólidos y una salida para los no sólidos).</p> <p>La eficiencia de separación de sólidos determina la fracción de sólidos que sale por la salida de sólidos. La eficiencia de separación de no-sólidos determina la fracción de los no sólidos que sale por la salida de los no sólidos.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Eficiencia de separación de sólidos • Eficiencia de separación de no-sólidos • Caída de presión

<p>ChemSep</p>	 <p>The diagram shows a vertical distillation column with two horizontal dashed lines representing trays. On the right side, there are two circular reboilers. The top reboiler is connected to the top of the column, and the bottom reboiler is connected to the bottom of the column. On the left side, there are two circular condensers. The top condenser is connected to the top of the column, and the bottom condenser is connected to the bottom of the column. Arrows indicate the flow of material between the column and the reboilers/condensers.</p>	<p>ChemSep es un programa incluido en la instalación de COCO, que sirve para realizar cálculos de procesos de separación de componentes múltiples. La unidad de operación ChemSep integra operaciones unitarias como: destilación, absorción o columna de extracción y la realización de cálculos de proceso de separación de componentes múltiples. Como tal, a menudo tiene una o más corrientes de entrada y dos corrientes de salida: una parte superior y un producto de fondo. ChemSep-LITE es una versión libre del simulador de la columna de equilibrio y está limitado a 40 componentes y 300 etapas.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Operación (destilación : simple, extractiva y azeotrópica; absorción: simple, reflujo, recalentada; columnas: simple de etapas, compleja, reflujo total ; Extractores: simple, etapas; Flash L-V)
----------------	--	---	---

Fuente: Cocosimulator.org., 2016.

5.4.4. PRESENTACIÓN DE RESULTADOS

La principal herramienta que COCO Simulator ofrece para devolver resultados de manera ordenada y manejable son los reportes. Los reportes pueden ser:

- Reporte de parámetros en una unidad (Equipo).
- Reporte de un flujo.

Para insertar cualquiera de estos reportes se hace de la siguiente manera:

1. Insert / unit parameter report. Insert / stream report.

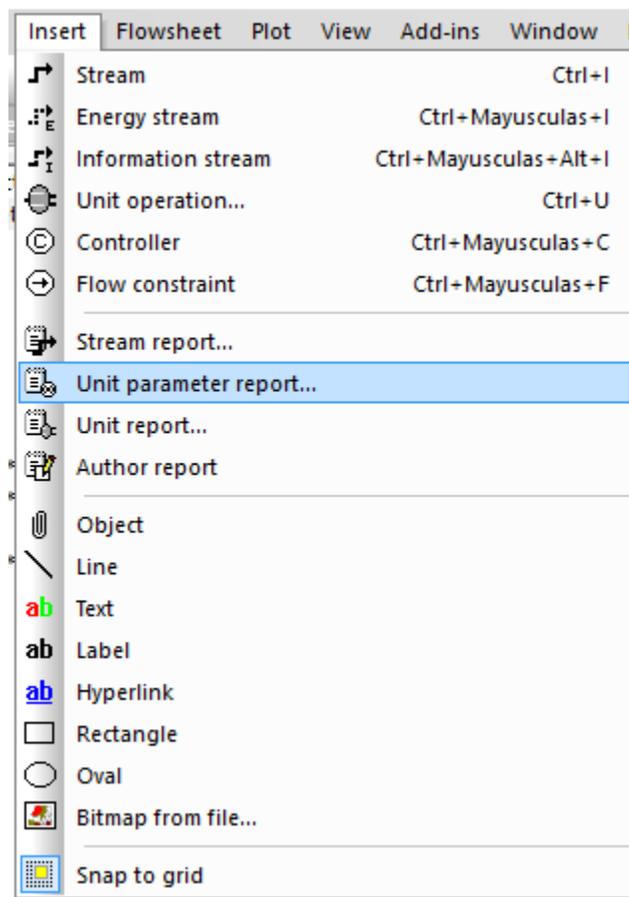


Figura 5.11. Menú *Insert* (Insertar) (Cocosimulator.org, 2016).

2. Los dos tipos de reporte ofrecen diferentes herramientas para la presentación de información. A continuación se muestran las más importantes de cada una.

- Reporte de parámetros en una unidad

Los reportes de parámetros de unidad permiten presentar información sobre los equipos que componen la simulación.

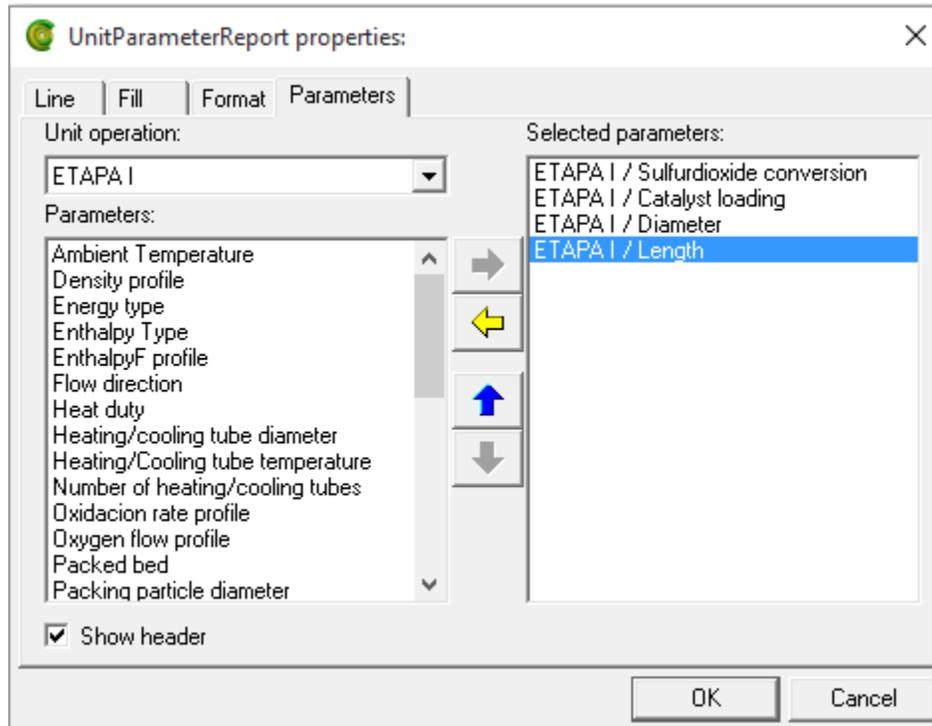


Figura 5.12. Cuadro para la creación de un reporte de parámetro en una unidad (Cocosimulator.org, 2016).

En este ejemplo se muestran dos casillas a llenar, la primera corresponde a la unidad o equipo del cual se extraerá y presentará la información. La segunda consiste en la selección de los parámetros específicos que se necesitan conocer de cada operación o equipo. El resto de pestañas disponibles son para personalizar la presentación visual del reporte. Este reporte corresponde a una etapa del reactor catalítico de una planta de producción de ácido sulfúrico, los parámetros a mostrar son: Conversión, Carga de catalizador, diámetro y longitud. El resultado se presenta en la Figura 5.13:

ETAPA I		
Parameter	Value	Unit
Sulfurdioxide conversion	0.599514	
Catalyst loading	10.3	kg / m ³
Diameter	5	m
Length	8	m

Figura 5.13. Reporte de parámetros en un reactor (Cocosimulator.org, 2016).

- Reporte de un flujo

Los reportes de un flujo permiten presentar información sobre los flujos que componen la simulación.

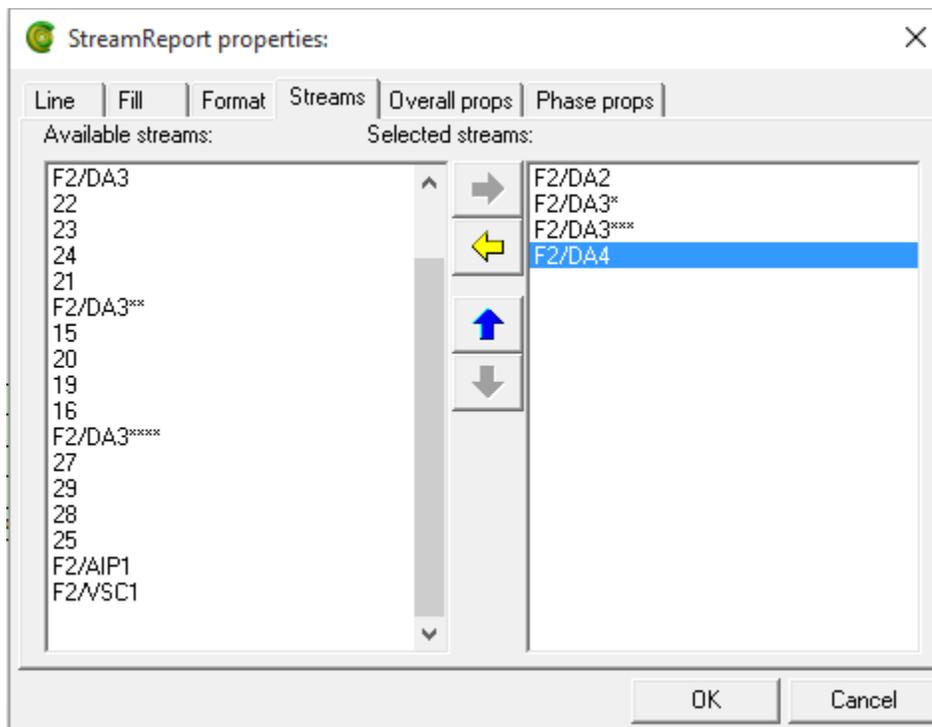


Figura 5.14. Cuadro para la creación de un reporte de un flujo (Cocosimulator.org, 2016).

La pestaña *Streams* permite la selección del flujo o flujos de los cuales se extraerá y presentará la información.

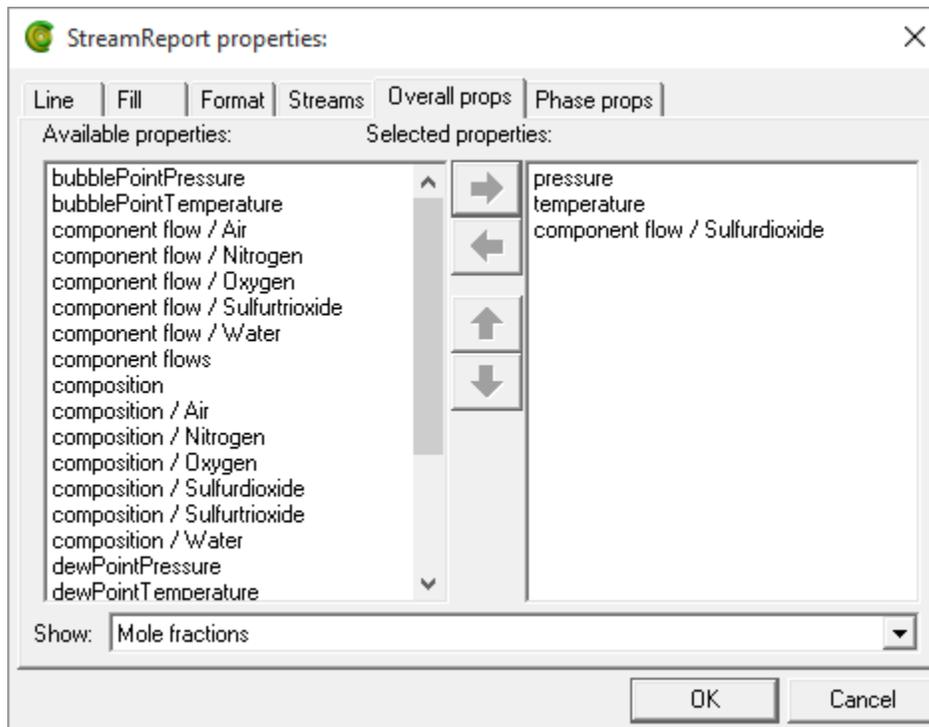


Figura 5.15. Cuadro para la creación de un reporte de un flujo (Cocosimulator.org, 2016).

La pestaña *Overall Props* permite definir los parámetros del flujo que se presentaran en el reporte.

La pestaña *Phase Props* es útil cuando en el flujo existe más de una fase y se pueden presentar los parámetros de cada una por separado. El resto de pestañas disponibles son para personalizar la presentación visual del reporte. Este reporte corresponde a una serie de flujos involucrados presentes en el reactor catalítico de la planta de producción de ácido sulfúrico. El resultado se presenta en la Figura 5.16:

Stream	F2/DA2	F2/DA3*	F2/DA3***	F2/DA4	Unit
Pressure	118373	116823	92487.6	89972	Pa
Temperature	871.145	785.799	738.154	718.523	K
Flow Sulfurdioxide	212.245	90.6958	32.4708	12.3615	kmol / day

Figura 5.16. Reporte de flujo en la simulación de un reactor (Autor, 2016).

5.4.5. AGREGAR UNA SUSTANCIA NUEVA A COCO SIMULATOR

COCO presenta una base de datos (*Pure Component Data, PDC*) limitada a aproximadamente 430 sustancias químicas y se puede tener acceso a ellas a través de TEA, que se basa en la biblioteca termodinámica de ChemSep. La base de datos exhibe más de 100 rutinas de cálculo de propiedades con sus derivados analíticos o numéricos.

COCO facilita el acceso a las bases de datos para añadir nuevas sustancias, esto se logra a través de ChemSep y su opción llamada *Pure Component Data Manager*. Las sustancias a añadir para la simulación de la industria del ácido sulfúrico y la producción de azúcar a partir de caña fueron: azufre, ácido sulfúrico, glucosa, fructosa y sacarosa. La metodología utilizada para agregar las sustancias se explica a continuación, utilizando como ejemplo la introducción del ácido sulfúrico.

1. Abrir ChemSep y ubicar la opción *Pure Component Data Manager*.

Dentro de este menú se debe crear una nueva base de datos usando la opción *guardar como*, ya que COCO no permite modificar el archivo existente llamado *chemsep1.pdc*. De esta manera el nuevo archivo *.pdc* contendrá todas las sustancias que COCO posee y la nueva sustancia.

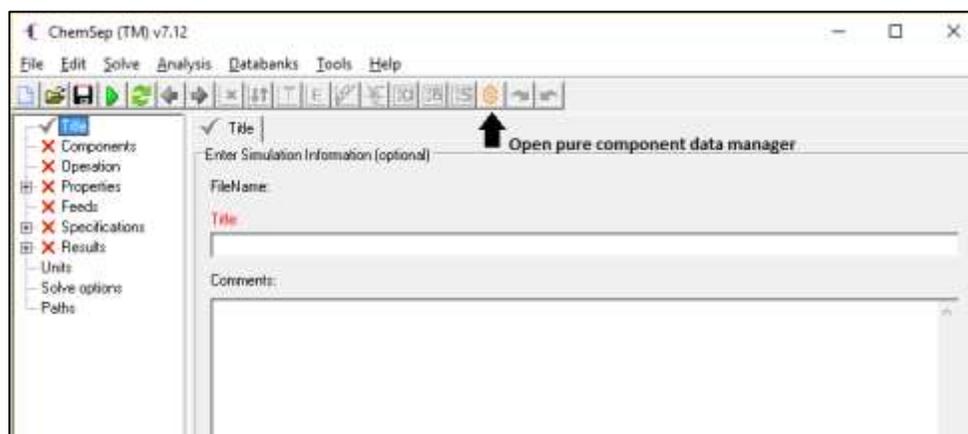


Figura 5.17. Pantalla principal de ChemSep (Cocosimulator.org, 2016).

2. Dar nombre al nuevo componente.

Para agregar un nuevo componente se selecciona *New* y a continuación se debe dar un nombre al componente.

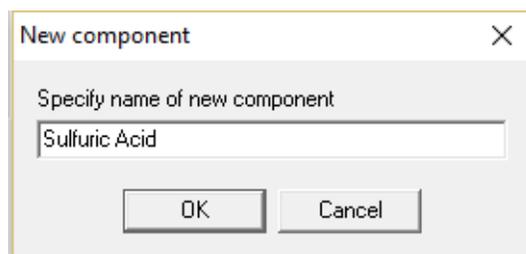


Figura 5.18. Nombramiento de un componente en ChemSep (Cocosimulator.org, 2016).

3. Completar información.

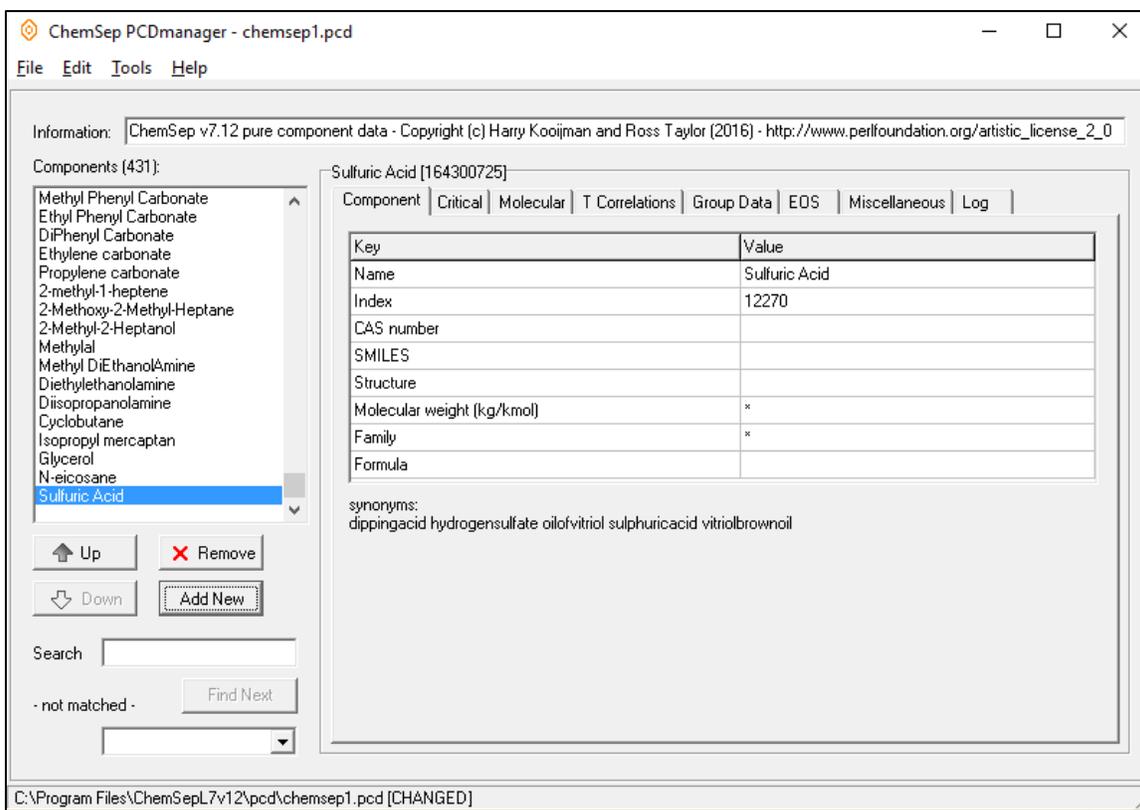


Figura 5.19. Información general de componentes (Cocosimulator.org, 2016).

Para completar la información del Ácido Sulfúrico se utilizó como ayuda una base de datos gratuita llamada *Sample Chemical Database* (DIPPR, 2016), donde se encontraron gran parte de las propiedades del Ácido Sulfúrico y las *T Correlations*.

Algunas de las propiedades críticas a completar son: Temperatura crítica, presión crítica, volumen crítico, factor de compresibilidad, punto normal de ebullición y puntos triples de temperatura y presión.

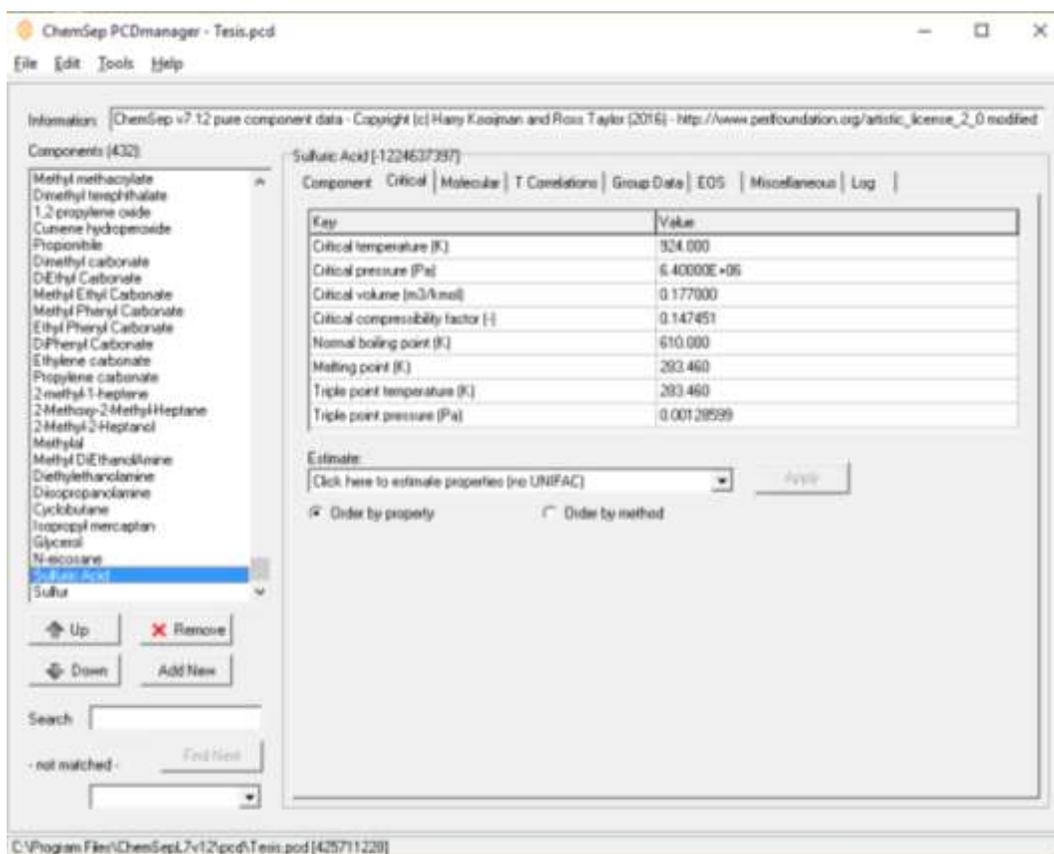


Figura 5.20. Propiedades críticas del Ácido Sulfúrico (Cocosimulator.org, 2016).

Entre las correlaciones de temperatura que se deben introducir están: densidad de sólido, densidad de líquido, presión de vapor, calor de vaporización, viscosidad del líquido, tensión superficial, ecuación de Antoine, entre otras. Para completar la

información de cada una de estas correlaciones se debe introducir la temperatura mínima, temperatura máxima y las constantes correspondientes.

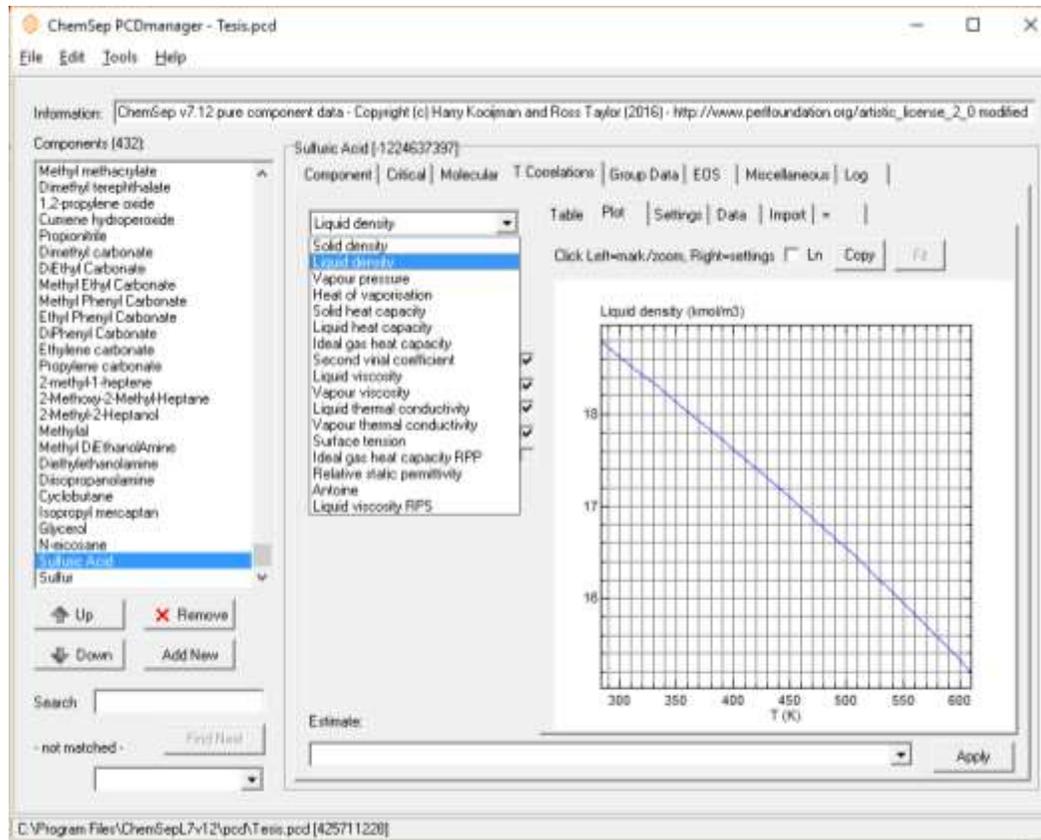


Figura 5.21. Correlaciones de temperatura del ácido sulfúrico (Cocosimulator.org, 2016).

Una vez que se ha completado la información que requiere COCO se guardan los cambios y se cierra el *Pure Component Data Manager*.

5.4.6. OPERACIONES UNITARIAS COMPLEJAS

En ciertas circunstancias el equipo disponible en COCO Simulator no es suficiente para representar ciertas operaciones unitarias. Sin embargo, algunas de estas pueden construirse con las operaciones disponibles en el programa. Un ejemplo es el reactor catalítico en una planta de producción de ácido sulfúrico. La reacción

se lleva a cabo en diferentes etapas y además hay múltiples entradas de sustancias diferentes.

Para representar este tipo de unidades, se elabora un diagrama de lo que sucede en el equipo para separarlo en partes más simples y luego se construye en el programa. En la Figura 5.22 se puede observar el resultado de la construcción del reactor catalítico.

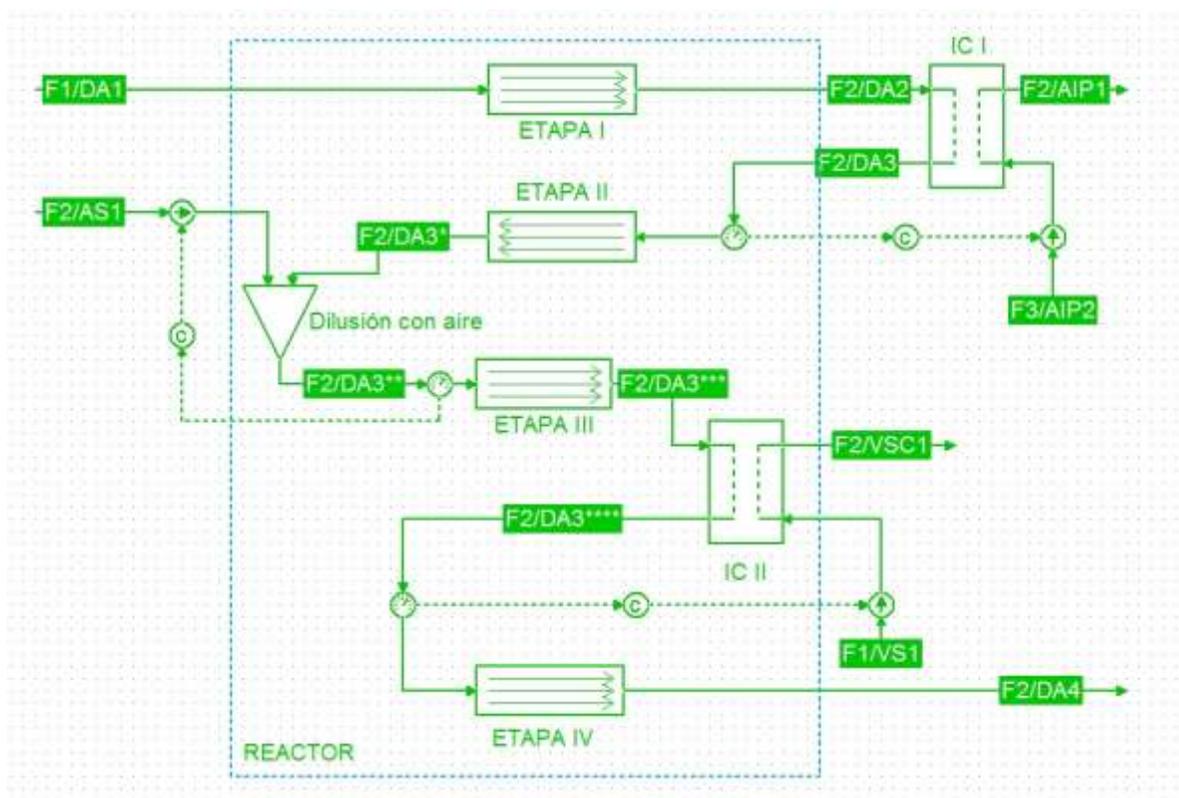


Figura 5.22. Diagrama reactor catalítico (Autor, 2016).

Cada una de las etapas puede representarse con un reactor separado utilizando las condiciones de operación indicadas. La inyección de aire para la dilución y enfriamiento también puede simularse con un simple mezclador. Con esta metodología se pueden simular muchos equipos con funciones específicas utilizando las herramientas ya disponibles en el programa.

CAPÍTULO VI

6.0. SIMULACIÓN DE COMPONENTES DENTRO DEL PROCESO DE LA INDUSTRIA DEL ÁCIDO SULFÚRICO

6.1. SEGMENTACIÓN DEL PROCESO PARA FINES DE ANÁLISIS

El proceso de la industria de producción de ácido sulfúrico se dividirá en tres componentes:

- Componente 1: Combustión de flor de azufre para producir SO_2
- Componente 2: Oxidación del SO_2 para convertirlo en SO_3
- Componente 3: Absorción del SO_3 para formar H_2SO_4

Se divide de esta manera para mantener coherencia con el proceso productivo de la planta de producción de ácido sulfúrico que pertenece al grupo FERTICA en El Salvador.

En este capítulo se explica en qué partes del proceso y bajo qué condiciones se está realizando la simulación, además, cómo se elabora la misma. Los detalles sobre los cálculos y procedimientos necesarios se encuentran en el Anexo B.

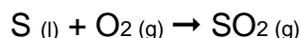
6.1.1. COMPONENTE UNO: COMBUSTIÓN DE FLOR DE AZUFRE PARA PRODUCIR SO_2

En este componente se desarrolla la generación de SO_2 en una mezcla de gases a partir de azufre fundido. El azufre fundido se hace pasar al horno quemador acompañado de aire en exceso y es ahí donde ocurre la reacción de combustión. En el proceso de producción con el que se está trabajando, parte de la corriente

de gases que sale del horno se hace pasar a una caldera, la cual aprovecha las altas temperaturas de los gases para generar vapor de agua el cuál es utilizado posteriormente en otros equipos. El calor es aprovechado en una caldera para el calentamiento de agua (Ver Figura 6.1, Flujo F3/AP2). La caldera fue representada en el programa mediante un intercambiador de calor.

El proceso original parte de azufre en flor, pero debido a que COCO no representa con exactitud el comportamiento de las sustancias en estado sólido, no se toma en cuenta la fundición del azufre para efectos de la simulación.

En el horno quemador se realiza la siguiente reacción de combustión:



La cinética asociada a dicha reacción fue modelada en esta fase.

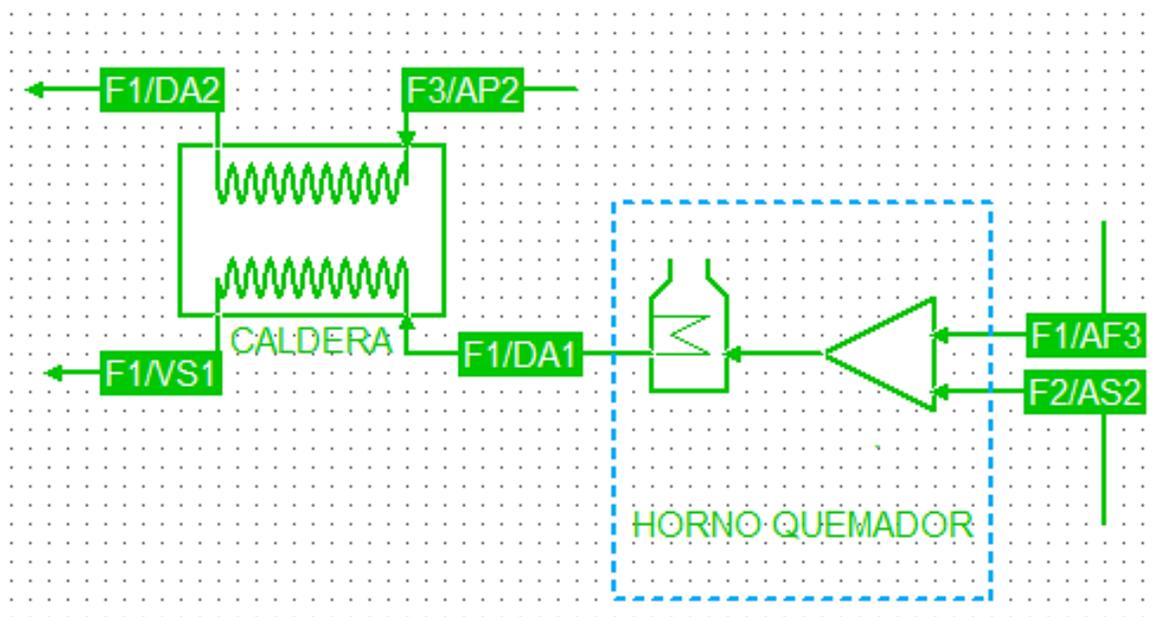


Figura 6.1 Representación de la simulación en COCO Simulator del componente uno (Autor, 2016).

6.1.2. COMPONENTE DOS: OXIDACIÓN DEL SO₂ PARA CONVERTIRLO EN SO₃

En el componente dos se lleva a cabo la reacción de oxidación de SO₂ a SO₃. Cuando la corriente de gases (conteniendo SO₂) sale de la caldera, se envía al reactor catalítico, donde toma lugar la reacción de oxidación (Ver Figura 6.2, Flujo F1/DA1).

Acorde al proceso que se realiza en el país, antes de que los gases entren al reactor, se hacen pasar por un filtro de gases, el cual permite atrapar electrostáticamente las impurezas que aun pudieran llevar la corriente de gases. Este paso se omite debido a que COCO Simulator no dispone equipos/operaciones de este tipo o modelos para simular partículas suspendidas en fluidos.

El reactor consiste de cuatro etapas modeladas con la misma cinética de reacción, pero con diferentes temperaturas y cantidades de catalizador. En COCO Simulator no hay un reactor por etapas, ni que se ajuste al diseño del reactor de la planta estudiada; por lo tanto, se utilizaron un conjunto de equipos para construir un proceso equivalente: cada etapa está representada por un reactor de flujo en pistón, con un lecho de catalizador.

Entre cada una de las etapas (reactores) es necesario enfriar el flujo de gases para mejorar la conversión. El enfriamiento se logra en intercambiadores de calor o inyectando aire a menor temperatura en la mezcla (Ver Figura 6.2, Flujos F2/DA2, F2/DA3*, F2/DA3***). Para determinar la cantidad de aire o vapor necesaria para enfriar la corriente de gases se utilizaron controladores de flujos. En la simulación se agregaron dos intercambiadores de calor: uno interno y otro externo al reactor. Además, se utilizó un mezclador para representar la inyección de aire. Ver Tabla 6.5 para obtener más información sobre los equipos mencionados.

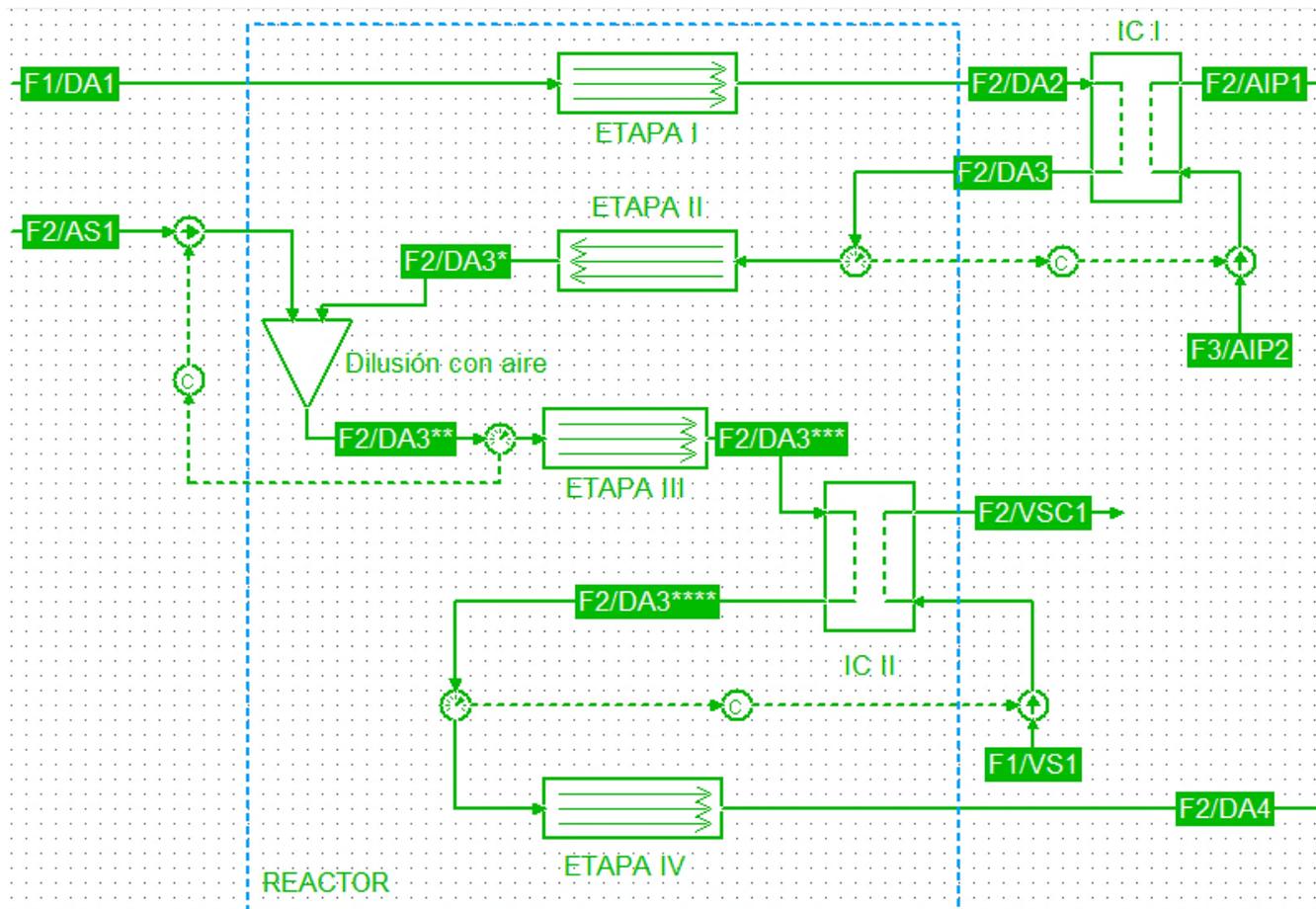


Figura 6.2. Representación de la simulación en COCO Simulator del componente dos (Autor, 2016).

En la Figura 6.2 a los flujos que están marcados con un asterisco les llamaremos auxiliares porque no existen físicamente en el proceso, dichos flujos solo están en la simulación para interpretar el comportamiento del reactor real.

Cabe mencionar que se simuló el sistema a partir de los equipos disponibles en COCO Simulator manteniendo coherencia con la descripción del funcionamiento obtenida del proceso en el país y bibliografía sobre el mismo.

6.1.3. COMPONENTE TRES: ABSORCIÓN DEL SO₃ PARA FORMAR H₂SO₄

El componente tres comprende la absorción de SO₃ en una corriente de ácido al 98.5 %p/p para obtener H₂SO₄ fumante, aproximadamente al 99.5 %p/p. En la Figura 6.3 se puede observar que: el óleum formado (Flujo F3/AS1), se envía a un tanque de recirculación junto con ácido diluido de la torre de secado (Flujo F3/AS7) y un flujo de agua (Flujo F3/AP3) que se ajusta para que el ácido sulfúrico formado llegue a una concentración del 98.5 %. El ácido que sale del tanque de recirculación se manda a torres de enfriamiento y se divide en tres corrientes: la primera corriente se recircula a la torre de absorción, la segunda se manda a la torre de secado para que remueva la humedad del aire y la tercera se dirige a almacenamiento.

Para la simulación de este componente se utilizaron las torres de separación disponibles en el programa así como equipos para otras operaciones simples como: mezcladores, intercambiadores de calor, etc.

Originalmente, en los diagramas creados para organizar el proceso (Ver Anexo A), algunos de los reflujos que tienen las mismas condiciones fisicoquímicas están representados por el mismo nombre, por ejemplo, F3/AS5 (reflujo repartido entre la torre de secado y un intercambiador de calor), para diferenciar entre este flujo y sus subdivisiones se utilizaron apóstrofes, tal y como se observa en la Figura 6.3.

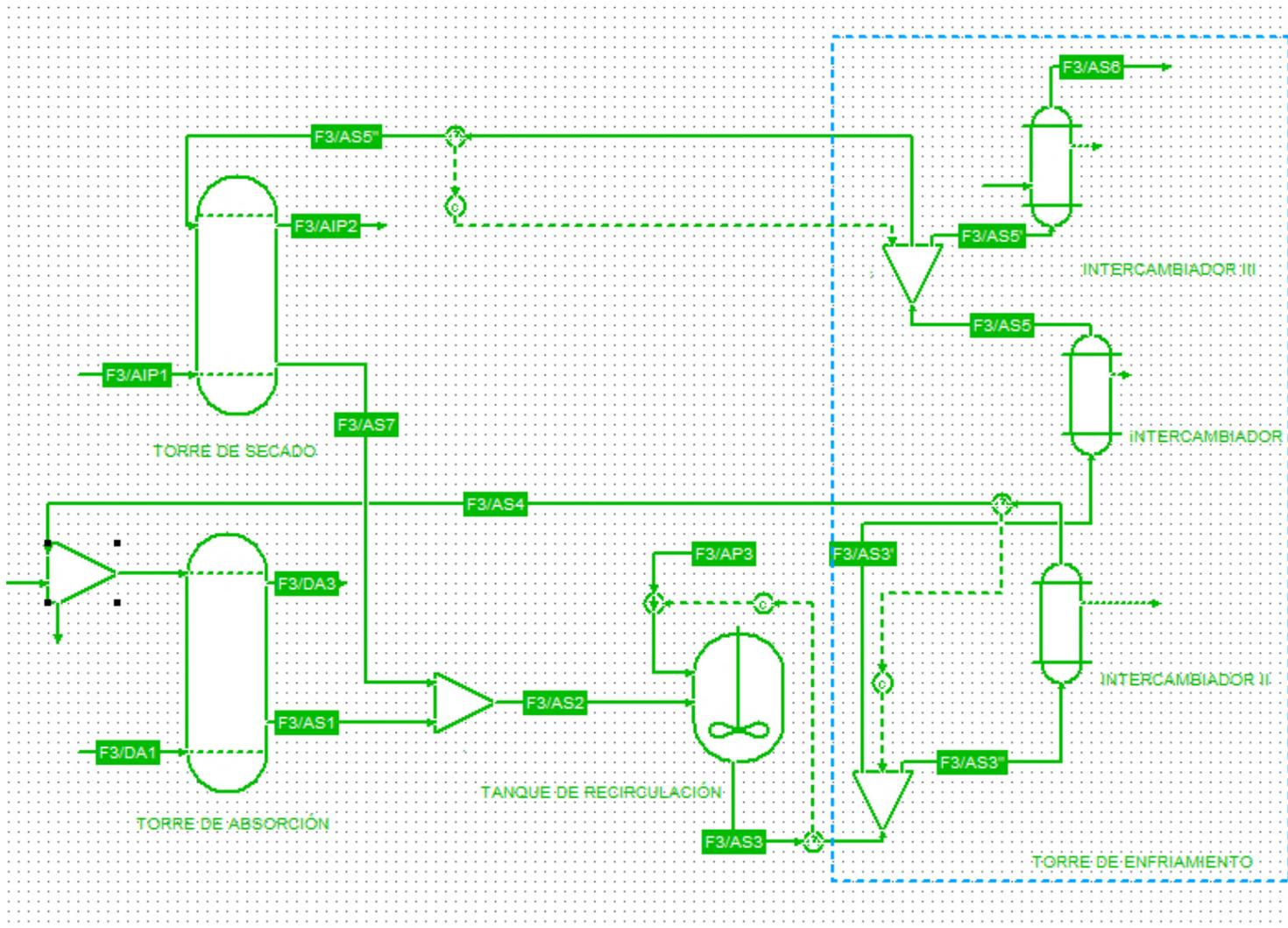


Figura 6.3. Representación de la simulación en COCO Simulator del componente tres (Autor, 2016).

6.2. METODOLOGÍA IMPLEMENTADA PARA LA SIMULACIÓN DE PROCESOS DE LA INDUSTRIA DEL ÁCIDO SULFÚRICO

Al momento de simular los diferentes procesos de la industria del ácido sulfúrico, se debe determinar que variables se controlarán en los equipos, los modelos termodinámicos y las sustancias químicas que se ven involucradas a lo largo del proceso.

La selección de un paquete termodinámico adecuado en base a las condiciones del problema que se vaya a desarrollar es de suma importancia para la obtención de los mejores resultados posibles. COCO cuenta únicamente con siete paquetes termodinámicos: Peng Robinson, Soave Redlich Kwong, Wilson, NRTL, UNIFAC VLE, UNIQUAC y Chemical Theory (Prausnitz). Para este proceso se selecciona Peng Robinson debido a que es la ecuación más cercana con la que se dispone en el simulador para trabajar con gases inorgánicos como los óxidos de azufre, puesto que el programa no permite la alteración de las ecuaciones de estado por métodos convencionales o accesibles a los usuarios promedio.

Para el presente caso, la base de datos de COCO solo presenta cinco (SO_2 , SO_3 , H_2O , O_2 y N_2) de las siete sustancias involucradas en la producción del ácido sulfúrico, por tanto, el azufre y el ácido sulfúrico fueron añadidos a la base de datos de COCO, mediante el proceso mencionado en la Figura 5.2. Las sustancias agregadas fueron utilizadas en los componentes de proceso uno y tres (combustión y absorción). Para más detalle de cómo se agregaron estas sustancias al *Pure Component Data Manager* ver sección 5.4.5.

6.2.1. METODOLOGÍA IMPLEMENTADA PARA EL COMPONENTE UNO: COMBUSTIÓN DE FLOR DE AZUFRE PARA PRODUCIR SO₂

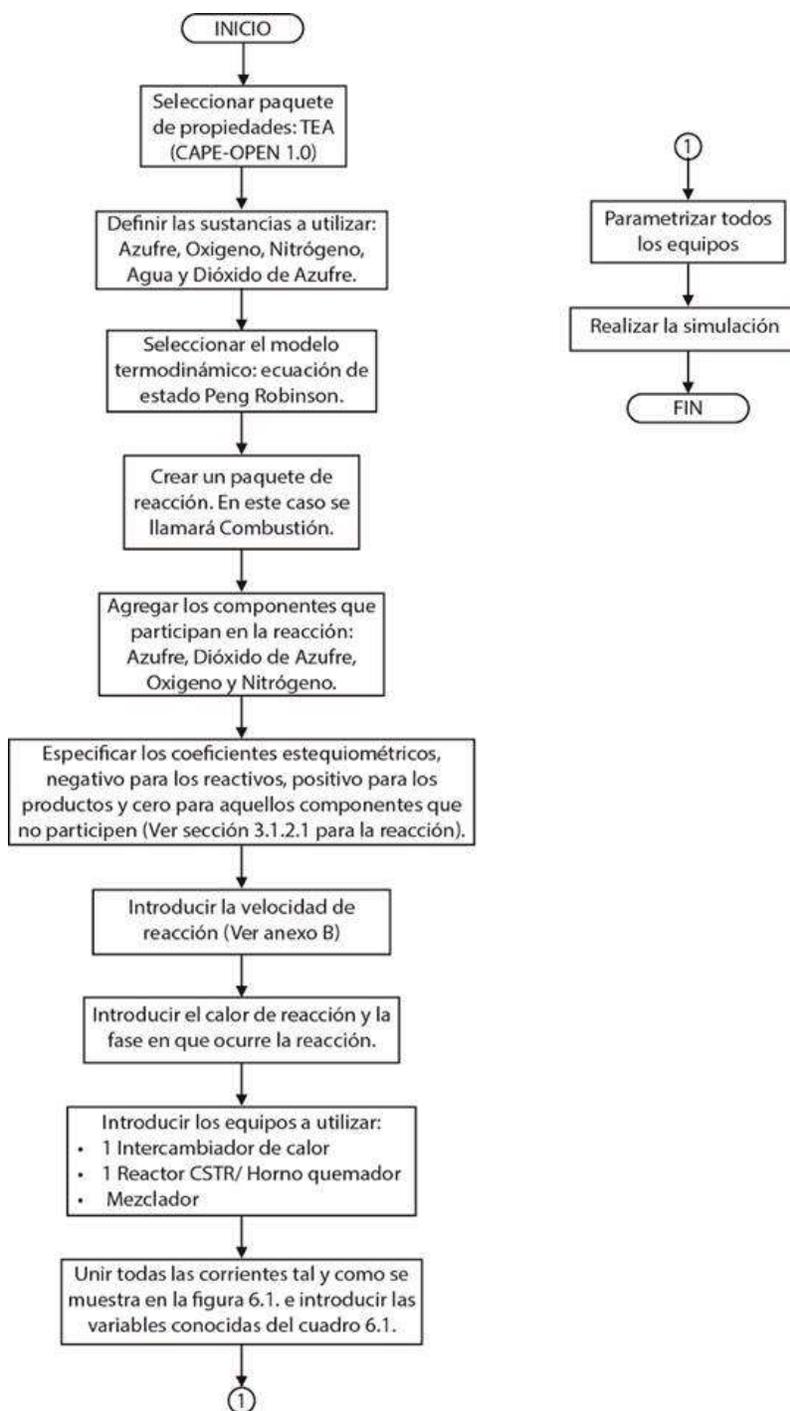


Figura 6.4. Diagrama de flujo con la metodología implementada para el componente uno (Autor, 2016).

6.2.2. METODOLOGÍA IMPLEMENTADA PARA EL COMPONENTE DOS: OXIDACIÓN DEL SO₂ PARA CONVERTIRLO EN SO₃

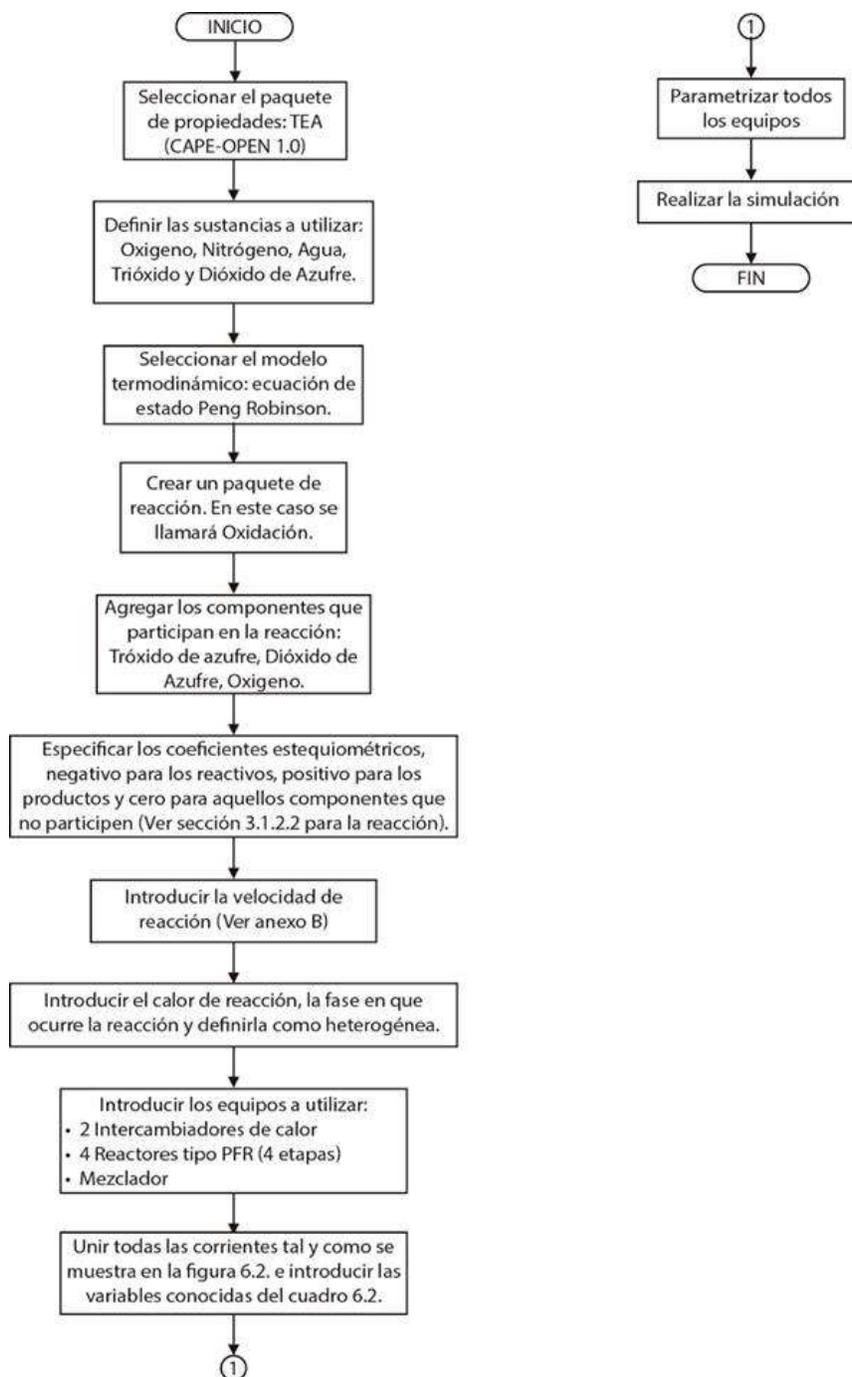


Figura 6.5. Diagrama de flujo con la metodología implementada para el componente dos (Autor, 2016).

6.2.3. METODOLOGÍA IMPLEMENTADA PARA EL COMPONENTE TRES: ABSORCIÓN DEL SO₃ PARA FORMAR H₂SO₄

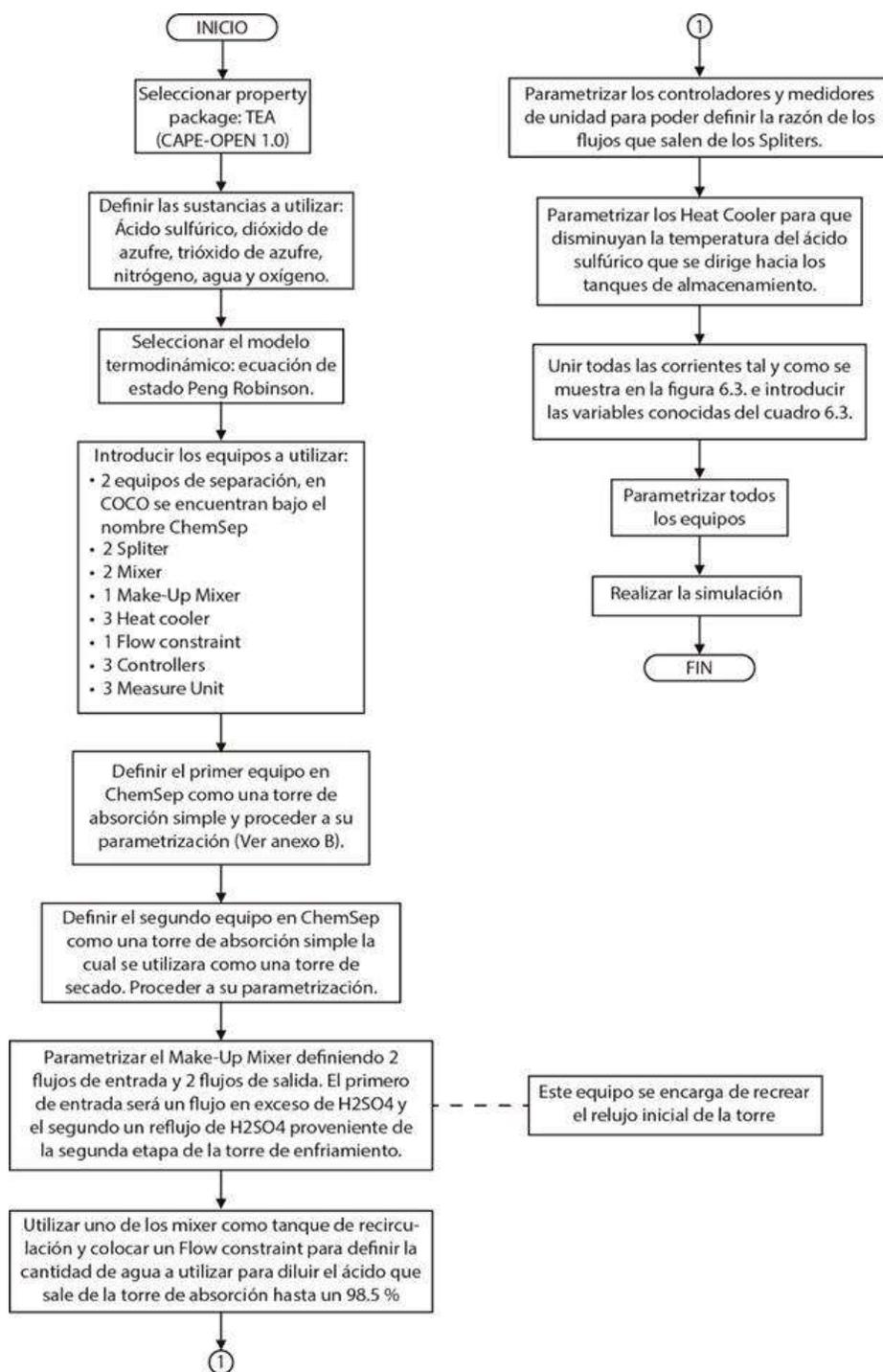


Figura 6.6. Diagrama de flujo con la metodología implementada para el componente tres (Autor, 2016).

6.3. DESCRIPCIÓN DE VARIABLES

En esta sección se explican todas las variables que se utilizaron en cada uno de los componentes de la producción de ácido sulfúrico. Las Tablas 6.1 a 6.3 presentan una descripción de lo que representa cada variable, así como los valores de flujo, composición y temperatura que fueron indispensables para poder simular este proceso. Los valores teóricos en estas tablas se obtuvieron de la visita a la planta de producción de ácido sulfúrico y de un balance de materia (Ver Anexo B). No todos los valores de flujo, composición o temperatura fueron necesarios para desarrollar la simulación, por lo tanto en los cuadros antes mencionados solo se colocan los valores requeridos o bien aquellos disponibles.

El nombre que se ha otorgado a cada una de las variables se ha hecho en base a la ficha de sub proceso explicada en el capítulo II, en la cual se aprecia la relación proceso-variable. Para más detalle ver Anexo A y Figuras 6.1 a 6.3 de este capítulo.

6.3.1. DESCRIPCIÓN DE VARIABLES EN COMPONENTE UNO: COMBUSTIÓN DE FLOR DE AZUFRE PARA PRODUCIR SO₂

Tabla 6.1. Resumen de las variables utilizadas en el componente uno

Variable	Descripción	Flujo teórico (ton/día)	Composición teórica (%mol)					Temperatura teórica (°C)
			S	SO ₂	O ₂	N ₂	H ₂ O	
F1/AF3	Corriente de azufre fundido que entra al quemador para la reacción de combustión	17.702	100	-	-	-	-	135.00
F2/AS2	Corriente de aire seco proveniente de la torre de secado	135.000	-	-	21	79	-	441.00

**Tabla 6.1. Resumen de las variables utilizadas en el componente uno
(Continuación)**

Variable	Descripción	Flujo teórico (ton/día)	Composición teórica (%mol)					Temperatura teórica (°C)
			S	SO ₂	O ₂	N ₂	H ₂ O	
F1/DA1	Corriente de gases conteniendo SO ₂ , y que han de ingresar a la caldera para poder enfriarlos	155.994	-	11	10	79	-	935.00
F1/DA2	Corriente de gases que salen de la caldera, los cuales se mandan al reactor	155.994	-	11	10	79	-	395.00
F3/AP2	Flujo de agua que ingresa a la caldera y por transferencia de calor, enfría los gases y genera vapor para otros procesos	-	-	-	-	-	100	100.00
F1/VS1	Vapor saturado proveniente de la caldera donde fue calentado con los gases de la combustión.	-	-	-	-	-	-	-

Fuente: Elaboración propia en base a datos proporcionados por Grupo Fertica, 2016.

6.3.2. DESCRIPCIÓN DE VARIABLES EN COMPONENTE DOS: OXIDACIÓN DEL SO₂ PARA CONVERTIRLO EN SO₃

Tabla 6.2. Resumen de las variables utilizadas en el componente dos

Variable	Descripción	Flujo teórico (ton/día)	Composición teórica (%mol)				Temperatura teórica (°C)
			SO ₂	SO ₃	N ₂	O ₂	
F1/DA1	Corriente de entrada a la primera etapa del reactor	155.994	11	-	79	10	395.00
F2/DA2	Corriente de salida de la primera etapa del reactor	-	-	-	-	-	585.00

**Tabla 6.2. Resumen de las variables utilizadas en el componente dos
(Continuación)**

Variable	Descripción	Flujo teórico (ton/día)	Composición teórica (%mol)				Temperatura teórica (°C)
			SO ₂	SO ₃	N ₂	O ₂	
F2/DA3	Corriente de entrada a la segunda etapa del reactor	-	-	-	-	-	-
F2/DA3*	Corriente previa a la mezcla con aire (flujo auxiliar)	-	-	-	-	-	507.00
F2/DA3**	Corriente mezclada con aire	-	-	-	-	-	-
F2/DA3***	Corriente de salida de la tercera etapa del reactor (flujo auxiliar)	-	-	-	-	-	460.00
F2/DA3****	Corriente de entrada en la cuarta etapa del reactor (flujo auxiliar)	-	-	-	-	-	-
F2/DA4	Corriente de salida de la cuarta etapa del reactor (flujo auxiliar)	201.324	0.15	8.18	82.23	9.44	440.00
F2/AS1	Corriente de aire seco utilizada para enfriar y agregar oxígeno a los gases en el reactor	-	-	-	-	-	-
F1/VS1	Corriente de vapor saturado proveniente de la caldera	-	-	-	-	-	-
F2/VSC1	Vapor sobrecalentado con el calor generado en la conversión del SO ₂	-	-	-	-	-	-
F2/AIP1	Aire seco con presión ajustada para reducir la temperatura en el reactor	-	-	-	-	-	-

**Tabla 6.2. Resumen de las variables utilizadas en el componente dos
(Continuación)**

Variable	Descripción	Flujo teórico (ton/día)	Composición teórica (%mol)				Temperatura teórica (°C)
			SO ₂	SO ₃	N ₂	O ₂	
F3/AIP2	Aire utilizado para enfriar los gases del reactor proveniente de la torre de secado	-	-	-	-	-	-

Fuente: Elaboración propia en base a datos proporcionados por Grupo Fertica, 2016.

6.3.3. DESCRIPCIÓN DE VARIABLES EN COMPONENTE TRES: ABSORCIÓN DEL SO₃ PARA FORMAR H₂SO₄

Tabla 6.3. Resumen de las variables utilizadas en el componente tres

Variable	Descripción	Flujo teórico (ton/día)	Composición teórica (%p/p)						Temperatura teórica (°C)
			SO ₂	SO ₃	N ₂	O ₂	H ₂ O	H ₂ SO ₄	
F3/DA1	Corriente de entrada a la torre de absorción conteniendo gases de SO ₃ .	201.32	0.15%mol	8.18 %mol	82.23%mol	9.44%mol	-	-	163.10
F3/AIP1	Corriente de aire a la entrada de la torre de secado.	-	-	-	-	-	-	-	127.75
F3/DA3	Gases a la salida de la torre de absorción.	-	0.78%mol	-	94.9%mol	4.28%mol	-	-	80.00
F3/AIP2	Aire seco a la salida de la torre de secado.	-	-	-	-	-	-	-	70.00
F3/AS1	Ácido fumante proveniente de la torre de absorción.	1279.390	-	-	-	-	-	-	91.00

Tabla 6.3. Resumen de las variables utilizadas en el componente tres (Continuación)

Variable	Descripción	Flujo teórico (ton/día)	Composición teórica (%p/p)						Temperatura teórica (°C)
			SO ₂	SO ₃	N ₂	O ₂	H ₂ O	H ₂ SO ₄	
F3/AS2	Suma de los flujos provenientes de la torre de absorción y secado, que han de ingresar al tanque de recirculación.	-	,	,	,	,	,	,	-
F3/AP3	Flujo de agua que se utiliza para diluir el ácido fumante.	9.796	,	,	,	,	100	,	-
F3/AS3	Corriente de salida del tanque de recirculación después de diluir el ácido fumante.	1918.090	,	,	,	,	1.5	98.5	86.76
F3/AS3''	Corriente que ha de ingresar a la torre de enfriamiento uno.	-	,	,	,	,	1.5	98.5	86.76
F3/AS4	Corriente de ácido al 98.5 %p/p que se recircula a la torre de absorción.	1292.379	,	,	,	,	1.5	98.5	72.44
F3/AS3'	Corriente que ha de ingresar a la torre de enfriamiento dos.	-	,	,	,	,	1.5	98.5	71.48
F3/AS5	Corriente de salida de la torre de enfriamiento dos.	-	,	,	,	,	1.5	98.5	-
F3/AS5''	Corriente de ácido al 98.5 %p/p que se recircula a la torre de secado.	1938.560	,	,	,	,	1.5	98.5	71.48
F3/AS7	Corriente de ácido que sale levemente diluida de la torre de secado.	628.898	,	,	,	,	,	,	-

**Tabla 6.3. Resumen de las variables utilizadas en el componente tres
(Continuación)**

Variable	Descripción	Flujo teórico (ton/día)	Composición teórica (%p/p)					Temperatura teórica (°C)	
			SO ₂	SO ₃	N ₂	O ₂	H ₂ O		H ₂ SO ₄
F3/AS5'	Corriente que ha de ingresar a la torre de enfriamiento tres.	-	,	,	,	,	1.5	98.5	-
F3/AS6	Corriente de ácido que se envía a almacenamiento.	50.00	,	,	,	,	1.5	98.5	-

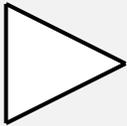
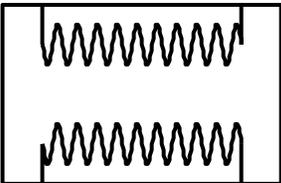
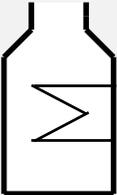
Fuente: Elaboración propia en base a datos proporcionados por Grupo Fertica, 2016.

6.4. DESCRIPCIÓN DE EQUIPOS

Las Tablas 6.4 a 6.6 de esta sección, describen cada equipo de COCO que se utilizó en la simulación de la producción de ácido sulfúrico. Cada cuadro muestra la figura con que se representa a ese equipo, una descripción de lo que realiza cada equipo y como se adaptó a los requerimientos de esta industria, además se mencionan cuáles son los parámetros que el programa exige que se introduzcan para cada equipo. Para más detalle del equipo utilizado en estos componentes, ver Anexo A.

6.4.1. DESCRIPCIÓN DE EQUIPOS EN COMPONENTE UNO: COMBUSTIÓN DE FLOR DE AZUFRE PARA PRODUCIR SO₂

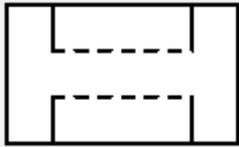
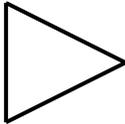
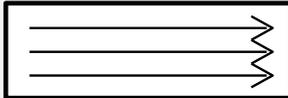
Tabla 6.4. Resumen de los equipos utilizados en el componente uno

Equipo	Figura	Descripción	Parámetros
Mezclador		Combina varios flujos de entrada para producir una corriente de salida. Para el componente uno, combina los flujos de aire y azufre que han de ingresar al quemador.	Caída de presión
Caldera		Se utiliza un intercambiador de calor, el cual intercambia calor entre los flujos de agua y los gases que salen del quemador. Por tanto, tiene dos entradas y dos salidas. Se debe de elegir una de siete opciones: calor, temperatura, LMTD, máxima transferencia de calor, eficiencia, eficiencia de NTU o eficiencia de UA. En este caso, se elige la temperatura.	<ul style="list-style-type: none"> • Caída de presión • Temperatura
Horno quemador		El horno quemador tiene como objetivo transformar el azufre en flor en SO_2 , a través de una reacción de combustión. Para ello, se utiliza un reactor del tipo RFP (Reactor de Flujo en Pistón). Es un modelo de reactor uni-dimensional simplificado en el que, en cada punto a lo largo del reactor, la velocidad de la fase reactiva, las concentraciones, la temperatura y la presión son constantes a lo largo de la sección transversal. El RFP solo tiene una entrada y una salida. Es necesario asignar un paquete de reacción para poder ejecutar este equipo.	<ul style="list-style-type: none"> • Fase de la reacción • Dirección del flujo • Longitud y diámetro del reactor

Fuente: Cocosimulator.org., 2016.

6.4.2. DESCRIPCIÓN DE EQUIPOS EN COMPONENTE DOS: OXIDACIÓN DEL SO₂ PARA CONVERTIRLO EN SO₃

Tabla 6.5. Resumen de los equipos utilizados en el componente dos

Equipo	Figura	Descripción	Parámetros
Intercambiador de calor		Se utiliza un intercambiador de calor, el cual intercambia calor entre los flujos de aire y los gases que salen del reactor. Su propósito es enfriar los gases del reactor y así favorecer la termodinámica de la reacción.	<ul style="list-style-type: none"> • Caída de presión • Temperatura
Mezclador		Se utiliza para inyectar una corriente de aire a los gases que participan en la reacción tanto con el objetivo de enfriarlos como para aumentar la concentración de oxígeno.	Caída de presión
Reactor		Es un reactor del tipo RFP. Como se explicó en el cuadro 6.4, el RFP solo tiene una entrada y una salida. Es necesario asignar un paquete de reacción para poder ejecutar este equipo. Ya que en este componente hay una reacción heterogénea presente, resulta necesario especificar las propiedades del catalizador.	<ul style="list-style-type: none"> • Fase de la reacción • Longitud y diámetro del reactor • Características del lecho empacado

**Tabla 6.5. Resumen de los equipos utilizados en el componente dos
(Continuación)**

Equipo	Figura	Descripción	Parámetros
Controlador		<p>El controlador recibe información de la unidad de medición, controla un parámetro previamente seleccionado y detiene las iteraciones cuando se llega al <i>set point</i> definido. Los controladores usados en este componente se utilizan para determinar la magnitud del flujo a menor temperatura a partir de la temperatura leída por la unidad de medición.</p>	
Unidad de medición		<p>La unidad de medición tiene un flujo de materia de entrada y uno de salida. Su propósito es exponer valores que están presentes en la corriente (temperatura, presión, flujo, etc.) como un puerto de información. Copia el contenido de la corriente de material de entrada a la corriente de salida y realiza un cálculo de equilibrio. Para ello, deben de especificarse la temperatura y presión, así como el parámetro y componente que se desea medir. Las unidades de medición se utilizaron para determinar la temperatura del flujo a enfriar.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Temperatura • Presión

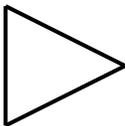
**Tabla 6.5. Resumen de los equipos utilizados en el componente dos
(Continuación)**

Equipo	Figura	Descripción	Parámetros
Flow Constraint		La restricción de flujo recibe información del controlador y depende del valor que recibe, en este caso el controlador dicta un valor de flujo dependiendo de la temperatura leída por la unidad de medición.	Variable a controlar (flujo másico o flujo molar)

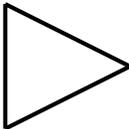
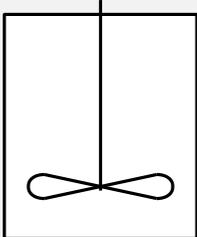
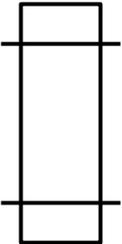
Fuente: Cocosimulator.org., 2016.

6.4.3. DESCRIPCIÓN DE EQUIPOS EN COMPONENTE TRES: ABSORCIÓN DEL SO₃ PARA FORMAR H₂SO₄

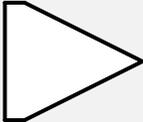
Tabla 6.6. Resumen de los equipos utilizados en el componente tres

Equipo	Figura	Descripción	Parámetros
Torre de absorción		Para este tipo de operación se selecciona un separador tipo <i>ChemSep</i> . Y en este caso en particular, se utilizará una torre de absorción simple. Esta torre posee dos entradas y dos salidas (el producto de cabeza y de fondo). Tiene como función absorber el SO ₃ en H ₂ SO ₄ al 98.5 %. Al agregar la reacción, se deben conocer datos cinéticos de esa reacción para poder ejecutar la torre.	<ul style="list-style-type: none"> • Presión • Eficiencia • Número de platos • Plato de alimentación
Mezclador		El mezclador combina los flujos de salida de H ₂ SO ₄ de la torre de absorción y la torre de secado, para llevarlos al tanque de recirculación.	Caída de presión

**Tabla 6.6. Resumen de los equipos utilizados en el componente tres
(Continuación)**

Equipo	Figura	Descripción	Parámetros
Torre de secado		<p>Al igual que la torre de absorción, la torre de secado se trabaja con ChemSep, seleccionando siempre un absorbedor simple, pues se trata de una operación gas-liquido. Tiene como función remover la humedad del aire al hacerlo pasar por H₂SO₄ al 98.5 %. Se debe de especificar el número de platos, los platos de alimentación, la presión y la eficiencia.</p> <p>Esta torre no trabaja con ninguna reacción.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Presión • Eficiencia
Separador		<p>El separador se utiliza para dividir una sola entrada en varias salidas.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Factor de división • Caída de presión
Tanque de recirculación		<p>Se utiliza un mezclador, el cual combina varios flujos de entrada para producir una única salida, debido a que COCO no posee tanques de mezcla. Se cambia el icono para tener una mejor apreciación del proceso.</p>	<p>Caída de presión</p>
Torre de enfriamiento		<p>El equipo usado en esta parte es un calentador/enfriador. Su función es cambiar la temperatura de un flujo. Posee una entrada y una salida. O bien, se puede especificar la temperatura de salida o la carga térmica. Se utilizan tres en este componente.</p>	<p>Temperatura de salida</p>
Unidad de medición		<p>Las unidades de medición se utilizaron para medir los flujos máxicos haciendo una relación de reciclo/secado, reciclo/absorción y la fracción mol de ácido a la entrada del tanque de recirculación.</p>	<ul style="list-style-type: none"> • Temperatura • Presión

**Tabla 6.6. Resumen de los equipos utilizados en el componente tres
(Continuación)**

Equipo	Figura	Descripción	Parámetros
Make up mixer		El <i>make up mixer</i> es una operación unitaria que se utiliza para crear la corriente de reflujo de H ₂ SO ₄ que entra a la torre de absorción. Para lograr esto, se especifica una corriente de alimentación de H ₂ SO ₄ con un flujo que es demasiado alto, esto significa que se puede utilizar sólo una parte de la corriente de alimentación y el excedente sale del make-up mixer sin llegar a ser parte del flujo que entra a la torre de absorción.	<ul style="list-style-type: none"> • Flujo de reciclo • Flujo en exceso
Controlador		Los controladores usados en este componente se utilizan para controlar el flujo de agua en diferentes equipos.	
Flow Constraint		La restricción de flujo recibe información del controlador y depende del valor que recibe, aumenta o disminuye el flujo de agua que se dirige al tanque de recirculación para diluir el ácido que sale de la torre de absorción hasta obtener una concentración de 98.5 %.	Variable a controlar (flujo másico o flujo molar)

Fuente: Cocosimulator.org., 2016.

6.5. RESULTADOS OBTENIDOS

Al resolver un problema, los datos que se obtienen suelen compararse con algún valor teórico que nos indica si estos datos son acertados o no. Para efectos de este trabajo, los valores teóricos con los cuales se va a comparar los resultados de la simulación son los datos proporcionados por la planta de producción de FERTICA.

Los valores numéricos reales de las variables más significativas de los tres componentes se presentan en la Tabla 6.7.

Tabla 6.7. Resumen de los resultados obtenidos de las corrientes simuladas

COMPONENTE UNO												
Variable	Flujo teórico (ton/día)	Flujo obtenido (ton/día)	Composición teórica (%mol)				Composición obtenida (%mol)				Temperatura teórica (°C)	Temperatura obtenida (°C)
			S	SO ₂	O ₂	N ₂	S	SO ₂	O ₂	N ₂		
F1/AF3	17.702	-	100	-	-	-	-	-	-	-	135.00	-
F1/DA1	155.994	152.70	-	11	10	79	1.998E-06	11.80	9.20	78.99	935.00	928.04
COMPONENTE DOS												
Variable	Flujo teórico (ton/día)	Flujo obtenido (ton/día)	Composición teórica (%mol)				Composición obtenida (%mol)				Temperatura teórica (°C)	Temperatura obtenida (°C)
			SO ₂	SO ₃	N ₂	O ₂	SO ₂	SO ₃	N ₂	O ₂		
F1/DA1	155.994	-	11	-	79	10	-	-	-	-	395.00	-
F2/DA4	201.324	192.07	0.15	8.18	82.23	9.44	0.21	8.91	82.52	8.36	421.90	445.37
COMPONENTE TRES												
Variable	Flujo teórico (ton/día)	Flujo obtenido (ton/día)	Composición teórica (%p/p)		Composición obtenida (%p/p)		Temperatura teórica (°C)	Temperatura obtenida (°C)				
			H ₂ SO ₄		H ₂ SO ₄							
F3/AS1	1279.390	2987.76	-		99.83		91.00	101.61				
F3/AS3	1918.090	5108.95	98.50		98.49		86.76	95.28				
F3/AS4	1292.379	2980.80	98.50		98.49		72.44	72.44				
F3/AS5''	1938.560	2073.60	98.50		98.49		71.48	71.48				
F3/AS7	628.898	2067.21	-		99.14		-	82.57				
F3/AS6	50.000	54.56	98.50		98.49		-	40.00				

Fuente: Autor, 2016.

Las Tablas 6.8 a 6.10 presentan la desviación correspondiente a cada variable en cada uno de los componentes simulados. La desviación se obtiene con la fórmula siguiente:

$$\text{Desviación}(\%) = \left| \frac{\text{Valor teórico} - \text{Valor obtenido}}{\text{Valor teórico}} \right| * 100$$

Tabla 6.8. Desviación en las corrientes simuladas del componente uno

Variable	Flujo teórico (ton/día)	Flujo obtenido (ton/día)	Desviación (%)	Temperatura teórica (°C)	Temperatura obtenida (°C)	Desviación (%)						
F1/AF3	17.702	-	-	135.00	-	-						
F1/DA1	155.994	152.70	2.07	935.00	928.04	0.74						
Variable	Composición teórica (%mol)				Composición obtenida (%mol)				Desviación (%)			
	S	SO ₂	O ₂	N ₂	S	SO ₂	O ₂	N ₂	S	SO ₂	O ₂	N ₂
F1/AF3	100	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
F1/DA2	-	11	10	79	1.998 E-06	11.80	9.20	78.99	-	7.27	8.00	0.01

Fuente: Autor, 2016.

Tabla 6.9. Desviación en las corrientes simuladas del componente dos

Variable	Flujo teórico (ton/día)	Flujo obtenido (ton/día)	Desviación (%)	Temperatura teórica (°C)	Temperatura obtenida (°C)	Desviación (%)
F1/DA1	155.994	-	-	395.00	-	-
F2/DA2	-	-	-	585.00	597.99	2.22
F2/DA3*	-	-	-	507.00	512.64	1.11
F2/DA3**	-	-	-	460.00	465.00	1.09
F2/DA4	201.324	192.07	4.60	440.00	445.37	1.22

**Tabla 6.9. Desviación en las corrientes simuladas del componente dos
(Continuación)**

Variable	Composición teórica (%mol)				Composición obtenida (%mol)				Desviación (%)			
	SO ₂	SO ₃	N ₂	O ₂	SO ₂	SO ₃	N ₂	O ₂	SO ₂	SO ₃	N ₂	O ₂
F1/DA2	11	-	79	10	-	-	-	-	-	-	-	-
F2/DA4	0.15	8.18	82.23	9.44	0.21	8.91	82.51	8.36	40.00	8.92	0.34	11.44

Fuente: Autor, 2016.

Tabla 6.10. Desviación en las corrientes simuladas del componente tres

Variable	Flujo teórico (ton/día)	Flujo obtenido (ton/día)	Desviación (%)	Temperatura teórica (°C)	Temperatura obtenida (°C)	Desviación (%)
F3/AS1	-	2987.76	-	91.00	101.61	11.65
F3/AS3	-	5108.95	-	86.76	95.28	9.82
F3/AS4	1292.379	2980.80	130.64	72.44	72.44	0.00
F3/AS5''	1938.560	2073.60	6.97	71.48	71.48	0.00
F3/AS7	-	2067.21	-	-	82.57	-
F3/AS6	50	54.56	9.12	-	40.00	-
Variable	Composición teórica (%p/p)		Composición obtenida (%p/p)		Desviación (%)	
	H ₂ SO ₄		H ₂ SO ₄		H ₂ SO ₄	
F3/AS1	-		99.83		-	
F3/AS3	98.5		98.49		0.01	
F3/AS4	98.5		98.49		0.01	
F3/AS5''	98.5		98.49		0.01	
F3/AS7	-		99.14		-	
F3/AS6	98.5		98.49		0.01	

Fuente: Autor, 2016.

6.6. DISCUSIÓN DE RESULTADOS

En esta sección se analizan los resultados de las simulaciones de los componentes correspondientes al proceso de producción de ácido sulfúrico. Para analizar la fiabilidad de los resultados se compararon flujos másicos, temperaturas y composiciones esperadas con las obtenidas a partir de la simulación.

- Componente uno: Combustión de flor de azufre para producir SO₂

En el primer componente, el flujo másico a la salida del horno (F1/DA1) presenta una desviación de 2.07 % que se encuentra dentro del rango esperado de variabilidad y se debe a pequeñas diferencias en el comportamiento de la reacción y en el flujo de aire entrando al horno.

Las desviaciones en la composición de dióxido de azufre, oxígeno y nitrógeno son 7.27 %, 8 % y 0.01 % respectivamente. La composición de nitrógeno no presenta cambios porque el gas es un espectador y no participa en la reacción. Las desviaciones en la composición del O₂ y SO₂ se deben a que la reacción presenta un comportamiento ideal, en la realidad ocurren pequeñas fluctuaciones en la composición. Sin embargo, no afectan el funcionamiento correcto de la simulación.

En cuanto a la temperatura de salida del horno, se obtuvo una desviación del 0.74 %. Esto indica que el comportamiento termodinámico de la reacción es confiable porque el valor de desviación es aceptable.

- Componente dos: Oxidación del SO₂ para convertirlo en SO₃

En el segundo componente, el flujo másico a la salida del reactor (F2/DA4) presenta una desviación del 4.60 %. Esta desviación no es significativa, pero se debe tomar en cuenta que entre la segunda y tercera etapa del reactor, se inyecta aire para enfriar los gases hasta la temperatura requerida. La cantidad de aire inyectada depende de las fluctuaciones de temperatura dentro del reactor y por tanto el flujo de salida es variable.

Otro factor que influye en el comportamiento de los flujos másicos son los parámetros de diseño de cada etapa del reactor. Las dimensiones del equipo fueron establecidas a partir de la información recopilada en la bibliografía del proceso.

En cuanto a las composiciones de salida del reactor, la composición del SO_3 determina la funcionalidad y confiabilidad de los resultados, la desviación de esta variable con respecto al valor esperado es del 8.92 %. Ésta desviación y la del resto de componentes es causada por pequeñas diferencias en el grado de conversión logrado en el reactor, y a la inyección de aire entre la etapa tres y cuatro.

Otra causa de variabilidad en la conversión y composiciones del reactor, es la manera en la que el simulador representa la influencia del catalizador en la reacción. En el reactor real el lecho está compuesto por diferentes tipos de catalizador, en el programa solo se puede controlar la carga de catalizador, la porosidad del lecho y el tamaño de partícula.

Las temperaturas que se utilizarán para analizar los resultados en este componente corresponden a los flujos de salida de cada etapa del reactor, F2/DA2, F2/DA3*, F2/DA3*** y F2/DA4, las desviaciones respectivas son: 2.22 %, 1.11 %, 1.09 % y 1.22 %. Las desviaciones anteriores son reducidas por lo que el resultado de la simulación puede considerarse confiable con respecto a su comportamiento termodinámico.

- Componente tres: Absorción del SO_3 para formar H_2SO_4

En el tercer componente se utilizaron tres flujos másicos para determinar la precisión de los resultados: F3/AS4, F3/AS5” y F3/AS6. Las desviaciones respectivas son: 130.64 %, 6.97 % y 9.12 %. Los reflujos fueron calculados a partir

de los requerimientos de absorción y secado estableciendo condiciones a la salida de las torres.

El flujo F3/AS4 presenta una desviación significativa y esto se debe a los siguientes factores que inciden en los resultados:

- El modelo de la reacción utilizada asume un comportamiento ideal. En el proceso real ocurre una reacción consecutiva en la que participan SO_3 y H_2SO_4 que deja como resultado $\text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7$ el cual al entrar en contacto con agua forma H_2SO_4 concentrado.
- En el proceso real se utiliza una torre de absorción con lechos empacados, no obstante, el programa solo permite trabajar con torres de platos. Por lo tanto, se hizo una equivalencia para simular el funcionamiento con lechos. Sin embargo, esta diferencia continúa siendo un factor que incide en los resultados.

Los flujos F3/AS5" y F3/AS6, están dentro de los valores esperados porque dependen de operaciones unitarias simples (secado e intercambio de calor) y se ayudan de controladores de flujo que regulan las magnitudes de los mismos.

En cuanto a las composiciones utilizadas para verificar la certeza de los resultados, todas presentaron una desviación aceptable y se debe al uso de los controladores de flujo que se aseguran de obtener las concentraciones esperadas en cada uno de estos flujos.

Finalmente, con respecto a las temperaturas de los flujos del subproceso, los únicos que presentaron desviación son F3/AS1 y F3/AS3 con un valor de 11.65 % y 9.82 % respectivamente. Los valores de desviación son aceptables y las diferencias se deben a la idealización del calor producido por la reacción en el caso de la torre de absorción, es decir, se utilizó un valor de entalpía de reacción constante cuando este depende, en realidad, de la temperatura.

CAPÍTULO VII

7.0. SIMULACIÓN DE COMPONENTES DENTRO DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE AZÚCAR A PARTIR DE CAÑA

7.1. SEGMENTACIÓN DEL PROCESO PARA FINES DE ANÁLISIS

En este capítulo se trabajarán con dos componentes del proceso de producción de azúcar a partir de caña, los cuales son:

- Componente 1: Ciclo de potencia
- Componente 2: Evaporación

Se divide de esta manera ya que son los únicos procesos factibles para simular a través de COCO Simulator, debido a las limitantes que el programa presenta en cuanto al equipo, pues en los ingenios suelen utilizarse equipos adaptados a las operaciones que ahí se realizan.

En este capítulo se explica en qué partes del proceso y bajo qué condiciones se está realizando la simulación, además, cómo se elabora la misma. Los detalles sobre los cálculos y procedimientos necesarios se encuentran en el Anexo C.

Todos los datos que fueron requeridos para las simulaciones fueron obtenidos de un ingenio azucarero salvadoreño al cual llamaremos “Ingenio Azucarero A”.

7.1.1. COMPONENTE UNO: CICLO DE POTENCIA

El primer componente a representar de la industria azucarera es el ciclo de potencia. Este proceso tiene como fin producir energía eléctrica a partir del poder calorífico del bagazo de caña, un sub producto de la caña de azúcar.

La combustión del bagazo de caña genera una gran cantidad de calor que sirve para transformar el agua introducida a las calderas en vapor (Ver Figura 7.1, Flujo F1/AP1). Se utilizan tres calderas, y el vapor generado en ellas es dirigido a un colector (F1/VSC1, F1/VSC1* y F1/VSC1**). Una parte de este vapor se envía al proceso de extracción del jugo (F1/VP1) donde es utilizado para hacer funcionar los molinos y el resto es inyectado a una turbina (F1/VP3) para generar energía eléctrica (10 MW), la cual se utiliza para el consumo de la misma planta del ingenio (5 MW) y el sobrante se inyecta a la red nacional de energía eléctrica (5 MW).

La ventaja de este componente es que la única sustancia de trabajo es el agua, solo se necesitan datos de flujos, temperatura y presión a la cual trabajan los equipos y la eficiencia de la turbina, para poder desarrollar la simulación.

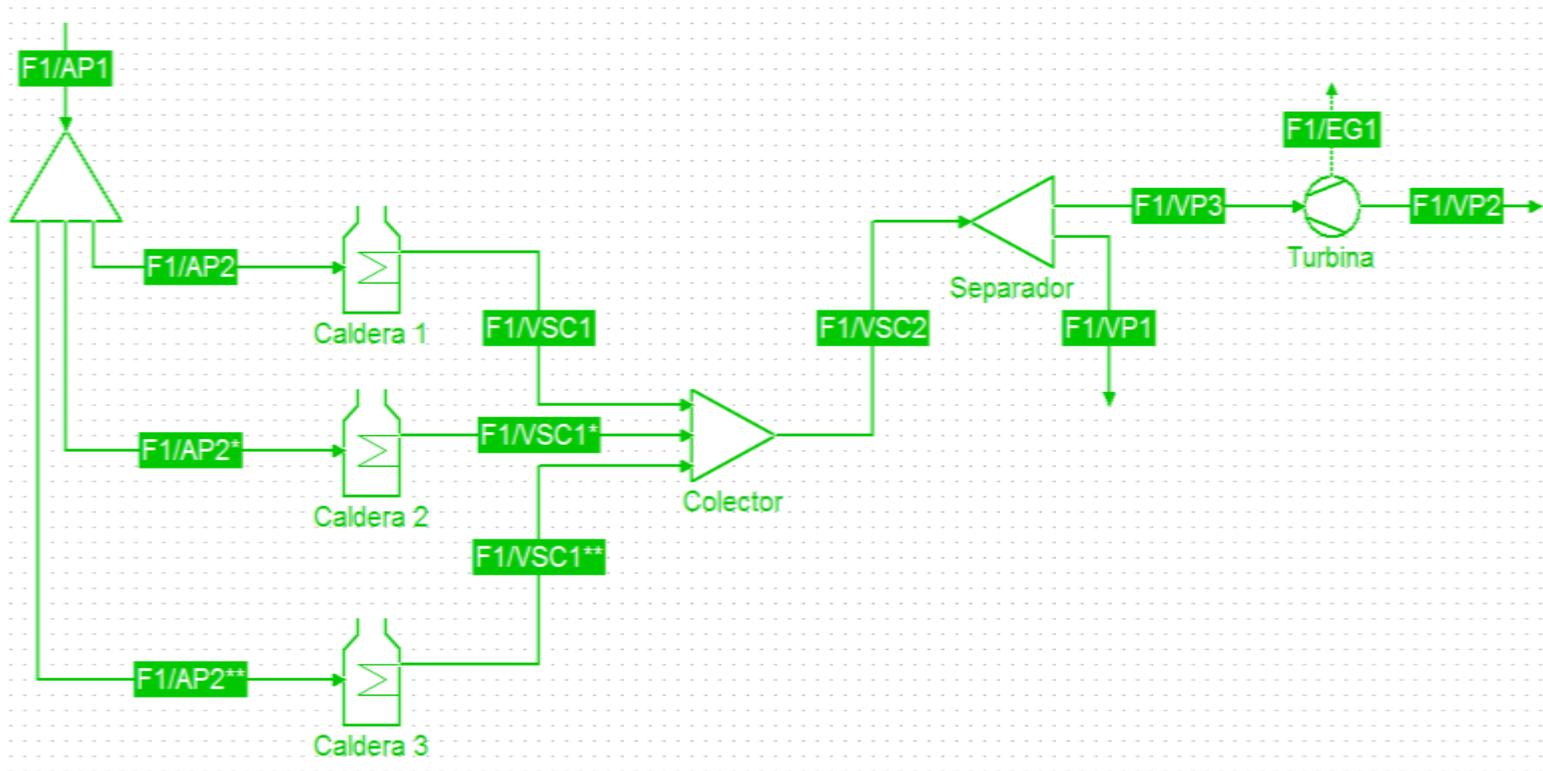


Figura 7.1 Representación de la simulación en COCO Simulator del componente uno (Autor, 2016).

7.1.2. COMPONENTE DOS: EVAPORACIÓN

El componente dos considerado es la operación de evaporación, la cual consiste en remover el agua presente en el jugo clarificado mediante evaporación. La remoción de agua se realiza aplicando evaporación múltiple efecto, este sistema permite eliminar alrededor del 75 - 80 % del agua presente en el jugo clarificado. El jugo clarificado pasa al primer evaporador (Ver Figura 7.2, Flujo F2/JC1) donde se concentra el jugo a 28 °Brix aproximadamente. Luego este jugo pasa al segundo efecto (F2/JC2) y así sucesivamente hasta llegar al cuarto efecto y alcanzar una concentración final de 63 °Brix aproximadamente.

Para la simulación de este proceso, la base de datos de COCO solo presenta una (agua) de las cuatro sustancias involucradas en la producción de azúcar a partir de caña. Por tanto, el jugo de caña representado por sacarosa, fructosa y glucosa, fueron añadidos a la base de datos de COCO, mediante el proceso descrito en la Figura 5.2. Las demás sustancias presentes se asumen como despreciables por ser mínima la cantidad en la cual están presentes (0.64 %p/p del porcentaje total). Para más detalle de cómo agregar una sustancia ver sección 5.4.5.

Sin embargo, solo fue posible conseguir datos para las tres sustancias en su fase sólida (sacarosa, fructosa y glucosa). Por esta razón, para representar el comportamiento de los evaporadores y poder simular en COCO se eligió el equipo llamado *Divisor de Componentes*, ya que los demás equipos que tienen la capacidad para representar con mayor exactitud la operación de evaporación, necesitaban datos para la fase líquida y gas de las sustancias presentes.

Cabe aclarar que, en el proceso real, se utiliza vapor para poder calentar el jugo en cada efecto. Pero como se mencionó previamente, el Divisor de Componentes que se utilizó solo trabaja con una entrada (ver más detalle en Tabla 7.4).

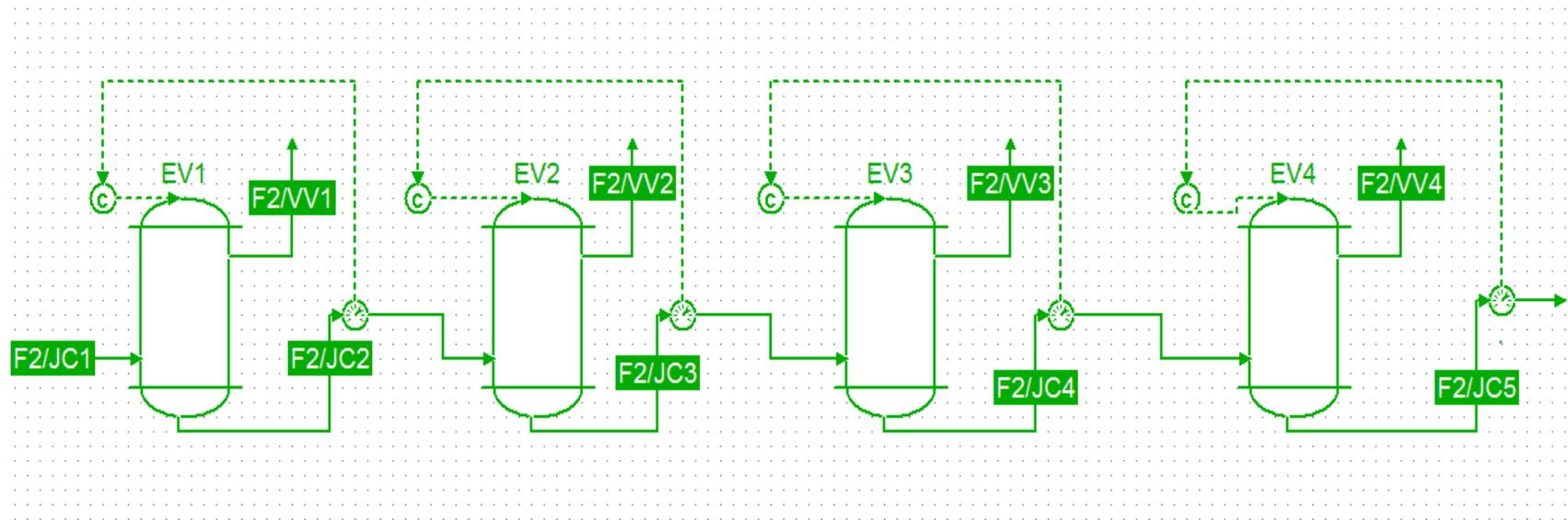


Figura 7.2. Representación de la simulación en COCO Simulator del componente dos (Autor, 2016).

7.2. METODOLOGÍA IMPLEMENTADA PARA LA SIMULACIÓN DE PROCESOS DE PRODUCCIÓN DE AZÚCAR A PARTIR DE CAÑA

Al momento de simular los diferentes procesos de producción de azúcar a partir de caña, se debe determinar que variables se controlaran en los equipos, los modelos termodinámicos y las sustancias químicas que se ven involucradas a lo largo del proceso.

En el componente uno, se utiliza el modelo UNIFAC VLE. Este modelo resulta útil puesto que se carecen de datos experimentales para el cálculo del Equilibrio Líquido-Vapor (ELV o VLE por sus siglas en inglés), debido a que se encontraron pocos datos de las sustancias involucradas (sacarosa, fructosa y glucosa). Este modelo realiza una buena estimación de los datos (Rivas, 2015).

En el componente dos, se selecciona el paquete *Water*. Este paquete viene incluido en la instalación de COCO y proporciona cálculos para el equilibrio basado en la combinación de variables de especificación como: presión-temperatura, presión-entalpía, presión-entropía, etc. (Cocosimulator.org, 2016)

7.2.1. METODOLOGÍA IMPLEMENTADA PARA EL COMPONENTE UNO: CICLO DE POTENCIA

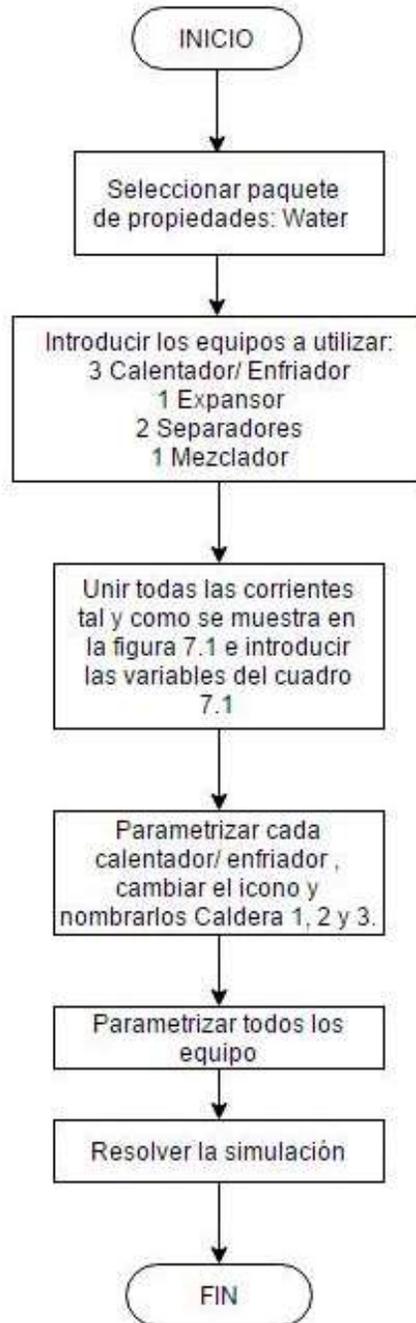


Figura 7.3. Diagrama de flujo con la metodología implementada para el componente uno (Autor, 2016).

7.2.2. METODOLOGÍA IMPLEMENTADA PARA EL COMPONENTE DOS: EVAPORACIÓN

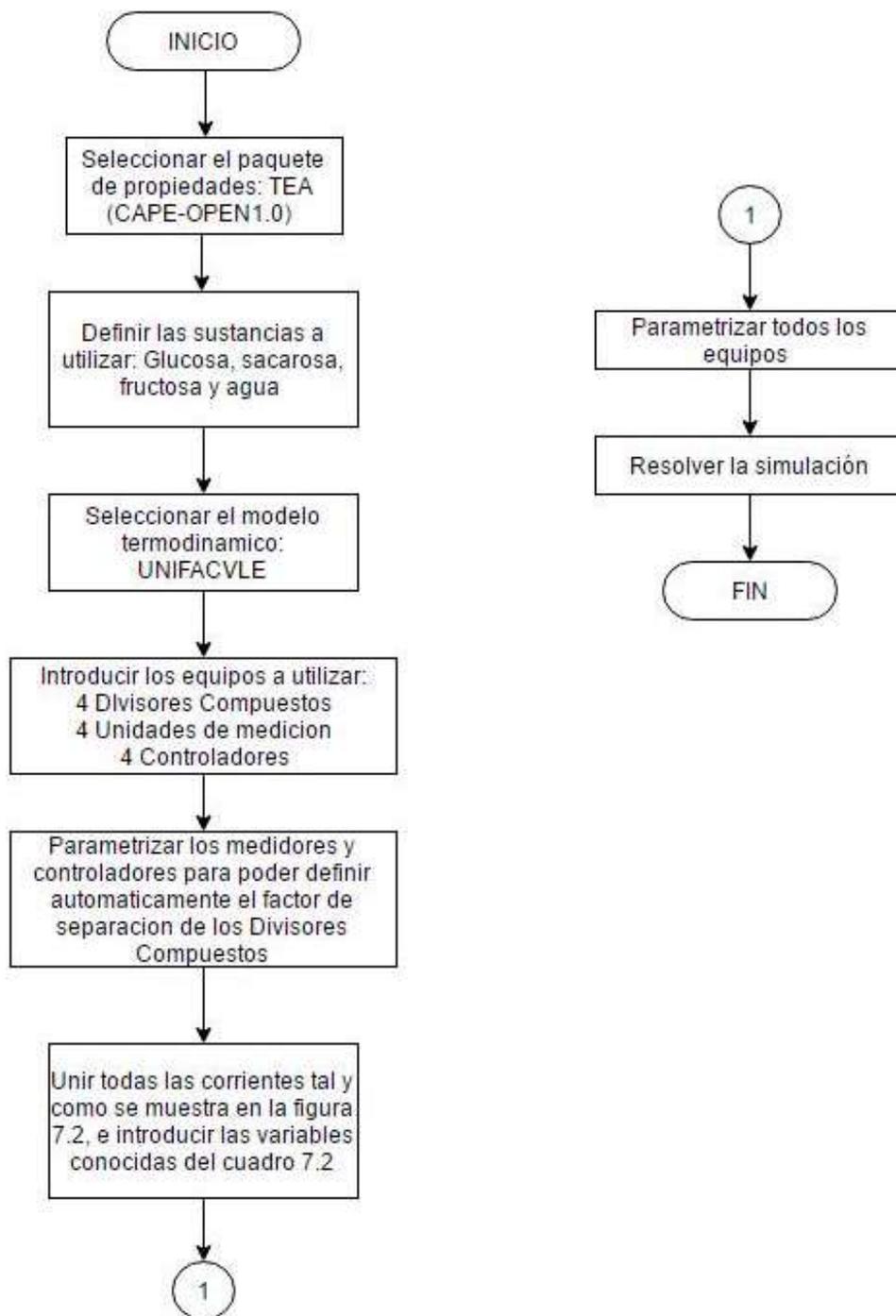


Figura 7.4. Diagrama de flujo con la metodología implementada para el componente dos (Autor, 2016).

7.3. DESCRIPCIÓN DE VARIABLES

En esta sección se describen las variables que se utilizaron en cada uno de los componentes de la producción de azúcar a partir de caña. Las Tablas 7.1 y 7.2 presentan una descripción de lo que representa cada variable, así como los valores de flujo, composición, presión y temperatura, según sea el caso, que fueron necesarios conocer para poder simular este proceso. Los datos teóricos utilizados en estas tablas fueron proporcionados durante la visita al ingenio azucarero "A".

El nombre que se ha otorgado a cada una de las variables se ha hecho en base a la ficha de sub proceso explicada en el capítulo II, en dicha ficha se muestra la relación proceso-variable (ver Anexo A).

7.3.1. DESCRIPCIÓN DE VARIABLES EN COMPONENTE UNO: CICLO DE POTENCIA

Tabla 7.1. Resumen de las variables utilizadas en el componente uno

Variable	Descripción	Flujo teórico (ton/h)	Presión teórica (bar)	Temperatura teórica (°C)
F1/AP1	Es el flujo total de agua que ingresa a las calderas el cual, mediante intercambio de calor con el bagazo, se transformará en vapor.	140	21	200
F1/AP2	Es el flujo de agua que ingresa a la caldera 1.	-	-	-
F1/AP2*	Es el flujo de agua que ingresa a la caldera 2.	-	-	-
F1/AP2**	Es el flujo de agua que ingresa a la caldera 3.	-	-	-
F1/VSC1	Es el flujo de vapor proveniente de la caldera 1.	-	-	-

**Tabla 7.1. Resumen de las variables utilizadas en el componente uno
(Continuación)**

Variable	Descripción	Flujo teórico (ton/h)	Presión teórica (bar)	Temperatura teórica (°C)
F1/VSC1*	Es el flujo de vapor proveniente de la caldera 2.	-	-	-
F1/VSC1**	Es el flujo de vapor proveniente de la caldera 3.	-	-	-
F1/VSC2	Es el flujo total de vapor proveniente del colector de vapor.	140	21	340
F1/VP1	Es el flujo de vapor que se manda a los molinos para su funcionamiento.	40	21	340
F1/VP2	Vapor saturado proveniente de la turbina que mediante mecanismos adecuados se transforma en energía eléctrica.	100	1.38	160
F1/VP3	Es el flujo de vapor que se inyecta a la turbina para la producción de energía eléctrica.	100	21	340
Variable	Descripción	Energía generada teórica (MW)		
F1/EG1	Energía producida con el flujo de vapor a través de la turbina.	10		

Fuente: Elaboración propia en base a datos proporcionados por "Ingenio Azucarero A", 2016.

7.3.2. DESCRIPCIÓN DE VARIABLES EN COMPONENTE DOS: EVAPORACIÓN

Tabla 7.2. Resumen de las variables utilizadas en el componente dos

Variable	Descripción	Flujo teórico (ton/h)	Composición teórica (%p/p)				Temperatura teórica (°C)
			Agua	Sacarosa	Fructosa	Glucosa	
F2/JC1	Jugo clarificado que ingresa al primer efecto a 17 °Brix.	308.350	83	15	1	1	93.33
F2/JC2	Jugo que ingresa al segundo efecto a 28.69 °Brix.	-	71	26	1.5	1.5	-
F2/JC3	Jugo que ingresa al tercer efecto a 41.68 °Brix.	-	58	38	2	2	-
F2/JC4	Jugo que ingresa al cuarto efecto a 49.3 °Brix.	-	51	44	2.5	2.5	-
F2/JC5	Jugo concentrado a 63 °Brix.	-	37	57	3	3	-
F2/VV1	Vapor vegetal proveniente del primer efecto.	120.779	-				130.00
F2/VV2	Vapor vegetal proveniente del segundo efecto.	-	-				115.62
F2/VV3	Vapor vegetal proveniente del tercer efecto.	-	-				103.37
F2/VV4	Vapor vegetal proveniente del cuarto efecto.	-	-				86.50

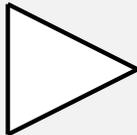
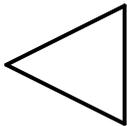
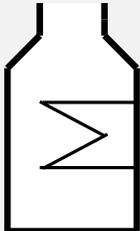
Fuente: Elaboración propia en base a datos proporcionados por "Ingenio Azucarero "A", 2016.

7.4. DESCRIPCIÓN DE EQUIPOS

Las Tablas 7.3 y 7.4 de esta sección, describen cada uno de los equipos de COCO que se utilizaron en la simulación. Cada tabla muestra la figura con que se representa a ese equipo, una descripción de lo que realiza cada equipo y como se adaptó a los requerimientos de esta industria, además se mencionan cuáles son las variables que el programa exige que se completen para cada equipo. Para mayor información del equipo utilizado en estos componentes ver Anexo A.

7.4.1. DESCRIPCIÓN DE EQUIPOS EN COMPONENTE UNO: CICLO DE POTENCIA

Tabla 7.3. Resumen de los equipos utilizados en el componente uno

Equipo	Figura	Descripción	Parámetros
Colector		Combina varios flujos de entrada para producir una corriente de salida. En este componente, colecta el vapor proveniente de las calderas.	Caída de presión
Separador		Se utiliza para dividir una sola entrada en varias salidas.	<ul style="list-style-type: none"> • Factor de división • Caída de presión.
Caldera		Su función es cambiar la temperatura de un flujo. Tiene una entrada y una salida. Ya sea la temperatura de salida o la cantidad de calor deben ser especificadas. En esta ocasión se especificó la temperatura de salida, que es la temperatura a la cual sale el vapor de la caldera.	<ul style="list-style-type: none"> • Cantidad de calor • Temperatura de salida • Caída de presión

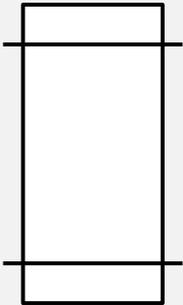
**Tabla 7.3. Resumen de los equipos utilizados en el componente uno
(Continuación)**

Equipo	Figura	Descripción	Parámetros
Turbina		Se utiliza un expansor, este sirve para obtener energía a partir de una caída de presión de los fluidos gaseosos. Un expansor tiene una entrada y una salida. Dado que se conocen las condiciones de entrada y salida del vapor en la turbina, se pudo calcular la eficiencia de esta.	<ul style="list-style-type: none"> • Caída de presión o presión de salida • Generación de energía o eficiencia isentrópica

Fuente: Cocosimulator.org., 2016.

7.4.2. DESCRIPCIÓN DE EQUIPOS EN COMPONENTE DOS: EVAPORACIÓN

Tabla 7.4. Resumen de los equipos utilizados en el componente dos

Equipo	Figura	Descripción	Parámetros
Evaporador		Debido a que COCO carece de evaporadores como tal, se utiliza un divisor de componentes. Éste dispositivo realiza separaciones ideales; divide en fracciones de compuestos específicos predefinidos. Posee una entrada y dos salidas. Se debe especificar una fracción de división para un compuesto determinado. En este caso el compuesto a separar es el agua, pues es lo que se busca eliminar del jugo. La desventaja que presenta este equipo es que trabaja isotérmicamente.	Caída de presión

**Tabla 7.4. Resumen de los equipos utilizados en el componente dos
(Continuación)**

Equipo	Figura	Descripción	Parámetros
Controlador		El controlador recibe información de la unidad de medición, controla un parámetro previamente seleccionado y detiene las iteraciones cuando se llega al <i>set point</i> definido. El parámetro a medir es la concentración de sacarosa a la salida de cada evaporador.	
Unidad de medición		La unidad de medición tiene un flujo de material de entrada y uno de salida. Éste copia el contenido de la corriente de material de entrada a la corriente de salida y realiza un cálculo de equilibrio. Para ello, deben de especificarse la temperatura y presión, así como el parámetro y componente que se desea medir. El parámetro a medir es la concentración de sacarosa.	<ul style="list-style-type: none"> • Temperatura • Presión

Fuente: Cocosimulator.org., 2016.

7.5. RESULTADOS OBTENIDOS

Al resolver un problema, los datos que se obtienen suelen compararse con algún valor teórico que nos indica si estos datos son acertados o no. Para efectos de este trabajo, los valores teóricos con los cuales se va a comparar los resultados de la simulación son los datos proporcionados por el “Ingenio Azucarero A”. Se han tabulado los resultados de las variables más significativas de los dos componentes en la Tabla 7.5.

Tabla 7.5. Resumen de los resultados obtenidos de las corrientes simuladas

COMPONENTE UNO										
Variable	Flujo teórico (ton/h)	Flujo obtenido (ton/h)	Presión teórica (bar)	Presión obtenida (bar)	Temperatura teórica (°C)	Temperatura obtenida (°C)				
F1/AP1	140	-	21	-	200	-				
F1/VSC2	140	140	21	21	340	340				
F1/VP1	40	42	21	21	340	340				
F1/VP3	100	98	21	21	340	340				
F1/VP2	100	98	1.38	1.38	160	160.13				
Variable	Energía generada teórica (MW)			Energía generada obtenida (MW)						
F1/EG1	10			8.68						
COMPONENTE DOS										
Variable	Flujo teórico (ton/h)	Flujo obtenido (ton/h)	Composición teórica (%p/p)				Composición obtenida (%p/p)			
			Agua	Sacarosa	Fructosa	Glucosa	Agua	Sacarosa	Fructosa	Glucosa
F2/JC1	308.35	-	0.83	0.15	0.01	0.01	0.83	0.15	0.01	0.01
F2/JC2	-	182.72	0.71	0.26	0.015	0.015	0.71	0.26	0.015	0.015
F2/JC3	-	125.77	0.58	0.38	0.02	0.02	0.58	0.38	0.02	0.02
F2/JC4	-	106.33	0.51	0.44	0.025	0.025	0.51	0.44	0.025	0.025
F2/JC5	-	83.13	0.37	0.57	0.03	0.03	0.37	0.57	0.03	0.03

Fuente: Autor, 2016.

Las Tablas 7.6 y 7.7 presentan la desviación correspondiente a las variables más representativas de la simulación. La desviación se obtiene con la fórmula siguiente:

$$Desviación(\%) = \left| \frac{Valor\ teórico - Valor\ obtenido}{Valor\ teórico} \right| * 100$$

Tabla 7.6. Desviación en las corrientes simuladas del componente uno

Variable	Presión teórica (bar)	Presión obtenida (bar)	Desviación (%)	Temperatura teórica (°C)	Temperatura obtenida (°C)	Desviación (%)
F1/AP1	21	-	-	200	-	-
F1/VSC2	21	21	0.0	340	340	0.0
F1/VP1	21	21	0.0	340	340	0.0
F1/VP3	21	21	0.0	340	340	0.0
F1/VP2	1.38	1.38	0.0	160	160.13	0.08
Variable	Energía generada teórica (MW)		Energía generada obtenida (MW)		Desviación (%)	
F1/EG1	10		8.68		13.2	

Fuente: Autor, 2016.

Tabla 7.7. Desviación de la composición peso del componente dos

Variable	Composición teórica (%p/p)				Composición obtenida (%p/p)				Desviación (%)			
	Agua	Sacarosa	Fructosa	Glucosa	Agua	Sacarosa	Fructosa	Glucosa	Agua	Sacarosa	Fructosa	Glucosa
F2/JC1	0.83	0.15	0.01	0.01	0.83	0.15	0.01	0.01	0.00	0.00	0.00	0.00
F2/JC2	0.71	0.26	0.015	0.015	0.71	0.26	0.015	0.015	0.00	0.00	0.00	0.00
F2/JC3	0.58	0.38	0.02	0.02	0.58	0.38	0.02	0.02	0.00	0.00	0.00	0.00
F2/JC4	0.51	0.44	0.025	0.025	0.51	0.44	0.025	0.025	0.00	0.00	0.00	0.00
F2/JC5	0.37	0.57	0.03	0.03	0.37	0.57	0.03	0.03	0.00	0.00	0.00	0.00

Fuente: Autor, 2016.

7.6. DISCUSIÓN DE RESULTADOS

A continuación, se presenta un análisis de los resultados obtenidos en el apartado anterior, en el cual se discuten las causas de desviación y la fiabilidad de los resultados.

- Componente uno: Ciclo de potencia

El primer componente en este apartado es el ciclo de potencia, en esta simulación se obtuvo una desviación aceptable. Los parámetros que se tomaron en cuenta para discutir la fiabilidad de la simulación de este componente son la energía eléctrica generada y la temperatura a la salida de la turbina porque fueron los únicos que presentaron desviación con respecto a los valores teóricos.

Se presenta una desviación del 13.2 % con respecto al valor esperado de energía producida en la planta y de 0.08 % con respecto a la temperatura esperada a la salida de la turbina; Sin embargo, estos valores se encuentran dentro de las variaciones normales de estos parámetros y se debe a que el programa no toma en cuenta algunos aspectos como: los materiales que componen los equipos, dimensiones de la turbina, transmisión mecánica de energía, etc. La idealidad con la que COCO Simulator interpreta ciertos comportamientos también es un factor que genera desviación.

- Componente dos: Evaporación

El segundo componente estudiado en este capítulo es la evaporación, en el cuadro 7.6 se observa que las desviaciones son cero, sin embargo, la fiabilidad de esta simulación es muy reducida porque el simulador no permite trabajar de manera correcta con las soluciones de sacarosa, fructosa y glucosa. El planteamiento original para simular este componente consistía de agrupaciones de intercambiadores de calor y separadores flash que representarían cada uno de los efectos; no obstante, el simulador no pudo generar resultados. El problema se encuentra en la adición de estas sustancias a la base de datos del simulador, al agregar una nueva sustancia se requiere de una gran cantidad de correlaciones en diferentes estados de materia (sólido, líquido y gas o vapor).

En el caso particular de esta sección, no se encontraron correlaciones para fases líquidas y vapor por lo que el simulador no fue capaz de trabajar con equipos que requerían datos de equilibrio entre dichas fases, como los evaporadores.

Para resolver este problema se elaboró una versión simplificada e ilustrativa del funcionamiento de los evaporadores en un ingenio azucarero, los resultados no son fiables por que el equipo utilizado no se basa en el comportamiento fisicoquímico de la mezcla para calcular la separación del vapor del jugo de caña. El separador de componentes que se utilizó obliga a separar una cantidad específica de agua para que se den las condiciones deseadas de concentración.

CAPÍTULO VIII

8.0. INCORPORACIÓN DE COCO SIMULATOR COMO UNA HERRAMIENTA DIDÁCTICA PARA LA INGENIERÍA QUÍMICA

Los criterios a utilizar para evaluar la funcionalidad del programa COCO Simulator como herramienta didáctica para la carrera de ingeniería química se han retomado de la norma ISO/IEC 25010:2011 Sistemas e ingeniería de software – Requerimientos y Evaluación de Sistemas y Calidad de Software (SQUARE) – Modelos de Calidad del Sistema y Software. El modelo es aplicable tanto a los sistemas de computador como a los productos de software.

La norma ISO/IEC 25010:2011 establece que la calidad del producto software se puede interpretar como el grado en que dicho producto satisface los requisitos de sus usuarios. Son precisamente estos requisitos los que se encuentran representados en el modelo de calidad, el cual categoriza la calidad del producto en características y sub características.

El modelo de calidad del producto definido por esta norma se encuentra compuesto por las ocho características de calidad que son: Adecuación Funcional, Eficiencia de Desempeño, Compatibilidad, Usabilidad, Fiabilidad, Seguridad, Mantenibilidad y Portabilidad. (ISO 25000, 2015).

Cada una de estas características de calidad contiene un determinado número de sub-características, de las cuales se seleccionaron las que realmente le conciernen a la evaluación de un software de simulación como COCO Simulator.

Esta selección se realizó con el objetivo de que la evaluación fuese más constructiva y objetiva.

8.1. EVALUACIÓN DE COCO SIMULATOR

Para trabajar de una manera sistemática y ordenada se presenta una escala de 2.5 a 10 que permite generar una evaluación cuantitativa del programa de simulación a partir de cada sub-característica:

- Inaceptable= 2.5
- Mínimo aceptable = 5
- Aceptable =7.5
- Sobresaliente =10

Cada valor asignado a las sub-características fue decidido en un conceso de los autores de este trabajo, en base a la experiencia y tiempo de trabajo con el programa de simulación. El resultado de la evaluación de cada característica es obtenido al sacar el promedio de las propias sub-características.

Tabla 8.1. Evaluación de COCO Simulator

CARACTERÍSTICA	SUB CARACTERÍSTICA	DESCRIPCIÓN	CALIFICACIÓN
ADECUACIÓN FUNCIONAL	Adecuación	Grado en el cual el programa puede proporcionar un conjunto apropiado de funciones para que el usuario desarrolle tareas y objetivos específicos. Por ejemplo: ecuaciones de estado y modelos termodinámicos, entre otras funciones.	5.0
	Precisión	Capacidad del programa para proveer resultados correctos con el nivel de precisión requerido.	7.5
RESULTADO:			6.2

Tabla 8.1. Evaluación de COCO Simulator (Continuación)

CARACTERÍSTICA	SUB CARACTERÍSTICA	DESCRIPCIÓN	CALIFICACIÓN
EFICIENCIA DE DESEMPEÑO	Comportamiento temporal	Tiempo de respuesta y procesamiento en la ejecución de la simulación.	7.5
	Utilización de recursos	Las cantidades y tipos de recursos utilizados cuando el programa lleva a cabo su función bajo condiciones determinadas.	7.5
RESULTADO:			7.5
COMPATIBILIDAD	Coexistencia	Capacidad del programa para permanecer activo con otro programa independiente, en un solo computador, compartiendo recursos comunes sin detrimento.	10.0
	Interoperabilidad	Capacidad de dos o más sistemas o complementos para intercambiar información y utilizar la información intercambiada.	7.5
RESULTADO:			8.7
USABILIDAD	Accesibilidad de la interfaz de usuario	Facilidad con la que el programa permite al usuario entender o deducir como utilizar las herramientas para satisfacer sus necesidades.	10.0
	Capacidad de aprendizaje	Capacidad del programa para que el usuario pueda aprender fácilmente como utilizarlo.	7.5
	Capacidad para ser usado	Capacidad del programa para que el usuario pueda operarlo y controlarlo con facilidad.	5.0
	Protección contra errores de usuario	Capacidad del programa para proteger a los usuarios de hacer errores.	10.0
	Estética de la interfaz de usuario	Capacidad de la interfaz para agrandar y satisfacer la interacción con el usuario.	7.5
RESULTADO:			8.0

Tabla 8.1. Evaluación de COCO Simulator (Continuación)

CARACTERISTICA	SUB CARACTERISTICA	DESCRIPCIÓN	CALIFICACIÓN
FIABILIDAD	Madurez	Nivel de desarrollo que posee el programa. Por ejemplo: la cantidad de sustancias de trabajo y equipos específicos para la industria química.	2.5
	Disponibilidad	Capacidad del programa o componentes de estar operativo y accesible para su uso cuando se requiere.	7.5
	Tolerancia a fallos	Capacidad del programa para operar según lo previsto en presencia de fallos del hardware o software.	7.5
	Recuperabilidad	Capacidad del programa para restablecer su funcionamiento y recuperar los datos directamente afectados en el caso de un cierre inesperado.	2.5
RESULTADO:			5.8
MANTENIBILIDAD	Capacidad para ser modificado	Capacidad del producto que permite que sea modificado de forma efectiva y eficiente sin introducir defectos o degradar el desempeño.	7.5
	Modularidad	Capacidad de un sistema o programa de ordenador (compuesto de componentes discretos) que permite que un cambio en un componente tenga un impacto mínimo en los demás.	7.5
	Reusabilidad	Capacidad de un archivo o fichero, que permite que sea utilizado en más de un ordenador o en la construcción de otros archivos o ficheros.	7.5
RESULTADO:			7.5

Tabla 8.1. Evaluación de COCO Simulator (Continuación)

CARACTERÍSTICA	SUB CARACTERÍSTICA	DESCRIPCIÓN	CALIFICACIÓN
PORTABILIDAD	Adaptabilidad	Capacidad del producto que le permite ser adaptado de forma efectiva y eficiente a diferentes entornos determinados de hardware, software, operacionales o de uso.	5.0
	Capacidad para ser instalado	Facilidad con la que el producto se puede instalar y/o desinstalar de forma exitosa en un determinado entorno.	7.5
	Capacidad para ser reemplazado	Capacidad del producto para ser utilizado en lugar de otro producto software determinado con el mismo propósito y en el mismo entorno.	5.0
RESULTADO:			5.8

Fuente: Elaboración propia en base a norma ISO/IEC 25010:2011.

8.2. CRITERIO DE ACEPTACIÓN

Las características que obtuvieron menor puntuación fueron: Adecuación Funcional, Fiabilidad y Portabilidad; los bajos resultados en estas características se deben a:

- La falta de herramientas que permiten simular procesos específicos; por ejemplo, modelos termodinámicos para trabajar con alcoholes, cetonas, éteres, hidrocarburos aromáticos, mezclas binarias, sistemas azeotrópicos o equilibrio líquido-líquido. Estos procesos pueden simularse, sin embargo los resultados carecen de fiabilidad porque el programa no cuenta con los modelos termodinámicos (Lee Kesler, Margules o modificaciones de Peng Robinson y Redlich-Kwong, entre otros) que interpretan mejor su comportamiento.

- La poca capacidad que posee para ser utilizado en lugar de otro programa de simulación.
- La nula capacidad de recuperación de datos cuando el programa se cierra de forma automática e inesperada.
- La carencia de una mayor cantidad de sustancias y equipos utilizados en industrias químicas para procesos específicos. Por ejemplo, reactores catalíticos, cristalizadores, centrifugas, equipos de filtración y separación de sólidos.

Por otra parte, los mejores resultados se obtuvieron en características como: eficiencia de desempeño, compatibilidad, usabilidad y mantenibilidad. Los buenos resultados se deben a las siguientes características que COCO Simulator presenta:

- Buen tiempo de respuesta para ejecutar la simulación. Un mínimo de 30 segundos aproximadamente, para dar por finalizada la simulación y un máximo de tres minutos aproximadamente, cuando el sistema creado es mas complejo y debe realizar un número mayor de iteraciones.
- Protege a los usuarios de cometer errores y notifica cuando un equipo no funciona de manera normal, mostrando mensajes de advertencia.
- Facilidad para que el usuario aprenda como utilizar el programa. Esto es importante para la aplicación del mismo como una herramienta didáctica.
- Tiene baja utilización de recursos al ejecutarse al mismo tiempo que otros programas.
- Es compatible con diecisiete diferentes compiladores y permite el intercambio de información con otros programas como Matlab y Scilab, entre otros.

A pesar de los resultados obtenidos en cuanto a fiabilidad y portabilidad, se considera que COCO Simulator es una buena opción como herramienta didáctica para la carrera de Ingeniería Química, debido a que, los equipos disponibles en el programa son de carácter general, es decir, simulan procesos simples como los estudiados en ejercicios de operaciones unitarias, ingeniería de las reacciones químicas y termodinámica química. Además, las sustancias contenidas en la base de datos son suficientes para desarrollar una buena cantidad de ejemplos y ejercicios.

CONCLUSIONES

- Se desarrollaron criterios para evaluar la funcionalidad del programa a partir de la norma ISO/IEC 25010:2011 y se concluyó que COCO Simulator tiene un buen desempeño en ciertas áreas específicas (separación de sustancias orgánicas, reacciones cinéticas homogéneas y heterogéneas, etc.), sin embargo, aún necesita desarrollarse en otras áreas, tales como: bases de datos, modelos termodinámicos, operaciones unitarias entre otros, lo anterior con la finalidad de poder simular más escenarios y ser más competitivo a nivel educativo.
- En el desarrollo de la simulación del proceso de producción de ácido sulfúrico se trabajó con tres componentes: combustión de flor de azufre para producir SO_2 , oxidación del SO_2 para convertirlo en SO_3 y absorción del SO_3 para formar H_2SO_4 . En cada uno de estos componentes se obtuvo una simulación satisfactoria, debido a que se logró representar el comportamiento de las reacciones químicas involucradas, así como predecir de qué manera afecta la parametrización de los equipos a los resultados finales e intermedios de cada componente.
- La principal dificultad a enfrentar cuando se plantearon los componentes de la primera simulación era la falta de algunas sustancias en la base de datos. Sin embargo, luego de haber completado la base de datos con el Administrador de Sustancias Puras, se logró construir con facilidad cada uno de los componentes involucrados. De manera similar, algunos equipos dentro del proceso de producción no estaban disponibles para su simulación pero la versatilidad del programa permitió utilizar otros equipos dentro de las herramientas para representar las operaciones unitarias y el reactor con éxito.

- En cuanto a la simulación del proceso de producción de azúcar se simularon dos componentes: ciclo de potencia y evaporación. La simulación del primer componente es simple pero demuestra la funcionalidad de COCO Simulator como una herramienta didáctica en el área de la termodinámica. El programa ejemplifica de manera práctica el comportamiento de diferentes sustancias utilizadas para la transformación de energía térmica en energía eléctrica, considerando la eficiencia y demás conceptos fundamentales de la termodinámica aplicada. La simulación del componente que representa a la evaporación no es representativa del comportamiento real, es decir, el equilibrio líquido-vapor que tiene lugar en los evaporadores, ya que el programa no interpreta bien la disolución de un sólido cristalino en un solvente.
- Los resultados de las simulaciones en ambos procesos han sido satisfactorios, a pesar de que la mayoría de equipos no contempla aspectos muy detallados sobre el diseño como: materiales de construcción, tiempos de residencia y geometría, entre otros; los resultados se ajustan a los valores esperados.
- Tomando en cuenta todas las experiencias, se desarrolló un manual que permite a los estudiantes de Ingeniería Química una aproximación simple y efectiva a la simulación de procesos industriales en este software, dicha guía se contempla en el capítulo V de este trabajo.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. Baur, R. (2011). Advances on CAPE-OPEN Unit Operation interfaces.
Recuperado de http://www.cocosimulator.org/downloads/Unit_SIG_Presentation_ECCE-8_Berlin_2011.pdf
2. Bildea, C. S., Kiss, A. A., & Grievink, J. (2010). Dynamic modeling and process optimization of an industrial sulfuric acid plant, 9.
3. Chen, J. C. P. (1997). *Manual del Azúcar de Caña*. México D. F.: Limusa.
4. Cocosimulator.org. (2016). *COCO - the CAPE-OPEN to CAPE-OPEN simulator*.
Recuperado el 15 de Julio de 2016, de <http://www.cocosimulator.org/index.html>.
5. Coulson, J. M., y Richardson, J. F. (2003). *Ingeniería Química: operaciones básicas (unidades SI)* (3° edición). Barcelona: Editorial Reverté, S.A.
6. Cruz, C. (2015). COCO Simulator.
7. Design Institute for Physical Properties (DIPPR). (2016). *Sample Chemical Database Login*. Recuperado el 10 de abril de 2016, de <http://dippr.byu.edu/students/chemsearch.asp>.
8. Galiano, J.A., Yáñez, G. y Fernández, E. (2007). *Análisis y Mejora de Procesos en Organizaciones Públicas*. Fundación Internacional y para Iberoamérica de Administración y Políticas Públicas (FIIAPP). ISBN: 978-84-8198-708-9.
9. García Torres, A. G., Martínez Cubias, R. K. M., y Rodríguez Díaz, I. A. (2013).

EVALUACIÓN DE LOS USOS POTENCIALES DEL TEBERINTO (Moringa oleífera) COMO GENERADOR DE MATERIA PRIMA PARA LA INDUSTRIA QUÍMICA. (Trabajo de Grado). Universidad de El Salvador, San Salvador, El Salvador.

10. Gil, I. D., Guevara, J. R., García, J. L., Leguizamón, A. & Rodríguez, G. (2016). *Process Analysis and Simulation in Chemical Engineering*. ISBN 978-3-319-14812-0.
11. González de Menjívar, A. M. (2013). Unidad 5: Eficiencia Energética de Biocombustibles Sólidos. UNAN, León, Nicaragua.
12. Guerrero, A., & Rivas, S. (s. f.). Compuestos Derivados del Azufre. Recuperado de www.sc.ehu.es/iawfemaf/archivos/materia/industrial/libro-5.pdf
13. Guzmán, L. E. (2016). Fabricación de ácido sulfúrico en Grupo Fertica [Entrevista personal, 25 de abril de 2016].
14. Grupo Fertica. (2016). Diagrama planta de Ácido Sulfúrico FERTICA.
15. Herz, R. K. (2012). Getting started with the COCO chemical process simulator. Recuperado de http://reactorlab.net/resources-folder/coco/coco_startup_1.pdf
16. IHOBE - Sociedad Pública de Gestión Ambiental. (2006). *Fabricación de Ácido Sulfúrico* (Series Guías Técnicas de aplicación de BREF's en la Comunidad Autónoma del País Vasco No. 1). País Vasco: Departamento de Medio Ambiente y Ordenación del Territorio. Recuperado de http://www.ingurumena.ejgv.euskadi.eus/contenidos/manual/bref_sulfurico/e

s_bref/adjuntos/sulfurico.pdf

17. ISO25000. Calidad del producto software ISO/IEC 25010. Recuperado de [http://iso25000.com/index.php/normas-iso-25000/iso 25010?limit=3&limitstart=0](http://iso25000.com/index.php/normas-iso-25000/iso%2025010?limit=3&limitstart=0)
18. Jiménez Gutiérrez, A. (2003). *Diseño de Procesos en Ingeniería Química* (Universidad de Barcelona, Departamento de Ingeniería Química y Metalurgia). España: Editorial Reverté, S.A.
19. King, M. J., Davenport, W. G., & Moats, M. S. (2013). *Sulfuric Acid Manufacture: Analysis, Control and Optimization*. (Second Edition). USA: ELSEVIER.
20. Kooijman, H. A. & Taylor, R., (2006). *The ChemSep Book*. Amsterdam, The Netherlands.
21. Mendivil Blanco, J. D. (2012). *SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE NEGRO DE HUMO UTILIZANDO EL PROGRAMA UNISIM* (Trabajo de Grado). Universidad de San Buenaventura Cartagena, Cartagena, Colombia. Recuperado de http://bibliotecadigital.usbcali.edu.co/jspui/bitstream/10819/2238/1/Simulaci%C3%B3n%20del%20proceso%20de%20producci%C3%B3n_Jos%C3%A9%20Daniel%20Mendivil%20Blanco_USBCTG_2012.pdf
22. National Institute of Standards and Technology (NIST). (2016). *Base de Datos de Referencia Estándar del NIST Número 69*. Recuperado el 10 de abril de 2016, de <http://webbook.nist.gov/chemistry/>.
23. Palladino, L. A., y Navarro, A. F. (s. f.). *UTILIZACION DE SIMULADORES EN*

- PLANTAS DE TRATAMIENTO DE EFLUENTES LIQUIDOS. Recuperado de <http://www.bvsde.paho.org/bvsaidis/argentina11/platraeflq.pdf>
24. Pardo, J. (2012). *Configuración y uso de mapa de procesos*. España. ISBN: 978-84-8143-797-3.
25. Prausnitz, J. M., Poling, B. E., & O'Connell, J. P. (2001). *The Properties of Gases and Liquids* (5th Edition). McGraw-Hill.
26. Rivas, L. F. (2015). Guía #4 PROCESOS DE EQUILIBRIOS DE FASES.
27. Ros Moreno, A. (2012). Ácido Sulfúrico H₂SO₄ (Tostación de Blenda). Recuperado de foundrynews.com.br/upload/artigos/acido-sulfurico-tostacion-de-blenda512de820e4d78.pdf
28. Royal Society of Chemistry. (2012). Supplementary Material. Kinetic Model. Recuperado de <http://www.rsc.org/suppdata/cp/c2/c2cp40714k/c2cp40714k.pdf>
29. Sánchez, A. J. (2011). La industria del ácido sulfúrico. Recuperado de <http://www.cvatocha.com/documentos/quimica/sulfurico.pdf>
30. Sánchez, M. (2013). *Indicadores: Seguimiento de la Gestión en la Empresa*. Recuperado de http://www.aec.es/c/document_library/get_file?uuid=6680d3c1-4aeb-4f58-b787-8d2562cd9399&groupId=10128
31. Scenna, N. J. y col. (1999). *Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos*. ISBN: 950-42-0022-2.
32. Scodelaro, F. (2012). 10 Aplicaciones gratuitas (y legales) para Ingeniería Química. Recuperado de <http://www.ingenieriaquimica.org/software/10-aplicaciones-gratuitas>

33. Smith, J. M., Van Ness, H. C., y Abbott, M. M. (2007). *Introducción a la Termodinámica en la Ingeniería Química* (Séptima Edición). México: McGraw-Hill.
34. Stellman, J. M., y McCann, M. (1998). Capítulo 77: Procesado Químico, Industrias Químicas. En *Enciclopedia de Salud y Seguridad en el Trabajo* (Vol. III). Organización Internacional del Trabajo (OIT). Recuperado de <http://www.insht.es/InshtWeb/Contenidos/Documentacion/TextosOnline/EnciclopediaOIT/tomo3/77.pdf>
35. Suárez B., T. (2004). *Química Industrial y Procesos Industriales* (Universidad de Los Andes, Facultad de Ciencias, Departamento de Química). Venezuela. Recuperado de <http://www.saber.ula.ve/bitstream/123456789/16719/1/procesos.pdf>
36. Treybal, R. E. (1990). *Operaciones de Transferencia de Masa* (Segunda Edición). México: McGraw-Hill.
37. UES-FIA-EIQA (2013). *ANÁLISIS TERMODINÁMICO DE PROCESOS Y LAS LEYES DE LA TERMODINÁMICA*. Presentado en Cátedra de Termodinámica Química I, Escuela de Ingeniería Química e Ingeniería de Alimentos, Facultad de Ingeniería y Arquitectura, Universidad de El Salvador, San Salvador, El Salvador.
38. UES-FIA-EIQA (2014). *INDUSTRIA DE LA CAÑA DE AZÚCAR: TERCERA PARTE OPERACIONES DE CLARIFICACION Y PURIFICACION DEL JUGO*. Presentado en Cátedra de Química Industrial, Escuela de Ingeniería Química e Ingeniería de Alimentos, Facultad de Ingeniería y Arquitectura,

Universidad de El Salvador, San Salvador, El Salvador.

39. UES-FIA-EIQA (2015). *Ingeniería de la Calidad: Gestión por Procesos*.

Presentado en Cátedra de Gestión e Ingeniería de la Calidad, Escuela de Ingeniería Química e Ingeniería de Alimentos, Facultad de Ingeniería y Arquitectura, Universidad de El Salvador, San Salvador, El Salvador.

40. Westley, F., Herron, J. T., & Cvetanović, R. J. (1987). *Compilation of Chemical Kinetic Data for Combustion Chemistry. Part 1. Non-Aromatic C, H, O, N and S containing Compounds*. U.S. Government Printing Office.

Recuperado de <http://www.nist.gov/data/nsrds/NSRDS-NBS73-I.pdf>

41. Zepeda Guardado, E. R. (2012). *PROPUESTA DE ALTERNATIVAS PARA LA REDUCCIÓN DE PÉRDIDAS DE SACAROSA EN UN INGENIO AZUCARERO* (Trabajo de Grado). Universidad de El Salvador, San Salvador, El Salvador.

GLOSARIO

Adecuación funcional: Es el grado del producto software para proporcionar funciones que satisfacen las necesidades declaradas e implícitas, cuando el producto se usa en las condiciones especificadas. (ISO/IEC 25010:2011).

Automatización: Aplicación de máquinas o de procedimientos automáticos en la realización de un proceso o en una industria.

Enlace glucosídico: es la unión de dos o mas monosacáridos formando disacáridos o polisacáridos utilizando un átomo de oxígeno como puente entre ambas moléculas.

Imbibición: Para mejorar la extracción de sacarosa, se aplica agua de imbibición. Este proceso consiste en agregar agua al bagazo antes de su paso por el molino final.

Parametrización: es la personalización de un proceso con el objetivo de cubrir necesidades específicas.

Pellets: pequeñas porciones de material aglomerado o comprimido. El término es utilizado para referirse a diferentes materiales.

ANEXO A
FICHAS DE PROCESO O
DE SUBPROCESO

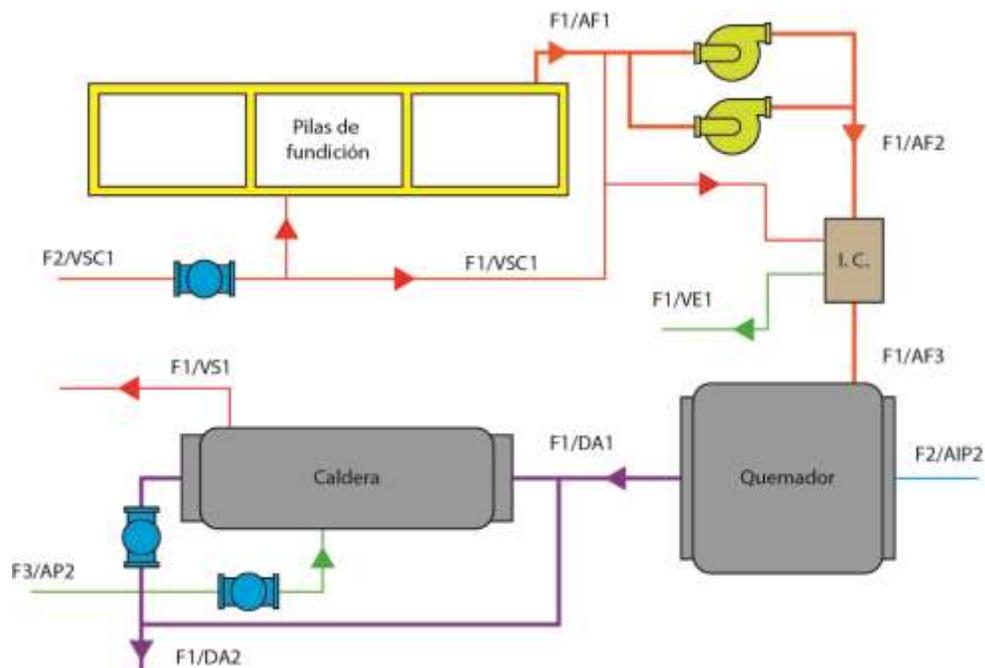


NOMBRE DEL SUB PROCESO:

OBTENCIÓN DE SO₂

CODIGO DEL SUB PROCESO:
P_AS: S01

Diagrama de sub proceso e interconexión de los equipos utilizados:



Información General

Responsable del sub proceso:	-
Objetivo del sub proceso	Transformar el azufre en flor en dióxido de azufre (SO ₂)
Descripción del sub proceso	Se obtiene dióxido de azufre por medio de su combustión en un quemador con aire seco. En primer lugar se funde el azufre y luego se pone en contacto con el aire seco, se utiliza el exceso de calor en los gases de salida para generar vapor en una caldera.
Nombre del proceso al que pertenece	Obtención de Ácido Sulfúrico



NOMBRE DEL SUB PROCESO:

OBTENCIÓN DE SO₂

CODIGO DEL SUB PROCESO:
P_AS: S01

Entradas y Salidas del Sub proceso:

Proveedor	Entrada	Salida	Receptor
Almacenamiento	Azufre en Flor	Gases de combustión (SO ₂)	P-AS-S02
P-AS-S02	Aire Seco	Vapor saturado	P-AS-S02
P-AS-S02	Vapor sobrecalentado		
P-AS-S03	Agua para caldera		

Variables de operación de las entradas y salidas:

Entrada	Variable / especificación	Salida	Variable / especificación
Aire Seco	Temperatura/135 °C	Gases combustión (SO ₂)	Temperatura/425 C°
Azufre	-	Vapor saturado	Presión / 150PSI
Vapor sobrecalentado	Temperatura/460 °C Presión/ 101325 Pa		
Agua de proceso	Temperatura/100 °C		

Flujos internos en sub proceso (en caso aplique):

Código	Descripción del flujo	Parámetros requeridos
F1/AF1	Primer flujo proveniente de la pila de fundición, este será calentado aún más con vapor sobrecalentado.	Temperatura
F1/AF2	Azufre fundido con la presión ajustada para ser enviado al intercambiador de calor.	Temperatura y presión
F1/AF3	Azufre con temperatura y presión para entrar al quemador.	Temperatura y presión
F1/VSC1	Vapor sobrecalentado llevado a la presión de trabajo del intercambiador de calor (S01-IC) y con el cual se funde y calienta el azufre en flor	Temperatura, presión y flujo másico.
F1/VS1	Vapor saturado proveniente de la caldera donde fue calentado con los gases de la combustión.	Presión
F1/VE1	Vapor residual y enfriado en el intercambiador de calor.	-



NOMBRE DEL SUB PROCESO:

OBTENCIÓN DE SO₂

CODIGO DEL SUB PROCESO:
P_AS: S01

F1/DA1	Flujo de gases, principalmente dióxido de azufre, proveniente del quemador a altas temperaturas	Temperatura
F1/DA2	Resultado de la reincorporación de la fracción de gases utilizada para generar vapor en la caldera. A esta fracción se le ajusta la presión con una bomba antes de reincorporarla al flujo.	Temperatura y presión

Descripción de equipo / parámetros:

Código	Equipos requeridos	Parámetros requeridos
S01-PF	Pila de fundición	Temperatura salida
S01-IC	Intercambiador de calor	Flujo de vapor sobrecalentado Presión
S01-HQ	Horno Quemador	Presión de trabajo Temperaturas de entrada y salida
S01-CA	Caldera	Presión Temperatura de entrada y salida
S01-BO##	Bombas	Presión entrada y salida

Procedimientos asociados al proceso:

Código	Nombre



NOMBRE DEL SUB PROCESO:

OBTENCIÓN DE SO₂

CODIGO DEL SUB PROCESO:
P_AS: S01

Leyes y normativas asociadas (si aplica):

Código	Nombre

Fecha aprobación	de	
---------------------	----	--

Revisión	
----------	--

Firma y sello

Aprobado por	
--------------	--

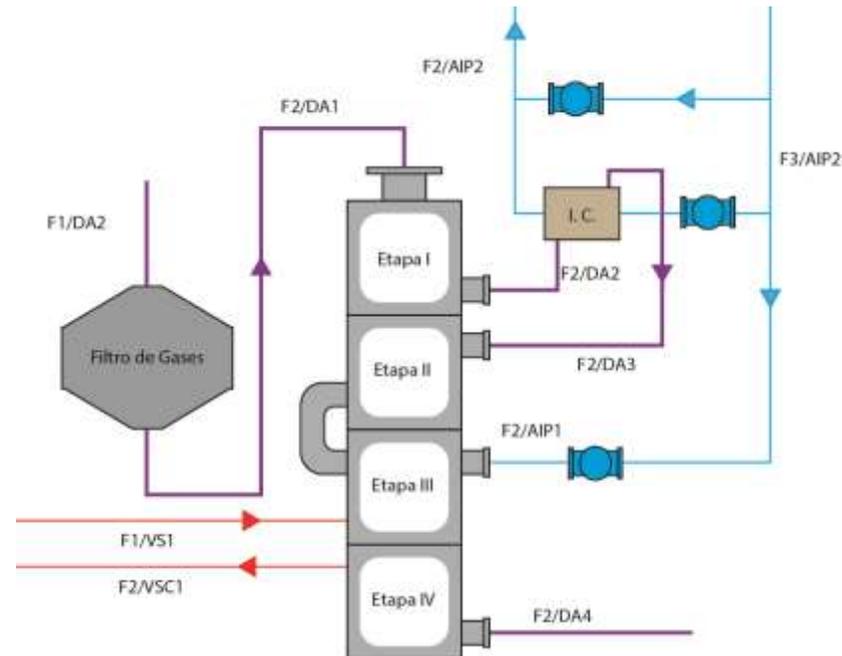


NOMBRE DEL SUB PROCESO:

OXIDACIÓN SO₂ A SO₃

CODIGO DEL SUB PROCESO:
P_AS: S02

Diagrama de sub proceso e interconexión de los equipos utilizados:



Información General

Responsable del sub proceso:	-
Objetivo del sub proceso	Convertir el SO ₂ en la corriente de gases a SO ₃
Descripción del sub proceso	La conversión toma lugar en un reactor catalítico, utilizando como catalizador sales de vanadio. La reacción que ocurre en este subproceso es la siguiente: $\text{SO}_2 + \frac{1}{2} \text{O}_2 \leftrightarrow 2\text{SO}_3$
Nombre del proceso al que pertenece	Obtención de Ácido Sulfúrico



NOMBRE DEL SUB PROCESO:

OXIDACIÓN SO₂ A SO₃

CODIGO DEL SUB PROCESO:
P_AS: S02

Entradas y Salidas del Sub proceso:

Proveedor	Entrada	Salida	Receptor
P-AS-S01	Gases (SO ₂)	Gases (SO ₃)	P-AS-S03
P-AS-S01	Vapor Saturado	Aire Seco	P-AS-S01
P-AS-S03	Aire Seco	Vapor Sobrecalentado	P-AS-S01

Variables de operación de las entradas y salidas:

Entrada	Variable / especificación	Salida	Variable / especificación
Gases (SO ₂)	Temperatura/425C°	Gases (SO ₃)	Temperatura/450 °C Presión/101325
Vapor Saturado	Presión/150PSI	Aire seco	Temperatura/135C°
Aire seco	Temperatura/ 30°C	Vapor sobrecalentado	Temperatura/ 460°C Presión/101325

Flujos internos (intermedios) en sub proceso (en caso aplique):

Código	Descripción del flujo	Parámetros requeridos
F2/VSC1	Vapor sobrecalentado con el calor generado en la conversión del SO ₂	Presión y temperatura
F2/AIP1	Aire seco con presión ajustada para reducir la temperatura en el reactor	Presión y temperatura
F2/AIP2	Aire seco con presión ajustada luego de haber sido utilizado en un intercambiador de calor para enfriar los gases del reactor.	Presión y temperatura
F2/DA1	Flujo libre de impurezas proveniente del filtro.	Temperatura y fracción mol de SO ₂
F2/DA2	Flujo de gases proveniente de la primera etapa de reacción	Temperatura y fracción mol de SO ₂
F2/DA3	Flujo de gases enfriado en el intercambiador de calor para ser devuelto al reactor	Temperatura y fracción mol de SO ₂
F2/DA4	Salida del reactor después de alcanzar la máxima conversión.	Temperatura y fracción mol de SO ₂



NOMBRE DEL SUB PROCESO:

OXIDACIÓN SO₂ A SO₃

CODIGO DEL SUB PROCESO:
P_AS: S02

Descripción de equipo / parámetros:

Código	Equipos requeridos	Parámetros requeridos
S02-RE##	Etapas del Reactor	Temperatura Conversión
S02-IC1	Intercambiador de Calor	Flujo de vapor sobrecalentado Presión
S02-F1	Filtro	Caída de presión
S02-BO##	Bombas	Presión entrada y salida

Procedimientos asociados al proceso:

Código	Nombre

Leyes y normativas asociadas (si aplica):

Código	Nombre

Fecha aprobación	de	
---------------------	----	--

Revisión	
----------	--

Firma y sello

Aprobado por	
--------------	--

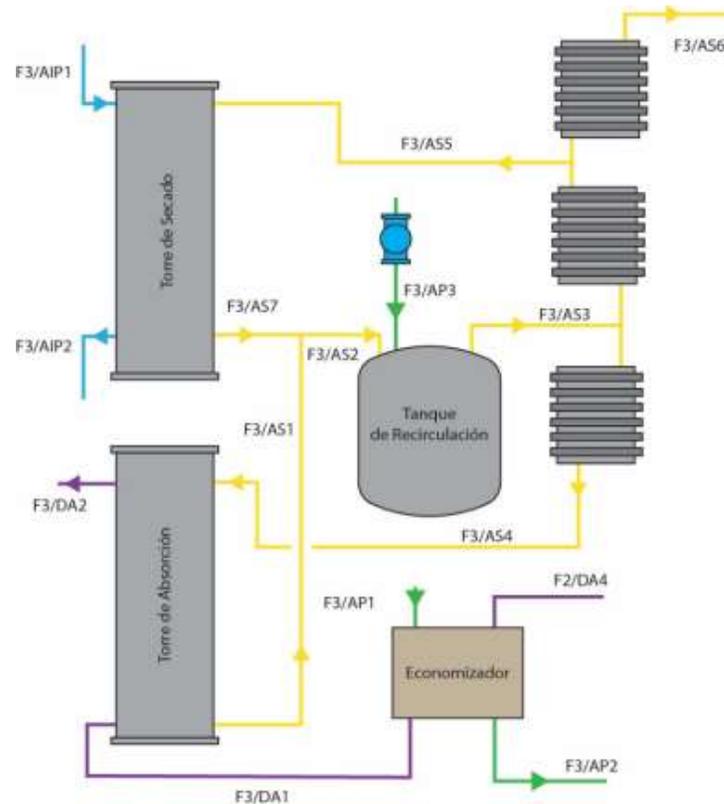


NOMBRE DEL SUB PROCESO:

ABSORCIÓN DEL SO₃

CODIGO DEL SUB PROCESO:
P_AS: S03

Diagrama de sub proceso e interconexión de los equipos utilizados:



Información General

Responsable del sub proceso:	-
Objetivo del sub proceso	Absorber el SO ₃ en una solución de agua para su conversión en ácido sulfúrico
Descripción del sub proceso	El SO ₃ es absorbido en una solución de sulfúrico porque la absorción en agua genera una reacción demasiado violenta. Cuando el SO ₃ es absorbido ocurren las siguientes reacciones: $\text{SO}_3 + \text{H}_2\text{SO}_4 \rightarrow \text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7 \text{ y } \text{H}_2\text{O} + \text{H}_2\text{S}_2\text{O}_7 \rightarrow 2\text{H}_2\text{SO}_4$
Nombre del proceso al que pertenece	Obtención de Ácido Sulfúrico



NOMBRE DEL SUB PROCESO:

ABSORCIÓN DEL SO₃

CODIGO DEL SUB PROCESO:
P_AS: S03

Entradas y Salidas del Sub proceso:

Proveedor	Entrada	Salida	Receptor
P-AS-S02	Gases (SO ₃)	Ácido sulfúrico Concentrado	Almacén
Condensadores	Agua proceso	Agua proceso	P-AS-S01
Ablandadores	Agua solución		

Variables de operación de las entradas y salidas:

Entrada	Variable / especificación	Salida	Variable / especificación
Gases (SO ₃)	Temperatura/450°C	Ácido sulfúrico concentrado	Concentración/ 98.5 %
Agua proceso	Temperatura/67.1	Agua de proceso	-
Agua solución	Temperatura/65 °C	Aire proceso	Temperatura/100 °C Presión < 101325
Aire ambiente	Temperatura/130°C Presión/101325		

Flujos internos en sub proceso (en caso aplique):

Código	Descripción del flujo	Parámetros requeridos
F3/DA1	Corriente de gases enfriada y lista para ser introducida a la torre de absorción.	Temperatura y presión
F3/DA2	Corriente de gases a la salida de la torre de absorción	Temperatura
F3/AP1	Agua de proceso que se calentará en el economizador	Caudal
F3/AP2	Agua de proceso utilizada en el economizador y que posteriormente será convertida en vapor en la caldera	Caudal Temperatura
F3/AP3	Corriente de agua utilizada para diluir el ácido sulfúrico fumante	Caudal
F3/AIP1	Corriente de aire de la cual el ácido absorbe la humedad y se diluye	Humedad Temperatura
F3/AIP2	Corriente de aire seco para utilizarse en el proceso	Humedad temperatura



NOMBRE DEL SUB PROCESO:

ABSORCIÓN DEL SO₃

CODIGO DEL SUB PROCESO:
P_AS: S03

F3/AS1	Flujo de ácido sulfúrico fumante que se diluirá antes de entrar al tanque de recirculación	Temperatura
F3/AS2	Solución de ácido sulfúrico que entra al tanque de recirculación.	Temperatura
F3/AS3	Solución de ácido sulfúrico recirculada a la torre de secado, absorción y una porción será enviada a almacenamiento.	Temperatura
F3/AS4	Corriente enviada a la torre de absorción	Temperatura
F3/AS5	Corriente enviada a la torre de secado.	Temperatura
F3/AS6	Corriente enviada a almacenamiento	Temperatura
F3/AS7	Corriente que se mezcla con el ácido fumante proveniente de la torre de absorción	Temperatura

Descripción de equipo / parámetros:

Código	Equipos requeridos	Parámetros requeridos
S03-TAB	Torre de absorción	Flujos máxicos Temperatura
S03-IC1	Intercambiador de Calor	Temperaturas de entrada y salida Caída de presión
S03-TSE	Torre de secado	Flujos máxicos
S03-TAL	Tanque de almacenamiento	Flujos máxicos
S03-SE##	Serpentines de enfriamiento	Temperaturas de entrada y salida
S03-BO##	Bombas	Presión de entrada y salida

Procedimientos asociados al proceso:

Código	Nombre



NOMBRE DEL SUB PROCESO:

ABSORCIÓN DEL SO₃

CODIGO DEL SUB PROCESO:
P_AS: S03

Leyes y normativas asociadas (si aplica):

Código	Nombre

Fecha aprobación	de	
---------------------	----	--

Revisión	
----------	--

Firma y sello

Aprobado por	
--------------	--

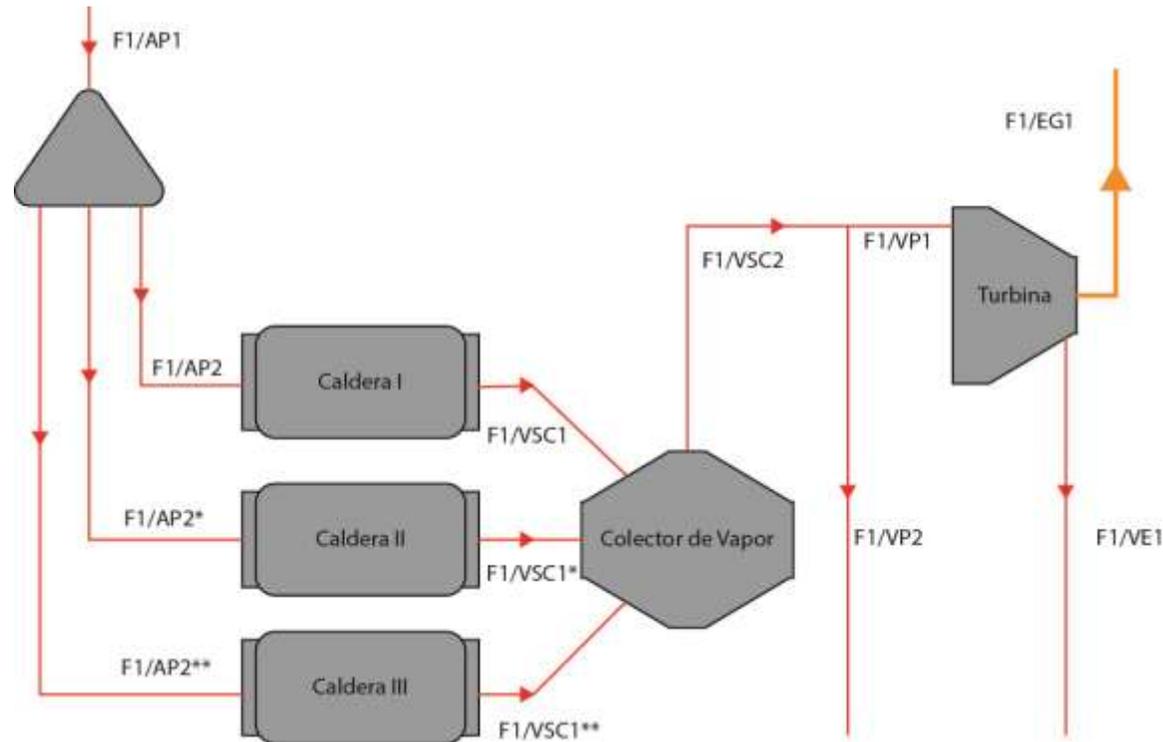


NOMBRE DEL SUB PROCESO:

GENERACIÓN DE ENERGÍA

CODIGO DEL SUB PROCESO:
P_ING: S01

Diagrama de sub proceso e interconexión de los equipos utilizados:



Información General

Responsable del sub proceso:	-
Objetivo del sub proceso	Generar energía a partir de la combustión de materia orgánica: bagazo.
Descripción del sub proceso	Se utilizan tres calderas para aprovechar el calor de combustión del bagazo y producir vapor, la energía acumulada en el vapor se recupera en una turbina generando 10MW.
Nombre del proceso al que pertenece	Producción de Azúcar (Ingenio Azucarero)



NOMBRE DEL SUB PROCESO:

GENERACIÓN DE ENERGÍA

CODIGO DEL SUB PROCESO:
P_ING: S01

Entradas y Salidas del Sub proceso:

Proveedor	Entrada	Salida	Receptor
Ambiente/Tratamiento	Agua proceso	Vapor de Proceso	Planta.
		Energía eléctrica	Planta y Sistema Nacional

Variables de operación de las entradas y salidas:

Entrada	Variable / especificación	Salida	Variable / especificación
Agua proceso	-	Vapor Proceso	Temperatura y presión
		Condensos	-

Flujos internos en sub proceso (en caso aplique):

Código	Descripción del flujo	Parámetros requeridos
F1/AP1	Flujo neto de agua a calentar.	-
F1/AP2	Flujo que entra a cada caldera para ser convertido en vapor	-
F1/VSC1	Vapor sobrecalentado producido en cada caldera a ser colectado y enviado a la planta y turbina	Temperatura y presión
F1/VSC2	Flujo neto de vapor enviado a la planta y turbina	Temperatura y presión
F1/VP1	Flujo de vapor entrando a la turbina	Temperatura y presión
F2/VP2	Flujo de vapor enviado a la planta.	Temperatura y presión
F2/ VE1	Vapor exhausto utilizado para generación de calor en planta	Temperatura
F2/ EG1	Energía producida con el flujo de vapor a través de la turbina	Voltaje, corriente



NOMBRE DEL SUB PROCESO:

GENERACIÓN DE ENERGÍA

CODIGO DEL SUB PROCESO:
P_ING: S01

Descripción de equipo / parámetros:

Código	Equipos requeridos	Parámetros requeridos
S01 – CA##	Calderas	Gradiente de temperatura, Presión, flujo de bagazo.
S01 – CO	Colector de vapor	Flujos de entrada y salida.
S01 – TB	Turbina	Caída de presión, temperatura de entrada y salida.

Procedimientos asociados al proceso:

Código	Nombre

Leyes y normativas asociadas (si aplica):

Código	Nombre

Fecha de aprobación	
---------------------	--

Revisión	
----------	--

Firma y sello

Aprobado por	
--------------	--

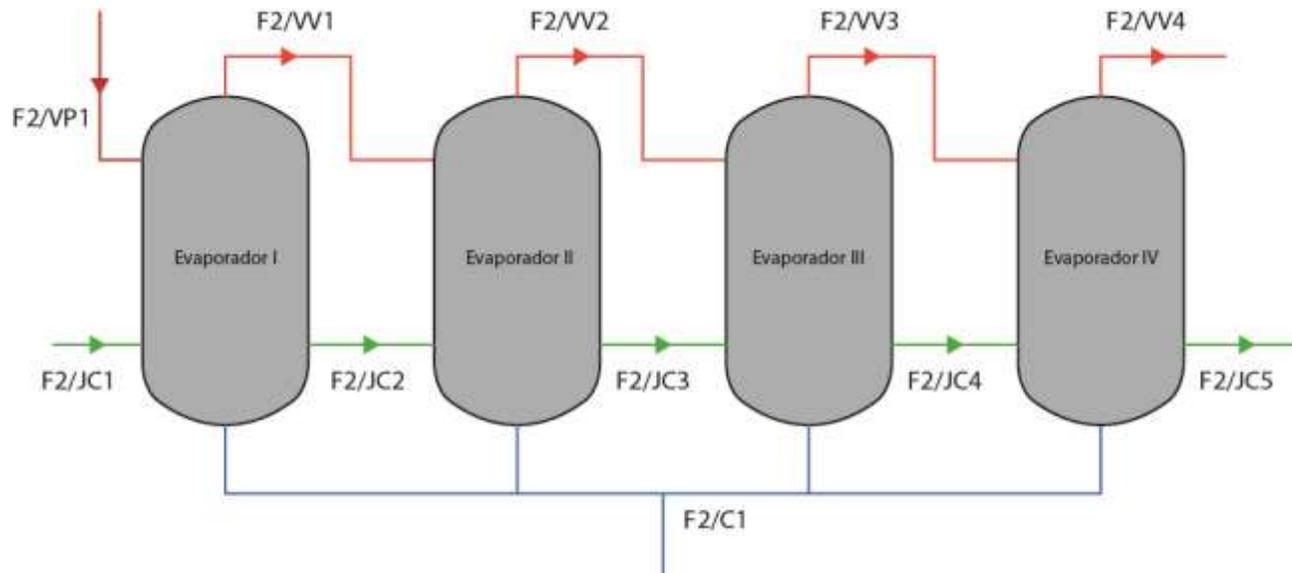


NOMBRE DEL SUB PROCESO:

EVAPORADORES

CODIGO DEL SUB PROCESO:
P_ING: S02

Diagrama de sub proceso e interconexión de los equipos utilizados:



Información General

Responsable del sub proceso:	-
Objetivo del sub proceso	Concentrar la sacarosa en el jugo eliminando agua por medio de la evaporación.
Descripción del sub proceso	El agua en la mezcla se evapora en 4 etapas denominadas efectos, en los que se reutiliza el calor del vapor vegetal producido para calentar y continuar la evaporación hasta llegar a la concentración deseada.
Nombre del proceso al que pertenece	Producción de Azúcar (Ingenio Azucarero)



NOMBRE DEL SUB PROCESO:

EVAPORADORES

CODIGO DEL SUB PROCESO:
P_ING: S02

Entradas y Salidas del Sub proceso:

Proveedor	Entrada	Salida	Receptor
Clarificador	Jugo de Caña (guarapo)	Jugo concentrado (Meladura)	Cristalizadores
Caldera/Turbinas	Vapor proceso	Condensos	Tratamiento de agua

Variables de operación de las entradas y salidas:

Entrada	Variable / especificación	Salida	Variable / especificación
Jugo de Caña	Concentración / 17.05 Brix	Jugo concentrado (Meladura)	Concentración/ 63.06 Brix
Vapor Proceso	Temperatura / 130 °C Presión / 137.895 Kpa	Condensos	-

Flujos internos en sub proceso (en caso aplique):

Código	Descripción del flujo	Parámetros requeridos
F2/VP1	Vapor de proceso utilizado para calentar el primer efecto	Temperatura y presión
F2/VV1	Vapor vegetal proveniente del primer efecto y utilizado para calentar el segundo efecto	Temperatura y presión
F2/VV2	Vapor vegetal proveniente del segundo efecto y utilizado para calentar el tercer efecto	Temperatura y presión
F2/VV3	Vapor vegetal proveniente del tercer efecto y utilizado para calentar el cuarto efecto	Temperatura y presión
F2/VV4	Vapor vegetal proveniente del tercer efecto y utilizado para calentar el cuarto efecto	Temperatura y presión
F2/JC1	Corriente de jugo de entrada al primer efecto a 17.05 brix (Guarapo)	Concentración
F2/JC2	Corriente de jugo de entrada al segundo efecto a 28.69 brix	Concentración
F2/JC3	Corriente de jugo de entrada al tercer efecto a 41.68 brix	Concentración
F2/JC4	Corriente de jugo de entrada al cuarto efecto a 49.30 brix	Concentración
F2/JC5	Corriente de jugo de salida del cuarto efecto a 63.06 brix (Meladura)	Concentración
F2/C1	Condensos resultantes de los cuatro efectos	---



NOMBRE DEL SUB PROCESO:

EVAPORADORES

CODIGO DEL SUB PROCESO:
P_ING: S02

Descripción de equipo / parámetros:

Código	Equipos requeridos	Parámetros requeridos
S02 – EVA##	Evaporadores o Efectos	Temperatura, Presión Concentraciones de entrada y salida

Procedimientos asociados al proceso:

Código	Nombre

Leyes y normativas asociadas (si aplica):

Código	Nombre

Fecha aprobación	de	
---------------------	----	--

Revisión	
----------	--

Firma y sello

Aprobado por	
--------------	--

ANEXO B

CÁLCULOS Y PROCEDIMIENTOS NECESARIOS PARA LA SIMULACIÓN DE LA INDUSTRIA DEL ÁCIDO SULFÚRICO

En este apartado se muestran todos los cálculos realizados para la industria del ácido sulfúrico y así completar los datos que COCO Simulator exige a la hora de ejecutar la simulación. Todos los cálculos se asumen bajo condiciones ideales, pues el propósito de este trabajo es la simulación de componentes con fines educativos.

1. BALANCE DE MATERIA GLOBAL

Información

- Producción de ácido al 98.5% p/p: 50 ton/día = 543.778 kmol/día

- Concentraciones a la entrada del absorbedor (%mol):

SO₃: 8.18 N₂:82.23

SO₂: 0.15 O₂:9.44

- Pesos moleculares:

S: 32.063 g/mol

SO₂: 62.066 g/mol

H₂SO₄: 98.079 g/mol

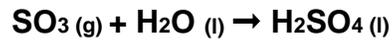
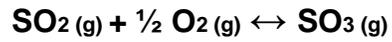
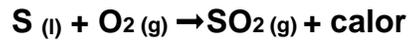
O₂: 32.9988 g/mol

H₂O: 18.01523 g/mol

N₂: 28.0134 g/mol

SO₃: 80.66 g/mol

La reacción total se resume a continuación:



Análisis global

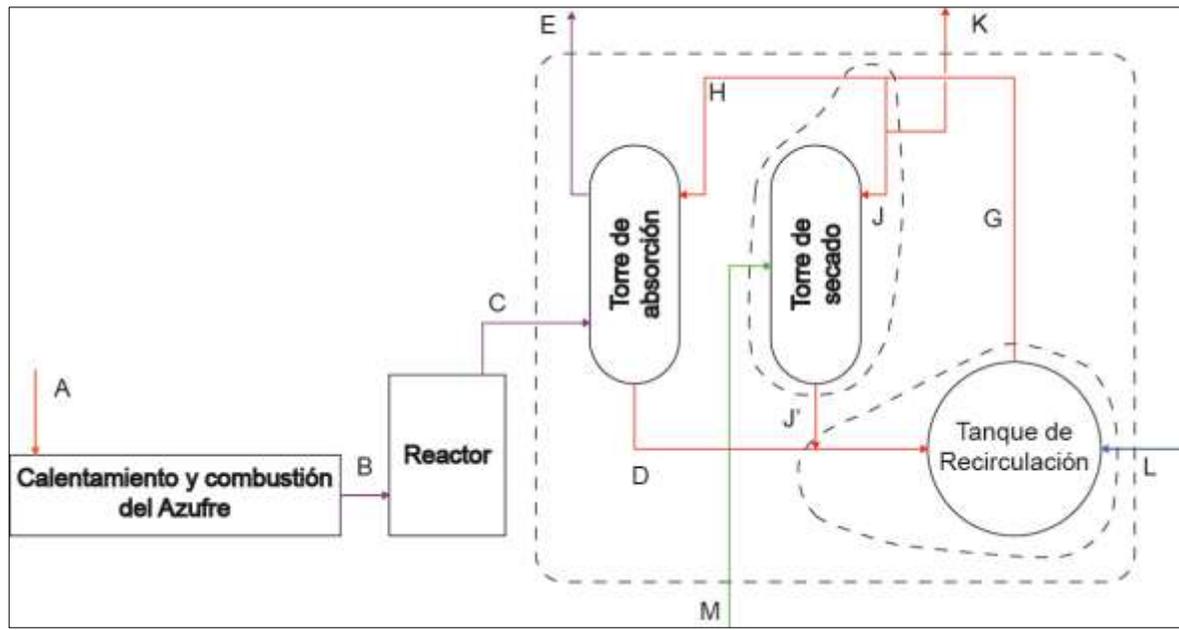


Figura B.1. Diagrama general de la planta de ácido sulfúrico (Autor, 2016).

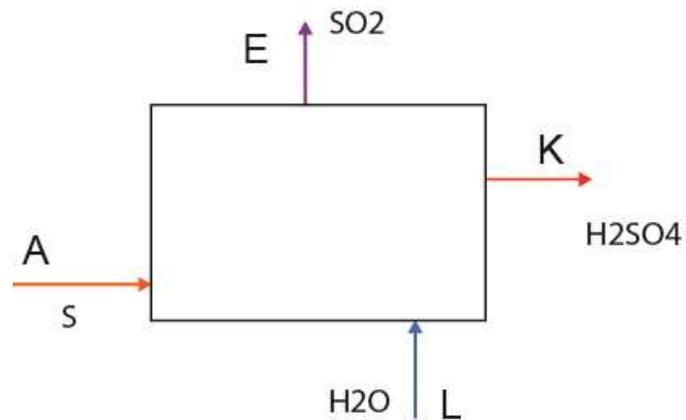


Figura B.2. Esquema del balance de materia global (Autor, 2016).

La conversión en la primera y tercera reacción se asume del 100 % porque los residuos de reactivos son despreciables. De la relación entre las cantidades de SO₂ y SO₃ en el flujo a la salida del reactor se calcula la conversión alcanzada en el mismo.

Teniendo la relación estequiométrica de 1:1 y asumiendo una base de 100 moles, tenemos que la cantidad total e inicial de moles de SO₂ es 8.33 moles y la cantidad convertida es 8.18, por lo que la conversión es X₂ = 98.19.

Con esta información se puede hacer un balance hacia atrás, partiendo del total producido por la planta: 50 ton de ácido al 98.5 %

$$n_{H_2SO_4} = \frac{50 \text{ ton}}{\text{día}} * \frac{1000 \text{ kg}}{1 \text{ ton}} * \frac{98.5 \text{ kg}_{H_2SO_4}}{100 \text{ kg}} * \frac{\text{kmol}}{98.079 \text{ kg}} = 502.1462 \frac{\text{kmol}}{\text{día}}$$

$$\begin{aligned} n_{SO_2} = n_s &= \frac{502.1462 \text{ kmol}_{H_2SO_4}}{\text{día}} * \frac{1 \text{ kmol}_{SO_3}}{1 \text{ kmol}_{H_2SO_4}} * \frac{100 \text{ kmol}_{SO_2}}{98.19 \text{ kmol}_{SO_3}} \\ &= 511.4026 \frac{\text{kmol}}{\text{día}} \end{aligned}$$

A partir de la cantidad calculada de SO₂ se resuelve la siguiente Tabla B.1 con información sobre el flujo C y E.

Tabla B.1. Resumen de corrientes C y E

Componente	Fracción mol	C: Flujo (kg/día)	E: flujo (kg/día)	C: %p/p	E: %p/p
SO ₃	8.18	40203.6389	-	19.96	-
SO ₂	0.15	589.9063	589.9063	0.293	0.366
N ₂	82.23	141408.40665	141408.40665	70.239	87.7653
O ₂	9.44	19122.020	19122.020	9.4984	11.8685
Total:	100	201324.65	161120.985	100	100

Fuente: Elaboración propia en base a datos proporcionados por Grupo Fertica, 2016.

Análisis Malla 1

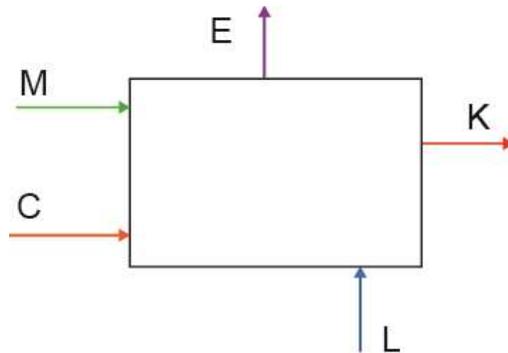


Figura B.3. Malla uno (Autor, 2016).

Dónde:

L: es una cantidad de agua que se introduce al sistema para diluir el ácido a la concentración de salida 98.5 %p/p.

M: representa la cantidad de agua absorbida del aire en la torre de secado.

El balance general de este análisis nos permite calcular L y M es despreciable por ser una cantidad muy pequeña, en comparación al tamaño de los demás flujos.

$$L = E + K - C = 9796.36 \frac{kg}{día}$$

Sabiendo que la concentraciones de ácido sulfúrico en H y en D son, 98.5 y 99.5 % respectivamente se obtiene la siguiente relación a partir de un balance de ácido sulfúrico en la torre de absorción: $0.98 \cdot H = 0.995 \cdot D$.

A partir de una relación de reflujo obtenida de la planta en funcionamiento se tiene que $H = 1292379.4 \text{ kg/día}$; y por lo tanto $D = 1279390.6624 \text{ kg/día}$.

Tabla B.2. Resumen de los flujos obtenidos de la producción de ácido sulfúrico

Flujo	Magnitud (ton/día)
A	17.70
B	155.99
C	201.32
E	161.12
H	1,292.379
K	50.00

Fuente: Autor, 2016.

Los flujos obtenidos en este balance fueron utilizados como una guía para la elaboración de la simulación en el programa.

2. DESCRIPCIÓN DE PROCEDIMIENTOS Y CÁLCULOS MATEMÁTICOS EN COMPONENTE UNO: COMBUSTIÓN DE FLOR DE AZUFRE PARA PRODUCIR SO₂

• CÁLCULO DE LA VELOCIDAD DE REACCIÓN DE COMBUSTIÓN

Se debe de introducir la velocidad de reacción que ocurre en el quemador, la cual, se calcula como sigue.

La reacción que ocurre en el quemador es: $S + O_2 \rightarrow SO_2 + \text{calor}$. Se hace la hipótesis de que la velocidad de la reacción de combustión depende de la temperatura y esto se expresa de la siguiente manera:

$$r = k_0 e^{-E/RT} \prod_i C_i^{\beta_i}$$

Dónde:

C_A: representa la concentración de azufre

C_B: representa la concentración de oxígeno.

Para obtener el modelo cinético que sigue esta reacción se utiliza la expresión de Arrhenius (Westley, F., Herron, J. T., & Cvetanović, R. J., 1987):

$$k = A \left(\frac{T}{298} \right)^n \exp \left(-\frac{B}{T} \right)$$

Los datos cinéticos para obtener el modelo cinético que sigue esta reacción son:

A, constante de Arrhenius: $1.51 \text{ cm}^3 / \text{mol} \cdot \text{s}$

n, factor n para la expresión de Arrhenius: 0

B, parámetro B para la expresión de Arrhenius: 50

T, es la temperatura en K

Estos datos son válidos para un rango de temperatura de 252-423 K.

Sustituyendo datos en la expresión de Arrhenius, tenemos que:

$$k = 1.51 \left(\frac{T}{298} \right)^0 \exp \left(-\frac{50}{T} \right)$$

Entonces, si se sustituye el valor de k obtenido en la ecuación uno, tenemos que:

$$r = 1.51 \left(\frac{T}{298} \right)^0 \exp \left(-\frac{50}{T} \right) C_A C_B$$

Evaluando a la temperatura a la cual el azufre ingresa al quemador que son $135 \text{ }^\circ\text{C} \approx 408.15 \text{ K}$ y simplificando se obtiene la siguiente expresión que se debe ingresar a COCO Simulator:

$$1.51 * (T/298) * (\exp(-50/T)) * (C(\text{Sulfur})) * (C(\text{Oxygen}))$$

3. DESCRIPCIÓN DE PROCEDIMIENTOS Y CÁLCULOS MATEMÁTICOS EN COMPONENTE DOS: OXIDACIÓN DEL SO₂ PARA CONVERTIRLO EN SO₃

- **CÁLCULO DE LA VELOCIDAD DE REACCIÓN DE OXIDACIÓN**

El procedimiento seguido para este componente es el mismo que en el componente uno, sin embargo, se utilizó el modelo de velocidad de reacción correspondiente a la reacción catalítica de oxidación de SO₂ a SO₃:

$$r = \frac{k_1 * p_{O_2} * p_{SO_2} * \left(1 - \left(\frac{p_{SO_3}}{K_p * p_{SO_2} * p_{O_2}^{0.5}}\right)\right)}{22.414 * (1 + K_2 * p_{SO_2} + K_3 * p_{SO_3})^2} \quad [kmol/(kgcat.s)]$$

Dónde:

p_{O2}, es la presión parcial de O₂

p_{SO2}, es la presión parcial de SO₂

p_{SO3}, es la presión parcial de SO₃

$$k_1 = 2.1125 * 10^5 * \left(\frac{-3599.78}{T}\right), [kmol/(kgcat.atm^2.s)]$$

$$K_2 = 14.641 \quad [atm^{-1}]$$

$$K_3 = 6.5775 \quad [atm^{-1}]$$

$$K_p = \exp\left(\frac{-10.68 + 11300}{T}\right) \quad [1/atm^{0.5}]$$

Este modelo fue extraído de *Dynamic modeling and process optimization*, (Bildea et al, 2010). Y sus unidades fueron ajustadas para que fueran coherentes con las de COCO Simulator, es decir: mol/(s*kg catalizado). En lugar de presiones parciales se utilizaron fracción, es decir un comportamiento de gases ideales para simplificar el modelo con fines didácticos.

La velocidad de reacción se debe de ingresar a COCO Simulator como:

$$\left(\frac{2.1125e+005 * \exp(-3599.78/T) * X(Oxygen) * X(sd) * (1 - (X(st) / (\exp((-10.68 + 11300)/T) * X(sd) * X(oxygen)^2 * (P/101325)^{0.5}))) * (P/101325)^{0.5}}{22.414 * (1 + (14.641 * X(sd) + 6.5775 * X(st)) * (P/101325))}\right)$$

4. DESCRIPCIÓN DE PROCEDIMIENTOS Y CÁLCULOS MATEMÁTICOS EN COMPONENTE TRES: ABSORCIÓN DEL SO_3 PARA FORMAR H_2SO_4

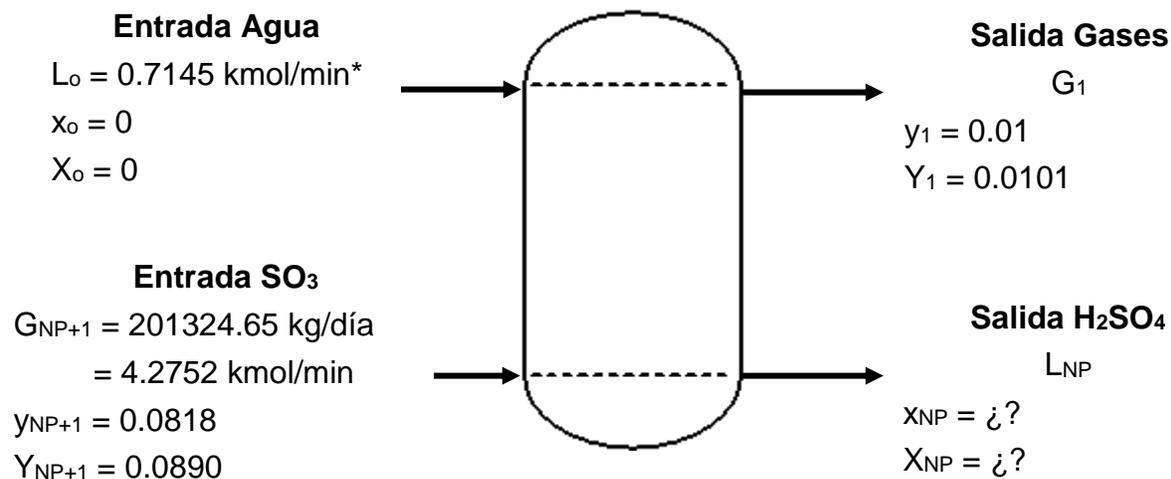
Al trabajar en la torre de absorción, COCO Simulator se auxilia de ChemSep. Esta requiere para su funcionamiento el número de platos, plato de alimentación, propiedades termodinámicas, datos de la reacción, presión y eficiencia. Los cálculos para conocer el número de platos y la velocidad de reacción se explican a continuación.

• CÁLCULO DEL NÚMERO DE PLATOS

Para el cálculo de los platos en la torre de absorción se asumirá lo siguiente:

- El ácido de la solución al 98.5 % no interfiere en la transferencia de masa
- No ocurre ninguna reacción durante la absorción
- Que la transferencia de masa es únicamente entre el agua y el SO_3

Los datos para la torre de absorción son:



Nota: El flujo de agua entrando a la torre, es solamente la porción de agua del flujo real total, es decir, el flujo total es 9.5918 kmol/min de estos el 1.5 %p/p es agua. Por lo tanto $L_o = 0.7145$ kmol/min.

Siguiendo la metodología de Treybal (1990), para encontrar el valor de Y_1 es necesario conocer los valores de L_s y G_s , los cuales se calculan como sigue:

$$L_s = L_o(1 - x_o)$$

$$L_s = (0.7145 \text{ kmol}/\text{min})(1 - 0)$$

$$L_s = 0.7145 \text{ kmol}/\text{min}$$

$$G_s = G_{NP+1}(1 - y_{NP+1})$$

$$G_s = (4.2752 \text{ kmol}/\text{min})(1 - 0.0818)$$

$$G_s = 3.9255 \text{ kmol}/\text{min}$$

$$\frac{L_s}{G_s} = \frac{Y_{NP+1} - Y_1}{X_{NP} - X_o}$$

$$\frac{0.7145}{3.9255} = \frac{0.0890 - 0.0101}{X_{NP} - 0}$$

$$X_{NP} = 0.4335$$

$$x_{NP} = 0.3024$$

Con los valores de Y_1 , Y_{NP+1} , X_o y X_{NP} se puede graficar la curva de operación para encontrar el número de platos de la torre.

Para obtener la curva de equilibrio, se debe de construir la curva $\text{SO}_3\text{-H}_2\text{O}$. Asumiendo una solución ideal, se puede combinar la ecuación de Dalton con Raoult.

$$y = \frac{P'}{P} * x$$

Dónde:

P': es la presión de vapor

P: la presión total del sistema en equilibrio.

La presión de vapor se obtiene con la ecuación de Antoine (Prausnitz, Poling & O'Connell, 2001):

$$\log_{10} P' = A - \frac{B}{T + C - 273.15}$$

Dónde: A = 6.17575, B = 1735.310, C = 236.50

Las condiciones de equilibrio para las cuales se obtendrá la curva de equilibrio son:

$$T = 298.15 \text{ K y } P = 1.01325 \text{ bar.}$$

Por tanto, la presión de vapor es 0.068911 bar, y al sustituirla en la ecuación de Dalton-Raoult se obtiene:

$$y = 0.068911 * x$$

Para mayor facilidad de cálculos, se construye la curva con relaciones molares a partir de las siguientes sustituciones:

$$Y = \frac{y}{1 - y}$$
$$X = \frac{x}{1 - x}$$

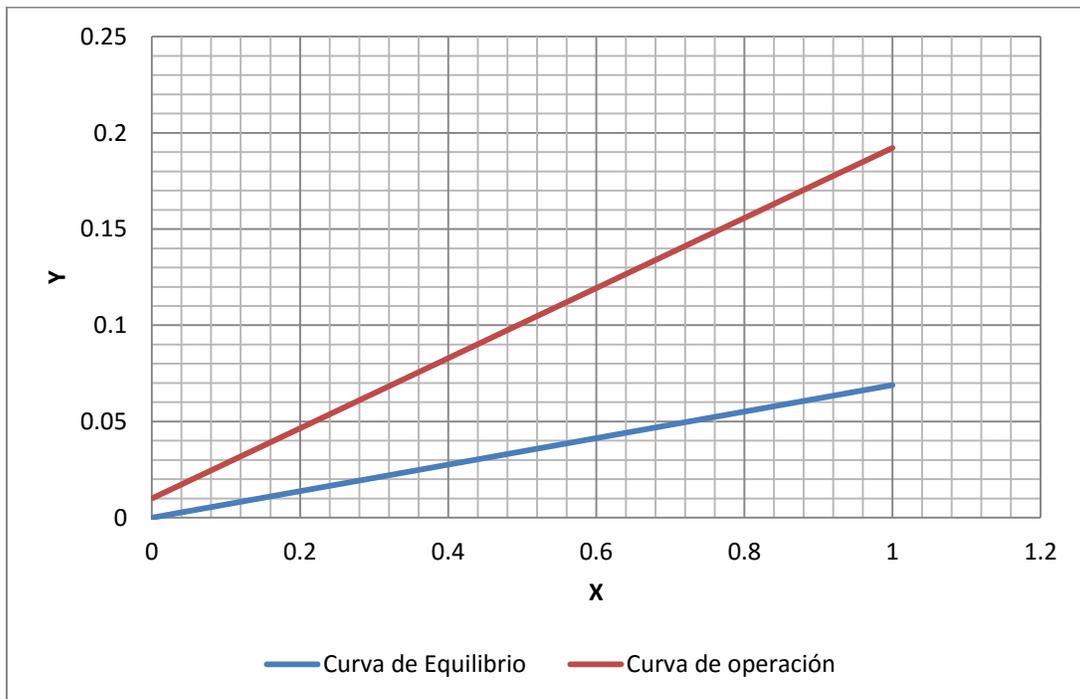


Figura B.4. Curva de equilibrio y de operación para el sistema $\text{SO}_3\text{-H}_2\text{O}$ (Autor, 2016).

Teniendo la curva de equilibrio y la curva de operación se pueden obtener los platos teóricos para la torre de absorción de manera grafica, ver Figura B.5.

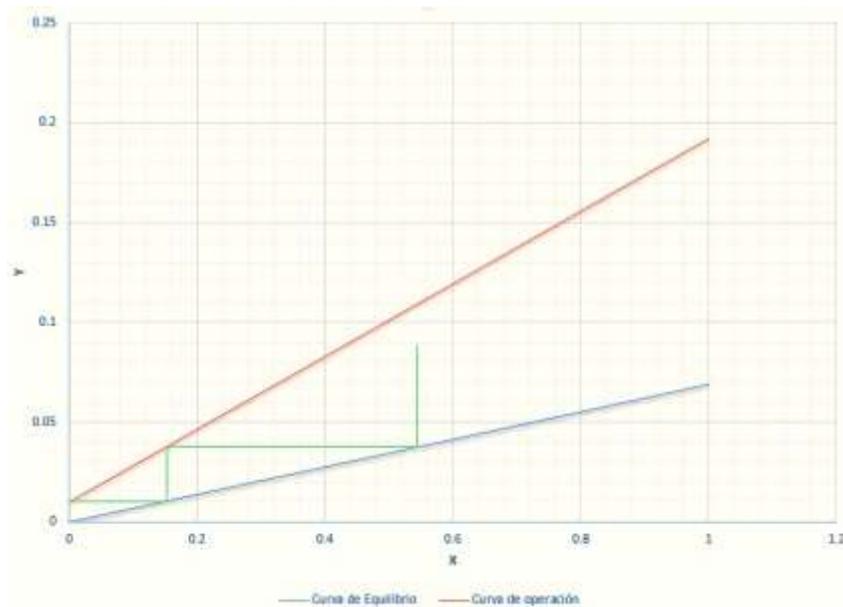


Figura B.5. Cálculo del número de platos por método gráfico (Autor, 2016).

Por tanto, de acuerdo a la Figura B.5, se necesitan dos platos teóricos para la torre de absorción.

- **CÁLCULO DE PROPIEDADES DE LA REACCIÓN**

La siguiente etapa a completar es la reacción. Se deben de ingresar los valores de k de la velocidad de reacción del SO_3 más H_2O . Si bien es cierto que en la práctica esta reacción no es usada, para fines didácticos se utilizara esta reacción.

La expresión de Arrhenius para obtener el modelo cinético de esta reacción es (Royal Society of Chemistry, 2012):

$$k = AT^n \exp\left(-\frac{E_a}{RT}\right)$$

Los datos cinéticos para obtener el modelo cinético de esta reacción son:

A: constante de Arrhenius: $7.23 \times 10^8 \text{ cm}^3 / \text{mol} \cdot \text{s}$

N: factor n para la expresión de Arrhenius: 0

E_a : Energía de activación para la expresión de Arrhenius: 0

Utilizando $R = 8.314472 \text{ J} / \text{mol} \cdot \text{K}$ y a $T = 436.25 \text{ K}$ (la temperatura a la cual el SO_3 ingresa a la torre) se sustituyen los datos y se obtiene:

$$k = 7.23 \times 10^8 \text{ cm}^3 / \text{mol} \cdot \text{s}$$

$$k = 723 \text{ m}^3 / \text{mol} \cdot \text{s}$$

Entonces, si se sustituye el valor de k en la expresión de la velocidad de reacción, tenemos que:

$$r = \left(723 \text{ m}^3 / \text{mol} \cdot \text{s}\right) C_A C_B$$

Dónde:

C_A representa la concentración de SO_3

C_B , representa la concentración de H_2O

Esto se ingresa a COCO Simulator por medio de una ecuación, eligiendo una de 231 ecuaciones que el programa presenta. Se elige la ecuación 2 ($y=a+b*t$), donde $B=723$ y los demás valores cero.

Esta columna trabaja a presión constante y con una eficiencia de 0.99.

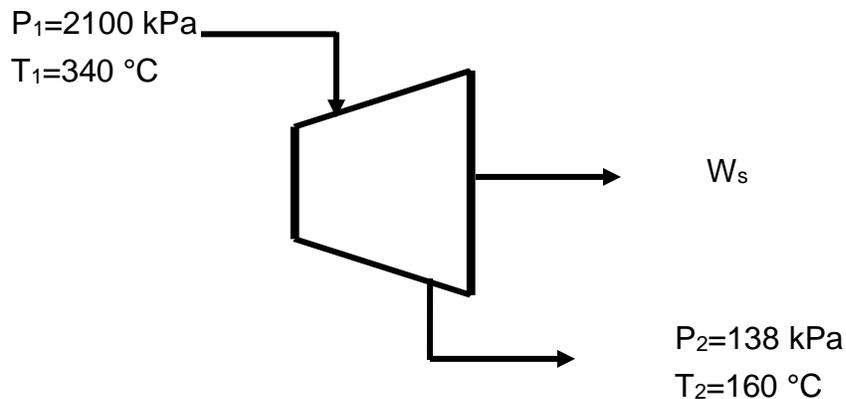
ANEXO C

CÁLCULOS Y PROCEDIMIENTOS NECESARIOS PARA LA SIMULACIÓN DE LA PRODUCCIÓN DE AZÚCAR A PARTIR DE CAÑA

En este apartado se muestran todos los cálculos realizados para la industria de producción de azúcar a partir de caña y así completar los datos que COCO Simulator exige a la hora de ejecutar la simulación. Todos los cálculos se asumen bajo condiciones ideales, pues el propósito de este trabajo es la simulación de componentes con fines educativos.

1. CÁLCULO DE LA EFICIENCIA EN LA TURBINA

Los datos para la turbina son:



Asumiendo que el flujo de vapor es en estado estacionario, el cálculo de la eficiencia en la turbina se define como (Smith, Van Ness y Abbott, 2007):

$$\eta_{IS} = \frac{W_s}{W_s(\text{isentrópico})}$$

Dónde:

W_s : es el trabajo real de eje.

Sustituyendo:

$$\eta_{IS} = \frac{h_{2R} - h_1}{h_{2S} - h_1}$$

Las propiedades fisicoquímicas del vapor a las condiciones de entrada y salida de la turbina se resumen en la Tabla C.1.

Tabla C.1. Propiedades fisicoquímicas del vapor para las condiciones dadas en la turbina

Punto	Presión (kPa)	Temperatura (°C)	Entalpia (kJ/kg)	Entropía (kJ/kg*K)
1	2100	340	3111.49	6.8941
2R	138	160	2792.77	
2S	138		2552.77	6.8941

Fuente: Smith et al, 2007.

Con los datos anteriores y sustituyendo en la fórmula del cálculo de la eficiencia tenemos que:

$$\eta_{IS} = \frac{2792.77 - 3111.49}{2552.77 - 3111.49}$$

$$\eta_{IS} = 0.5704$$

2. CÁLCULO DE FLUJOS EN EVAPORACIÓN

Acorde a los datos proporcionados por el “Ingenio Azucarero A”, se maneja un flujo de 300 m³/h. Con la densidad del jugo, 8.57 lb/gal (Zepeda Guardado, 2012), se puede transformar este dato a flujo másico.

$$300 \frac{\text{m}^3}{\text{h}} * 8.57 \frac{\text{lb}}{\text{gal}} * 264.172 \frac{\text{gal}}{\text{m}^3} * 0.000454 \frac{\text{ton}}{\text{lb}}$$
$$m = 308.35 \text{ ton/h}$$