

UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR  
FACULTAD DE INGENIERIA Y ARQUITECTURA  
ESCUELA DE INGENIERIA QUIMICA



DESARROLLO DE MODULOS DE SIMULACION DE PROCESOS  
EN INGENIERIA QUIMICA

PRESENTADO POR:

Marvin Cirilo Ramírez Avelar

PARA OPTAR AL TITULO DE:  
INGENIERO QUIMICO

CIUDAD UNIVERSITARIA, ABRIL DE 2005

## UNIVERSIDAD DE EL SALVADOR

RECTORA :  
Dra. María Isabel Rodríguez

SECRETARIA GENERAL :  
Licda. Alicia Margarita Rivas de Recinos

## FACULTAD DE INGENIERÍA Y ARQUITECTURA

DECANO :  
Ing. Mario Roberto Nieto Lovo

SECRETARIO :  
Ing. Oscar Eduardo Marroquín Hernández

## ESCUELA DE INGENIERÍA QUÍMICA

DIRECTOR :  
Ing. Fernando Teodoro Ramírez Zelaya

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

Trabajo de graduación previo a la opción al grado de:  
INGENIERO QUÍMICO

Título :  
DESARROLLO DE MODULOS DE SIMULACION DE  
PROCESOS EN INGENIERIA QUIMICA

Presentado por :  
Br. Marvin Cirilo Ramírez Avelar

Trabajo de graduación aprobado por:

Docente director :  
Ing. Tania Torres Rivera

Docente director :  
Ing. Alba Marisela Saravia Cortez

San Salvador, Abril de 2005

Trabajo de Graduación Aprobado por:

Docentes Directores :

Ing. Tania Torres Rivera

Ing. Alba Marisela Saravia Cortez

## AGRADECIMIENTOS

**A Dios todopoderoso**, por ser la fuente de mi vida, alegría, fe y fortaleza en todo momento, ser los brazos que me han sostenido en mis momentos difíciles, haberme dado la oportunidad de seguir en vida, de seguir adelante, junto a todos los seres que aprecio mucho.

**A mi madre**, ser mi cariño, alegría, comprensión, apoyo y compañía en todas las desveladas de mis estudios, gracias por todo tu amor de madre, por tu voz y manos de consuelo.

**A mi padre**, por estar siempre a mi lado, por ser mi amigo y padre, siempre pendiente de todos y llevarnos adelante, ser mi consejo, apoyo, y fortaleza, creer en mí.

**A mi hermana Gaby**, por ser además una linda persona y genial compañía, ser mi mejor amiga, mi apoyo, y una bendición en nuestra familia.

**A mi hermana Yani**, por ser como mi madre, ya que cuidaste de mí desde pequeños, por tu apoyo y fortaleza.

**A mis mejores amigos:** JuanCarlos Henríquez y Giancarlo Gil, por ser como mis hermanos, por compartir ilusiones, alegrías y tristezas, y a pesar del tiempo estar siempre juntos y conservar aquella vieja amistad.

**A mis amigos:** Nelson Vaquero, Alejandra Avelar, Mirtala Guevara, Carolina Salmerón, Jennifer Amaya, Jessica García, Gaby Ayala, Rocío Sibrián, Jonathan Tobar, Manuel Gil, Verenys Paz, Ronnie Hernández, Luis Franco, Lisandro Urrutia, René Ortiz, Mario Cordero, etc., por además de ser mis compañeros y haber compartido este tiempo, esta etapa de la vida, haber sido mi apoyo, fortaleza en mis estudios y cuando más lo necesité.

**A mis maestros**, Ing. Tania Torres, Ing. Marisela Saravia, por ser un gran apoyo como asesoras y maestras, Ing. Delmy Rico, Ing. Francisco Arévalo, Ing. Eugenia Gamero, Ing. Teodoro Ramírez, Ing. Noemí Laínez, y en particular al Ing. Juan Ramírez por ser mi apoyo y amigo, confiar en mí y por presentarme a Matlab, a todos por guiarme por la carrera Ingeniería Química.

**Y en general**, a todos los que han sido para mí una voz, un oído, una mano, una alegría, cuando de ella la necesité.

## RESUMEN EJECUTIVO

### 1. Objetivos

#### Objetivo general

Aplicar herramientas informáticas para el modelamiento y simulación de procesos en las áreas de Termodinámica e Ingeniería de las Reacciones Químicas, para incorporarse al proceso de enseñanza-aprendizaje de la carrera de Ingeniería Química en la Universidad de El Salvador.

#### Objetivos específicos

- a) Presentar a la Simulación de Procesos como una herramienta moderna y eficiente para el estudio de la carrera Ingeniería Química y sus áreas de aplicación en las industrias de proceso químico, el diseño de procesos y desarrollo de proyectos de investigación.
- b) Predecir el comportamiento de procesos asociados a las áreas de Termodinámica e Ingeniería de las reacciones químicas a través del modelamiento matemático, termodinámico o cinético del proceso.
- c) Visualizar los resultados de la simulación y las interacciones entre las variables y parámetros de diseño y operación que intervienen en los procesos.
- d) Incentivar y adaptar la Simulación de procesos a la enseñanza – aprendizaje de la carrera Ingeniería Química en la Universidad de El Salvador.

## 2. Alcances

- a) Desarrollo de problemas en los que se simulen procesos termodinámicos y el diseño de reactores químicos.
- b) Planteamiento de los diagramas de flujo de los procesos seleccionados, de tal forma que puedan ser codificables a un lenguaje de programación aplicable.
- c) Desarrollo de un programa que incorpore la simulación de cada proceso en el entorno de interfaz gráfica del paquete informático Matlab, con vínculos de importación de datos con la hoja de cálculo Microsoft Excel.
- d) Formulación de guías de laboratorio de simulación para ser utilizadas en las áreas correspondientes.
- e) Creación de una página Web con la teoría aplicada, información sobre la creación y uso del programa, descarga de guías de laboratorio, etc.

### 3. Limitaciones

Se desarrollaron simulaciones de procesos específicos para las áreas de Termodinámica Clásica (Termodinámica Química I), Termodinámica de Equilibrio de Fases (Termodinámica Química II) e Ingeniería de las Reacciones Químicas, asignaturas de la carrera Ingeniería Química de la Universidad de El Salvador, con la selección de la técnica más adecuada para la resolución de las ecuaciones y algoritmos de simulación, quedando restringido al proceso para el cual ha sido diseñado.

A continuación se detallan las simulaciones desarrolladas por cada módulo:

- ❖ Termodinámica Clásica
  - Simulación de planta de potencia de vapor.
  - Simulación de proceso de refrigeración por absorción de amoníaco.
  
- ❖ Termodinámica de Equilibrio de Fases
  - Simulación de procesos de licuefacción de gases
  - Simulación del proceso de evaporación instantánea
  
- ❖ Ingeniería de Reacciones Químicas
  - Simulación de reactor discontinuo ideal isotérmico
  - Simulación de sistemas de reactores serie/paralelo: mezcla completa y flujo en pistón.
  - Simulación de reactor de flujo en pistón no isotérmico.



#### **4. Resultados obtenidos**

En este trabajo de graduación han sido desarrollados módulos de simulación de procesos en Ingeniería Química, para ser usados como herramientas en las áreas de estudio, aplicando además una metodología de estudio llamado Aprendizaje Basado en Problemas el cual busca el desarrollo de estrategias y habilidades en el estudiante para la resolución de los problemas, siendo también una motivación para la aplicación en otras áreas de la carrera, proyectos de investigación, etc.

Estos programas de simulación permiten interactuar con el proceso, previamente desarrollado el modelamiento del mismo aplicando la teoría, es posible comprender el fenómeno, su comportamiento ante variaciones de las condiciones de entrada,

Como complemento adicional a los módulos de simulación se desarrolló un programa principal que integra dichos módulos, llamado SimuLab IQ v1.0., guías de laboratorio de simulación y un sitio Web con información general sobre éste trabajo, teoría aplicada, descarga de las guías de laboratorio.

## INDICE

<b>INTRODUCCIÓN</b>	<b>i</b>
<b>Capítulo 1. Teoría del Modelamiento y la Simulación de Procesos</b>	<b>1</b>
<b>1.1 Simulación de Procesos</b>	<b>1</b>
1.1.1 Definición de la simulación de procesos	1
1.1.2 Evolución de la simulación de procesos	3
1.1.3 Etapas de desarrollo para la simulación de un proceso químico	6
1.1.4 Clasificación de las técnicas de simulación	9
1.1.5 Aplicaciones de la simulación de procesos en Ingeniería Química	11
<b>1.2 Metodología del modelamiento matemático</b>	<b>13</b>
1.2.1 Leyes fundamentales del modelamiento de procesos químicos	16
1.2.2 Métodos de simulación en base a modelos	17
1.2.3 Análisis estructural y desarrollo algorítmico de procesos	21
<b>Capítulo 2. Incorporación de la simulación de procesos como estrategia de enseñanza-aprendizaje de la Ingeniería Química.</b>	<b>23</b>
2.1 Apoyo de la simulación en el proceso de enseñanza-aprendizaje de la Ingeniería Química.	23
2.2 Definición del Aprendizaje Basado en Problemas (ABP)	24
2.3 Características del Aprendizaje Basado en Problemas	27
2.4 Objetivos del Aprendizaje Basado en Problemas	28
2.5 Diferencias del ABP con los modelos tradicionales	29
2.6 Ventajas del Aprendizaje Basado en Problemas	31
2.7 Aplicación del Aprendizaje Basado en Problemas en la Simulación de procesos.	32
<b>Capítulo 3. Desarrollo de módulo para la simulación de procesos en termodinámica clásica</b>	<b>37</b>
<b>3.1 Simulación de una planta de potencia de vapor</b>	<b>37</b>
3.1.1 Principios básicos del proceso	37
3.1.2 Planteamiento del problema	43
3.1.3 Definición de variables	44

3.1.4	Modelamiento del proceso	45
3.1.5	Desarrollo algorítmico	52
3.1.6	Simulación del proceso	69
3.1.7	Resultados obtenidos	75
<b>3.2</b>	<b>Simulación de un sistema de refrigeración por absorción de amoníaco</b>	<b>78</b>
3.2.1	Principios básicos del proceso	78
3.2.2	Planteamiento del problema	85
3.2.3	Definición de variables	86
3.2.4	Modelamiento del proceso	87
3.2.5	Desarrollo algorítmico	90
3.2.6	Simulación del proceso	96
3.2.7	Resultados obtenidos	100
<b>Capítulo 4.</b>	<b>Desarrollo de módulo para la simulación de procesos en termodinámica de equilibrio de fases</b>	<b>101</b>
<b>4.1</b>	<b>Simulación de proceso de licuefacción de gases</b>	<b>101</b>
4.1.1	Principios básicos del proceso	101
4.1.2	Planteamiento del problema	104
4.1.3	Definición de variables	106
4.1.4	Modelamiento del proceso	107
4.1.5	Desarrollo algorítmico	117
4.1.6	Simulación del proceso	121
4.1.7	Resultados obtenidos	124
<b>4.2</b>	<b>Simulación de un sistema de proceso de evaporación instantánea</b>	<b>125</b>
4.2.1	Principios básicos del proceso	125
4.2.2	Planteamiento del problema	127
4.2.3	Definición de variables	127
4.2.4	Modelamiento del proceso	128
4.2.5	Desarrollo algorítmico	134
4.2.6	Simulación del proceso	140
4.2.7	Resultados obtenidos	142

<b>Capítulo 5. Desarrollo de módulo para la simulación de procesos en Ingeniería de las Reacciones Químicas</b>	<b>144</b>
<b>5.1 Simulación de un reactor discontinuo ideal isotérmico</b>	<b>144</b>
5.1.1 Principios básicos del proceso	144
5.1.2 Planteamiento del problema	146
5.1.3 Definición de variables	146
5.1.4 Modelamiento de la cinética del proceso	147
5.1.5 Desarrollo algorítmico	152
5.1.6 Simulación del proceso	155
5.1.7 Resultados obtenidos	159
<b>5.2 Simulación de sistemas de reactores en serie/paralelo</b>	<b>161</b>
5.2.1 Principios básicos del proceso	161
5.2.2 Planteamiento del problema	161
5.2.3 Definición de variables	161
5.2.4 Modelamiento de la cinética del proceso	162
5.2.5 Desarrollo algorítmico	165
5.2.6 Simulación del proceso	166
5.2.7 Resultados obtenidos	167
<b>5.3 Simulación de un reactor en flujo en pistón no isotérmico</b>	<b>170</b>
5.3.1 Principios básicos del proceso	170
5.3.2 Planteamiento del problema	170
5.3.3 Definición de variables	170
5.3.4 Modelamiento de la cinética del proceso	171
5.3.5 Desarrollo algorítmico	173
5.3.6 Simulación del proceso	175
5.3.7 Resultados obtenidos	176
<b>Capítulo 6. Desarrollo de herramientas para el uso de los módulos de simulación de procesos en Ingeniería Química</b>	<b>179</b>
<b>6.1 Integración de los módulos como sistema de simulación de procesos</b>	<b>179</b>
<b>6.2 Programa principal de simulación de procesos SimuLab IQ v1.0</b>	<b>182</b>

<b>6.3</b>	<b>Guía de usuario de programa de simulación de procesos</b>	<b>187</b>
6.3.1	Requerimientos de software	187
6.3.2	Ejecución del programa de simulación en Matlab	188
<b>6.4</b>	<b>Elaboración de guías de laboratorio de simulación de procesos aplicando la metodología del Aprendizaje Basado en Problemas</b>	<b>189</b>
6.4.1	Guía No.1: Simulación de planta de potencia de vapor	189
6.4.2	Guía No.2: Simulación de sistema de refrigeración por absorción	191
6.4.3	Guía No.3: Simulación de proceso de licuefacción de gases	193
6.4.4	Guía No.4: Simulación de proceso de evaporación instantánea	196
6.4.5	Guía No.5: Simulación de proceso de reactor discontinuo ideal	198
6.4.6	Guía No.6: Simulación de sistemas de reactores serie/paralelo	199
6.4.7	Guía No.7: Simulación de reactor de flujo en pistón no isotérmico	200
<b>6.5</b>	<b>Creación de sitio Web sobre información del programa de simulación de procesos, SimuLab IQ v1.0</b>	<b>201</b>
6.5.1	Contenido del sitio Web	201
6.5.2	Página de inicio del sitio Web	203
6.5.3	Página de teoría de simulación de procesos	204
6.5.4	Página de teoría del Aprendizaje Basado en Problemas	205
6.5.5	Página de información de los módulos de simulación de procesos	206
6.5.6	Página de descarga de guías de laboratorio de simulación de procesos	207
6.5.7	Página de información de Matlab y SimuLab IQ	208
	<b>Capítulo 7. Conclusiones</b>	<b>209</b>
	<b>Capítulo 8. Referencias bibliográficas</b>	<b>210</b>
	<b>Capítulo 9. Anexos</b>	<b>211</b>

## INTRODUCCION

Un buen método para resolver un problema es descomponerlo en partes con el fin de estudiarlo y resolverlo por separado, y a medida que se vuelve más complejo proceder a analizarlo y resolverlo en su totalidad, el cual resulta al final difícil de comprender su comportamiento ante las distintas variaciones y casos que puedan presentarse, lo cual puede lograrse a través de un ordenador.

Cuando ha sido posible reducir el problema a sus elementos principales y relaciones relevantes, detectar lo más importante, definir los algoritmos que representan su comportamiento, podemos desarrollar modelos que integren todos estos aspectos y respondan a la realidad que pretendemos manejar, siendo así la base esencial para la simulación del proceso.

En este trabajo se ha orientado hacia una de las importantes herramientas de la Ingeniería Química, la Simulación de Procesos Químicos, desde un punto de vista académico, se desarrollaron programas capaces de representar procesos químicos, para ser analizados y estudiados sus comportamientos dentro las áreas: Termodinámica Química e Ingeniería de las Reacciones Químicas, aplicando una metodología de estudio para incorporarse como herramienta didáctica en los programas de estudio, el cual es el Aprendizaje Basado en Problemas.

## Capítulo 1

### Teoría del Modelamiento y la Simulación de Procesos

#### 1.1 Simulación de Procesos en Ingeniería Química

##### 1.1.1 Definición de la Simulación de Procesos

La simulación se define como una técnica para evaluar en forma rápida un proceso con base en una representación del mismo, mediante modelos matemáticos. La solución de éstos se lleva a cabo por medio de programas de computadora y permite tener un mejor conocimiento del comportamiento del proceso, (Martínez, 2000).

La simulación de procesos en Ingeniería Química está vinculada al cálculo de los balances de materia, energía y eventualmente la cinética, termodinámica y velocidad de transferencia de un proceso cuya estructura, y datos preliminares de los equipos que los componen, son conocidos.

La estrategia general del diseño de procesos químicos puede considerarse constituido por tres etapas: Síntesis de procesos, Simulación de procesos y Optimización, (véase Fig. 1.1).

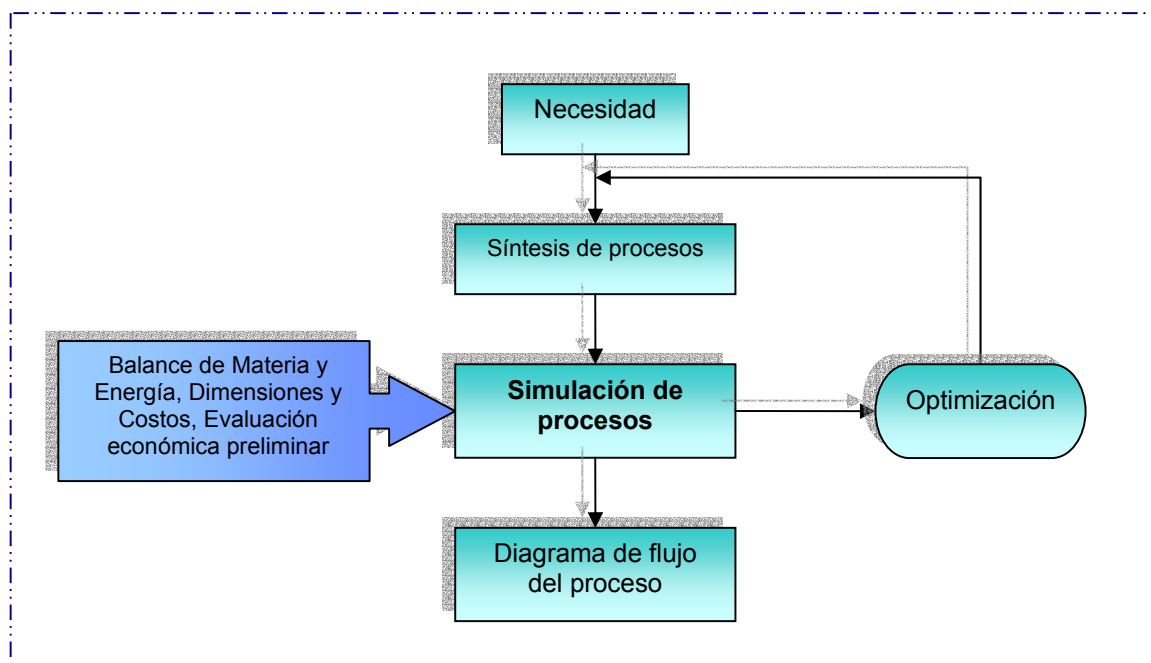


Fig. 1.1 Etapas de diseño de procesos

Fuente: Martínez, 2000

La Ingeniería Química se encarga de la transformación de materias primas naturales y artificiales para la satisfacción de necesidades, para ello la síntesis de procesos corresponde a la etapa donde se crea la estructura básica del diagrama de flujo del proceso químico, seleccionando los equipos a ser utilizados, con sus correspondientes interconexiones, y se establecen los valores iniciales de las condiciones de operación.

En la etapa de Simulación de procesos se solucionan los balances de materia y energía para un proceso químico, cálculo de dimensiones y costos de los equipos y efectuar una evaluación económica preliminar del proceso, y la etapa de Optimización, que puede ser *paramétrica*, modificando parámetros tales como presión o temperatura, o *estructural* cuando se hacen modificaciones al diagrama de flujo involucrando a los equipos y/o interconexiones, (Martínez, 2000).

La simulación de un proceso empieza por el desarrollo de un programa capaz de repetir las características de comportamiento de dicho proceso ante las variaciones en sus variables. Como es imposible repetir exactamente dichas características, deben aproximarse para que la simulación sea lo más real posible, lo que se logra mediante el planteamiento del modelo matemático que lo represente.

La simulación de procesos puede plantearse de tres formas distintas:

- a) El desarrollo de un programa específico de un proceso determinado en que las variables están especificadas de antemano, o bien el programa pregunta sus valores antes de cada ejecución.

El programa es flexible pero requiere de un gran tiempo de desarrollo, siendo solo apto para el proceso en particular de que se trate, es decir, no puede crecer ni aplicarse a otros procesos, aunque sean similares, y cada nueva simulación requerirá un tiempo de desarrollo comparable.

- b) El desarrollo de un conjunto de subprogramas organizados en bloques que unidos entre sí representan el proceso completo.

En éste caso, se dispone de una biblioteca de subprogramas que le permiten simular las unidades individuales de su proceso.



Por ejemplo, pueden combinar fácilmente una unidad de control de presión con una unidad de intercambio de calor para simular el calentamiento de un producto con vapor de agua cuya presión está controlada mediante un controlador de presión. Por otro lado, también puede seleccionar los datos de propiedades termodinámicas de los productos y el método de convergencia de cálculo más rápido que dé una solución aceptable.

De este modo el trabajo de programación es menor, pero la flexibilidad para un proceso determinado se reduce, ya que no se pueden modificar las unidades individuales con las que se trabaja.

- c) Los programas ejecutivos, que son programas de carácter general que simulan una clase particular de procesos y seleccionan la técnica numérica más adecuada para la resolución rápida de las ecuaciones de la simulación.

Este programa presenta la ventaja que es la solución más sencilla pero queda restringido al proceso para el que fue diseñado. Los modelos de simulación desarrollados en el presente proyecto corresponden a éste tipo de simulador de procesos.

Introducirnos al área de la simulación de procesos en Ingeniería Química nos hace recurrir a la historia de la simulación en general, desarrollándose en forma paralela a la evolución de las computadoras, en el siguiente apartado se presentan los puntos más relevantes.

### **1.1.2 Evolución de la Simulación de Procesos**

En los primeros pasos, la simulación de procesos se basaba principalmente en circuitos analógicos.

Los programas de simulación de procesos empezaron a difundirse a partir de la cuarta generación de computadoras, que se caracterizó por la sustitución de las memorias de ferrita por circuitos integrados, cuando la velocidad de procesamiento alcanzada y los costos empezaron a ser atractivos para las industrias debido a su factibilidad de eficiencia y económicos, principalmente por la industria petroquímica.

En 1950 se inician las primeras aplicaciones de la programación lineal a la industria petroquímica en la creación de modelos que simulan la mezcla de gasolinas y de aceites. Los primeros programas fueron escritos inicialmente para grandes ordenadores VAX, IBM, etc. y gradualmente para ordenadores personales tipo IBM-PC o compatibles, reduciéndose su precio, (Solé, 1989).

La teoría de sistemas nos muestra que diversos principios físicos tienen asociados modelos matemáticos equivalentes o isomórficos. 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 sea equivalente al proceso estudiado), ya que son fácilmente cuantificables. (Scenna, 1999).

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 evolucionó lentamente de la simulación analógica a la digital, habiendo prácticamente desaparecido la simulación digital en muchas aplicaciones.

Con 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 (PC's), se 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. En la actualidad los sistemas multimedia, las supercomputadoras y las "autopistas informáticas" representan el avance logrado, (Scenna, 1999).

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. En el año 1974 aparece el primer simulador de procesos químicos, el FLOWTRAN, (Scenna, 1999).

Existe actualmente una gran variedad de simuladores de procesos comerciales, de las cuales son poderosas herramientas de cálculo en procesos industriales, con enormes bases de datos y un fuerte respaldo de bibliotecas para cálculos de equipos y bibliotecas de modelos para cálculos termodinámicos, que le dan al simulador la ventaja de una gran versatilidad.

Ejemplos de estos simuladores de procesos de propósitos generales son:

Aspen Plus y Speedup (de Aspen Technology, USA), Pro II (de Simulations Sciences, USA), Hysys (de Hyprotech, Canada), Chemcad (de Chemstations, USA), etc. Aspen Plus, Pro II y Chemcad son simuladores de procesos en estado estable, Speedup es un simulador de procesos dinámico y Hysys es útil para los dos tipos de simulación, (Martínez, 2000).

Un aspecto muy importante en los simuladores de procesos, es la disponibilidad de propiedades termodinámicas y de transporte de las corrientes del proceso, estas propiedades son fundamentales para efectuar los balances de materia y energía al grado de que si tenemos buenos datos o buenas correlaciones para las propiedades, entonces los resultados de la simulación serán altamente confiables.

Los simuladores modernos deben de permitir la selección de los modelos de propiedades termodinámicas adecuados para la naturaleza de los componentes químicos, estado de agregación y condiciones de operación. Las corrientes del proceso pueden ser:

1. Gases a baja y alta presión.
2. Soluciones líquidas con componentes no polares, polares y electrolitos a baja y alta presión.
3. Sólidos en suspensión o finamente divididos.

(Martínez, 2000)

El desarrollo de la simulación de un proceso químico está conformado por una secuencia de etapas, las cuales son detalladas en el siguiente apartado.

### **1.1.3 Etapas para el desarrollo de la simulación de un proceso químico**

En la preparación de la simulación de un proceso químico existen ciertos pasos importantes a seguir en pequeña o gran escala. Los cuales son: Identificación y formulación del problema; definición del sistema; formulación del modelo; localizar los datos necesarios; seleccionar el paquete de software adecuado; adquirir los recursos computacionales adecuados; experimentación, interpretación, implementación y documentación para el uso apropiado de las herramientas seleccionadas, (Chemical Engineering, Noviembre, 1994).

#### **a. Identificar y formular el problema**

En este paso debe quedar perfectamente establecido el objeto de la simulación. El alcance del problema a solucionar puede ser obvio en su análisis, pero identificarlo en las primeras etapas de un proyecto de simulación no es a menudo tan fácil. Habrá entonces que escoger algo que hará la diferencia en términos de ganar nuevas percepciones o de ofrecer mejoras importantes en el fondo del problema.

#### **b. Definición del sistema**

El sistema a simular debe estar perfectamente definido, identificando dónde estará la frontera del sistema a estudiar y las interacciones con el exterior que serán consideradas.

#### **c. Formulación del modelo**

Comienza con el desarrollo de un modelo simple que captura los aspectos relevantes del sistema real, en los que éstos dependen de la formulación del problema.

El arte de modelar consiste en la habilidad para analizar un problema, resumir sus características esenciales, seleccionar y modificar las suposiciones básicas que caracterizan al sistema, y luego enriquecer y elaborar el modelo hasta obtener una aproximación útil.

#### **d. Localizar los datos necesarios**

El diseño y simulación de procesos químicos necesita de datos de propiedades físicas, termodinámicas, cinéticos y de transporte, los cuales se calculan a partir de modelos de propiedades con base teórica o empíricos.

La representación precisa de las propiedades es fundamental para la simulación de procesos. El usuario debe seleccionar un modelo para representar las propiedades, el uso de un modelo inadecuado puede cambiar los resultados de la simulación y perder validez. Los errores en la simulación por una mala selección del modelo de propiedades físicas no se pueden detectar o prevenir fácilmente, los resultados parecen correctos, pero son erróneos, (Chemical Engineering Progress, Octubre, 1996).

Se encontrará que los resultados de la simulación serán más sensitivas para ciertas variables que otras. Habrá de intentar ajustar algunos de los parámetros desconocidos y considerar la importancia que representan para el proceso. Este paso se denomina: *Análisis sensorial*.

Al diseñar un nuevo proceso o modificar uno existente es posible además recolectar los mejores datos disponibles para las variables sensoriales, o diseñar un proceso para acomodar las posibles variaciones en los datos.

Si los compuestos son importantes y los datos no están disponibles, pueden ser estimadas directamente las propiedades físicas necesarias haciendo uso de correlaciones teóricas o empíricas, ecuaciones de estado, modelos experimentales, modelos de actividad, etc.

#### **e. Seleccionar el paquete de modelamiento**

El modelo es implementado utilizando algún lenguaje de computación. Existen lenguajes específicos de simulación que facilitan esta tarea; también, existen programas que ya cuentan con modelos implementados para casos especiales.

Los simuladores de procesos en estado estacionario presentan una fácil incorporación de los puntos básicos de las operaciones unitarias, así como también reactores químicos. Además contienen paquetes termodinámicos capaces de representar un amplio rango de sistemas de procesamiento.

Las opciones para uso general de simuladores de procesos dinámicos son más limitados, debido a las siguientes razones:

- Incorporación de técnicas de simulación robustas para calcular la respuesta de los procesos en función del tiempo tienden a ser complejos.
- Es difícil diseñar e implementar simuladores dinámicos para uso general debido a variables específicas para cada equipo.
- Existe una carencia de apreciación del valor de la simulación dinámica.

(Chemical Engineering, Nov. 1994)

#### **f. Adquirir los recursos computacionales**

El paquete de modelamiento seleccionado en la etapa anterior determinará los recursos computacionales, o en ciertos casos requerimientos de sistema en relación a software y hardware seleccionados. Algunos paquetes requerirán una amplia gama de recursos, tales como estaciones de trabajo complejas, mientras que otros tan solo requerimientos generales de una computadora personal.

El recurso informático seleccionado para el desarrollo de los módulos de simulación de procesos en este trabajo es el lenguaje de alto nivel MATLAB de The Mathworks Co., el cual posee una extensa librería matemática y herramientas de aplicación en ingeniería, lo facilita la incorporación de los modelos de simulación y su representación e interfaz gráfica con el usuario.

#### **g. Experimentación**

En ésta etapa se realizan las simulaciones de acuerdo al diseño previo. Los resultados obtenidos son debidamente recolectados y procesados.

#### **h. Interpretación**

Se analiza la sensibilidad que tiene el modelo con respecto a los parámetros que tienen asociados la mayor incertidumbre. El modelo será sensible a determinados parámetros si para pequeños cambios en los valores de los mismos las respuestas varían notablemente. Si es así, se deberán recolectar datos adicionales para refinar la estimación de parámetros críticos.

**i. Implementación**

El manejo de los simuladores desarrollados deben ser lo más amigablemente posible, que permita una implementación para un uso adecuado, un aprendizaje y reconocimiento de las señales de error cuando las cosas no andan bien, ya que se corre el peligro debido al desconocimiento de las limitaciones y alcances del simulador utilizado evitando sobrepasar los límites para los cuales ha sido diseñado. Para los paquetes comerciales el entrenamiento de implementación es impartido mediante un curso desarrollado por la compañía que lo ha vendido, acompañado por un manual de usuario, tutoriales, soporte técnico y actualizaciones de algunas aplicaciones.

**j. Documentación**

Incluye la elaboración de la documentación técnica y manuales de uso. La documentación técnica debe contener una descripción detallada del modelo y de los datos; también se debe incluir la evolución histórica de las etapas del desarrollo. Esta documentación será también de una utilidad posterior para futuros perfeccionamientos.

Para la simulación de procesos existe una clasificación de distintas técnicas acorde a ciertos criterios generales y particularidades el sistema en estudio, las cuales se presentan en el siguiente apartado.

**1.1.4 Clasificación de las técnicas de simulación**

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

Las técnicas de simulación pueden clasificarse según diversos criterios, por ejemplo, según el tipo de procesos (continuo o discontinuo), si involucra el tiempo (estacionario o dinámico), las técnicas a emplearse en los módulos para la simulación de procesos termodinámicos son en su mayoría del tipo en estado estacionario, así mismo los utilizados para la simulación de la cinética de la reacción son del tipo de simulación dinámica. En la tabla 1.1 se presenta un detalle de la clasificación.

Tabla 1.1  
Clasificación de las técnicas de simulación de procesos

Clasificación	Tipos		Descripción
Tipo de variable	<i>Cualitativa</i>	Estudia las relaciones causales y las tendencias temporales cualitativas de un sistema	
	<i>Cuantitativa</i>	Describe numéricamente el comportamiento de un proceso, a través de un modelo matemático del mismo.	
		<i>Estado estacionario</i>	Resuelve los balances de un sistema no involucrando la variable temporal
		<i>Estado dinámico</i>	Plantea los balances en su dependencia con el tiempo.
Tipo de fenómeno	<i>Determinístico</i>	El sistema no contiene ningún elemento aleatorio, las ecuaciones dependen de parámetros y variables conocidas con certeza	
	<i>Estocástico</i>	El sistema posee ciertas variables están sujetas a incertidumbre, que puede ser expresada por funciones de distribución de probabilidad.	
Tipo de evento	<i>Eventos discretos</i>	Las relaciones funcionales del sistema sólo permiten que el estado varíe en un conjunto finito (contable) de puntos temporales.	
	<i>Eventos continuos</i>	Las relaciones funcionales entre las variables del sistema sólo permiten que el estado evolucione en el tiempo en forma continua	

Todas éstas técnicas de simulación de procesos han tenido una marcada importancia de aplicación en diversas áreas a través de la historia y actualidad de la Ingeniería Química, de las cuales se presentan a continuación.



### 1.1.5 Aplicaciones de la Simulación de Procesos en Ingeniería Química.

En la enseñanza-aprendizaje de la carrera Ingeniería Química existen tres tipos de problemas que pueden resolverse por medio de Simulación de Procesos:

1. En la *simulación de un problema (análisis)*, donde son especificadas las variables asociadas con las corrientes de alimentación y las variables de diseño de los módulos unitarios. Las incógnitas son las variables asociadas con todas las corrientes adicionales y con las corrientes de producto que salen del proceso. Es decir, se conocen las alimentaciones y los parámetros de los equipos, y las incógnitas son las condiciones de las corrientes de salida.
2. El *problema de diseño* es similar al problema de simulación, excepto que algunas de las variables de diseño no están especificadas y se imponen restricciones a algunas variables de las corrientes (regularmente sólo restricciones de igualdad). El número de restricciones es igual al número de variables de diseño sin especificar. En el diseño se conocen las alimentaciones y las condiciones principales de las corrientes de salida, y las incógnitas son las dimensiones y especificaciones de algunos parámetros de los equipos.
3. En el *problema de optimización*, las variables asociadas con las corrientes de alimentación y las variables de diseño pueden no estar especificadas, entonces es necesario agregar una función de costo al modelo. Las variables sin especificar se determinan de modo que se minimiza la función objetivo. En este caso, se pueden especificar restricciones de igualdad y desigualdad.

(Martínez, 2000)

Actualmente en la industria de procesamiento químico, cuyo desarrollo inició en la industria petroquímica, se desarrollaron paquetes de simulación de procesos, tanto generales como específicos para cada industria o proceso químico, mediante los cuales es posible:

- Detección de cuellos de botella en la producción.
- Predicción de los efectos de cambios en las condiciones de operación y capacidad de la planta.
- Optimización del proceso cuando cambian las características de los insumos y/o las condiciones económicas del mercado.
- Evaluación de alternativas de proceso para reducir el consumo de energía.
- Análisis de condiciones críticas de operación.
- Transformación de un proceso para desarrollar otras materias primas.
- Análisis de factibilidad y viabilidad de nuevos procesos.
- Optimización del proceso para minimizar la producción de desechos y contaminantes.
- Entrenamiento de operadores e ingenieros de proceso.
- Investigación de la factibilidad de automatización de un proceso.

(Martínez, 2000)

La variedad de aplicaciones de los simuladores de procesos es muy grande. En el pasado sólo era usado en el diseño de procesos, ahora se manejan simuladores en ingeniería ambiental, ingeniería de procesos, investigaciones científicas y tecnológicas.

En las diferentes etapas de un proyecto, puede haber necesidad de realizar simulaciones con diferentes niveles de sofisticación, tal como se describe a continuación en la tabla 1.2:

Tabla 1.2

Aplicaciones de la simulación de procesos en las etapas de un proyecto

<b>Etapas del proyecto</b>	<b>Aplicaciones de la simulación</b>
<i>Investigación y desarrollo</i>	Prueba de factibilidad técnica y económica del proyecto.
<i>Etapas crítica en la toma de decisiones</i>	Evaluación de diferentes alternativas de proceso y condiciones de operación y se toman decisiones
<i>Planta piloto</i>	Obtener mejores estimaciones de las condiciones de operación a escala industrial.
<i>Diseño.</i>	Proporciona todos los datos de proceso requeridos para el diseño detallado de los diferentes equipos.
<i>Simulación de plantas existentes.</i>	Cuando es necesario cambiar las condiciones de operación, o cuando se quieren sustituir materias primas

## **1.2 Metodología del modelamiento matemático**

El Modelamiento es el proceso de construcción de un modelo, el cual es una representación de un objeto, sistema, o idea, por medio de la aplicación de principios fundamentales.

De manera imprescindible, para simular un proceso es necesario crear un modelo que permita estudiar y prever el comportamiento que tendrá dicho proceso, a fin de poder evaluar el comportamiento del mismo ante determinadas condiciones y preparar de éste modo los cambios y las estrategias a seguir.

La modelización de los procesos requiere el desarrollo de un modelo matemático de un sistema, con las simplificaciones adecuadas para simular el núcleo del proceso. Estas simplificaciones deben ser lo más leves posible, dentro de las limitaciones que puedan imponer las herramientas informáticas empleadas (memoria, tipo de ordenador...), para que la simulación sea lo más real posible. (Solé, 1989)

La ventaja que tiene este procedimiento frente a un diseño en planta piloto, es la rapidez de la obtención de los datos del experimento y la economía que se logra con la simulación del proceso en estudio, en contraparte el modelo debe cumplir las características de precisión necesarias para obtener resultados que sean lo más concordantes posible en la práctica, aproximaciones a la realidad.

La utilidad que tiene el modelo en la simulación está principalmente en el diseño de una planta nueva (en cuanto a su viabilidad) y el análisis de plantas en operación. Mediante los cuales es posible determinar la sensibilidad de la planta a la variación de los parámetros claves del proceso. Esto permite determinar los cambios que va a sufrir el sistema si se modifican las condiciones de operación del proceso o de la planta, o bien si se cambian las condiciones de proyecto de la planta.

El modelo del proceso también se presta al ensayo de varias configuraciones de control que permitan optimizar el control del proceso, incluyendo el ahorro de energía, la mejora de los rendimientos de fabricación y la conexión de los equipos con los sistemas de control avanzado de la planta, (Solé, 1989).

Tradicionalmente el modelamiento de procesos ha sido usado para el diseño de diagramas de flujo y para especificar sólo los parámetros importantes del equipo. Mientras tanto, otras áreas de aplicación han venido incrementando importancia acorde con las etapas del ciclo de vida de los procesos, desde síntesis a diseño, construcción, inicio, modificación y retiro, tal como se muestra en la figura 1.2, (Chemical Engineering, Nov., 1994)

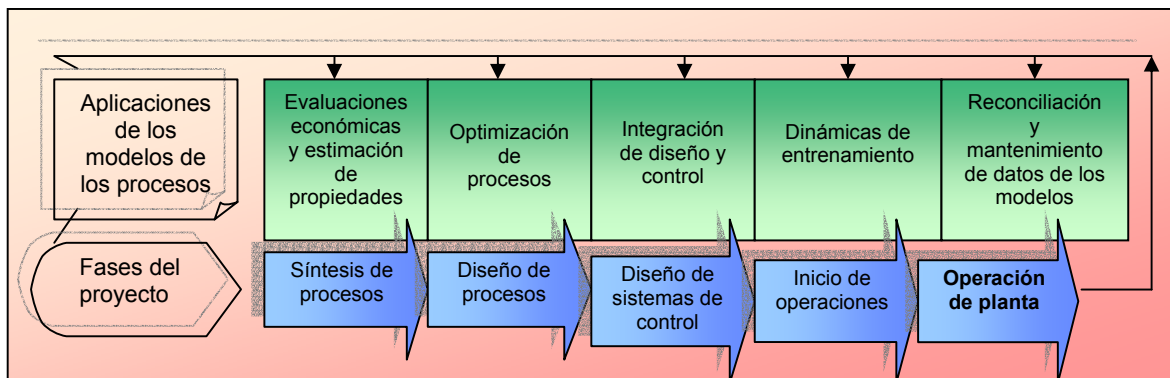


Figura 1.2 Un simulador de procesos juega diferentes roles en la variedad de fases del ciclo de vida de un proceso.

Fuente:., Chemical Engineering, Nov., 1994

Dentro de los principios básicos más importantes del modelado de los procesos químicos están, (Tarifa, 2001).

- El modelo matemático sólo puede ser una aproximación del sistema real, el cual puede ser extremadamente complejo y aún no comprendido del todo. El mejor modelo es el más simple que satisface las expectativas del ingeniero.
- El modelado es un proceso continuo. Se debe comenzar modelando los fenómenos principales y luego ir agregando los restantes si es que son necesarios. Es decir, se va de menor a mayor, de un prototipo al modelo final. Tratar de enfrentar el problema de una sola vez puede traer problemas.
- El modelado es un arte, no hay reglas fijas, pero el premio es un profundo conocimiento del sistema en estudio. Muchas veces, el problema que se quiere resolver con el simulador se resuelve en la etapa del modelado; es decir, antes de completar el simulador.

- d. El modelo debe ser realista y robusto. Las predicciones del modelo deben estar de acuerdo con las observaciones y no debe ser demasiado sensible a cambios en los parámetros o variables de entradas.

Los pasos para encarar la construcción de un modelo son, (Tarifa, 2001).

- a. *Definición de los objetivos del modelo*: Es de suma importancia establecer claramente qué es lo que se espera del modelo. Esto implica la definición de las fronteras del sistema a modelar, de la exactitud necesaria, de la necesidad de conocer la evolución en el tiempo, etc.
- b. *Formulación de un modelo físico*: Se identifican los fenómenos más importantes que se llevan a cabo en el sistema.
- c. *Balances (estacionarios o dinámicos)*: Se escriben los balances de materia, energía, etc.
- d. *Propiedades*: Se obtienen o estiman los valores para las propiedades físico químicas que intervienen en los balances.
- e. *Suposiciones considerando los objetivos*: Se realizan las simplificaciones en el modelo considerando los objetivos.
- f. *Consistencia matemática*: El grado de libertad del modelo.
- g. *Se resuelve el modelo* utilizando algún método matemático analítico o numérico (simulación).
- h. *Perfeccionamiento*: Si los resultados obtenidos con el modelo no son satisfactorios, entonces se repite el ciclo adoptando suposiciones menos restrictivas. En esta etapa se puede sugerir la adquisición de nuevos datos experimentales.

El modelo puede ser obtenido empíricamente o utilizando los principios básicos<sup>1</sup>. En el primer caso el tiempo de desarrollo es menor, no hay que pensar mucho, sólo se trata de ajustar parámetros para que las predicciones del modelo coincidan con los datos experimentales.

---

<sup>1</sup> Balances de materia y/o energía, etc.

Sin embargo, la dificultad aparece a la hora de seleccionar los datos experimentales que se utilizarán para realizar el ajuste ya que se necesita una gran cantidad si es que se quiere que la zona de validez del modelo no sea muy pequeña. Por otra parte, el otro enfoque ofrece la ventaja de requerir menos datos experimentales, produce modelos más confiables; pero requieren de un gran esfuerzo para su desarrollo.

### **1.2.1 Leyes fundamentales del modelamiento de procesos químicos**

Las leyes fundamentales que gobiernan a los procesos químicos son:

#### *a. Balance de masas*

Según el principio de conservación de masas, el flujo de masa que entra en el sistema menos el flujo de masa que sale del sistema es igual a la velocidad de cambio de masa dentro del sistema, (Solé, 1989). Los primeros pasos para definir el balance de materia incluyen seleccionar las fronteras del sistema, identificar todas las corrientes de entrada y salida, es decir todos los flujos de materia que atraviesen las fronteras del sistema, e identificar las sustancias químicas que contiene cada corriente. (Reklaitis, 1989)

#### *b. Balance de componentes*

Dado que en una reacción química ocurre un reordenamiento de los átomos y las moléculas, formando compuestos moleculares diferentes, mientras disminuye el número de moles de una especie reactante, aumenta el número de moles del producto en un sistema reaccionante.

#### *c. Conservación de la energía o balance de energía*

El balance de energía es importante cuando la temperatura afecta las variables que nos interesan estudiar. Por ejemplo, en un reactor la conversión será afectada por la temperatura a través de la constante cinética; a su vez, la reacción afectará a la temperatura mediante la generación de calor.

La ley de conservación de energía es planteada por el primer principio de la termodinámica. La energía interna depende no tanto de la temperatura sino de la materia del sistema y su composición. Por este motivo, el balance de materia siempre está asociado al de energía.

Las variables físicamente significativas, tales como composición, fase, presión y temperatura, deben primero convertirse a contenido de energía. Entonces, es posible balancear los contenidos de energía de las diversas corrientes, y finalmente, deberá traducirse el contenido de energía de las corrientes previamente desconocidas, a variables físicamente significativas. (Reklaitis, 1989).

*b. Transferencia de materia, energía y momentum.*

Las ecuaciones de transporte permiten calcular la rapidez con que una propiedad (masa, energía y momentum) se transfieren de un punto del sistema a otro). Esta rapidez de transferencia se expresa como un flujo de la propiedad por unidad de área y es directamente proporcional a un gradiente de la propiedad en una o varias coordenadas espaciales, (Martínez, 2000).

### **1.2.2 Métodos de simulación en base a modelos**

Los métodos de simulación más utilizados tanto en los procesos químicos como otras aplicaciones son:

- a. Método modular secuencial
- b. Método orientado a ecuaciones
- c. Método modular simultáneo

Sus definiciones, aplicaciones y características se detallan a continuación.

#### **a. Método modular secuencial**

El sistema de simulación modular responde a la división de los procesos químicos en unidades de transformación, donde se realizan las transformaciones físicas o químicas de las materias (reactores, secaderos, mezcladores, intercambiadores de calor, evaporadores, columnas de destilación, etc.) y en unidades de transporte donde una red de tuberías conecta los diversos equipos entre sí para que las materias primas y las intermedias circulen por la planta, así como los fluidos de energía (el vapor, el agua, el aire comprimido, etc.), (Solé, 1989).

Este sistema de módulos individuales partiendo de datos tales como los flujos de entrada de los fluidos y los parámetros de dimensionamiento del módulo, proporcionan los flujos de salida y los resultados del módulo.

Las variables independientes consisten generalmente en caudales, temperaturas (o entalpías) y presiones. Las variables dependientes son generalmente caudales totales, fracción de vapor y entalpía total o temperatura.

Cada módulo representa un determinado proceso de operación unitaria realizada en la planta, y consiste en un subprograma cuyo objeto es calcular los flujos o corrientes de salida partiendo de los flujos o corrientes de entrada con los parámetros del módulo conocidos e introducidos en el programa.

Los simuladores modulares secuenciales siguen la misma filosofía que las operaciones unitarias, es decir, cada equipo: bomba, válvula, intercambiadores, etc.; son modelados a través de modelos específicos para los mismos y además, el sentido de la información coincide con el flujo físico en la planta. Esto representa una ventaja ya que cada sistema de ecuaciones es resuelto con una metodología que resulte adecuada para el mismo, ya que es posible analizar bajo todas las circunstancias posibles, el comportamiento del método de resolución propuesto, esto es sistemas ideales, no ideales, geometrías del equipo, distintas variantes, etc., (Scenna, 1999).

Las principales características de los simuladores modulares secuenciales son, (Scenna, 1999):

- ❖ Biblioteca de módulos (equipos).
- ❖ Flowsheet: equivale a un grafo orientado o dígrafo<sup>2</sup>.
- ❖ Orden de resolución fijo (iteraciones)
- ❖ Tres niveles de iteración (se incorpora otro si se desea optimizar)
  - Cálculos fisicoquímicos.
  - Módulos en sí. (ej.: flash, columna, etc.)
  - Variables de iteración (reciclo).
  - Optimización
- ❖ Módulos individuales resueltos eficientemente.
- ❖ Fácilmente comprendido por ingenieros no especialistas en simulación.
- ❖ La información ingresada por el usuario (relacionada con equipo o corrientes) resulta fácilmente evaluada e interpretable.

---

<sup>2</sup> grafo o dígrafo: conjunto de puntos unidos entre sí.



- ❖ Los problemas de diseño (selección de parámetros) son más fáciles de resolver.
- ❖ Se incrementa la dificultad cuando se plantea un problema de optimización (funcionan como cajas negras).
- ❖ Poco versátiles, pero muy flexibles, muy confiables y bastante robustos.

#### **b. Método orientado a ecuaciones**

Mediante éste método, se plantea el modelo matemático que representa al proceso construyendo un gran sistema de ecuaciones algebraicas que representa a todo el conjunto o planta a simular. De esta forma el problema se traduce en resolver un gran sistema de ecuaciones algebraicas, por lo general no lineales. (Scenna, 1999).

Consiste básicamente en la solución simultánea de las ecuaciones que describen el diagrama de flujo, resolviendo el sistema de ecuaciones algebraicas no lineales que constituyen el modelo matemático del proceso completo, por medio de un procedimiento de solución de sistemas de ecuaciones.

El método de ecuaciones se ha utilizado ampliamente en la modelización de unidades individuales por sus ventajas de rápida convergencia en la solución, tales como columnas de destilación, la cual fue una de sus primeras aplicaciones. Sin embargo, las desventajas que presenta de dificultad de diagnóstico por parte del usuario en caso de error que produzca la falta de convergencia de la solución, y de precisar valores adecuados de arranque, así como de no aprovechar las investigaciones realizadas mundialmente en base al método modular secuencial, hacen que el método no sea empleado como rutina general en simulaciones de procesos industriales, (Solé, 1989).

El principal problema con la metodología orientada a ecuaciones es la convergencia del sistema y la consistencia de las soluciones que se encuentren. Por ejemplo los sistemas altamente no lineales pueden producir múltiples soluciones.

Una ventaja importante es que puede lograrse una velocidad de convergencia cuadrática mayor que en los simuladores secuenciales y así mismo, es posible incorporar fácilmente expresiones de restricción para definir problemas de optimización.

Las principales características de los simuladores orientados a ecuaciones, se presentan a continuación, (Scenna, 1999).

- ❖ Cada equipo se representa por las ecuaciones que lo modelan. El modelo es la integración de todos los subsistemas.
- ❖ Desaparece la distinción entre variables de procesos y parámetros operativos, por lo tanto se simplifican los problemas de diseño.
- ❖ Resolución simultánea del sistema de ecuaciones algebraicas (no lineales resultante).
- ❖ Mayor velocidad de convergencia.
- ❖ Necesita una mejor inicialización (mejor cuanto mayor sea el problema a resolver).
- ❖ A mayor complejidad, menor confiabilidad en los resultados y más problemas de convergencia (soluciones en sentido físico).
- ❖ Más difícil de usar por no especialistas.

### **c. Método modular simultáneo**

Es posible plantear el desarrollo de simuladores combinando la estrategia modular y la orientada a ecuaciones de forma tal de aprovechar los aspectos positivos de ambas metodologías lo máximo posible. Para ello se selecciona un grupo de variables sobre las cuales se procederá según la metodología orientada a ecuaciones, esto es, se las resolverá simultáneamente, mientras que para el resto se mantiene la metodología modular, es decir, se trata de encontrar una secuencia acíclica, que provea por su cálculo, en cada iteración, los valores de las variables a resolverse simultáneamente.

Es por ello que a esta filosofía también se la conoce como two-tear o de dos niveles jerárquicos, ya que se trabaja en uno con las variables tratadas simultáneamente, y en el otro secuencialmente. (Scenna, 1999).

El sistema de ecuaciones a resolver es un sistema simplificado de más fácil solución que el sistema de ecuaciones en el método orientado a ecuaciones. Este sistema simplificado está formado por modelos aproximados o representaciones lineales de los modelos rigurosos (ecuaciones no lineales).

### **1.2.3 Análisis estructural y desarrollo algorítmico de los procesos**

El resultado del planteamiento del problema es el diseño de un algoritmo para resolver el problema. Un algoritmo se puede considerar como el conjunto de instrucciones que conducen a la solución de un problema determinado. Dichas instrucciones deben tener una secuencia lógica para poder llegar a la solución real. El algoritmo se puede expresar de diversas maneras. Mediante símbolos, utilizando un lenguaje determinado para hablar la solución, describir sintéticamente dicha solución o simplemente escribiéndolo en cualquier código válido para algún lenguaje de programación. La última forma de describir el algoritmo es a lo que se le denomina PROGRAMA. (Cerquera, 2001)

El algoritmo puede ser representado a través de estructuras denominadas Diagramas de Flujo, que utiliza símbolos estándar de diagramación de algoritmos para computador, en el que cada paso del algoritmo se visualiza dentro del símbolo adecuado y el orden en que estos pasos se ejecutan. Se indica su secuencia conectándolos con flechas llamadas líneas de flujo porque indican el flujo lógico del algoritmo.

La representación del diagrama de flujo del proceso puede traducirse a un diagrama, llamado diagrama de flujo de información (DFI). Este diagrama matemáticamente es un dígrafo, en el cual los nodos son los módulos de equipos conectados uno a uno a través de las corrientes que los vinculan, las cuales se representan como arcos dirigidos. Estas corrientes de información por lo general coinciden con las corrientes físicas del proceso, pero no necesariamente en todos los casos. Lo mismo sucede con los equipos (nodos del dígrafo), (Scenna, 1999).

Por ejemplo, en la figura 1.3 se muestra un esquema de un proceso particular y en la figura 1.4 su traducción al diagrama de flujo de información (DFI), que resulta más útil para el manejo de la información y variables involucradas en el proceso y su interconexión con cada etapa.

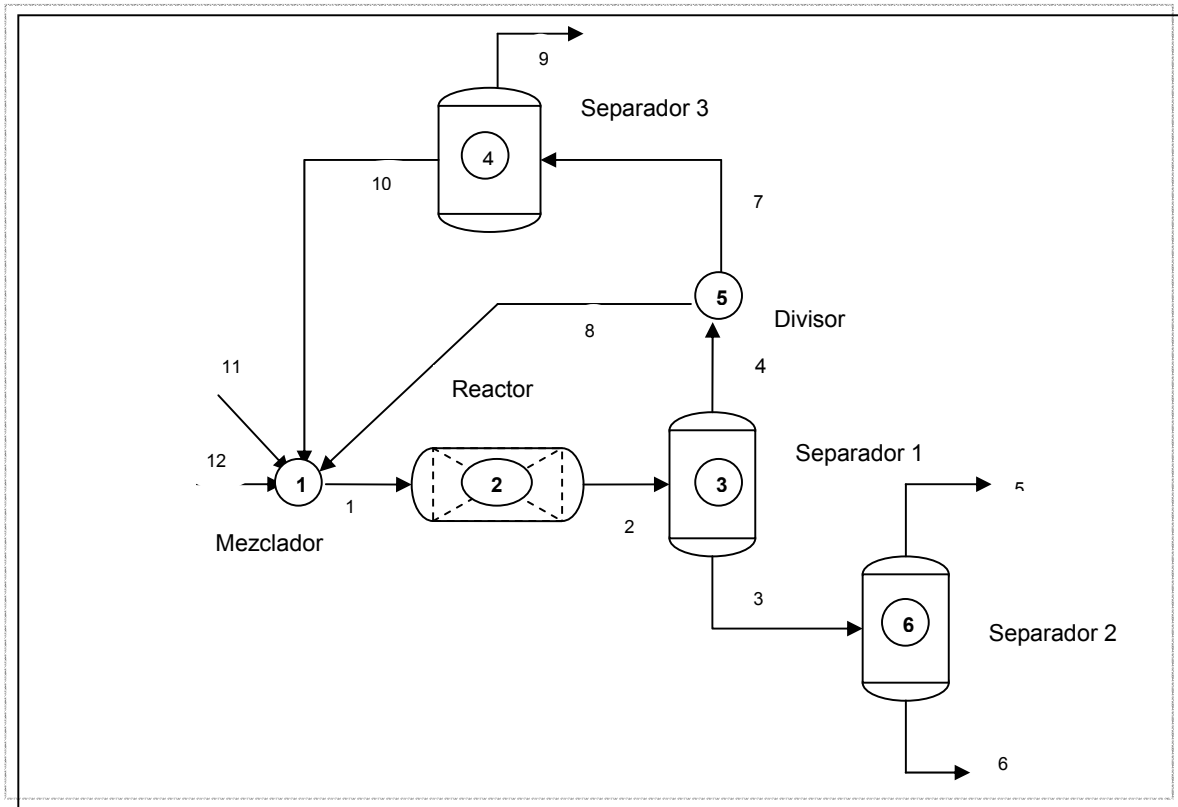


Fig. 1.3 Diagrama de flujo de proceso

Fuente: Reklaitis, 1989

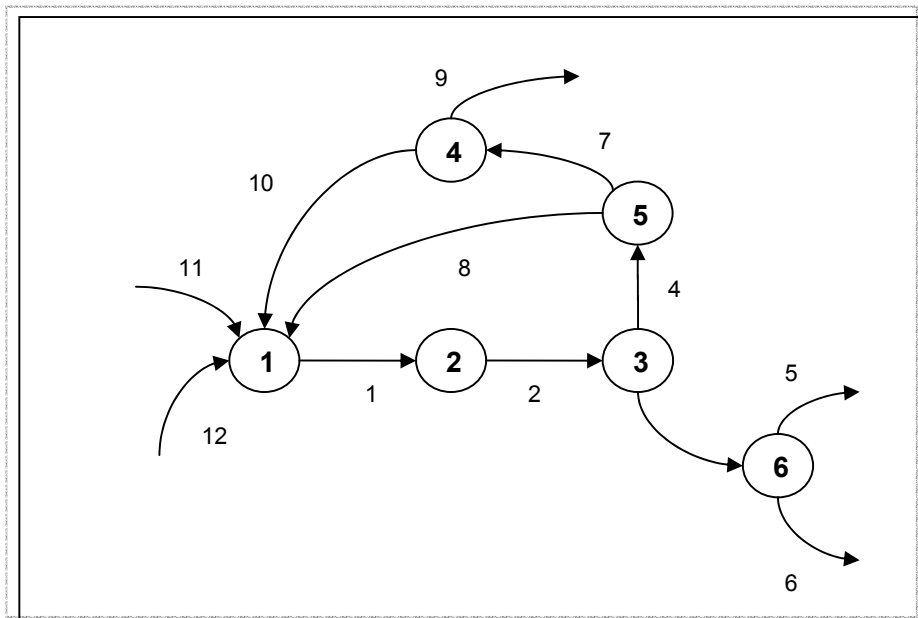


Fig. 1.4 Diagrama de Flujo de Información (DFI) de la figura 1.3

Fuente: construcción propia

## **Capítulo 2**

### **Incorporación de la Simulación de procesos como estrategia de enseñanza-aprendizaje de la Ingeniería Química.**

#### **2.1 Apoyo de la simulación en el proceso de enseñanza-aprendizaje de la Ingeniería Química.**

Antes del desarrollo de los módulos de simulación de procesos y su incorporación en los programas de estudio de las asignaturas correspondientes, se hará una evaluación de los modelos de enseñanza-aprendizaje y de la manera cómo la simulación puede ser una potencial herramienta para el apoyo de tales modelos logrando posiblemente el rediseño o modificación de los mismos.

Los modelos de enseñanza tradicionales desde los primeros años de estudios hasta el nivel de educación superior han formado estudiantes que comúnmente se encuentran poco motivados y hasta aburridos con una forma repetitiva de aprendizaje, memorizando una gran cantidad de información, mucha de la cual se vuelve irrelevante en el mundo exterior o bien en poco tiempo, se presenta en los alumnos el olvido de mucho de lo aprendido y gran parte de lo que logran recordar no puede ser aplicado a los problemas y tareas que se presentan en el momento de afrontar la realidad.

Una educación pasiva y centrada en la memoria, para muchos alumnos provoca incluso dificultad para razonar de manera eficaz, y en muchos casos, presentan dificultades para asumir las responsabilidades correspondientes a la especialidad de sus estudios y al puesto que ocupan. De igual forma se puede observar en ellos la dificultad para realizar tareas trabajando de manera cooperativa. En la mayor parte de los casos, los alumnos ven a la educación convencional como algo obligatorio y con poca relevancia en el mundo real o bien, se plantean el ir a sus estudios como un mero requisito social y están imposibilitados para ver la trascendencia de su propio proceso educativo, (ITESM,1999).

En una asignatura que se centra sólo en el contenido, el alumno es un sujeto pasivo del grupo que sólo recibe la información por medio de lecturas y de la exposición del profesor y en algunos casos de sus compañeros, y el docente como un emisor que transmite la información a sus alumnos desarrollando un contenido acorde al programa de estudios de la asignatura.

Una nueva visión o rediseño de estos modelos tradicionales es destacar el papel del estudiante como un constructor activo que descubre y transforma su propio conocimiento, quien asume tal responsabilidad y cooperación dentro del núcleo de estudiantes e interrelaciones con el docente, así también por parte del docente, el papel de desarrollar las habilidades y capacidades profesionales de los estudiantes, identificando aptitudes especiales que los diferencia del resto como futuros profesionales.

El profesor debe conocer los aspectos básicos acerca del desarrollo humano en general y del desarrollo intelectual en particular; que conozca también diversas estrategias de aprendizaje, de modo que sea capaz de construir ambientes que conduzcan a sus alumnos a convertirse realmente en activos constructores de su conocimiento, (Martínez, 2000).

Bajo el modelo en que el alumno es quien busca el aprendizaje considerando que es necesario para resolver los problemas que se le plantean, basado en un constructivismo propio, se desarrolla la metodología de estrategia de aprendizaje conocida como Aprendizaje Basado en Problemas (ABP), el cual puede ser utilizado en un proyecto de investigación, un caso de estudio, un proyecto de diseño, resolución de un problema, un proyecto industrial, o el aprendizaje autodirigido.

La metodología ABP, es la que en este estudio se considera la más adecuada para introducir los módulos en los que se aplique la simulación como estrategia de enseñanza aprendizaje en las áreas de Termodinámica Química e Ingeniería de las Reacciones Químicas.

## **2.2 Definición del Aprendizaje Basado en Problemas**

El método del Aprendizaje Basado en Problemas (ABP) tiene sus primeras aplicaciones y desarrollo en la escuela de medicina en la Universidad de Case Western Reserve en los Estados Unidos y en la Universidad de McMaster en Canadá en la década de los 60's.

Esta metodología se desarrolló con el objetivo de mejorar la calidad de la educación médica cambiando la orientación de un currículum que se basaba en una colección de temas y exposiciones del maestro, a uno más integrado y organizado en problemas de la vida real y donde confluyen las diferentes áreas del conocimiento que se ponen en juego para dar solución al problema. El ABP en la actualidad es utilizado en la educación superior en muy diversas áreas del conocimiento.

Es una estrategia de enseñanza-aprendizaje en la que tanto la adquisición de conocimientos como el desarrollo de habilidades y actitudes resultan importantes, en el ABP un grupo pequeño de alumnos se reúne, con la facilitación de un tutor, a analizar y resolver un problema seleccionado o diseñado especialmente para el logro de ciertos objetivos de aprendizaje. Durante el proceso de interacción de los alumnos para entender y resolver el problema se logra, además del aprendizaje del conocimiento propio de la materia, que puedan elaborar un diagnóstico de sus propias necesidades de aprendizaje, que comprendan la importancia de trabajar cooperativamente, que desarrollen habilidades de análisis y síntesis de información, además de comprometerse con su proceso de aprendizaje, (ITESM,1999).

Es un modelo de educación que involucra a los estudiantes en un aprendizaje autodirigido pues resuelve problemas complejos, del mundo real. Otras definiciones más son:

- El ABP es el tipo de organización necesaria en el salón de clase para apoyar un enfoque constructivista para la enseñanza-aprendizaje.
- En el ABP se presenta una situación de aprendizaje antes de dar el conocimiento. Después, una vez que se adquiere el conocimiento, se aplica en la solución del problema. Los estudiantes tienen el control de la situación porque ellos deben seleccionar el conocimiento necesario para resolver el problema, aprenden ese conocimiento y lo relacionan con el problema. Ellos eligen su propio ritmo y secuencia. Frecuentemente, ellos mismos se evalúan.

- El aprendizaje basado en problemas es un desarrollo de currículo y un sistema instruccional que simultáneamente desarrolla estrategias para solución de problemas y las bases y habilidades del conocimiento de la disciplina. Los estudiantes desempeñan un papel activo en la solución de un problema, el cual tiene más de una alternativa de solución, similar a lo que ocurre con los problemas del mundo real.
- El ABP es un formato educacional que se centra en la discusión y aprendizaje que emana de la base de un problema. Es un método que motiva el aprendizaje independiente y ejercita a los estudiantes a enfrentar situaciones complejas y a definir sus propias alternativas de comprensión en el contexto de problemas clínicamente relevantes, con la intención de hacerlo más parecido a lo que ellos vivirán más tarde en el campo de trabajo. Es la forma de aprendizaje que propicia un entendimiento más profundo del material de conocimiento.
- El ABP es una estrategia que favorece el pensamiento crítico y las habilidades de solución de problemas junto con el aprendizaje de contenidos a través del uso de situaciones o problemas del mundo real.

El ABP se sustenta en diferentes corrientes teóricas sobre el aprendizaje humano, tiene particular presencia la teoría constructivista, de acuerdo con esta postura en el ABP se siguen tres principios básicos, (ITESM,1999)

- El entendimiento con respecto a una situación de la realidad surge de las interacciones con el medio ambiente.
- El conflicto cognitivo al enfrentar cada nueva situación estimula el aprendizaje.
- El conocimiento se desarrolla mediante el reconocimiento y aceptación de los procesos sociales y de la evaluación de las diferentes interpretaciones individuales del mismo fenómeno.

El ABP incluye el desarrollo del pensamiento crítico en el mismo proceso de enseñanza - aprendizaje, no lo incorpora como algo adicional sino que es parte del mismo proceso de interacción para aprender. El ABP busca que el alumno comprenda y profundice adecuadamente en la respuesta a los problemas que se usan para aprender con un enfoque integral.



La estructura y el proceso de solución al problema están siempre abiertos, lo cual motiva a un aprendizaje consciente y al trabajo de grupo sistemático en una experiencia cooperativa de aprendizaje, (ITESM,1999).

En el ABP los alumnos van integrando una metodología propia para la adquisición de conocimiento y aprenden sobre su propio proceso de aprendizaje. Los conocimientos son introducidos en directa relación con el problema y no de manera aislada o fragmentada, donde los alumnos pueden observar su avance en el desarrollo de conocimientos y habilidades, tomando conciencia de su propio desarrollo.

### **2.2.1 Características del ABP**

Una de las principales características del ABP está en fomentar en el alumno la actitud positiva hacia el aprendizaje, respetando la autonomía del estudiante, quien aprende sobre los contenidos y la propia experiencia de trabajo en la dinámica del método, los alumnos tienen además la posibilidad de observar en la práctica aplicaciones de lo que se encuentran aprendiendo en torno al problema.

A continuación se describen algunas características del ABP, (ITESM,1999)

- Es un método de trabajo activo donde los alumnos participan constantemente en la adquisición de su conocimiento.
- El método se orienta a la solución de problemas que son seleccionados o diseñados para lograr el aprendizaje de ciertos objetivos de conocimiento.
- El aprendizaje se centra en el alumno y no en el profesor o sólo en los contenidos.
- Es un método que estimula el trabajo cooperativo en diferentes disciplinas, se trabaja en grupos pequeños.
- Los cursos con este modelo de trabajo se abren a diferentes disciplinas del conocimiento.
- El maestro se convierte en un facilitador o tutor del aprendizaje.

Al implementar el ABP la actividad gira en torno a la discusión de un problema y el aprendizaje surge de la experiencia de trabajar sobre ese problema, es un método que estimula el autoaprendizaje y permite la práctica del estudiante al enfrentarlo a situaciones reales y a identificar sus deficiencias de conocimiento.

### **2.2.2 Objetivos del Aprendizaje Basado en Problemas**

El ABP busca un desarrollo integral en los alumnos y conjuga la adquisición de conocimientos propios de la especialidad de estudio, además de habilidades, actitudes y valores. Se pueden señalar los siguientes objetivos del ABP, (ITESM,1999)

- Promover en el alumno la responsabilidad de su propio aprendizaje.
- Desarrollar una base de conocimiento relevante caracterizada por profundidad y flexibilidad.
- Desarrollar habilidades para la evaluación crítica y la adquisición de nuevos conocimientos con un compromiso de aprendizaje de por vida.
- Desarrollar habilidades para las relaciones interpersonales.
- Involucrar al alumno en un reto (problema, situación o tarea) con iniciativa y entusiasmo.
- Desarrollar el razonamiento eficaz y creativo de acuerdo a una base de conocimiento integrada y flexible.
- Monitorear la existencia de objetivos de aprendizaje adecuados al nivel de desarrollo de los alumnos.
- Orientar la falta de conocimiento y habilidades de manera eficiente y eficaz hacia la búsqueda de la mejora.
- Estimular el desarrollo del sentido de colaboración como un miembro de un equipo para alcanzar una meta común.

### 2.2.3 Diferencias del ABP con los modelos tradicionales

En el cuadro 2.1 se señalan algunas diferencias importantes entre el proceso de aprendizaje tradicional y el proceso de aprendizaje en el ABP

**Tabla 2.1**  
**Comparación del aprendizaje tradicional con el ABP**

Proceso de aprendizaje tradicional	Aprendizaje Basado en Problemas
El profesor asume el rol de experto o autoridad formal.	Los profesores tienen el rol de facilitador, tutor, guía, coaprendiz, mentor o asesor.
Los profesores transmiten la información a los alumnos.	Los alumnos toman la responsabilidad de aprender y crear alianzas entre alumno y profesor.
Los profesores organizan el contenido en exposiciones de acuerdo a su disciplina.	Los profesores diseñan su curso basado en problemas abiertos.  Los profesores incrementan la motivación de los estudiantes presentando problemas reales.
Los alumnos son vistos como "recipientes vacíos" o receptores pasivos de información.	Los profesores buscan mejorar la iniciativa de los alumnos y motivarlos.  Los alumnos son vistos como sujetos que pueden aprender por cuenta propia.
Las exposiciones del profesor son basadas en comunicación unidireccional; la información es transmitida a un grupo de alumnos.	Los alumnos trabajan en equipos para resolver problemas, adquieren y aplican el conocimiento en una variedad de contextos.  Los alumnos localizan recursos y los profesores los guían en este proceso.
Los alumnos trabajan por separado.	Los alumnos conformados en pequeños grupos interactúan con los profesores quienes les ofrecen retroalimentación.
Los alumnos absorben, transcriben, memorizan y repiten la información para actividades específicas como pruebas o exámenes.	Los alumnos participan activamente en la resolución del problema, identifican necesidades de aprendizaje, investigan, aprenden, aplican y resuelven problemas.
El aprendizaje es individual y de competencia.	Los alumnos experimentan el aprendizaje en un ambiente cooperativo.

Fuente: "Traditional versus PBL Classroom". <http://www.samford.edu/pbl/what3.html>. (16 de Junio 1999).

En la figura 2.1 se presenta un esquema de los pasos del proceso de aprendizaje convencional comparados con el Aprendizaje Basado en Problemas, en el cual la meta del ABP es descubrir lo que los estudiantes necesitan aprender para enfrentar el problema presentado.

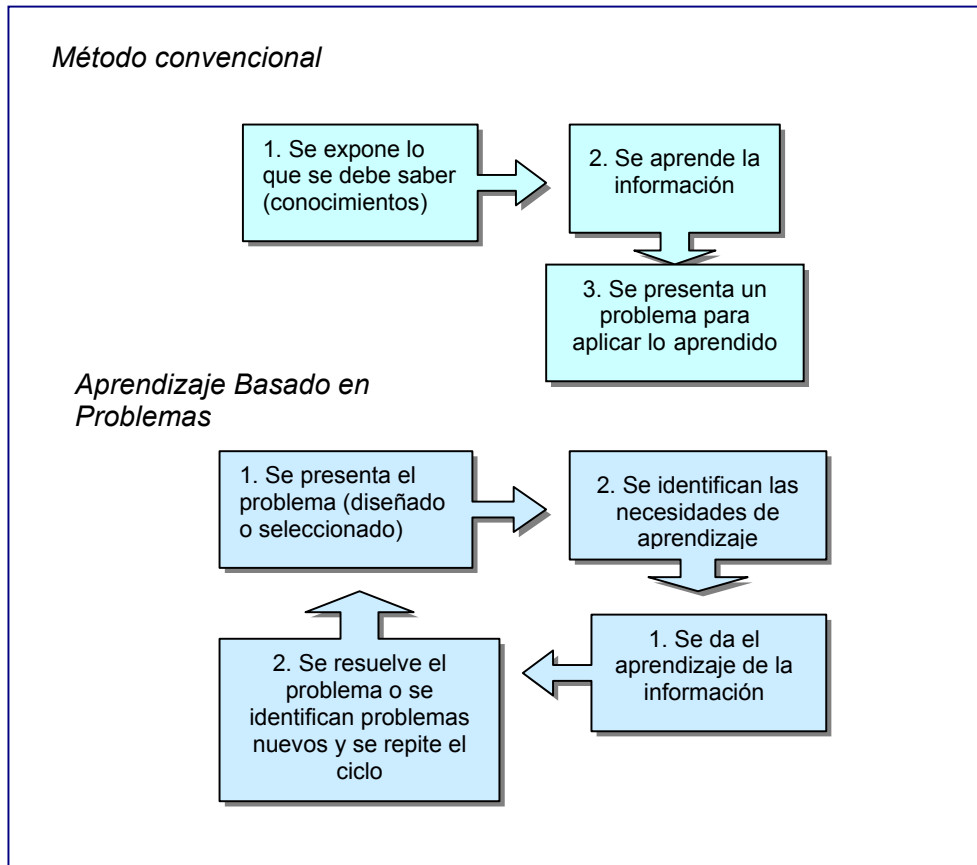


Fig. 2.1 Comparación de pasos en el proceso de aprendizaje convencional y el ABP.

Fuente: *El ABP como técnica didáctica*, Dirección de Investigación y Desarrollo Educativo, ITESM

### 2.2.4 Ventajas del Aprendizaje Basado en Problemas

Dentro de las ventajas obtenidas con la aplicación del método de Aprendizaje Basado en Problemas se pueden citar:

- ❖ *Alumnos con mayor motivación:* El método estimula que los alumnos se involucren más en el aprendizaje debido a que sienten que tienen la posibilidad de interactuar con la realidad y observar los resultados de dicha interacción.
- ❖ *Un aprendizaje más significativo:* El ABP ofrece a los alumnos una respuesta obvia a preguntas como ¿Para qué se requiere aprender cierta información?, ¿Cómo se relaciona lo que se hace y aprende con lo que pasa en la realidad?
- ❖ *Desarrollo de habilidades de pensamiento:* La misma dinámica del proceso en el ABP y el enfrentarse a problemas lleva a los alumnos hacia un pensamiento crítico y creativo.
- ❖ *Desarrollo de habilidades para el aprendizaje:* El ABP promueve la observación sobre el propio proceso de aprendizaje, los alumnos también evalúan su aprendizaje ya que generan sus propias estrategias para la definición del problema, recaudación de información, análisis de datos, la construcción de hipótesis y la evaluación.
- ❖ *Integración de un modelo de trabajo:* El ABP lleva a los alumnos al aprendizaje de los contenidos de información de manera similar a la que utilizarán en situaciones futuras, fomentando que lo aprendido se comprenda y no sólo se memorice.
- ❖ *Posibilita mayor retención de información:* Al enfrentar situaciones de la realidad los alumnos recuerdan con mayor facilidad la información ya que ésta es más significativa para ellos.
- ❖ *Permite la integración del conocimiento:* El conocimiento de diferentes disciplinas se integra para dar solución al problema sobre el cual se está trabajando, de tal modo que el aprendizaje no se da sólo en fracciones sino de una manera integral y dinámica.
- ❖ *Las habilidades que se desarrollan son perdurables:* Al estimular habilidades de estudio autodirigido, los alumnos mejorarán su capacidad para estudiar e investigar sin ayuda de nadie para afrontar cualquier obstáculo, tanto de orden teórico como práctico, a lo largo de su vida. Los alumnos aprenden resolviendo o analizando problemas del mundo real y aprenden a aplicar los conocimientos adquiridos a lo largo de su vida en problemas reales.

- ❖ *Incremento de su autodirección:* Los alumnos asumen la responsabilidad de su aprendizaje, seleccionan los recursos de investigación que requieren: libros, revistas, bancos de información, etc.
- ❖ *Mejoramiento de comprensión y desarrollo de habilidades:* Con el uso de problemas de la vida real, se incrementan los niveles de comprensión, permitiendo utilizar su conocimiento y habilidades.
- ❖ *Habilidades interpersonales y de trabajo en equipo:* El ABP promueve la interacción incrementando algunas habilidades como; trabajo de dinámica de grupos, evaluación de compañeros y cómo presentar y defender sus trabajos.
- ❖ *Actitud automotivada:* Los problemas en el alumno incrementan su atención y motivación. Es una manera más natural de aprender. Les ayuda a continuar con su aprendizaje al salir de la escuela.

### **2.3 Aplicación del Aprendizaje Basado en Problemas en la Simulación de procesos.**

Para lograr la incorporación de la simulación de procesos en las áreas desarrolladas y aprovechar la potencialidad de ésta herramienta como recurso didáctico, se basa en plantearse la metodología del Aprendizaje Basado en Problemas.

Para iniciar la aplicación del estudio de la simulación como estrategia de apoyo al proceso de enseñanza-aprendizaje se requieren ciertas condiciones o ajustes en los modelos educativos, así como en la relación docente-alumno, tal como se describen a continuación:

- Cambiar el énfasis del programa de enseñanza-aprendizaje, requiriendo que los alumnos sean activos, independientes, con auto-dirección en su aprendizaje y orientados a la solución de problemas en lugar de ser los tradicionales receptores pasivos de información.
- Enfatizar el desarrollo de actitudes y habilidades que busquen la adquisición activa de nuevo conocimiento y no sólo la memorización del conocimiento existente.
- Generar un ambiente adecuado para que el grupo de participantes pueda trabajar de manera cooperadora para resolver problemas comunes en forma analítica, además promover la participación de los maestros como tutores en el proceso de discusión y en el aprendizaje.

- Estimular en los alumnos la aplicación de conocimientos adquiridos en otros cursos en la búsqueda de la solución al problema.
- Guiados por maestros fungiendo como facilitadores del aprendizaje, desarrollando en los alumnos el pensamiento crítico, habilidades para la solución de problemas y para la colaboración, mientras identifican problemas, formulan hipótesis, conducen la búsqueda de información, realizan experimentos y determinan la mejor manera de llegar a la solución de los problemas planteados.
- Motivar a los alumnos a disfrutar del aprendizaje estimulando su creatividad y responsabilidad en la solución de problemas que son parte de la realidad.
- Identificar y estimular el trabajo en equipo como una herramienta esencial del ABP.
- Abrir al grupo la responsabilidad de identificar y jerarquizar los temas de aprendizaje en función del diagnóstico de sus propias necesidades.
- Promover que los alumnos trabajen de manera independiente fuera del grupo investigando sobre los temas necesarios para resolver el problema, luego discutirán lo que han aprendido de manera independiente con el resto del grupo, de la misma manera los alumnos podrán pedir asistencia de maestros u otros expertos en el área sobre temas que consideren de mayor importancia para la solución del problema y el aprendizaje de los contenidos.

Lo que se busca con estas condiciones es preparar un ambiente de interacción dentro del grupo de trabajo y entre éstos y el docente de la asignatura durante el cual el proceso de desarrollo sea dirigido hacia el modelamiento y simulación del fenómeno o proceso.

Debido a que el eje del trabajo en el ABP y la Simulación de procesos está en el planteamiento del problema, los alumnos se sentirán más involucrados y con mayor compromiso en la medida en que identifican al problema como un reto y una posibilidad de aprendizaje propio, el diseño y selección de los problemas a solucionar mediante la simulación del proceso deben de constituirse de ciertas características que permitan el buen desarrollo de esta metodología de aprendizaje y los resultados esperados.

Las características esenciales de los problemas en el ABP se presentan a continuación, (Duch, 1999)

- El diseño del problema debe, comprometer el interés de los alumnos y motivarlos a examinar de manera profunda los conceptos y objetivos que se quieren aprender. El problema debe estar en relación con los objetivos del curso y con problemas o situaciones de la vida diaria para que los alumnos encuentren mayor sentido en el trabajo que realizan.
- Los problemas deben llevar a los alumnos a tomar decisiones o hacer juicios basados en hechos, información lógica y fundamentada. Están obligados a justificar sus decisiones y razonamiento en los objetivos de aprendizaje del curso. Los problemas o las situaciones deben requerir que los estudiantes definan qué suposiciones son necesarias y por qué, qué información es relevante y qué pasos o procedimientos son necesarios con el propósito de resolver el problema.
- La cooperación de todos los integrantes del grupo de trabajo es necesaria para poder abordar el problema de manera eficiente. La longitud y complejidad del problema debe ser administrada por el tutor de tal modo que los alumnos no se dividan el trabajo y cada uno se ocupe únicamente de su parte.
- Las preguntas de inicio del problema deben lograr que los alumnos se interesen y entren a la discusión del tema. De este modo se mantiene a los estudiantes trabajando como un grupo y sacando las ideas y el conocimiento de todos los integrantes y evitando que cada uno trabaje de manera individual.
- El contenido de los objetivos del curso debe ser incorporado en el diseño de los problemas, conectando el conocimiento anterior a nuevos conceptos y ligando nuevos conocimientos a conceptos de otros cursos o disciplinas.
- Los problemas deben estar diseñados para motivar la búsqueda independiente de la información a través de todos los medios disponibles para el alumno y además generar discusión en el grupo.
- En la situación del trabajo del grupo ante el problema, el mismo diseño del problema debe estimular que los alumnos utilicen el conocimiento previamente adquirido, en este proceso los alumnos aprenden a aprender, por lo tanto desarrollan la capacidad de aplicar el pensamiento sistémico para resolver las nuevas situaciones que se le presentarán a lo largo de su vida.



Al momento de enfrentarse los alumnos con el problema planteado bajo la metodología de Aprendizaje Basado en Problemas, deberán estar guiados por las siguientes recomendaciones a seguir para cada una de las etapas que consta el modelamiento y simulación del proceso:

1. *Leer y analizar el escenario en el que se presenta el problema:* discutir en el grupo los puntos necesarios para establecer un consenso sobre cómo se percibe dicho escenario.
2. *Identificar cuáles son los objetivos de aprendizaje* que se pretenden cubrir con el problema que el profesor - tutor les ha planteado.
3. *Identificar la información con la que se cuenta:* elaborar un listado de lo que ya se conoce sobre el tema, identificar cuál es la información que se tiene entre los diferentes miembros del grupo.
4. *Un esquema del problema:* elaborar una descripción del problema, esta descripción debe ser breve, identificando qué es lo que el grupo está tratando de resolver, reproducir, responder o encontrar de acuerdo al análisis de lo que ya se conoce, la descripción del problema debe ser revisada a cada momento en que se disponga de nueva información.
5. *Un diagnóstico situacional:* elaborar grupalmente una lista de lo que se requiere para enfrentar al problema, preparar un listado de preguntas de lo que se necesita saber para poder solucionar el problema, así como conceptos que necesitan dominarse. Este es el punto en el que el grupo está trabajando en la elaboración de su propio diagnóstico situacional en torno a los objetivos de aprendizaje y a la solución del problema.
6. *Un esquema de trabajo:* preparar un plan con posibles acciones para cubrir las necesidades de conocimiento identificadas y donde se puedan señalar las recomendaciones, soluciones o hipótesis. Es pertinente elaborar un esquema que señale las posibles opciones para llegar a cubrir los objetivos de aprendizaje y la solución del problema.
7. *Recopilar información:* El equipo busca información en todas las fuentes pertinentes para cubrir los objetivos de aprendizaje y resolver el problema.

8. *Analizar la información:* Trabajando en el grupo se analiza la información recopilada, se buscan opciones y posibilidades y, se replantea la necesidad de tener más información para solucionar el problema, en caso de ser necesario el grupo se dedica a buscar más información.
9. *Plantearse los resultados:* A manera de ejercicio para el grupo es importante que preparen un reporte en donde se hagan recomendaciones, estimaciones sobre resultados, inferencias u otras resoluciones apropiadas al problema, todo lo anterior debe estar basado en los datos obtenidos y en los antecedentes. Todo el grupo debe participar en este proceso de tal modo que cada miembro tenga la capacidad de responder a cualquier duda sobre los resultados.
10. *Retroalimentar:* el proceso de retroalimentación debe ser constante a lo largo de todo el proceso de trabajo del grupo, de tal manera que sirva de estímulo a la mejora y desarrollo del proceso, se recomienda al final de cada sesión dejar un espacio de tiempo para la retroalimentación grupal.
11. *La evolución del grupo:* el trabajo del grupo continuará y en esa medida el aprendizaje, tanto en relación con los contenidos como en relación con la interacción de los miembros con el grupo, por lo tanto se recomienda establecer, con base en una primera experiencia, indicadores para el monitoreo del desempeño del grupo.

Los pasos recomendados deben revisarse en cada ocasión en la que se afrontará un problema, ya que cada momento de desarrollo del grupo y situación presentada es diferente. Así también permitirá una mejor comprensión del fenómeno que se da en el proceso y de toda una serie de teoría en que se fundamenta, que no sólo se quedará a nivel de memoria, sino también en análisis y aplicación a casos reales.

### Capítulo 3

#### Desarrollo de módulo de simulación de procesos en Termodinámica Clásica

El módulo de simulación de procesos correspondiente al área de Termodinámica Clásica comprende los siguientes programas de simulación:

- ✚ Simulación de una Planta de Potencia de Vapor
- ✚ Simulación de un Sistema de Refrigeración por Absorción de Amoníaco.

Los cuales se desarrollan a continuación:

#### 3.1 Simulación de una planta de potencia de vapor.

##### 3.1.1 Principios básicos del proceso

Una planta de potencia de vapor opera en un ciclo termodinámico de Carnot, esta es considerada como una máquina térmica a gran escala en la que el fluido de trabajo (agua) se encuentra fluyendo continuamente, en estado uniforme, sucesivamente a través de una bomba, una caldera, una turbina y condensador para que finalmente regrese a su estado inicial.

El ciclo ideal (o básico) utilizado es el cual opera reversiblemente y consiste en dos etapas isotérmicas conectadas mediante dos etapas adiabáticas. En la etapa isotérmica a temperatura más elevada,  $T_H$ , el calor  $|Q_H|$  es absorbido por el fluido de trabajo de la máquina, mientras que en la etapa isotérmica a temperatura más baja,  $T_C$ , el calor  $|Q_C|$  es desechado por el fluido. El trabajo producido es  $|W| = |Q_H| - |Q_C|$ , y la eficiencia térmica del ciclo de Carnot está dado por la ecuación:

$$\eta = \frac{|W|}{|Q_H|} = 1 - \frac{T_C}{T_H}, \quad \text{ec. 3.1}$$

Aquí puede observarse que,  $\eta$  aumenta al incrementarse  $T_H$  y al decrecer  $T_C$ , así también al aumentar la temperatura promedio a la cual el calor es absorbido y cuando disminuye la temperatura promedio a la cual el calor es expulsado.

En la figura 3.1 se muestra un proceso de flujo continuo en estado estable simple, en el cual el vapor que es generado en una caldera se expande en una turbina adiabática para producir trabajo. La descarga de la corriente de la turbina pasa a un condensador, del cual es bombeada adiabáticamente de regreso a la caldera.

La energía producida por la turbina es mucho mayor que la requerida por la bomba, y el egreso neto de energía es igual a la diferencia entre la velocidad de ingreso de calor en la caldera  $|\dot{Q}_H|$  y la velocidad de expulsión de calor en el condensador  $|\dot{Q}_C|$ , (Van Ness, 1997).

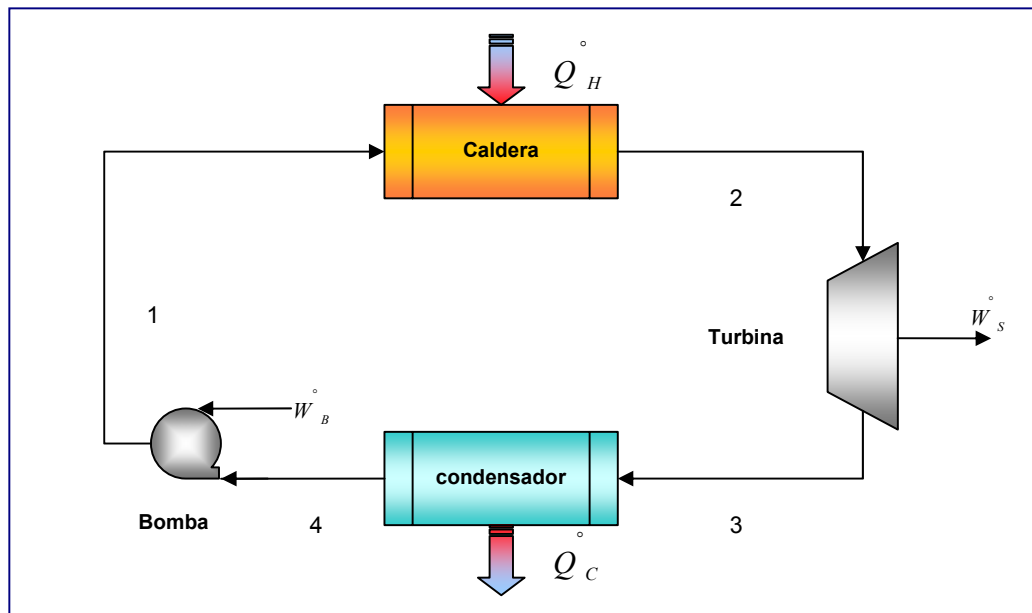


Fig. 3.1 Planta de energía de vapor simple

Fuente: Van Ness, 1997

Los cambios de propiedades del fluido a medida que fluye a través de las piezas individuales del equipo se pueden mostrar como líneas en un diagrama  $TS^1$ , como se presenta en la figura 3.2. La secuencia de líneas representa el ciclo de *Carnot*. En esta idealización la etapa 1→2 es la absorción isotérmica de calor a  $T_H$ , y se representa por una línea horizontal en el diagrama  $TS$ . Este proceso de vaporización, también se efectúa a presión constante y produce una corriente de vapor saturado a partir de agua líquida saturada. La etapa 2 →3 es una expansión adiabática, reversible, de vapor saturado hasta una presión a la cual  $T^{\text{sat}}=T_c$ . Este proceso de expansión isentrópica está representado por una línea vertical en el diagrama  $TS$  y produce un vapor que está húmedo; la etapa 3 →4 es el desprendimiento isotérmico de calor a la temperatura  $T_c$ , y esta representado por la línea horizontal en el diagrama  $TS$ , es un proceso de condensación, pero es incompleto.

<sup>1</sup> Diagrama  $TS$ : Temperatura ( $T$ ) vrs. Entropía ( $S$ )

La etapa  $4 \rightarrow 1$  lleva el ciclo de nuevo a su origen, produciendo agua líquida saturada en el punto 1, es un proceso de compresión isentrópica representado por una línea vertical en el diagrama  $TS$ , (Van Ness, 1997).

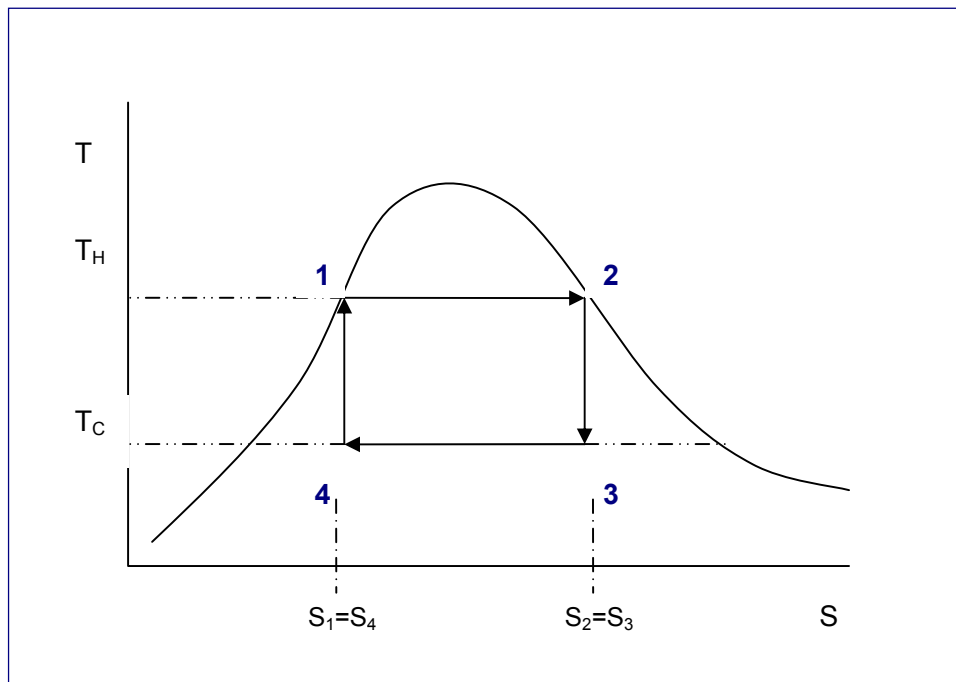


Fig. 3.2 Ciclo de Carnot en un diagrama  $TS$

Fuente: Van Ness, 1997

Existen severas dificultades prácticas en la operación del equipo que pretende realizar las etapas  $2 \rightarrow 3$  y  $4 \rightarrow 1$ , dado que las turbinas que reciben vapor saturado producen una emisión con alto contenido líquido, lo cual causa graves problemas de corrosión. Aún más difícil es el diseño de una bomba que recibe una mezcla de líquido y vapor (punto 4) y descarga líquido saturado (punto 1), (Van Ness, 1997).

Dadas estas dificultades ha sido diseñado un modelo de ciclo alternativo con el que es posible operar una planta de potencia y facilita el diseño y operación de equipo para tales propósitos, este ciclo corresponde al ciclo *Rankine*, el cual difiere respecto al ciclo de Carnot en los siguientes aspectos:

La etapa de calentamiento 1 →2 se lleva a cabo más allá de la vaporización para producir vapor sobrecalentado y, también la etapa de enfriamiento 3 →4 lleva a cabo una condensación completa, produciendo líquido saturado para ser bombeado a la caldera.

El ciclo de Rankine en las cuatro etapas mostradas en la fig. 3.3, las cuales se describen a continuación, (Van Ness, 1997)

**1→2:** Un proceso de calentamiento a presión constante en una caldera. La etapa queda a lo largo de una isobara (la presión de la caldera), y consiste en tres secciones: calentamiento de agua líquida subenfriada hasta su temperatura de saturación, vaporización a temperaturas y presión constantes y sobrecalentamiento del vapor a una temperatura definidamente superior a su temperatura de saturación.

**2→3:** Expansión (isentrópica) reversible y adiabática de vapor en una turbina hasta la presión del condensador. La etapa cruza normalmente la curva de saturación, produciendo una descarga húmeda. Sin embargo el sobrecalentamiento logrado en la etapa 1 →2 corre la línea vertical suficientemente lejos a la derecha en la figura 3.3 como para que el contenido en humedad no sea demasiado grande.

**3→4:** Un proceso a presión y a temperaturas constantes en un condensador para producir líquido saturado en el punto 4.

**4→1:** Bombeo isentrópico, reversible y adiabático del líquido saturado a la presión de la caldera, produciendo líquido subenfriado. La línea vertical es muy corta, debido a que el aumento de temperatura asociado con la compresión de un líquido es pequeño.

Las plantas de energía se pueden construir para que operen en un ciclo que parte del ciclo de Rankine solamente debido a las irreversibilidades de las etapas que producen y requieren trabajo, (Van Ness, H, Cap. 8, 1997).

El rendimiento del ciclo Rankine es dependiente de la temperatura promedio a la cual se añade el calor, y de la temperatura promedio a la cual el calor es cedido, por lo tanto cualquier cambio que aumente la temperatura promedio a la cual el calor se suministra o que disminuya la temperatura promedio a la cual el calor es cedido, incrementará el rendimiento del ciclo Rankine.

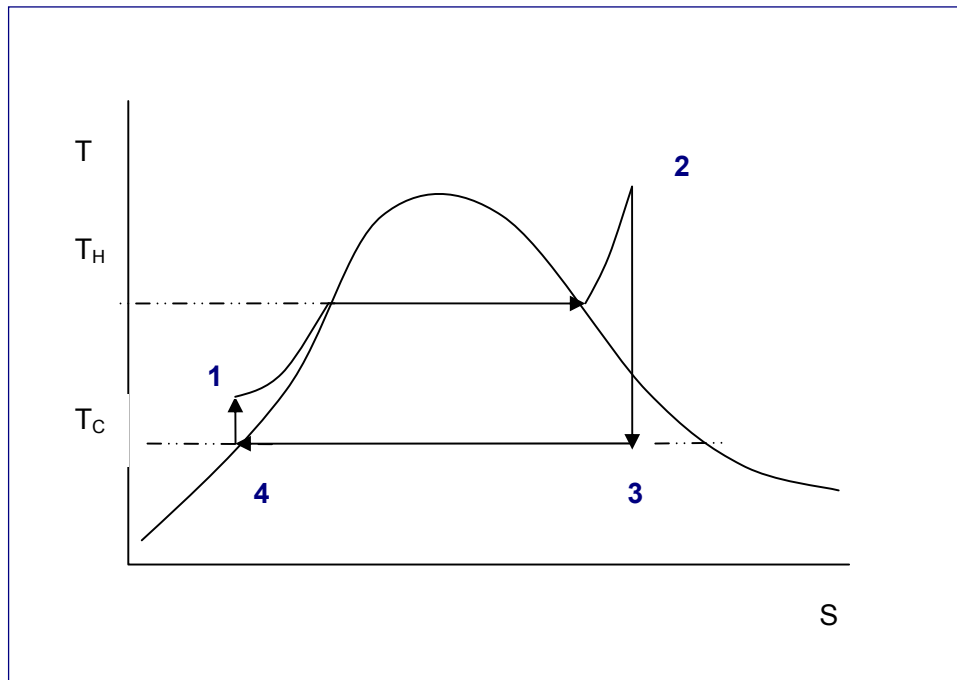


Fig. 3.2 Ciclo de Rankine en un diagrama TS

Fuente: Van Ness, 1997

Dado que la eficiencia térmica de un ciclo de energía de vapor puede ser incrementada al elevar la presión y, por tanto, la temperatura de vaporización de la caldera, así como también existe el factor de sobrecalentamiento en la caldera, por lo tanto las presiones y temperaturas elevadas en la caldera favorecen las eficiencias. Sin embargo para condiciones de temperaturas y presiones elevadas de operación de las plantas de potencia posee sus limitantes, tanto económicas como de construcción más pesada.

De igual forma la eficiencia térmica puede aumentarse a medida que la presión y la temperatura de condensación son reducidas en el condensador, la cual debe ser al mismo tiempo superior a la temperatura del medio de enfriamiento, que usualmente es agua, las plantas de potencia buscan operar con una presión en el condensador tan bajo como sea posible.

Las plantas de potencia más modernas operan con una modificación del ciclo de Rankine, que incorpora calentadores del agua de alimentación. El agua proveniente del condensador, en lugar de ser bombeada directamente de regreso a la caldera, primero se calienta con vapor extraído de la turbina. Esto se hace normalmente en diversas etapas, con vapor tomado de la turbina a varios estados intermedios de la expansión, (Van Ness, 1997).

En la figura 3.3 se muestra una disposición con cuatro calentadores del agua de alimentación.

Las condiciones de operación de esta figura serán descritas a continuación, (Van Ness, 1997). de las cuales son la base para el desarrollo de la Simulación de una Planta de Potencia de Vapor correspondiente al módulo de Termodinámica Clásica.

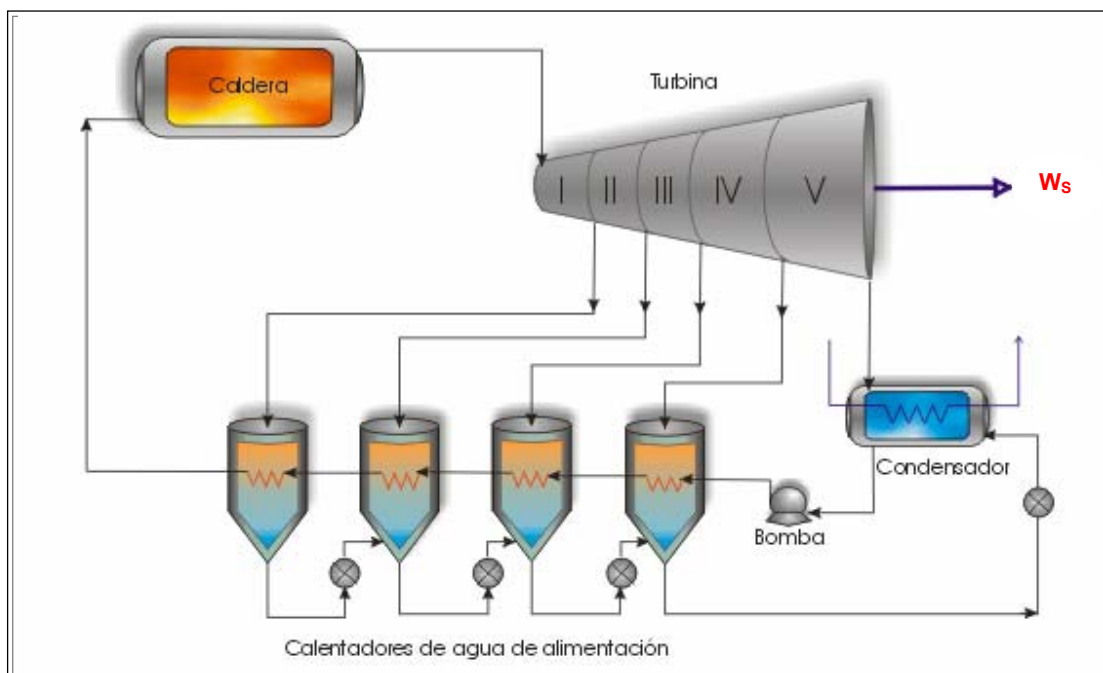


Figura 3.3 Planta de energía de vapor con calentamiento del agua de alimentación

Fuente: Van Ness, 1997



### **3.1.2 Planteamiento del problema**

En el proceso representado en la figura 3.3, las condiciones de operación de la caldera son 8,600 kPa y 500 °C y la presión de descarga de la turbina, 10 kPa. El condensador produce un ligero enfriamiento del condensado, fijando la temperatura del agua líquida del condensador a 45 °C. La bomba del agua de alimentación causa un ligero aumento de temperatura de 1 °C, haciendo que la temperatura del agua de alimentación que entra a la serie de calentadores sea de 46 °C.

Se ha especificado la temperatura para la corriente de alimentación que entra a la caldera de 226 °C, así también los cuatro calentadores del agua de alimentación alcanzan el mismo incremento de temperatura.

El vapor suministrado a un calentador del agua de alimentación debe estar a una presión suficientemente elevada para que su temperatura de saturación sea más alta que la temperatura de la corriente del agua de alimentación que sale del calentador.

El condensado de cada calentador del agua de alimentación se lanza a través de una válvula de estrangulamiento al calentador que tiene la siguiente presión más baja, y el condensado que se recolecta en el calentador final de la serie se lanza dentro del condensador. Así todo el condensado regresa del condensador a la caldera por vía de los calentadores del agua de alimentación.

El propósito de calentar de ésta forma el agua de alimentación es elevar la temperatura promedio a la cual el calor se añade a la caldera, lo que eleva la eficiencia térmica de la planta, operando por tanto bajo un ciclo de regeneración.

Se desea conocer las condiciones termodinámicas a la salida de cada sección de la turbina, así como su aporte de trabajo de eje, también conocer la cantidad de vapor extraído en cada sección que pasa a través de cada calentador, la eficiencia térmica del ciclo, la velocidad del vapor a la turbina, la velocidad de transferencia de calor en la caldera y al agua de enfriamiento en el condensador, incógnitas a las cuales debe dar respuesta la simulación de este proceso.

### 3.1.3 Definición de variables

Identificando las variables del proceso en estudio, podemos clasificarlas en:

1. Variables de diseño
2. Parámetros de operación
  - a. Variables de entrada
  - b. Variables de proceso
  - c. Variables de salida

#### ➤ Variables de diseño

Las variables de diseño corresponden a especificaciones de los equipos involucrados en el proceso, las cuales pueden variarse sólo modificando el equipo; para este proceso se identifican las siguientes variables de diseño:

Tabla 3.1

Variables de diseño en Simulación de Planta de Potencia de Vapor

Variable	Descripción
Nt	Eficiencia térmica de la turbina
Nb	Eficiencia de la bomba

#### ➤ Parámetros de operación

Las variables o parámetros de operación son las que pueden ser modificadas de acuerdo a los requerimientos o capacidades del proceso. En el proceso se identifican:

##### a. Variables de entrada

Tabla 3.2

Variables de entrada en Simulación de Planta de Potencia de Vapor

Variable	Descripción
Po	Presión del vapor en la caldera
P <sub>i+1</sub>	Presión a la salida de la sección <i>i</i> de la turbina
Te	Temperatura a la entrada de la caldera
To	Temperatura a la salida de la caldera
F	Alimentación a la turbina
POT	Producción de energía por la planta (Potencia o trabajo neto)

b. *VARIABLES DE PROCESO*

Tabla 3.3

Variables de proceso en Simulación de Planta de Potencia de Vapor

Variable	Descripción
$H_i, S_i, T_i$	Entalpía, Entropía y Temperatura, respectivamente, a la entrada de una sección $i$ de turbina
$H_{i+1}, S_{i+1}, T_{i+1}$	Entalpía, Entropía y Temperatura, respectivamente, a la salida de una sección $i$ de turbina
$TL_i, HL_i$	Temperatura y entalpía a la entrada del calentador $i$ de agua de alimentación
$TL_{i+1}, HL_{i+1}$	Temperatura y entalpía a la salida del calentador $i$ de agua de alimentación
LC	Flujo de líquido comprimido a través de la serie de calentadores de agua.
DHs	Cambio de entalpía a entropía constante en una sección de turbina
$W_i$	Trabajo real producido por una sección $i$ de turbina
$m_i$	Kg. de vapor extraído en la sección $i$ de la turbina
$f_i$	Kg. de vapor alimentados a la sección $i+1$ de la turbina

c. *VARIABLES DE SALIDA*

Tabla 3.2

Variables de entrada en Simulación de Planta de Potencia de Vapor

Variable	Descripción
n	Eficiencia térmica del ciclo completo
$W_t$	Trabajo total producido por el ciclo
Q	Calor proporcionado en la caldera
$m_o$	Velocidad del vapor a la turbina
Qcal	Velocidad de transferencia de calor en la caldera
Qcon	Velocidad de transferencia de calor al agua en enfriamiento en el condensador

## 3.1.4 Modelamiento del proceso

Como fue descrito en el Capítulo 1, para llevar a cabo la simulación de un proceso es necesario crear un modelo que permita estudiar y prever el comportamiento que tendrá dicho proceso, a fin de poder evaluar el comportamiento del mismo ante determinadas condiciones, por tanto para la Simulación de la Planta de Potencia de Vapor se establecerá el modelamiento del proceso que lo represente, desarrollando cada modelo acorde a éste proceso específico.

Tal como se muestra en la Fig 3.3 se identifican las siguientes unidades de proceso:

1. Caldera
2. Turbina
3. Calentador
4. Condensador
5. Bomba

#### 1. Modelamiento de caldera

El modelamiento de la caldera deberá dar como resultado el calor proporcionado para elevar la temperatura del agua de 226 °C a 500 °C transformando el líquido comprimido a vapor sobrecalentado en un proceso a presión constante.

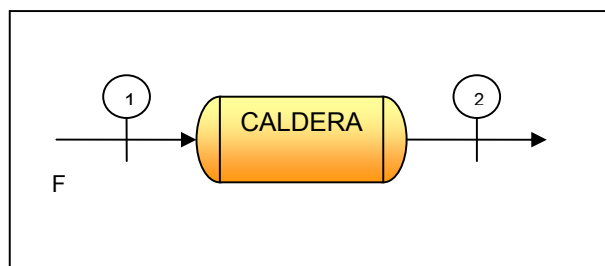


Fig. 3.4 Unidad de proceso: Caldera

Fuente: Construcción propia

Para un proceso a presión constante, el calor proporcionado en la caldera será:

Balance de energía:

$$Q = \Delta H_p = F (\hat{H}_2 - \hat{H}_1) \quad \text{ec. 3.2}$$

Relaciones termodinámicas:

$$\hat{H}_1 = \hat{H} \quad \text{Entalpía Líquido comprimido } (T_1, P_1)$$

$$\hat{H}_2 = \hat{H} \quad \text{Entalpía Vapor sobrecalentado } (T_2, P_2)$$

$$P_1 = P_2 = \text{Presión constante} = \text{proceso isobárico}$$

## 2. Modelamiento de turbina

La unidad de proceso correspondiente a la turbina, está constituido por 5 secciones, de distintas presiones (de mayor a menor presión) y con la misma eficiencia, en la cual cada una porción del vapor exhausto se destina a un calentador y la otra porción a siguiente sección de turbina, produciendo su respectivo trabajo de potencia individual.

El proceso de generación de potencia en la turbina corresponde a una expansión isentrópica (Entropía constante), involucrada su correspondiente eficiencia térmica, es determinado el trabajo real producido y las condiciones del vapor a la salida de cada sección de turbina.

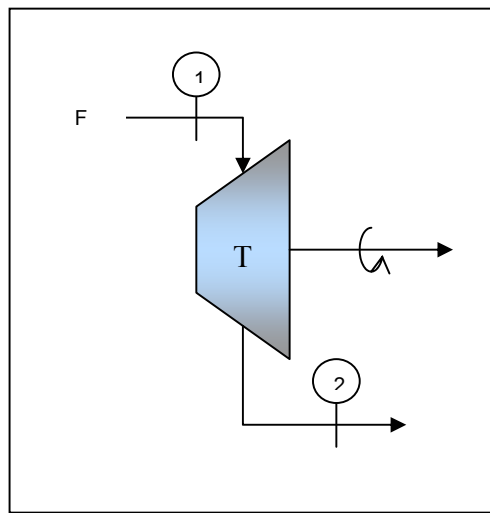


Fig. 3.5 Unidad de proceso: Turbina

Fuente: Construcción propia

Para un proceso isentrópico (entropía constante), el balance de energía en la turbina es:

$$(\Delta H_s) = F(\hat{H}_2 - \hat{H}_1)_s \quad \text{ec. 3.3}$$

El cambio de entalpía real es:

$$\Delta H = \eta_t (\Delta H_s) \quad \text{ec. 3.4}$$

el trabajo para la sección  $i$  de turbina, es:

$$W_{S_i} = \Delta H \quad \text{ec. 3.5}$$

el valor de la entalpía a la salida de la turbina es entonces:

$$H_2 = H_1 + \Delta H \quad \text{ec. 3.6}$$

Relaciones termodinámicas:

$$\hat{H}_1 = \hat{H} \text{ Entalpía Vapor sobre calentado } (T_1, P_1)$$

$$\hat{H}_2 = \hat{H} \text{ Entalpía Vapor sobre calentado, saturado ó húmedo } (H_1, \Delta H)$$

a condiciones ideales:

$$S_2 = S_1$$

y bajo condiciones reales:

$$S_2 = S (P_2, H_2) \quad \text{donde } H_2 = H(H_1, \Delta H)$$

$$T_2 = T (P_2, H_2)$$

### 3. Modelamiento del calentador

El calentador es utilizado para recuperar parte de la energía a la salida de cada sección de turbina para precalentar el agua de alimentación a la caldera. El modelamiento para esta unidad de proceso es la siguiente:

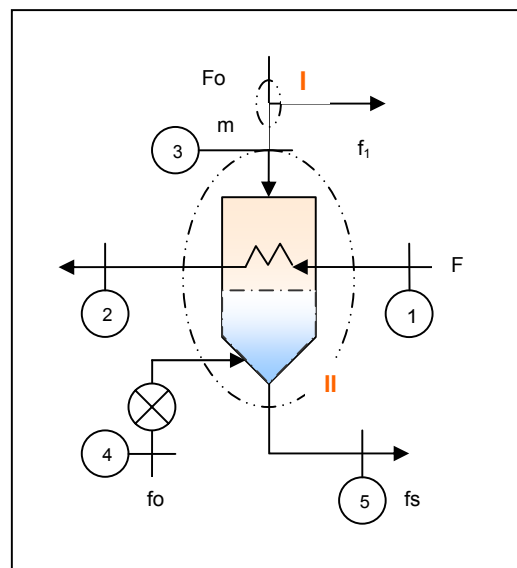


Fig. 3.7 Unidad de proceso: Calentador

Fuente: Construcción propia

Balance de materia en el sistema I:

$$F_o = f_1 + m$$

ec. 3.7

Balance de materia en el sistema II:

$$f_o + m = f_s \quad \text{ec. 3.8}$$

Balance de energía en el sistema II:

de la ecuación de balance de energía:

$$\sum m_S \hat{H}_S - \sum m_E \hat{H}_E = 0 \quad \text{ec. 3.9}$$

para el sistema II:

$$(f_S \hat{H}_S + F \hat{H}_2) - (m \hat{H}_3 + F \hat{H}_1 + f_o \hat{H}_4) = 0 \quad \text{ec. 3.10}$$

sustituyendo la ec. 3.8 en la ec. 3.10, y despejando para "m", el vapor extraído de la turbina hacia el calentador, se obtiene:

$$m = \frac{F(\hat{H}_1 - \hat{H}_2) - f_o(\hat{H}_4 - \hat{H}_5)}{\hat{H}_5 - \hat{H}_3} \quad \text{ec. 3.11}$$

Relaciones termodinámicas:

$$\hat{H}_1 = \hat{H} \quad \text{Entalpía líquido comprimido } (T_1, P_1 = 8600 \text{ kPa})$$

$$\hat{H}_2 = \hat{H} \quad \text{Entalpía líquido comprimido } (T_2, P_1 = 8600 \text{ kPa})$$

$$\hat{H}_3 = \hat{H} \quad \text{Entalpía vapor sobrecalentado, saturado o húmedo } (T_3, P_3)$$

$$\hat{H}_4 = \hat{H} \quad \text{Entalpía líquido saturado } (T_4, P_{\text{sat}})$$

$$\hat{H}_5 = \hat{H} \quad \text{Entalpía líquido saturado } (T_5, P_{\text{sat}})$$

#### 4. Modelamiento del condensador

El condensador recibe el vapor exhausto de la última sección de la turbina, así como el total de líquido saturado obtenido en la serie de calentadores.

El modelamiento del condensador es el siguiente:

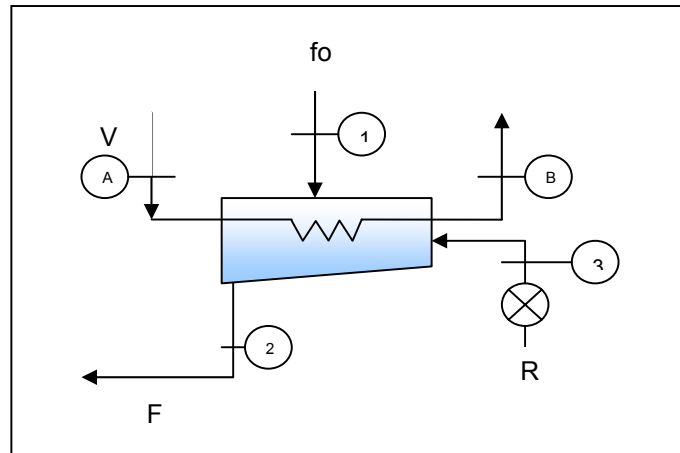


Fig. 3.8 Unidad de proceso: Condensador

Fuente: Construcción propia

El balance de materia resulta:

$$F = fo + R \quad \text{ec. 3.12}$$

De la ecuación de balance de energía:

$$\sum m_S \hat{H}_S - \sum m_E \hat{H}_E = 0 \quad \text{(ec. 3.9)}$$

el balance de energía en el condensador es:

$$(V \hat{H}_B + F \hat{H}_2) - (fo \hat{H}_1 + R \hat{H}_R + V \hat{H}_A) = 0 \quad \text{ec.3.13}$$

despejando para el flujo de agua de enfriamiento "V":

$$V = \frac{fo \hat{H}_1 + R \hat{H}_R - F \hat{H}_2}{\hat{H}_B - \hat{H}_A} \quad \text{ec. 3.14}$$

Relaciones termodinámicas, proceso a presión constante:

$\hat{H}_1$  = Entalpía vapor húmedo ( $P_1, T_{\text{sat}}$ ), salida de última sección de turbina

$\hat{H}_2$  = Entalpía líquido saturado ( $P_1, T_{\text{sat}}$ ), salida del condensador

$\hat{H}_3$  = Entalpía líquido saturado ( $T_3, P_{\text{sat}}$ ), salida de último calentador

$\hat{H}_A, \hat{H}_B$  = Entalpía líquido saturado ( $T_A, T_B$ , respectivamente), agua de enfriamiento.



### 5. Modelamiento de bomba

La bomba es utilizada para impulsar el agua de alimentación condensada hacia la serie de calentadores, y posteriormente a la caldera, incrementado relativamente la presión con un ligero incremento de temperatura, cambiando las condiciones de líquido saturado a líquido comprimido en un proceso isentrópico.

El modelamiento para la bomba es el siguiente:

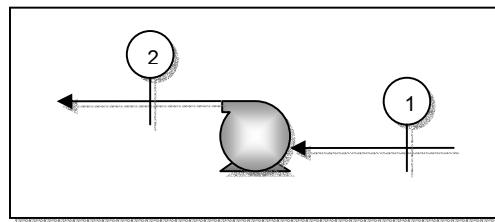


Fig 3.9 Unidad de proceso: Bomba

Fuente: Construcción propia

Para un proceso isentrópico, (entropía constante), el trabajo está dado por:

$$W_S = (\Delta H)_S = - \int_{P_a}^{P_2} V dP \quad \text{ec. 3.15}$$

Integrando:

$$W_S = (\Delta H)_S = - V (P_2 - P_1) \quad \text{ec. 3.16}$$

donde V = Volumen específico del agua.

El cambio de entalpía es:

$$\Delta H = \frac{(\Delta H)_S}{\eta_B} \quad \text{ec. 3.17}$$

El cambio de temperatura que se experimenta en la bomba viene dado por:

$$\Delta H = C_p \Delta T + V(1 - \beta T) \Delta P \quad \text{ec. 3.18}$$

donde:  $\beta$  = coeficiente de expansividad volumétrica.

$C_p$  = capacidad calorífica a presión constante

También, es posible determinar el cambio de temperatura mediante un proceso iterativo de acuerdo a la siguiente relación:

$$\Delta H = \hat{H}_2 - \hat{H}_1 \quad \text{ec. 3.19}$$

$\hat{H}_1$  = Entalpía del líquido saturado a  $T_1$  y  $P_1$

$\hat{H}_2$  = Entalpía del líquido comprimido a  $T_2$  y  $P_2$

donde  $T_1$ ,  $P_1$  y  $P_2$ , son conocidos

y dado que  $\Delta H$  puede determinarse por medio de las ecs. 3.16 y 3.17, se busca la  $\hat{H}_2$  que cumpla la ecuación 3.19 y por tanto su correspondiente  $T_2$ , y con este valor:  $\Delta T = T_2 - T_1$ .

### 3.1.5 Desarrollo algorítmico

La identificación de unidades de proceso y corrientes de flujo para la Planta de potencia de vapor presentado en la fig. 3.3 es:

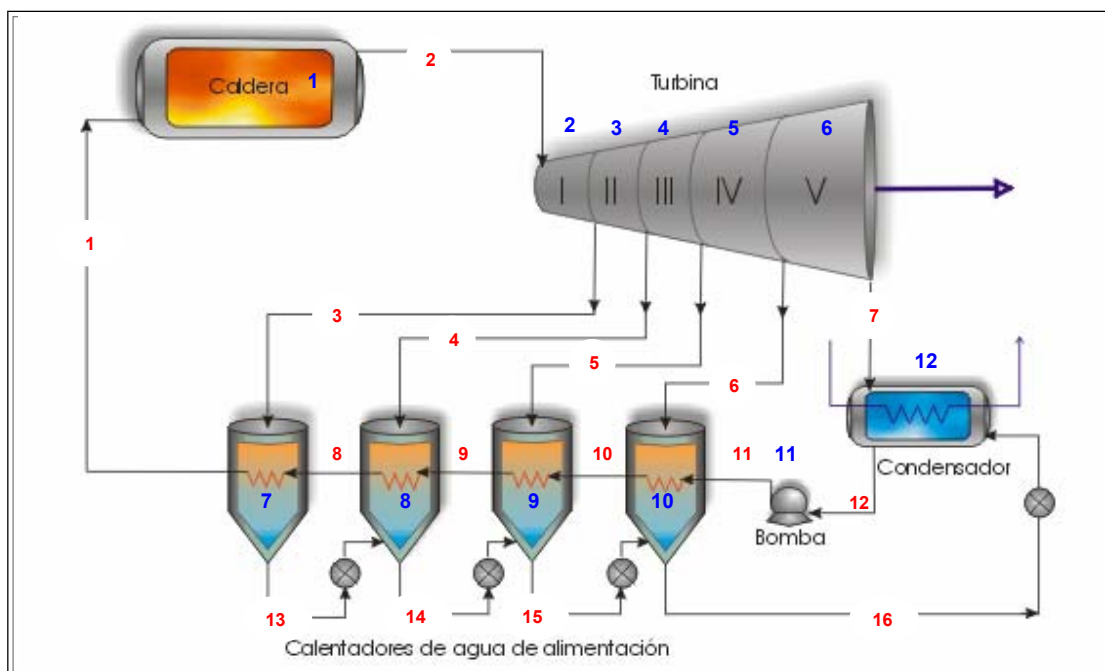


Figura 3.10 Identificación de unidades de proceso y corrientes de flujo de fig. 3.3

Fuente: Construcción propia

El diagrama de flujo de información para el proceso representado en la fig. 3.10 es el siguiente:

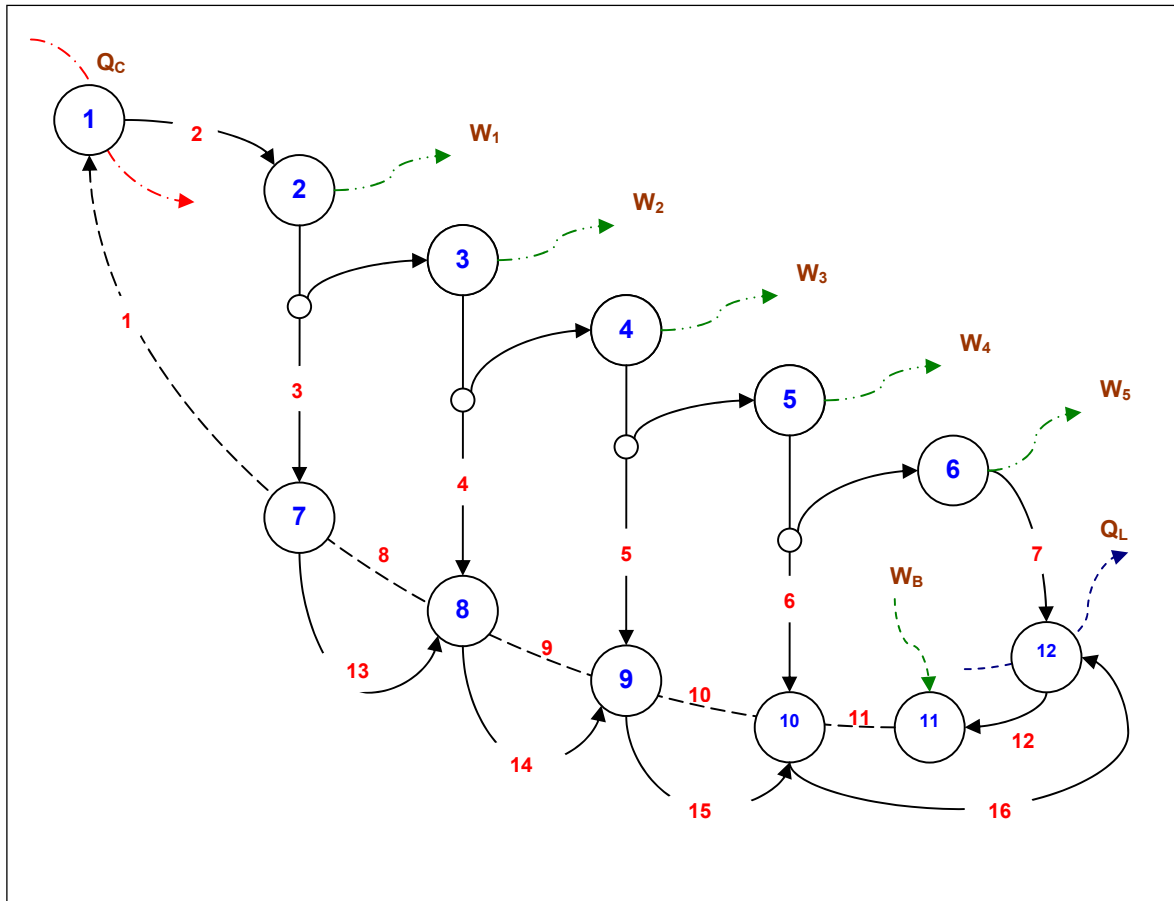


Fig. 3.11 Diagrama de flujo de información para proceso de fig. 3.10

Fuente: Construcción propia

Como puede observarse, la unidad "1" (caldera) proporciona "información" a la unidad "2" (primera sección de turbina) y luego esta a la unidad "3" (segunda sección de turbina) y "7" (primer calentador de agua de alimentación), de esta misma forma al resto de unidades hasta la unidad "12" (condensador) y "11" (bomba), la cual proporciona información a las unidades 10, 9, 8, 7 y 1 sucesivamente, para iniciar nuevamente el ciclo. Así mismo se identifica el calor añadido a la caldera ( $Q_C$ ), el calor liberado en el condensador ( $Q_L$ ), el trabajo de bombeo ( $W_B$ ) y el trabajo efectuado por cada sección  $i$  de turbina ( $W_i$ ).

Como puede observarse en el diagrama de flujo de información (DFI) la sección formada por las unidades 2, 3 y 7 se repite cuatro veces en el proceso global fluyendo el mismo tipo de información y ejecutando los mismos algoritmos, por lo que el DFI de la fig. 3.11 se puede simplificar de la forma en que se presenta en la figura 3.12:

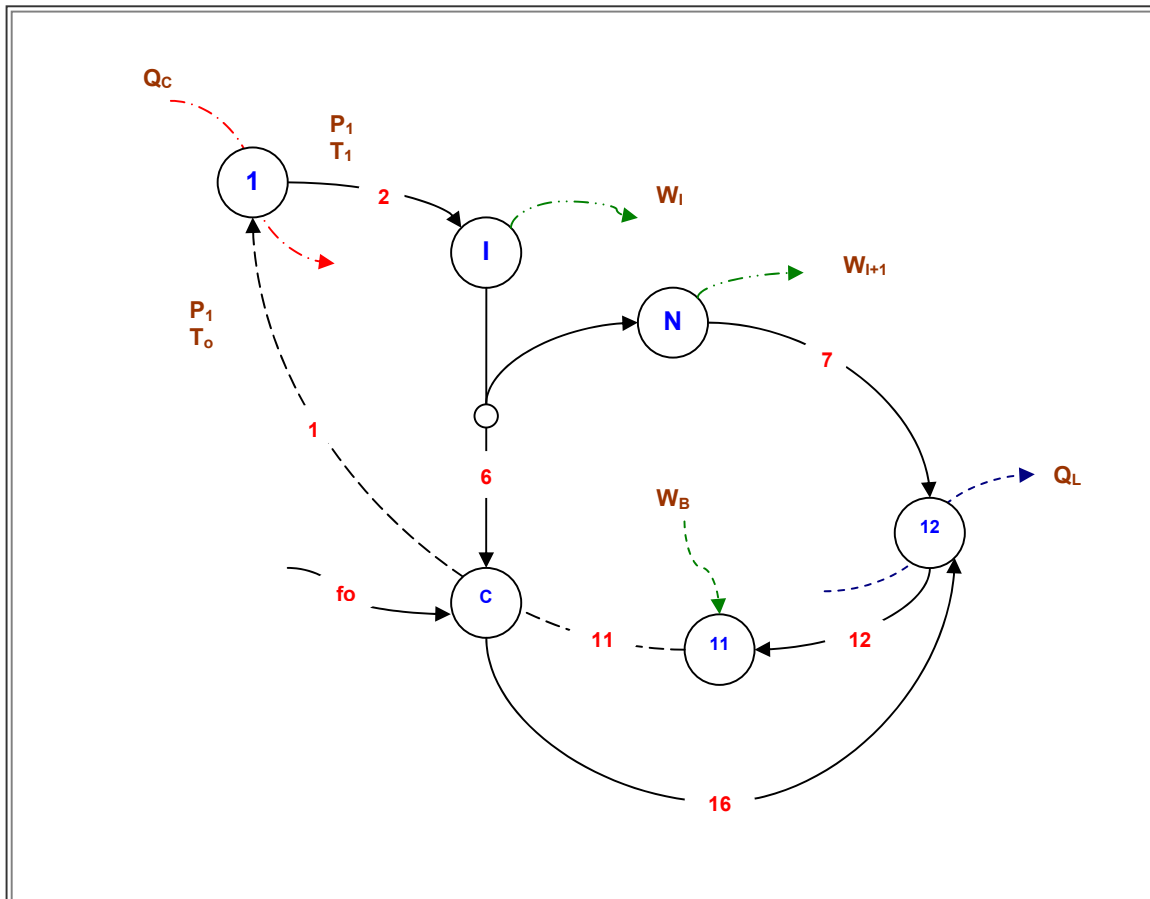


Fig. 3.12 Diagrama de flujo de información simplificado de fig. 3.11

Fuente: Construcción propia

Las unidades de proceso "I" y "N", corresponden a la primera y última sección de turbina respectivamente, la unidad "c" al calentador de agua de la alimentación a la salida de la primera sección de turbina y las unidades "1", "11" y "12", corresponden a la caldera, la bomba y el condensador respectivamente, junto con las corrientes de flujo etiquetadas en las figs. 3.10 y 3.11.

Para la primera sección de turbina la corriente “fo” es igual a cero, ya que no existe una entrada de agua proveniente de un calentador previo a éste. Puede observarse el flujo de calor a la entrada de la turbina y a la salida del condensador y el trabajo suministrado a la bomba y producido por la turbina en éste proceso.

Analizando el proceso completo, habrá que establecer una estrategia de cálculo para el planteamiento de los algoritmos solución al proceso, identificando primeramente las variables desconocidas que requieren sus valores las unidades de proceso para su ejecución y que pueden ser determinadas con los datos disponibles hasta el momento, estas variables son:

1. Temperatura a la salida de la bomba.
2. Temperaturas de saturación en cada calentador.
3. Entalpías de saturación del flujo extraído de las turbinas a la salida de cada calentador.
4. Incremento de temperatura del agua de alimentación en los calentadores.
5. Temperaturas a la entrada y salida de cada calentador.
6. Entalpía a la entrada y salida del agua de alimentación a la serie de calentadores.

Por tanto, la solución al proceso inicia por el desarrollo del algoritmo correspondiente a la unidad de proceso No. 11 (bomba), dado que se conoce la presión de entrada, la misma a la salida de la sección 5 de la turbina, dado que el proceso en el condensador es a presión constante:

$$P_{\text{salida sección V turbina}} = P_{\text{entrada bomba}}$$

Se conoce también la presión de salida en la bomba, la misma a la entrada de la caldera, puesto que el proceso de intercambio de calor en los calentadores es a presión constante:

$$P_{\text{entrada caldera}} = P_{\text{calentador 1,2,3 y 4}} = P_{\text{salida bomba}}$$

Así mismo se conoce el estado termodinámico del fluido de entrada y salida en la bomba:

*Entrada:* Líquido saturado a la presión de entrada a la temperatura de saturación.

*Salida:* Líquido comprimido a la presión y temperatura (desconocida) de salida.

Por tanto en éste algoritmo habrá de determinarse la temperatura de salida de la bomba, a presión de salida y entrada, eficiencia y flujo conocidos.

El modelamiento matemático para la unidad de proceso No. 11 (bomba) se desarrolló en la sección 3.1.3 de éste capítulo y su algoritmo solución se presenta el algoritmo de la fig. 3.13:

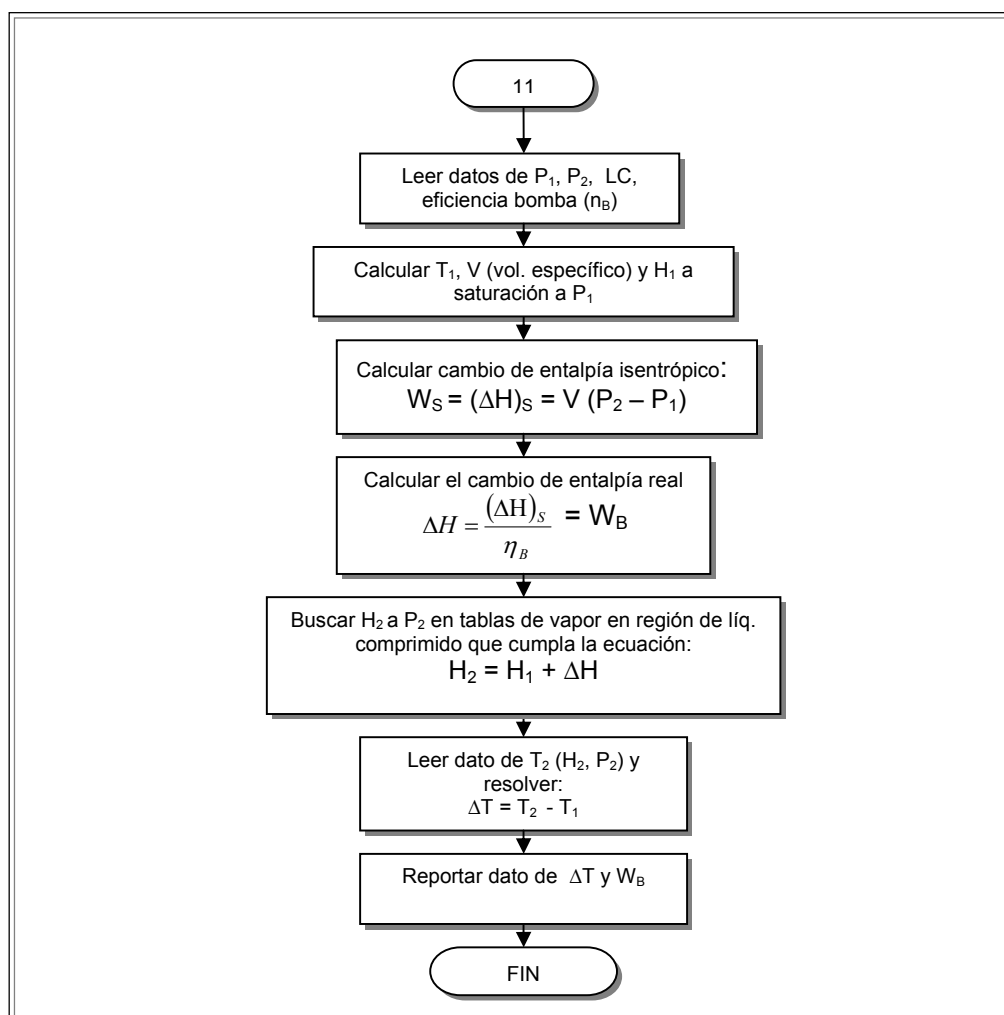


Fig. 3.13. Algoritmo de cálculo para unidad de proceso: Bomba

Fuente: Construcción propia

Este algoritmo proporciona información a la unidad de proceso No. 10 (cuarto calentador de agua, que es la entalpía del líquido (comprimido) y temperatura a la entrada del calentador (salida de la bomba), datos que serán de utilidad para determinar el cambio de temperatura a través de la serie de calentadores, ya que conocemos la temperatura a la salida del primer calentador (unidad 7), aplicamos la siguiente ecuación:

Cambio de temperatura a través de la serie de calentadores:

$$\Delta T = T_2 \text{ (corriente 1)} - T_1 \text{ (corriente 11)} \quad \text{ec. 3.20}$$

Cambio de temperatura a través de cada calentador:

$$\Delta T_c = \Delta T/4 \quad \text{ec. 3.21}$$

La temperatura a la entrada de la serie de calentadores es:

$$T_i = T_{sb} + (n-i) \Delta T_c \quad \text{ec. 3.22}$$

donde:

- $i$  : calentador  $i$  de la serie
- $n$  : total de calentadores (cuatro)
- $T_{sb}$  : temperatura de salida de la bomba
- $\Delta T_c$  : incremento de temperatura.

Puede notarse en esta ecuación que para el cuarto calentador el término  $(n-i)=0$ , lo que demuestra que la temperatura de entrada al cuarto calentador es la misma a la salida de la bomba:  $T_4 = T_{sb}$ .

Con estos datos se determina la entalpía de saturación a la salida del calentador  $i$  y la entalpía de líquido comprimido del agua de alimentación a la presión constante ( $P_{\text{entrada caldera}} = P_{\text{calentador 1,2,3 y 4}} = P_{\text{salida bomba}}$ ).

Con esto, la unidad de proceso No. 7 (calentador 1) le proporciona a la unidad de proceso No. 1 (caldera) la información correspondiente a la entalpía del agua de alimentación a condiciones de líquido comprimido a la temperatura de entrada de la caldera (temperatura de salida del calentador 1) y la presión de entrada de la caldera (presión constante en la serie de calentadores y salida de la bomba).

Analizando ahora la unidad de proceso No. 1, correspondiente a la caldera, cuyo diagrama de flujo de información (DFI) tomado de la fig. 3.12 se presenta en la figura 3.14

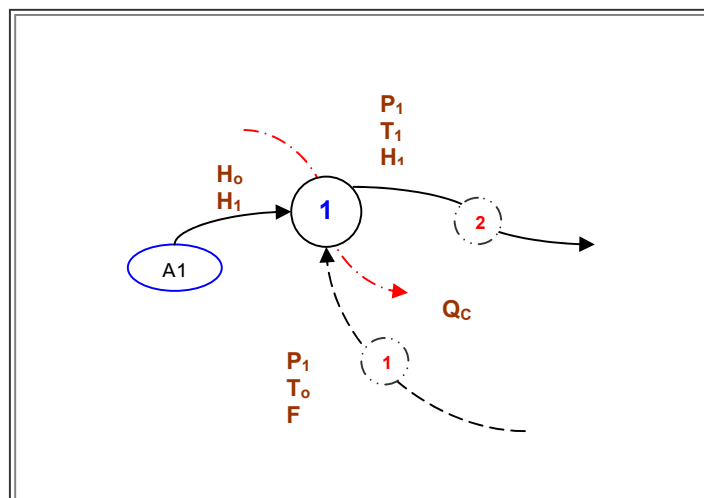


Fig. 3.14 Diagrama de flujo de información en unidad de proceso 1: Caldera

Fuente: Construcción propia

Como puede observarse en la fig. 3.14, la unidad de proceso No. 1 requiere de información de las condiciones de entrada y salida de la unidad, respecto a presión, temperatura y entalpía del agua de alimentación, para ejecutar el modelo desarrollado en la sección 3.1.3 de éste capítulo para la caldera.

Para un proceso de combustión e intercambio de calor a presión constante, implica un algoritmo (A1) de lectura de las propiedades termodinámicas de entrada y salida en tablas de vapor de agua para realizar el balance de energía; cabe mencionar que los datos en la simulación no serán leídos manualmente, se desarrolló un programa que realiza ésta tarea el cual se presenta posteriormente.

Un algoritmo de lectura de la entalpía de salida de la caldera a condiciones de vapor sobrecalentado se presenta en la fig. 3.15:



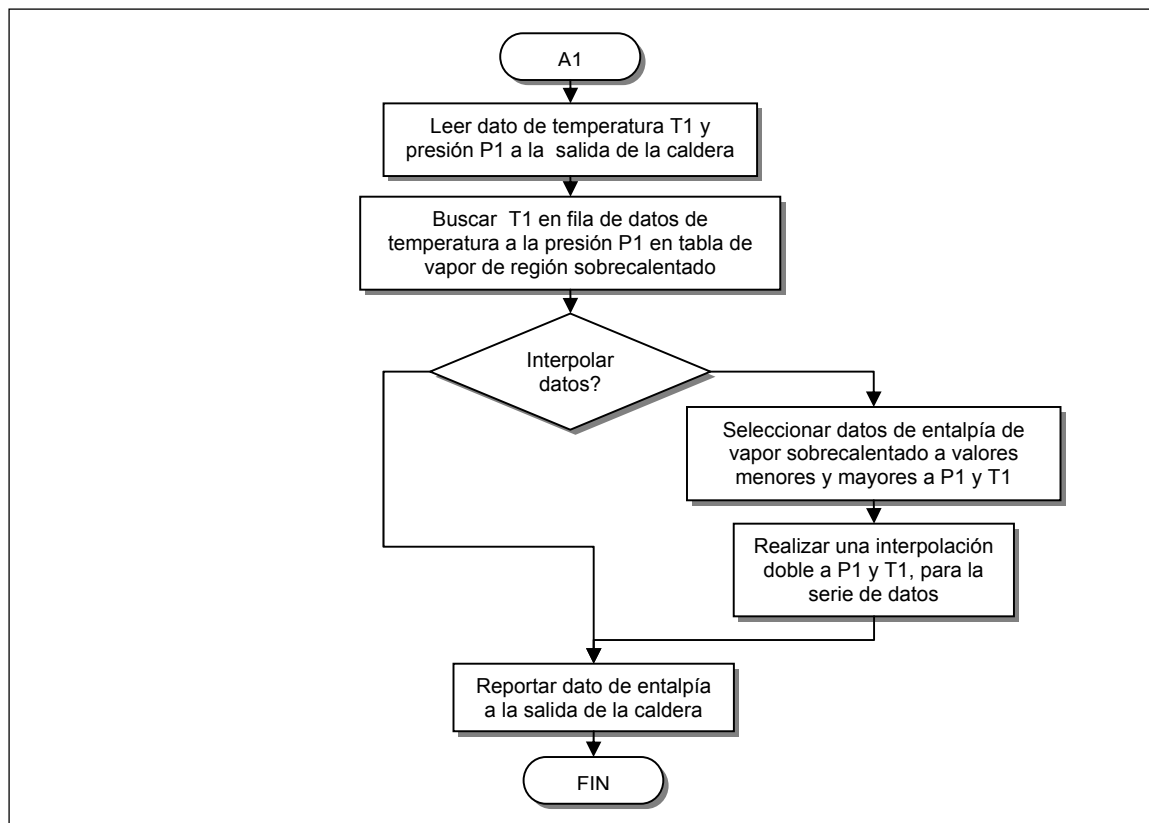


Fig. 3.15 Algoritmo de lectura de datos de entalpía a la entrada y salida de la caldera.

Fuente: Construcción propia

Este algoritmo proporciona información a la unidad de proceso “1” y “2”. El modelamiento de la unidad de proceso “1”, desarrollado en la sección 3.1.3, presenta el siguiente algoritmo solución:

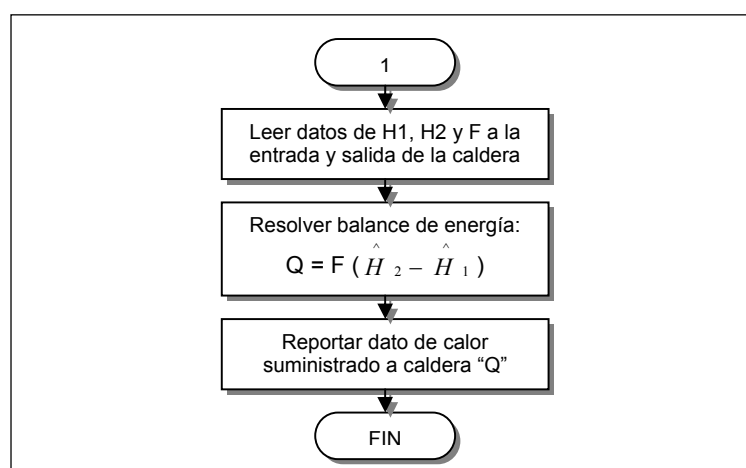


Fig. 3.16 Algoritmo solución de unidad de proceso 1: Caldera

Fuente: Construcción propia

El algoritmo de la fig. 3.16 da como resultado información general (calor suministrado a la caldera), que será utilizado para el cálculo de la eficiencia del ciclo termodinámico del proceso.

En la figura 3.17 se analiza el flujo de información entre las unidades (2 y 3):

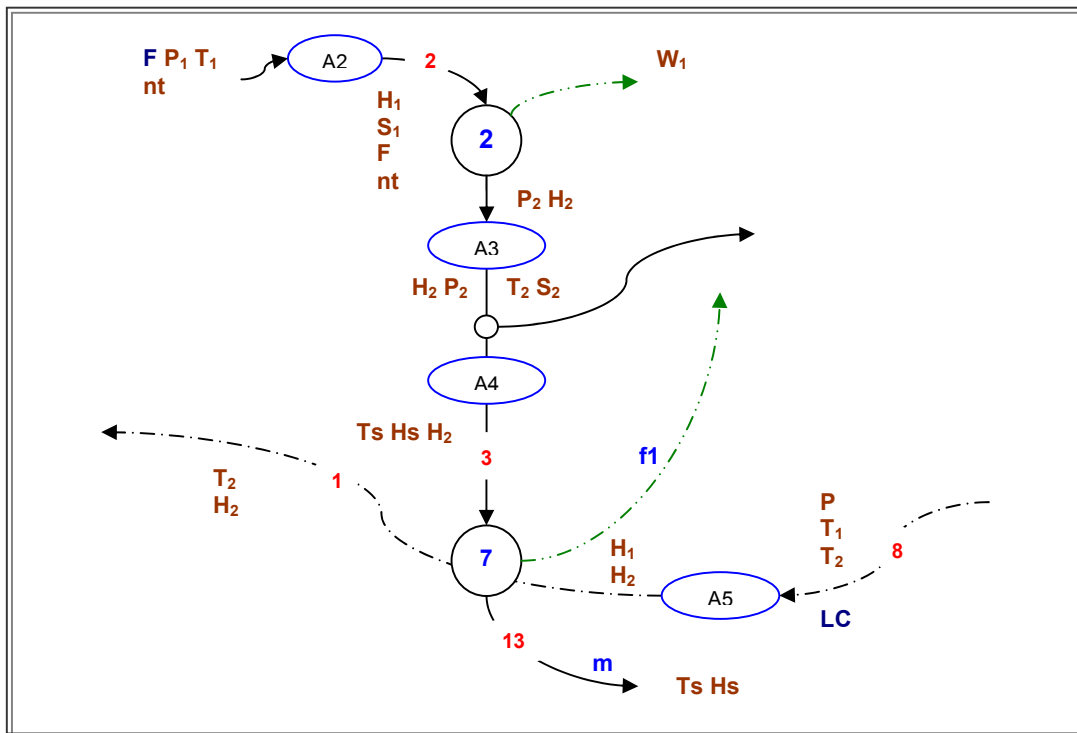


Fig. 3.17 Diagrama de flujo de información entre unidades 2 y 3

Fuente: Construcción propia

En la fig. 3.17 se identifican los algoritmos de cálculo de datos A2, A3, A4 y A5, que producirán información para la ejecución de los modelos matemáticos de las unidades de proceso "2" y "7".

La unidad de proceso "2" requiere de datos de entalpía y entropía de la alimentación de vapor sobrecalentado, siendo la primera calculada por el algoritmo A1 desarrollado anteriormente. Un algoritmo de lectura de datos de entropía a condiciones de sobrecalentamiento se presenta en la figura 3.18:

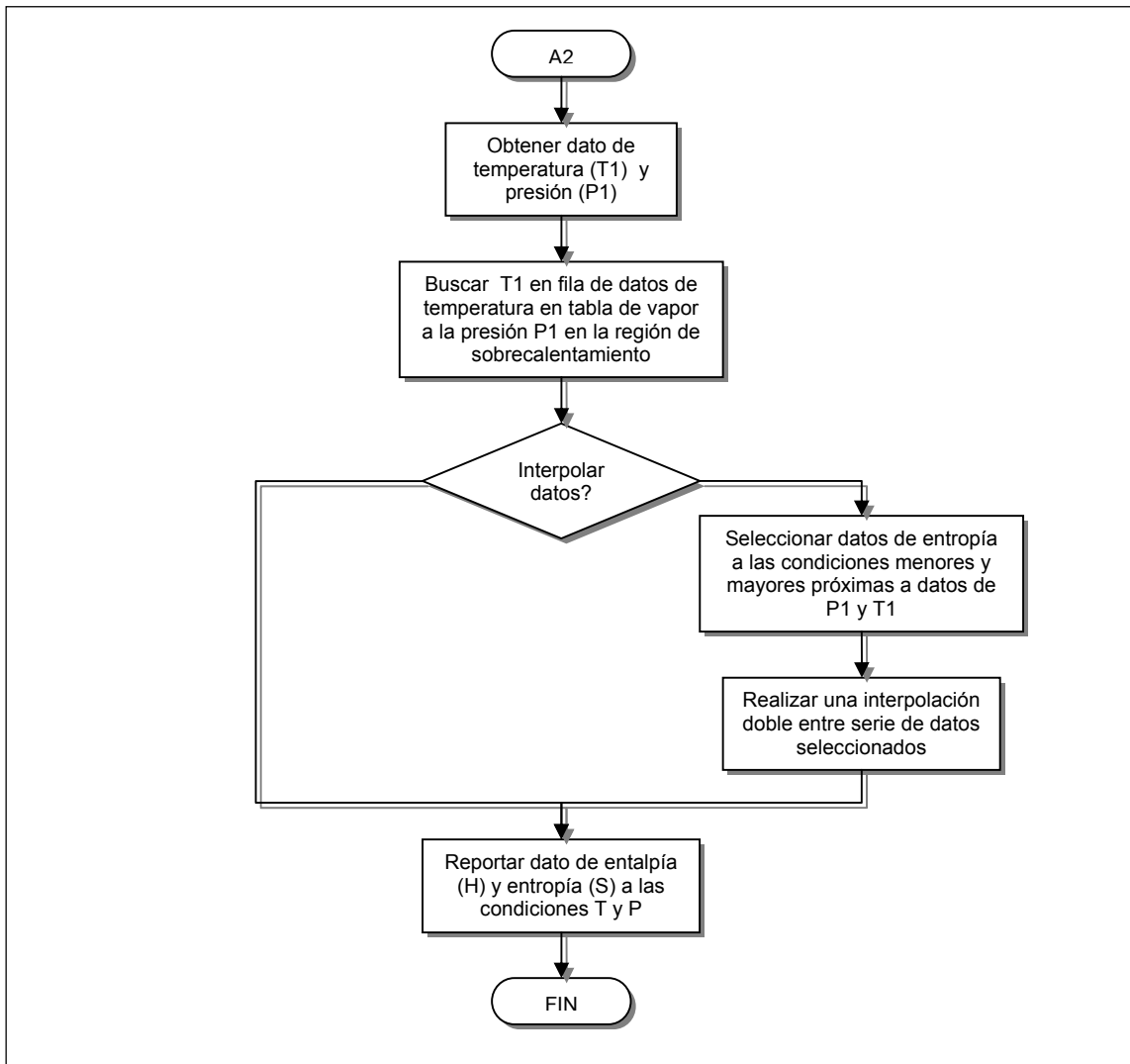


Fig. 3.18 Algoritmo de lectura de datos de entropía a condiciones de sobrecalentamiento a la entrada de unidad de proceso "2": Sección I de turbina.

Fuente: Construcción propia

El algoritmo solución para la unidad de proceso No. 2, correspondiente a la sección 1 de turbina se basa en el modelamiento del proceso desarrollado en la sección 3.1.3 de éste capítulo, ver algoritmo de la fig. 3.19:

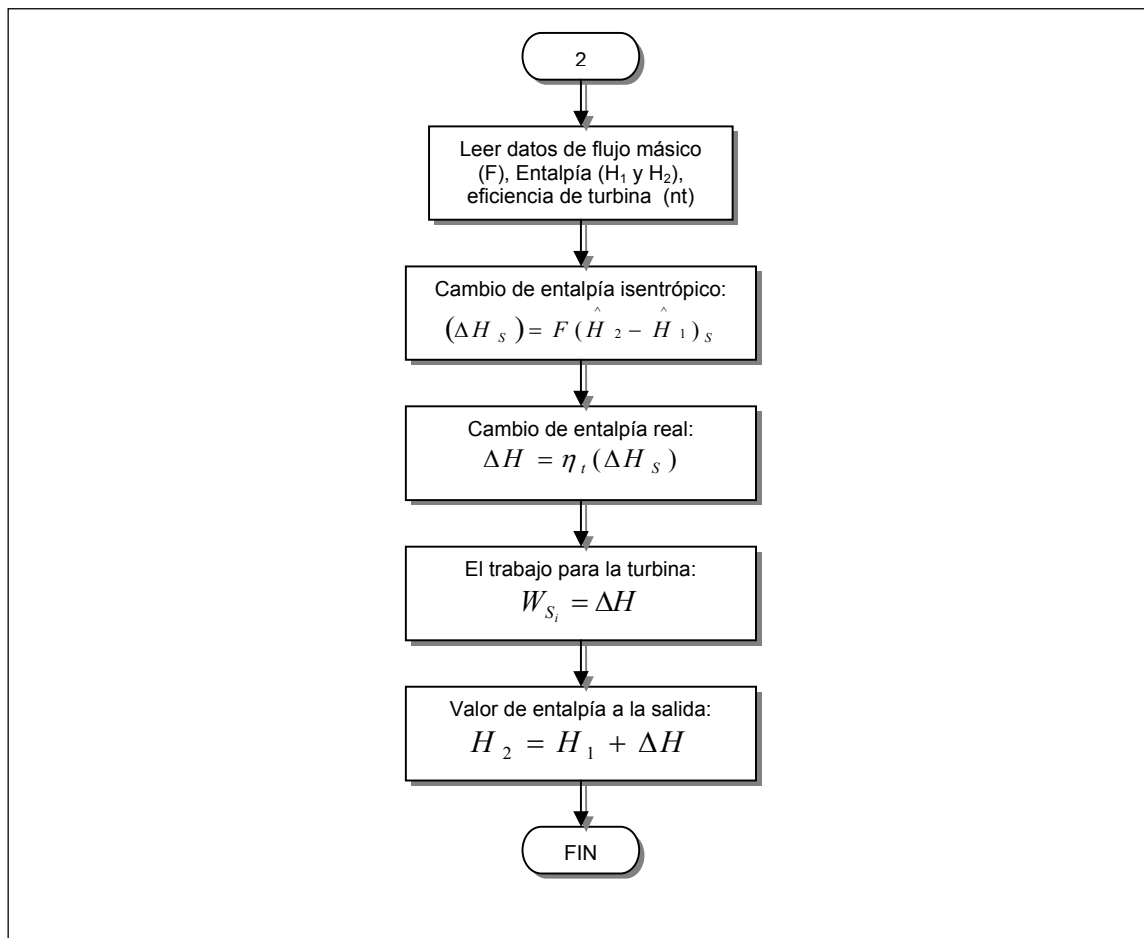


Fig. 3.19. Algoritmo de cálculo para unidad de proceso: Turbina

Fuente: Construcción propia

Este algoritmo proporciona información a la etapa de proceso No. 7 y como resultado general, el trabajo producido por esta sección de turbina para las condiciones establecidas.

Posteriormente como se presenta en la figura 3.12, se debe conocer la temperatura y entropía a la salida de la turbina, en función de las condiciones de  $H_2$  y  $T_2$ , para tal efecto se plantea en el algoritmo solución de la fig. 3.20:

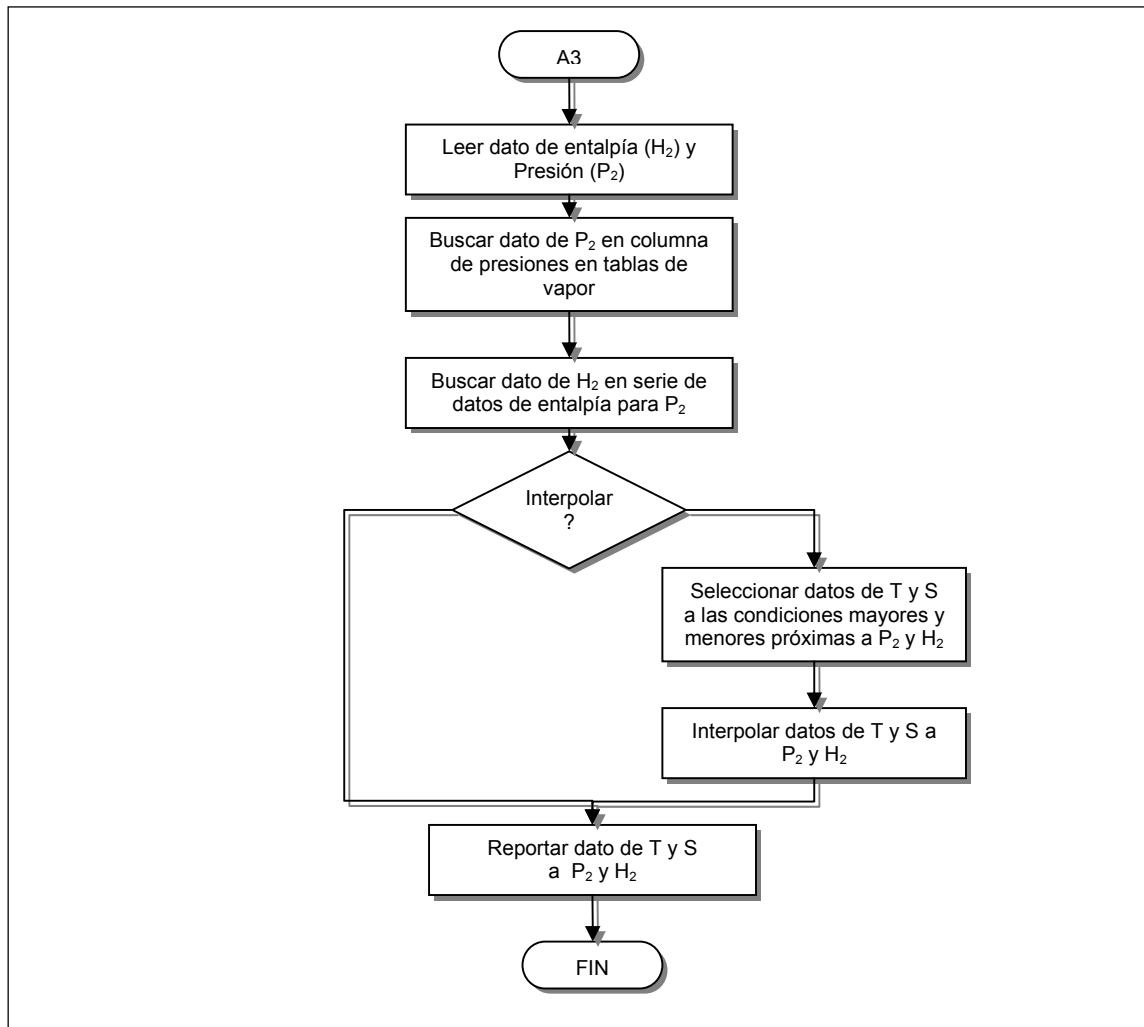


Fig. 3.20 Algoritmo de lectura de datos de entropía y temperatura a condiciones de P y H.

Fuente: Construcción propia

Luego la información generada hasta este punto por los algoritmos de las fig. 3.18, fig. 3.20 y la unidad de proceso No. 2, es enviada al algoritmo de la fig. 3.21 según los datos requeridos para las siguientes unidades de proceso (No. 7, calentador de agua y No. 3, la siguiente sección de turbina).

La unidad de proceso No. 7 corresponde al calentador del agua, en el cual ocurre un proceso de intercambio de calor a presión constante entre el vapor extraído de la turbina y el agua de alimentación a la caldera, transformando esta corriente (corriente 3 en el DFI de la fig 3.17) a un líquido saturado (corriente 13) a presión  $P_2$  (constante) y un incremento de la temperatura de la segunda corriente, (corrientes 8 y 1 de líquido comprimido en DFI de fig 3.17).

El algoritmo de la fig. 3.21 tiene de información de entrada los datos de presión  $P_2$  y  $H_2$  provenientes de la unidad de proceso No. 2, con la cual se determinarán las condiciones de temperatura y entalpía a condiciones de saturación a la presión  $P_2$ , la que permanece constante a los largo del proceso de intercambio de calor.

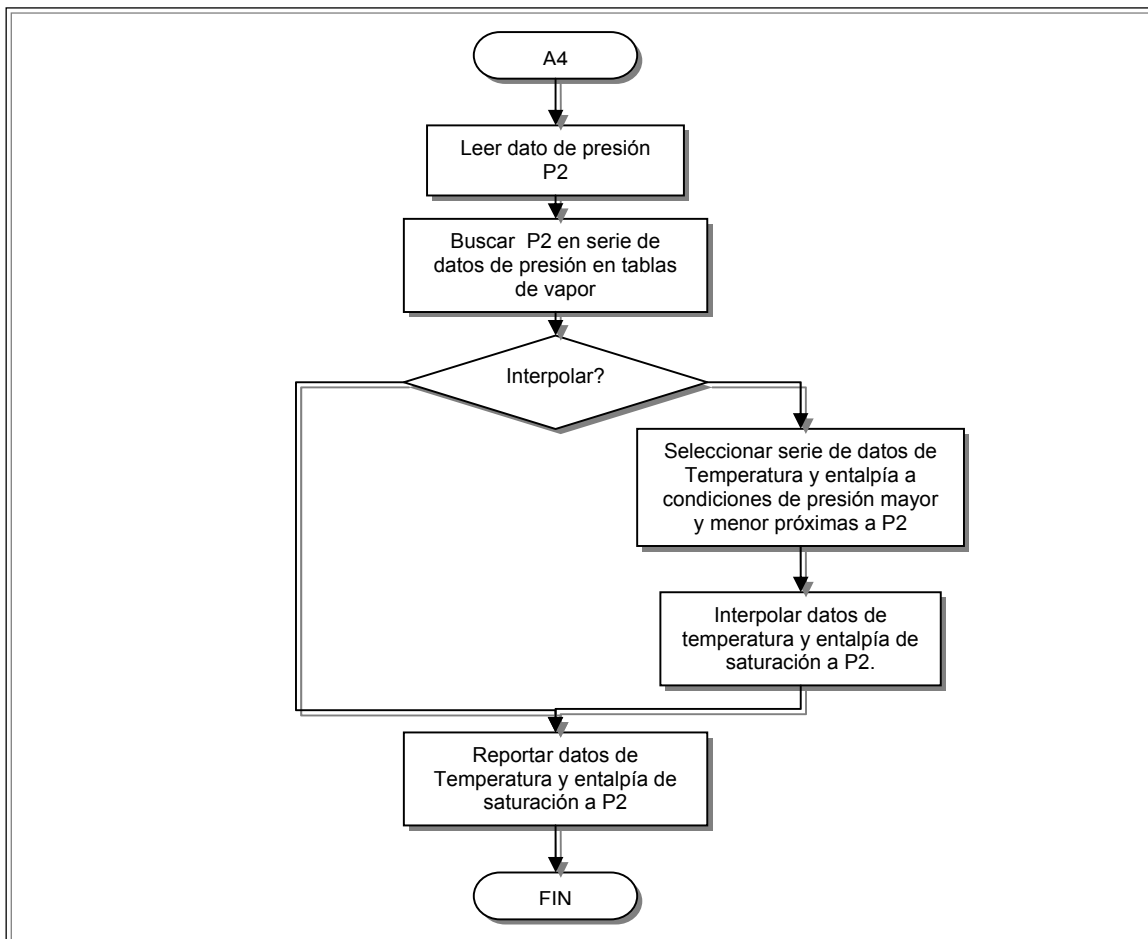


Fig. 3.21 Algoritmo de lectura de datos de entalpía y temperatura a condiciones de saturación a la presión  $P$  dado.

Fuente: Construcción propia

El algoritmo de la fig. 3.21 le proporciona información a la unidad de proceso No. 7, el cual a la vez necesita datos de entalpía en la región de líquido comprimido para el agua de alimentación (LC), a las condiciones de  $T_1$  y  $T_2$ , en un proceso a presión constante proveniente del algoritmo A5. Este algoritmo se detalla en la fig. 3.22:

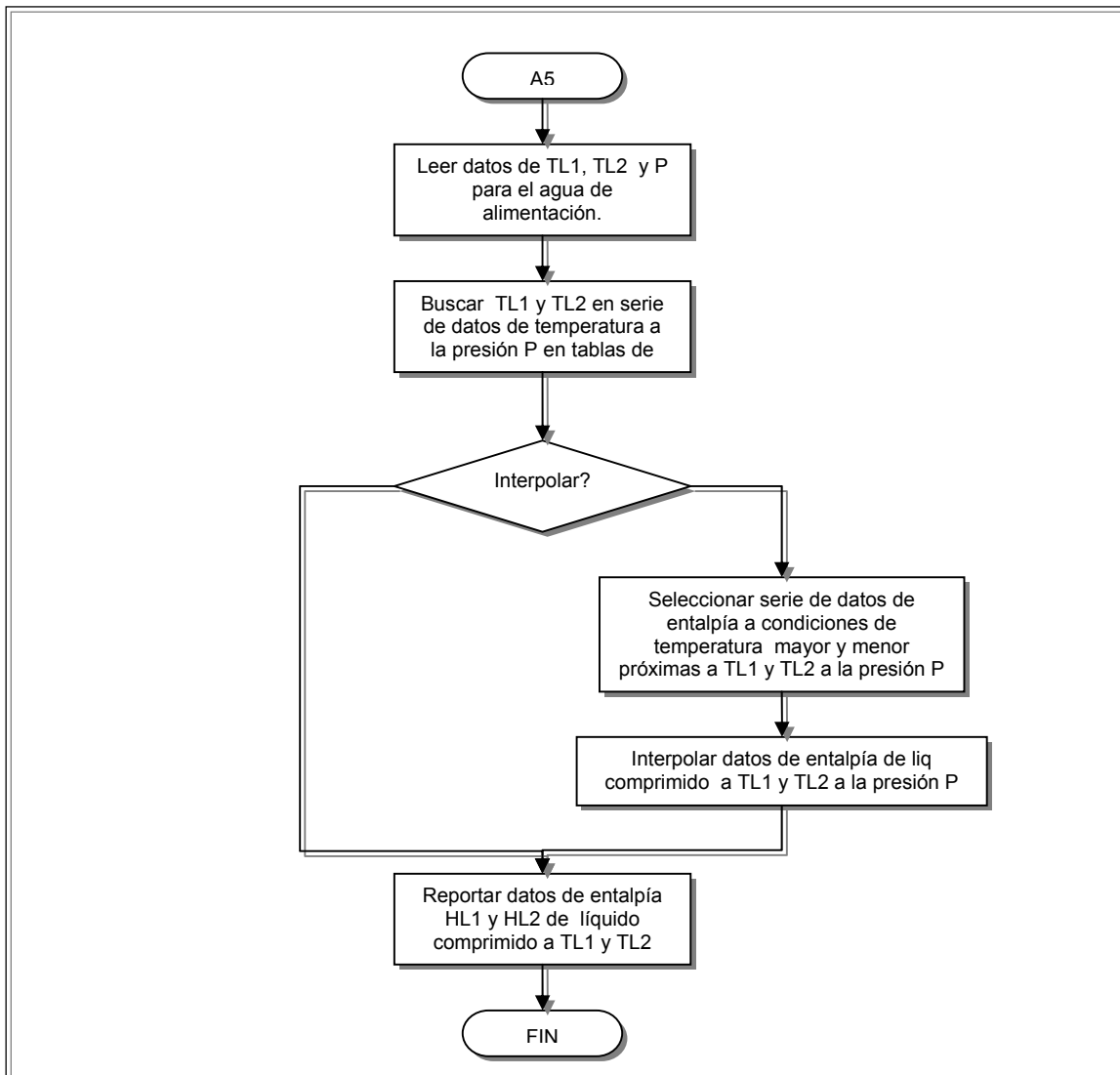


Fig. 3.22 Algoritmo de lectura de datos de entalpía a condiciones de líquido comprimido a temperaturas  $T_1$  y  $T_2$  a presión  $P$  constante.

Fuente: Construcción propia

El algoritmo de la fig. 3.22 le proporciona información a la unidad de proceso No. 7, que corresponde al calentador de agua de alimentación, así mismo a las unidades de proceso No. 3 y 8 presentados en el DFI de la fig. 3.11, y cuyo modelamiento fue desarrollado en la sección anterior de éste capítulo, y su respectivo algoritmo solución se detalla en la figura 3.23:

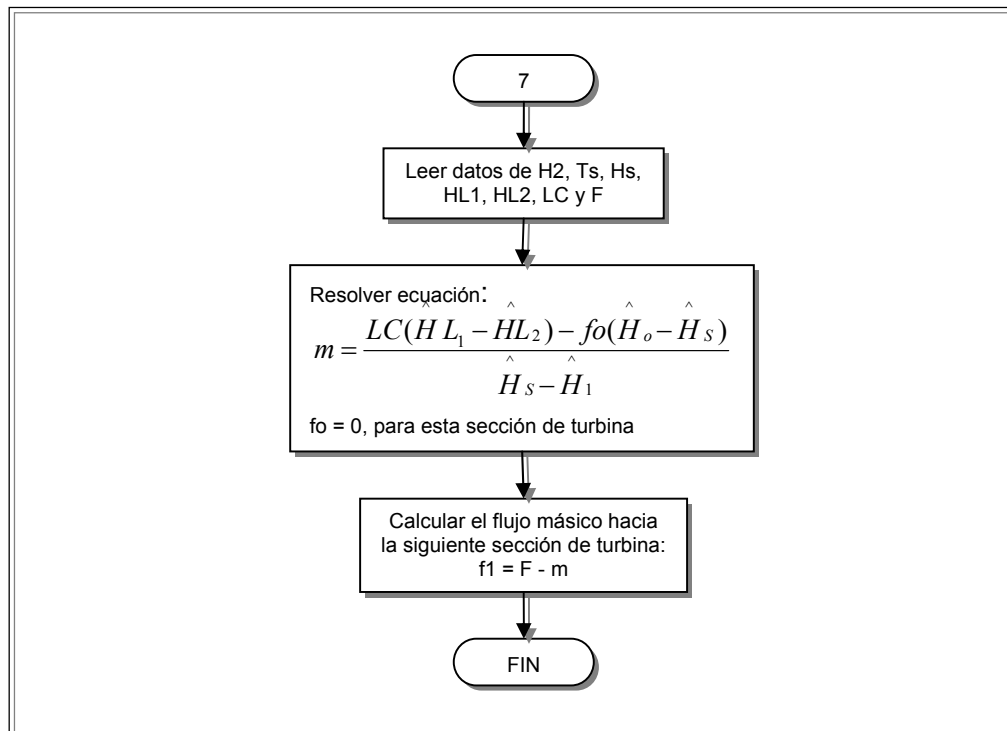


Fig. 3.23 Algoritmo de cálculo para unidad de proceso: Calentador

Fuente: Construcción propia

El algoritmo de la figura 3.23 le proporciona información a la siguiente sección de turbina y calentador de agua de alimentación (unidades No. 3 y 8 en DFI de la fig. 3.11, respectivamente), la alimentación de vapor exhausto ( $f_1$ ) y el flujo de líquido saturado obtenido de la condensación del vapor extraído ( $f_o$ ) de la sección de turbina con su respectiva entalpía y temperatura de saturación. Puede notarse en la fig. 3.11 que en el primer calentador de agua de alimentación  $f_o = m$  a la salida y  $f_o = 0$  a la entrada de ésta sección.

Todo este proceso algorítmico se repite para cada una de las secciones de turbina con sus respectivos calentadores de agua, sucesivamente hasta la última sección de turbina, sección "N" tal como se muestra en el DFI de la figura 3.12, en la cual todo el vapor exhausto es dirigido al condensador (unidad de proceso No. 12) sin pasar por un calentador de agua, así mismo esta unidad (12) recibe el flujo total de vapor extraído de las secciones anteriores (R) de turbina en un estado de líquido saturado.



El modelamiento para la unidad de proceso 12 (condensador) fue desarrollado en la sección 3.1.3 de éste capítulo, y su respectivo algoritmo solución se detalla en la figura 3.24:

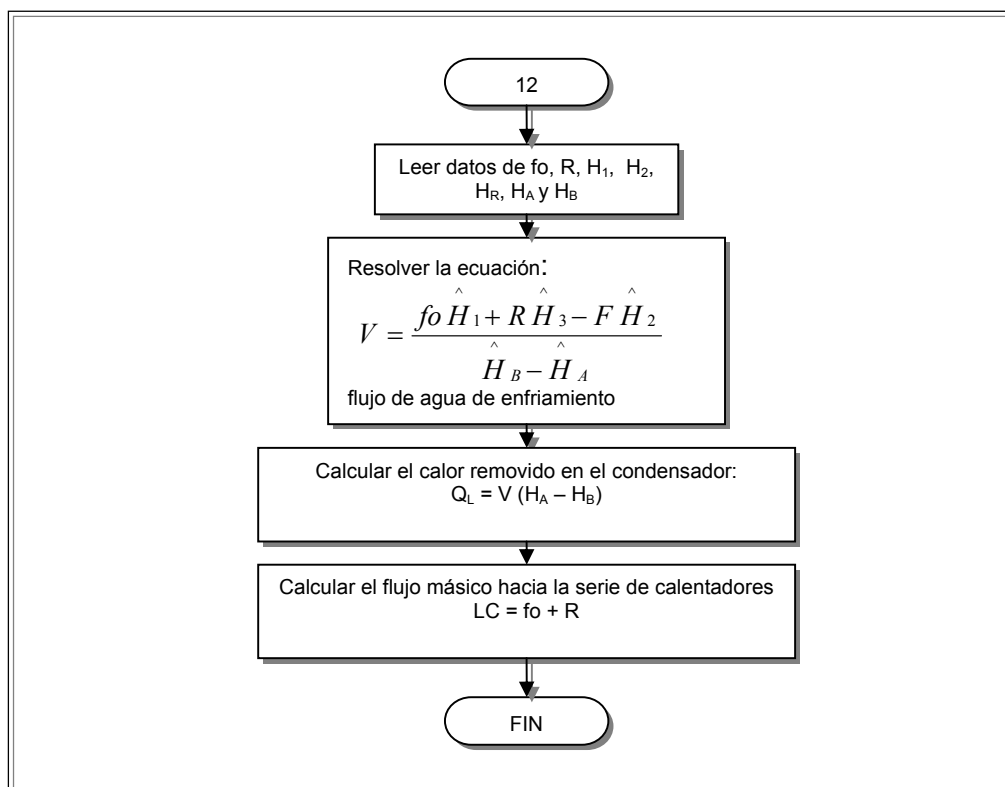


Fig. 3.24 Algoritmo de cálculo para unidad de proceso: Condensador

Fuente: Construcción propia

El algoritmo de la fig. 3.24 proporciona información general, (flujo de agua de enfriamiento y calor removido), así como también realiza la comprobación del balance de materia en todo el proceso, en caso de no cumplirse enviará un mensaje de error. Al comprobarse el balance de materia, ésta unidad le envía información a la unidad de proceso No. 11 (bomba) sobre el flujo másico de líquido a transportar a través de la serie de calentadores así como de su condición de temperatura, presión y entalpía de saturación.

Finalmente para el cálculo de la eficiencia térmica del ciclo, la velocidad del vapor a la turbina, la velocidad de transferencia de calor en la caldera y al agua de enfriamiento en el condensador, presentado en el algoritmo de la fig. 3.25:

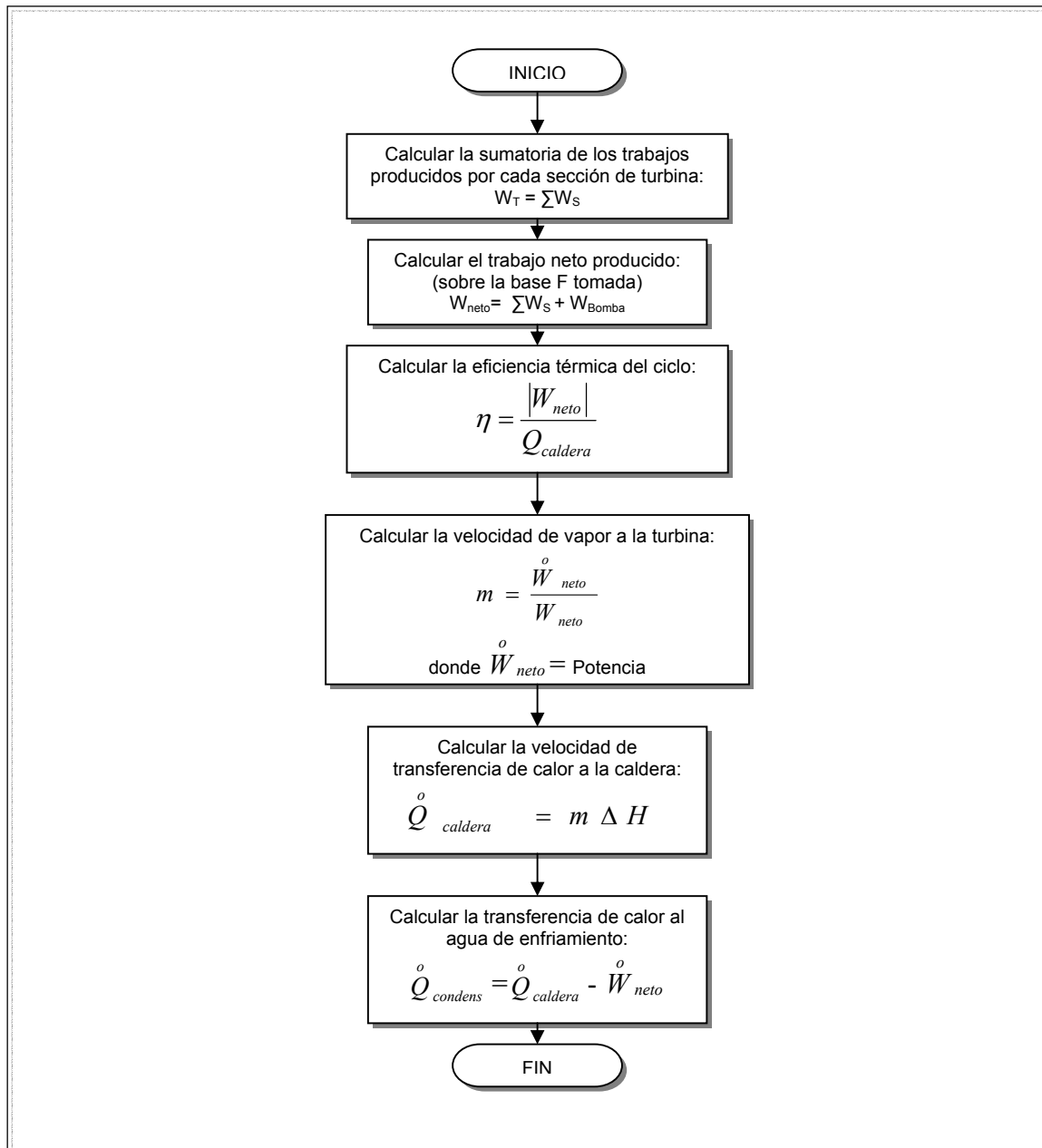


Fig. 3.25 Algoritmo de cálculo de resultados para el ciclo completo

Posteriormente estos algoritmos son interrelacionados auxiliándose de un lenguaje de programación con los recursos informáticos adecuados, para obtener *la simulación del proceso*, que será desarrollado en la sección 3.1.6:

### 3.1.6 Simulación del proceso

De acuerdo a la naturaleza del proceso en estudio, en cuanto a las variables y ecuaciones que modelan cada unidad individual, la técnica de simulación que más conviene aplicar es la *Simulación modular secuencial*, puesto que aplicar el método orientado a ecuaciones resultaría un sistema bastante complejo de difícil convergencia con un método matemático tradicional (*p. ej Método de Newton*), así mismo no aplica la simulación dinámica, dado que el proceso es en estado estacionario.

Tal como se presentó en el modelamiento del proceso y el desarrollo algorítmico, el sistema está formado por las unidades de proceso: bomba, calentador, caldera, turbina y condensador, las cuales cada una pueden ser vista como módulos secuenciales que con sus respectivos modelos representativos y el flujo de información integran al proceso completo.

El recurso informático utilizado será el lenguaje de alto nivel: MATLAB versión 6.5 R13 en un ambiente de interfaz gráfica de usuario con vínculo a una hoja de cálculo en Microsoft Excel conteniendo las tablas de vapor en unidades del sistema internacional de unidades (S.I.) y el sistema inglés, permitiendo así tener acceso a los datos termodinámicos requeridos para los diversos cálculos en el proceso.

El programa primero hace la selección del sistema de unidades a trabajar en la simulación:

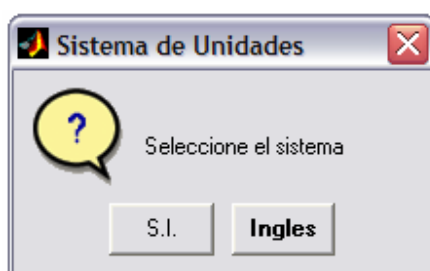


Fig. 3.26 Ventana de selección de sistema de unidades

En caso de cerrar esta ventana sin seleccionar uno de los dos sistemas de unidades aparece el siguiente mensaje de error:

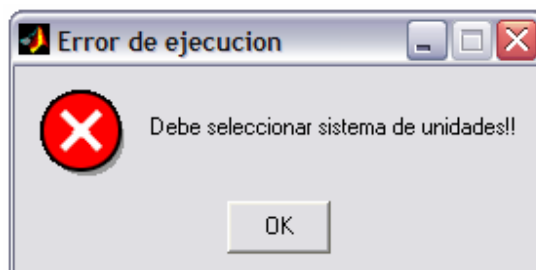


Fig. 3.27 Ventana de error en caso de omitir selección de sistema de unidades

Presionando el botón “OK” de esta ventana de la fig. 3.27 aparece nuevamente la ventana de la figura 3.26, seleccionando esta vez el sistema de unidades con el cual se trabajará en la simulación del proceso, para el caso del Sistema Internacional de unidades (S.I.)

La codificación de cada uno de estas unidades de programa y programa principal se presenta en el Anexo A.

El programa principal utiliza las siguientes funciones creadas, para la lectura de datos de las tablas de vapor, tal como se presentó en los algoritmos desarrollados en la sección anterior.

Tabla 3.4

Resumen de funciones creadas para lectura de valores en tablas de vapor

<b>Función</b>	<b>Resultado</b>
TempSat(P)	Temperatura de saturación a una presión determinada (P)
PresSat(T)	Presión de saturación a una temperatura determinada
EntalfSat(T)	Entalpía del líquido saturado a una temperatura dada (T)
HLiqComp(P,T)	Entalpía del líquido comprimido a una presión y temperatura dados (P,T)
EntalPT(P,T)	Entalpía del vapor sobrecalentado dados presión y temperatura (P,T)
EntroPT(P,T)	Entropía del vapor sobrecalentado dados presión y temperatura (P,T)
EntalPS (P,S)	Entalpía del vapor sobrecalentado dados presión y entropía (P,S)
SATURADO(P,S)	Entalpía del vapor saturado a valores de presión y entropía (P,S)
EntroTempPSH(P,Tlim,H)	Entropía, temperatura, calidad y estado del vapor a presión y entalpía (P, H), a la salida de una sección de turbina; Tlim: es un parámetro de temperatura de valor límite de lectura en tablas.

Todas estas funciones son utilizadas por el programa principal desarrollado en el ambiente de interfaz gráfica de usuario (GUI) de MATLAB, basado en la programación orientada a objetos, cuya codificación se presenta en el Anexo A. de este trabajo de graduación, el cual permite interactuar con la simulación del proceso, facilita la entrada de datos y una comprensión visual de los resultados.

Seleccionado el sistema de unidades con el cual se trabajará aparece la siguiente ventana de entrada de datos al programa de simulación:

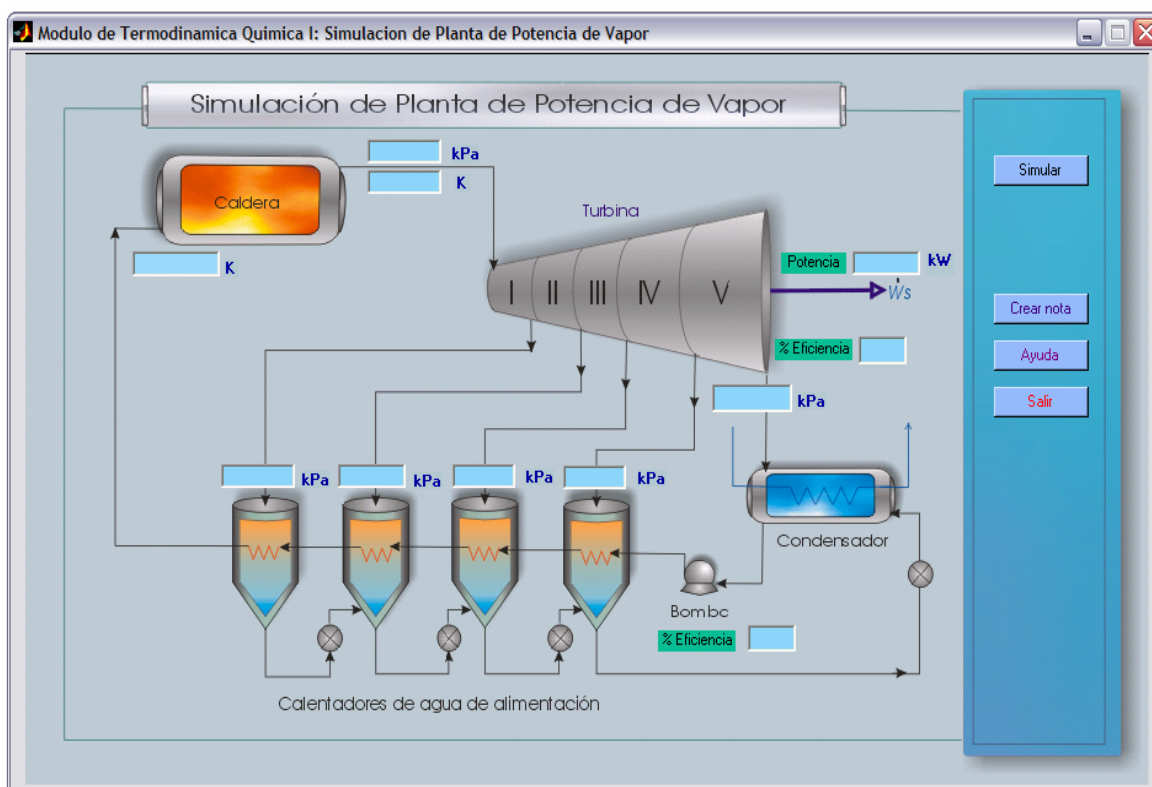


Fig. 3.28 Ventana de entrada de datos al programa de simulación

Como puede observarse en la fig. 3.28, el título de la ventana hace mención: “Módulo de Termodinámica Química I: Simulación de Planta de Potencia de Vapor”, aparecen los campos de entrada de datos, los campos de texto de las unidades en el Sistema Internacional de unidades y los botones de acción “Simular”, “Crear nota”, “Ayuda” y “Salir”.

La codificación de ésta ventana se encuentra en el CD de este documento, la imagen del proceso fue creada en un programa de diseño de imágenes y luego convertida a un objeto.

El botón de acción “*Crear nota*” permite al usuario hacer anotaciones sobre algunos datos del proceso o cualquier observación, o incluso abrir un archivo de texto almacenado previamente, abriéndose la aplicación de “Bloc de notas”, como se presenta en la fig. 3.29:

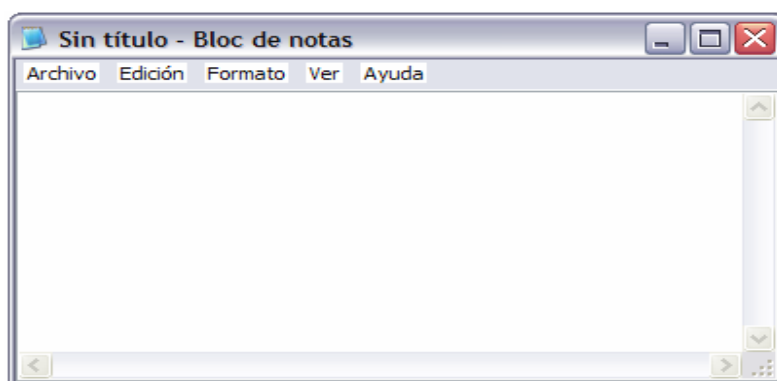


Fig. 3.29 Aplicación de “Bloc de Notas” al ejecutar botón de acción “*Crear nota*”

El botón de acción “*Ayuda*” contiene información sobre el proceso y de los principios básicos en los cuales se fundamenta, al ejecutarse aparece la siguiente ventana:

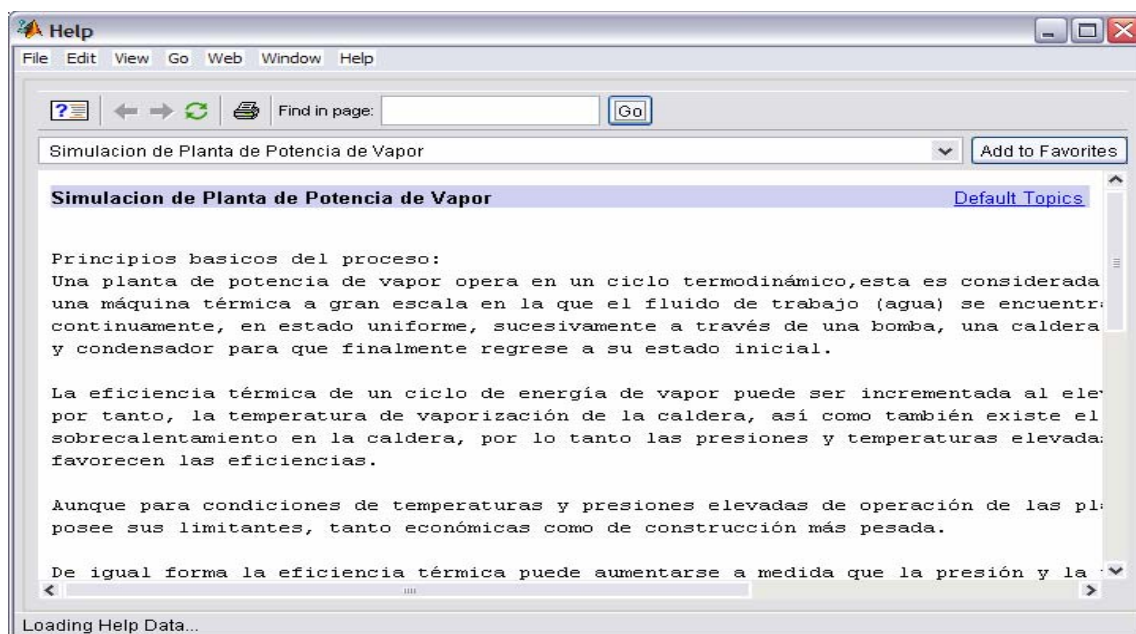


Fig. 3.30 Ventana de ayuda al ejecutar botón de acción “*Ayuda*”

Para iniciar la simulación primero se introducen los datos del proceso, los cuales serán los propuestos en el ejemplo 8.2 del libro “*Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química*” (Van Ness, 1997):

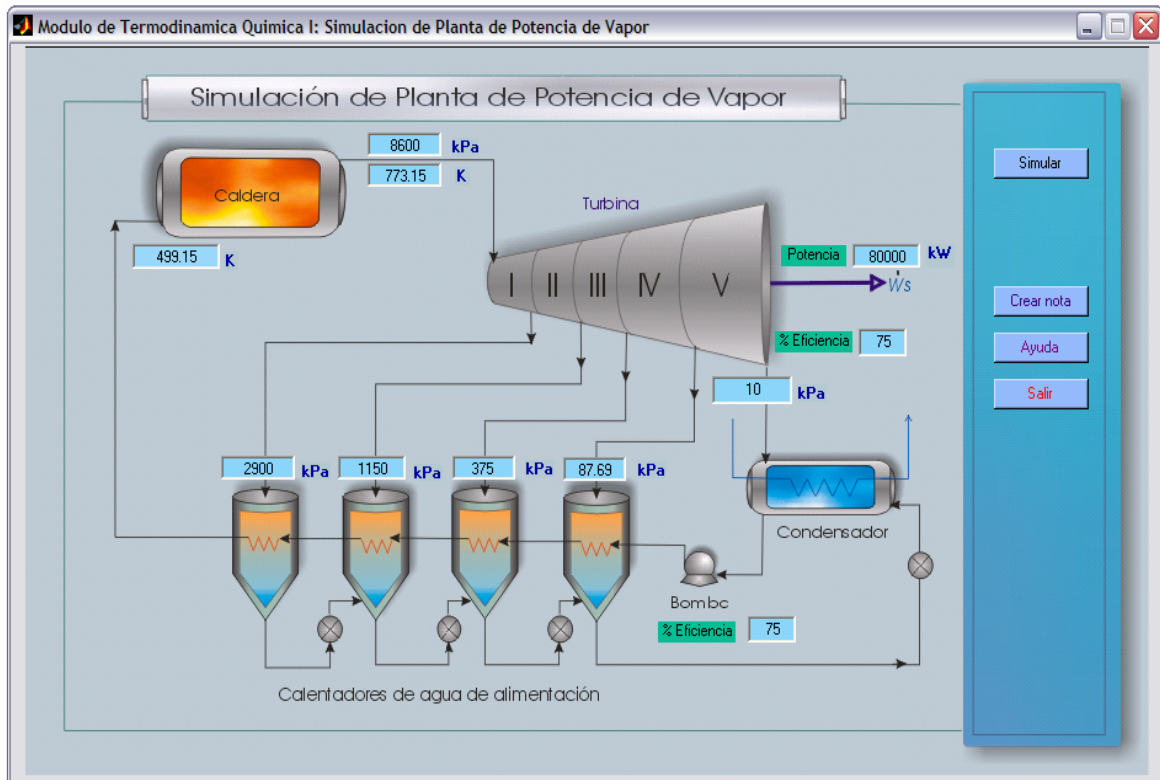


Fig. 3.31 Entrada de datos al proceso de simulación

Luego de ejecutar el botón de acción “Simular”, se inicia el proceso de simulación, apareciendo en pantalla la siguiente ventana de avance, de la fig. 3.32:

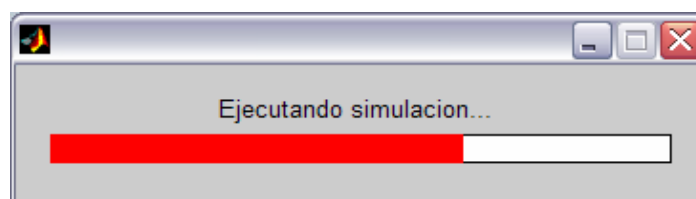


Fig. 3.32 Ventana de avance del proceso de simulación

Tal como se determinó en el desarrollo algorítmico del proceso, el punto de partida para la solución del problema es la unidad de proceso No. 11, correspondiente a la bomba, la cual genera información para la serie de calentadores, así sucesivamente como se analizó en el diagrama de flujo de información del proceso.

Luego se procede al cálculo de variables desconocidas en la serie de calentadores a partir del cambio de temperatura del agua de alimentación en la bomba. Siguiendo la secuencia del diagrama de flujo de información de la fig. 3.12 y el algoritmo de la fig. 3.16 de las secciones anteriores, la siguiente unidad de proceso a resolver es la No. 1, correspondiente a la caldera, cuya codificación se presenta el anexo A.3.

La siguiente unidad de proceso a resolverse es la turbina, comenzando por la primera sección (unidad de proceso No. 2), la cual recibe información de la caldera. Posteriormente se procede a resolver la unidad de proceso No. 7 (calentador 1), determinando la cantidad de vapor extraído de la sección de turbina, por medio de balances de materia y energía entre la salida de la turbina y el agua de alimentación a condiciones de líquido comprimido que fluye a través de la serie. Donde su codificación de acuerdo al algoritmo de la fig. 3.23.

De esta misma forma sucesivamente se realizan los cálculos para el resto de secciones de turbina y calentadores de agua de alimentación, hasta llegar a la siguiente etapa de proceso que corresponde al condensador, el cual recibe el vapor extraído de la sección V de turbina y la sumatoria del líquido condensado en la serie de calentadores.

Finalmente se realiza el cálculo de las variables para el ciclo completo y las velocidades de transferencia de calor en la caldera y condensador.

Cuando se han terminado de ejecutar todas funciones y líneas de programa, la ventana de avance de ejecución de la fig. 3.32 finaliza, y aparece en pantalla la ventana de la fig. 3.33 para dar a conocer que la simulación ha concluido:

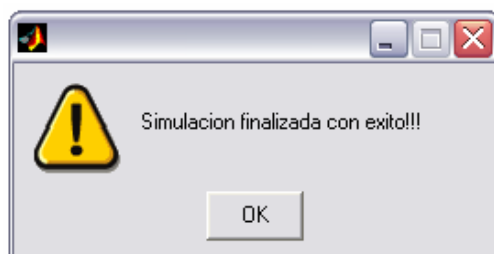


Fig. 3.33 Ventana de notificación de simulación concluida



### 3.1.7 Resultados de simulación de planta de potencia de vapor

Los resultados de la simulación del proceso son presentados en la siguiente ventana de la fig. 3.34:

Modulo de Termodinamica I: Resultados de Simulacion de Planta de Potencia de Vapor

**RESULTADOS DE SIMULACIÓN DE PLANTA DE POTENCIA DE VAPOR**

Ciclo	$-\dot{W}_{s\text{neto}}$	$-\dot{W}_{s\text{producido}}$	Eficiencia térmica	Flujo de vapor a la turbina	
	80000 kJ/s	811.447 kJ/kg	0.331719	97.2036 kg/s	
Unidad de proceso	$H_{\text{salida}}$	$W_{s\text{salida}}$	$T_{\text{salida}}$	Estado	vapor extraído
	<b>kJ/kg</b>	<b>kJ/kg</b>	<b>K</b>		<b>kg/s</b>
<b>TURBINA</b>					
Sec. I	3145.29	-239.881	637.076	Sobrecalentado	9.13882
Sec. II	2987.28	-158.015	547.843	Sobrecalentado	7.69006
Sec. III	2861.35	-125.93	475.092	Sobrecalentado	6.65751
Sec. IV	2730.77	-130.58	401.688	Sobrecalentado	5.83091
Sec. V	2573.72	-157.04	318.973	Vap. Humedo	67.8863
<b>CALENTADOR</b>	Agua de alimentación a caldera		Líquido condensado		
	$T_{\text{entrada}}$	$H_{\text{entrada}}$	$T_{\text{salida}}$	$H_{\text{salida}}$	
	<b>K</b>	<b>kJ/kg</b>	<b>K</b>	<b>kJ/kg</b>	
1	454.364	772.121	505.119	999.555	
2	409.578	578.57	459.196	789.905	
3	364.793	389.53	414.451	594.696	
4	320.007	203.337	369.15	402.2	
<b>CONDENSADOR</b>	Velocidad de transferencia de Calor en agua de enfriamiento		Flujo de agua de enfriamiento		
	-154388	kJ/s	1.49968 kg/s		
<b>CALDERA</b>	Velocidad de transferencia de Calor		Calor añadido		
	234388	kJ/s	2411.31 kJ/kg		
<b>BOMBA</b>	Trabajo de bomba		Incremento de temperatura del agua		
	1124.44	kJ/s	1.03394 K		

Imprimir Guardar Abrir Diagrama T-S Cerrar

Fig. 3.34 Ventana de resultados de la simulación del proceso

Como puede observarse en la fig. 3.34, la eficiencia del ciclo para la simulación del proceso es de 0.331719, comparada con la calculada en el ejemplo de base (Van Ness, 1997), que es de 0.3276, la diferencia es de 1.25%, y el trabajo producido para la simulación del proceso es de -811.447 kJ/kg, comparada con la calculada en el ejemplo del libro, de -804.0 kJ, la diferencia es de 0.92%, resultados que pueden ser considerados de un orden de error aceptable respecto a lo presentado en el libro.

En la ventana de la fig. 3.34 el botón de acción “Imprimir” permite hacer una copia impresa de los resultados, el botón de acción “Guardar”, almacena los resultados de la simulación en un archivo definido por el usuario, abriéndose el siguiente cuadro de diálogo de la fig. 3.35:

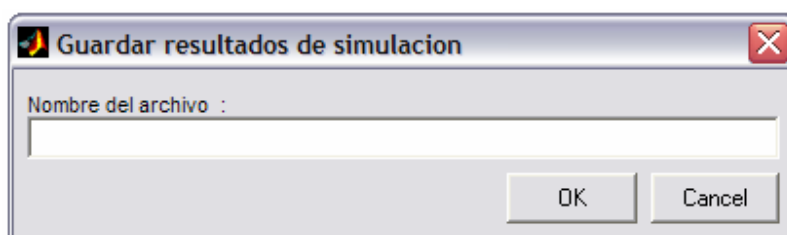


Fig. 3.35 Cuadro de diálogo de almacenamiento de resultados

De igual forma, el botón de acción “Abrir”, permite al usuario abrir resultados de una sesión anterior almacenados previamente, abriéndose el siguiente cuadro de diálogo de la fig. 3.36:

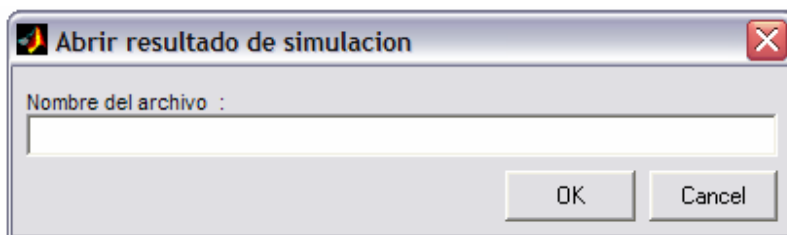


Fig. 3.36 Cuadro de diálogo de apertura de resultados almacenados

El botón de acción “Diagrama T-S”, permite ver el Diagrama Temperatura-Entropía para el ciclo termodinámico del proceso simulado, en el cual pueden identificarse cada una de las etapas del proceso y los cambios termodinámicos que ocurren entre cada una, y el comportamiento del Ciclo de Rankine con regeneración de calor del proceso, el cual se presenta en la fig. 3.37:

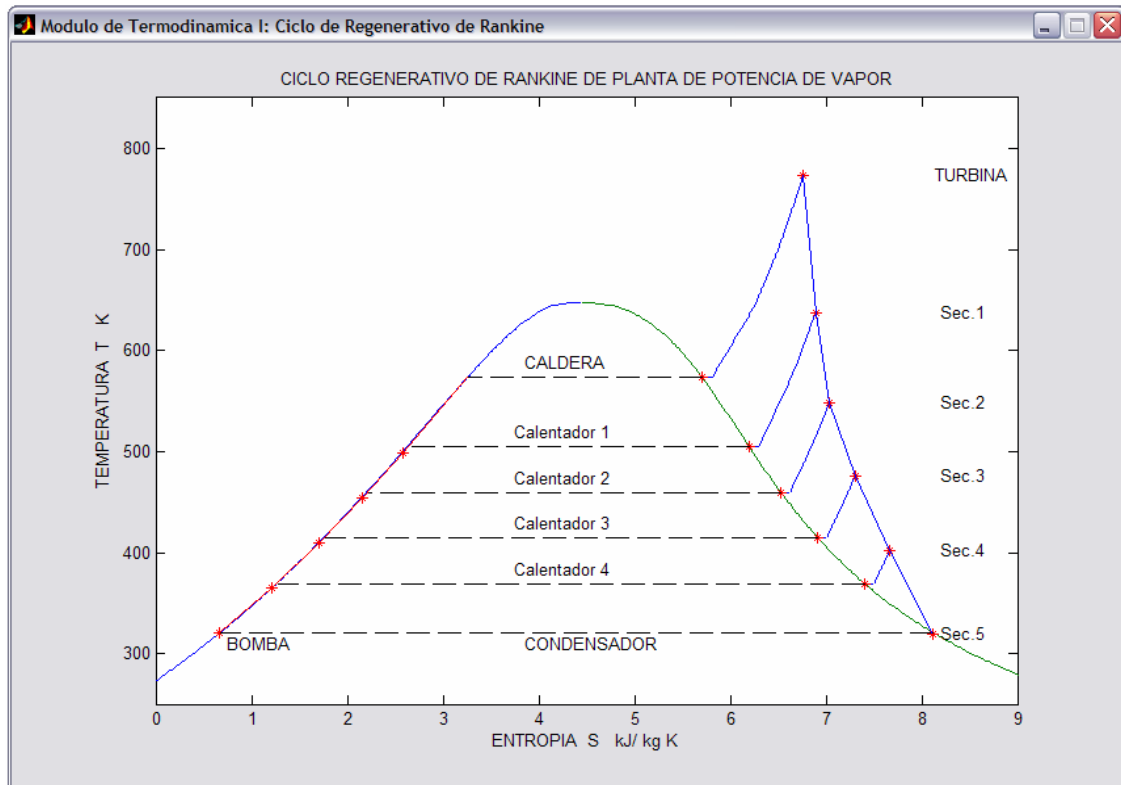


Fig. 3.37 Diagrama T-S para la Planta de Potencia de Vapor simulada

En el diagrama de la fig. 3.37 el incremento de la temperatura del agua por la bomba no puede apreciarse, pues como fue calculado en el programa, es de 1.0033 K. Puede observarse el incremento de temperatura del líquido comprimido a través de la serie de calentadores hasta la entrada a la caldera, la cual lleva el líquido comprimido, pasando por un cambio de fase líquido-vapor, hasta vapor sobrecalentado a la entrada de la sección I de turbina, en las cuales a su vez se observa el vapor extraído de cada sección a presión constante y llevado hasta un vapor saturado y luego líquido saturado por cada calentador, puede observarse también la línea de entropía creciente para el proceso real hasta la sección V de turbina, el cual finalmente el flujo extraído de la última sección de turbina es condensado y mezclado con el fluido acumulado en la serie de calentadores y llevado a la entrada de la bomba.

La codificación para la generación de este gráfico se presenta en el anexo A.4.

## 3.2 Simulación de un Sistema de Refrigeración por Absorción de Amoníaco

### 3.2.1 Principios básicos del proceso

La refrigeración tiene sus aplicaciones en acondicionamiento de aire de edificios y en el tratamiento, transportación y conservación de alimentos y bebidas. También encuentra uso industrial a gran escala, por ejemplo en la fabricación de hielo y la deshidratación de gases.

La palabra *refrigeración* significa mantenimiento de una temperatura inferior a la del ambiente. Esto requiere absorción continua de calor a un bajo nivel de temperatura a menudo logrado por evaporación de un líquido en un proceso de flujo continuo en estado uniforme. El vapor que se forma puede regresar a su estado líquido original para su evaporación en alguna de sus dos formas, siendo la más común la compresión y condensación del mismo. Alternativamente puede ser absorbida por un líquido de volatilidad baja, del cual es evaporado posteriormente a presión más elevada. (Van Ness, 1997).

En un proceso de refrigeración continua, el calor absorbido a una temperatura baja es desechado ininterrumpidamente al ambiente, que se encuentra a una temperatura más elevada. En esencia, un ciclo de refrigeración es un ciclo invertido de una máquina térmica. El calor es transferido de un nivel bajo de temperatura a uno más alto; de acuerdo con la segunda ley, esto requiere de una fuente externa de energía. El refrigerador ideal, como una máquina térmica ideal, opera en un ciclo de Carnot, que existe en dos etapas isotérmicas en las cuales el calor  $|Q_C|$  es absorbido a la temperatura más baja  $T_C$  y el calor  $|Q_H|$  es desechado a la temperatura más elevada  $T_H$ , y en dos etapas adiabáticas. El ciclo requiere la adición de trabajo neto  $W$  al sistema. Como  $\Delta U$  del fluido de trabajo es cero para el ciclo, de la primera ley de la termodinámica<sup>2</sup> da:

$$W = |Q_H| - |Q_C| \quad \text{ec.3.22}$$

Una medida usual de la efectividad de un refrigerador se llama *coeficiente de desempeño*, que se define como:

---

<sup>2</sup> primera Ley de la Termodinámica (sistema cerrado):  $\Delta U = Q + W$

$$\omega = \frac{\text{calor absorbido a la temperatura más baja}}{\text{trabajo neto}}$$

Así,

$$\omega = \frac{|Q_C|}{W}$$

ec. 3.24

Esta ecuación se aplica a un refrigerador que opera en un ciclo de Carnot, y da el máximo valor posible de  $\omega$  para cualquier refrigerador que esté operando entre los valores  $T_H$  y  $T_C$ . Además muestra con claridad que el efecto de refrigeración por unidad de trabajo disminuye a medida que decrece la temperatura  $T_C$  de absorción de calor y a medida que aumenta la temperatura  $T_H$  de expulsión de calor.

El proceso de refrigeración puede llevarse a cabo por dos métodos:

1. Refrigeración por compresión
2. Refrigeración por absorción

En este trabajo se escoge la alternativa de Refrigeración por Absorción dado que la temática abordada es de amplia aplicación en Ingeniería Química.

La refrigeración útil se logra de la misma manera en ambos sistemas, en cuanto a lo que es la evaporación de un líquido en un evaporador, utilizando el calor latente de vaporización para tener efecto de enfriamiento. Ambos sistemas, utilizan un condensador para remover el calor del vapor refrigerante a una alta presión, y regresarlo a su estado líquido original. Ambos utilizan un dispositivo de control de flujo o de expansión. (Pita, 1991).

En el sistema de absorción se utiliza la energía calorífica, para elevar la presión del refrigerante. La baja presión del evaporador se mantiene, mediante el uso de otra sustancia llamada absorbente. Dos componentes, el absorbedor y el regenerador, llenan una función semejante a la del compresor. En el sistema de absorción se utilizan a menudo componentes auxiliares como las bombas.

Algunos pares de sustancias tienen una afinidad o atracción mutua, de tal manera que cuando hacen contacto, una de las dos absorbe a la otra. La sustancia que absorbe se llama el absorbente, y la sustancia absorbida es el refrigerante.

Una razón por la cual el sistema de absorción es popular y versátil, se debe a que opera directamente con la energía calorífica. Es por ello que en cualquier lugar en donde se disponga con vapor residual, agua caliente o gases de combustión, se toma en consideración la refrigeración por absorción.

El absorbente es un líquido y la otra sustancia, que sirve como el refrigerante del sistema, se encuentra en estado gaseoso (de vapor), cuando es absorbida. Dos pares de sustancias que se utilizan con buen éxito en los sistemas de absorción está compuesto de agua y amoníaco. El agua es el absorbente, y el amoníaco el refrigerante. El otro par es el bromuro de litio y el agua. En este caso, el bromuro de litio es el absorbente y el agua es el refrigerante, (Pita, 1991).

En los sistemas de refrigeración por absorción, la mezcla de las dos sustancias normalmente se encuentra en estado líquido. Cuando la proporción del absorbente en la mezcla es elevada y la proporción del refrigerante es baja, a la solución se le llama solución concentrada o fuerte; y cuando la proporción del absorbente es baja y la del refrigerante es elevada, se le llama solución diluida o débil. La concentración se expresa por lo general como el porcentaje en peso del absorbente. Una solución más concentrada puede absorber una mayor cantidad de refrigerante, con mayor rapidez. Una solución puede absorber una cantidad máxima de refrigerante; cuando se diluye demasiado, ya no es capaz de absorber más refrigerante, (Pita, 1991).

La temperatura de evaporación del refrigerante depende de sus características de presión y temperatura de saturación. La temperatura a la cual el refrigerante se evapora varía con la presión del evaporador. La presión debe ser lo suficientemente baja, para que la temperatura resultante de evaporación se encuentre al valor que se necesita para la aplicación de la refrigeración.

En los sistemas de compresión de vapor, la baja presión en el evaporador se mantiene mediante la acción de succión del bombeo del compresor, como se observa en la figura 3.38 (a), la cual remueve el refrigerante tan pronto como se evapora, evitando así que se eleve la presión.

La figura 3.38 (b) muestra en forma esquemática, cómo se utiliza el proceso de absorción para mantener esta baja presión. El evaporador contiene el refrigerante (amoníaco). El absorbedor es un recipiente adjunto que contiene una solución fuerte (concentrada) de agua y amoníaco. Los dos recipientes se hallan conectados de manera que el vapor pueda fluir libremente entre los dos.

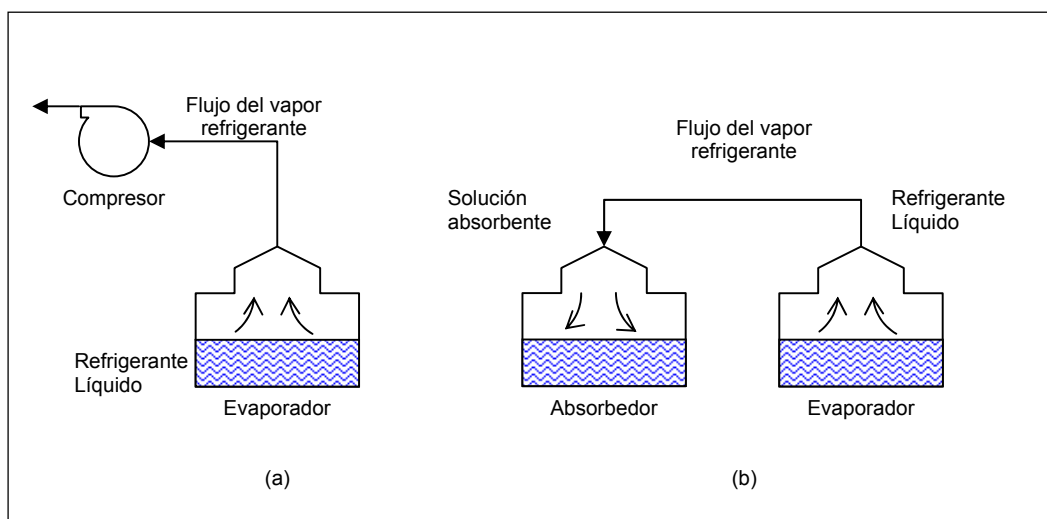


Fig. 3.38 Comparación de las maneras de obtener el flujo y la succión de un refrigerante desde el evaporador, en los sistemas de absorción y de compresión de vapor, (a) sistema de compresión de vapor, (b) sistema de absorción.

Fuente: Pita, 1991

A los recipientes se les vacía del aire hasta que se encuentran a una presión extremadamente baja. El amoníaco en el evaporador comenzará a vaporizarse súbitamente; esto es, hervirá. El efecto refrigerante del calor latente de vaporización enfriará el amoníaco no evaporado, lográndose la refrigeración, (Pita, 1991).

El vapor de amoníaco producido llena el espacio evacuado de ambos recipientes. La presión en el evaporador aumenta a medida que se evapora más refrigerante. De igual forma, la temperatura de evaporación también aumenta, y se pierde la refrigeración a una temperatura aceptablemente baja. Sin embargo, esto se evita por la acción del absorbente.

El vapor de amoníaco que llena los recipientes hace contacto con la superficie de la solución fuerte absorbente, y ésta lo absorbe. Esto reduce la presión en el espacio, creándose un ligero gradiente de presión de la superficie del refrigerante en evaporación hacia el absorbente, lo que estimula el flujo del vapor de agua. Esto es, el absorbedor retira el vapor de amoníaco a medida que éste se produce, manteniendo con ello la presión baja y la temperatura en el evaporador. Esta acción del absorbedor reemplaza el efecto de succión creado por el compresor mecánico (Pita, 1991).

El refrigerante se utiliza para enfriar el agua que circula a través de una serie de tubos en el evaporador. Entonces se hace circular el agua fría hasta la carga a enfriar. Asimismo, el agua refrigerante se recircula continuamente mediante una bomba del evaporador, a través de un cabezal equipado con boquillas de aspersion, haciéndola pasar por fuera de la tubería de agua fría, (Pita, 1991).

El calor procedente del agua del sistema (a una temperatura ligeramente más alta que el refrigerante) evapora el amoníaco refrigerante. Esto enfría el agua del sistema.

Una combinación de bomba y boquilla de aspersion, se utiliza, asimismo, para rociar la solución concentrada del absorbedor en el espacio del absorbedor. Esto aumenta el contacto en el área superficial entre la solución y el vapor de agua, aumentando, asimismo, la eficacia del proceso de absorción. Es obvio que se dispone de algunos medios para recuperar el refrigerante, si es que el sistema se va a utilizar más de una vez. Se necesitan dos etapas básicas. En primer lugar, es necesario separar el refrigerante de la solución. Esto se logra calentando la solución débil, hasta alcanzar una temperatura a la cual el agua se separa por ebullición, lo cual se realiza en un componente llamado generador. En segundo lugar, el vapor de agua se debe condensar hasta alcanzar el estado líquido, de manera que esté en condiciones para usarse nuevamente en el evaporador, (Pita, 1991).

En la figura 3.39 se muestra una disposición práctica utilizada para recuperar el refrigerante, de modo que el sistema pueda operarse continuamente. La solución débil se bombea del absorbedor a un recipiente llamado regenerador o concentrador. Se aplica calor a la solución, de lo que resulta la ebullición del amoníaco.



La solución fuerte, ahora reconcentrada, se retorna al absorbedor para luego rociarse de manera que penetre en el vapor de agua refrigerante de los alrededores, en donde tiene lugar la absorción. La fuente de calor es, con frecuencia, vapor de agua o agua caliente que circula en un serpentín. La aplicación directa de los gases calientes de la combustión puede, asimismo utilizarse, si bien, por supuesto, los aparatos son físicamente diferentes, (Pita, 1991).

El espacio del generador está conectado a un cuarto componente que es el condensador. El vapor de agua llena el espacio en los recipientes. A través de la tubería del condensador se hace circular agua de enfriamiento. La temperatura del agua es más baja que la temperatura de condensación del vapor de agua a la presión de condensación. El vapor de agua, por lo tanto, cede su calor de condensación, y se condensa como líquido, acumulándose en el fondo del condensador, (Pita, 1991).

El evaporador y el absorbedor se hallan a una temperatura extremadamente baja, y pueden considerarse como el lado de baja del sistema. La presión desarrollada en el generador y el condensador por el proceso de calentamiento es más elevada; estos dos componentes pueden considerarse el lado de alta del sistema. (Si bien la presión es más elevada en el generador y el absorbedor, todavía está muy por debajo de la presión atmosférica).

A fin de mantener el diferencial de presión entre el lado de alta y el lado de baja, y de causar un efecto de enfriamiento por vaporización súbita en el refrigerante, se provee un orificio entre el condensador y el evaporador. Esto sirve como un dispositivo de expansión, semejante al que funciona en el sistema de compresión de vapor. Esto completa el ciclo, (Pita, 1991).

El trabajo requerido por un refrigerador de Carnot que absorbe calor a una temperatura  $T_C$  y expulsa calor a la temperatura del ambiente circundante  $T_S$ , es:

$$W = \frac{T_S - T_C}{T_C} |Q_C| \quad \text{ec. 3.25}$$

donde  $|Q_C|$  es el calor absorbido. Si se dispone de una fuente de calor a una temperatura superior a la del ambiente, digamos  $T_H$ , entonces el trabajo se puede obtener de una máquina de Carnot que opere entre ésta temperatura y la temperatura del ambiente  $T_S$ . El Calor que se requiere  $|Q_H|$  para la producción de trabajo  $|W|$  se encuentra a partir de la siguiente ecuación:

$$\eta = \frac{|W|}{|Q_H|} = 1 - \frac{T_S}{T_H} \quad \text{ec. 3.26}$$

Despejando  $|Q_H|$  de la ecuación 3.26 y sustituyendo  $|W|$  de la ecuación 3.25 se obtiene:

$$|Q_H| = |Q_C| \frac{T_H}{T_H - T_S} \frac{T_S - T_C}{T_C} \quad \text{ec. 3.27}$$

El valor de  $|Q_H|/|Q_C|$  dado por esta ecuación es un mínimo, dado que el ciclo de Carnot no se puede lograr en la práctica, (Van Ness, 1997)

El sistema de refrigeración por absorción que opera con agua como refrigerante y la solución de bromuro de litio como absorbente, está limitado a temperaturas de refrigeración que se encuentran arriba del punto de congelación del agua. Para temperaturas más bajas, el sistema recomendado opera con amoníaco como refrigerante y agua como disolvente, y para cual se desarrollará la *Simulación de un sistema de refrigeración por absorción de amoníaco*.

### 3.2.2 Planteamiento del problema (Van Ness, 1959)

El sistema de absorción mostrado en la fig. 3.39, emplea amoníaco como refrigerante y agua como absorbente.

El calor es proporcionado al regenerador por condensación del vapor a presión atmosférica. La temperatura del regenerador es de 175 °F, las temperaturas del condensador y absorbedor son de 70 °F. El amoníaco es evaporado a 10 °F.

Asumiendo que la operación es adiabática, excepto donde el calor es intencionalmente adicionado o retirado, y despreciando la caída de presión debido a la fricción del fluido, habrá que determinar lo siguiente:

- La presión en cada parte del sistema.
- La composición de la solución débil y fuerte de amoníaco.
- El trabajo de bomba mínimo requerido por tonelada de refrigeración.
- El calor transferido en el regenerador, condensador, y absorbedor por tonelada de refrigeración (12,000 BTU/h).

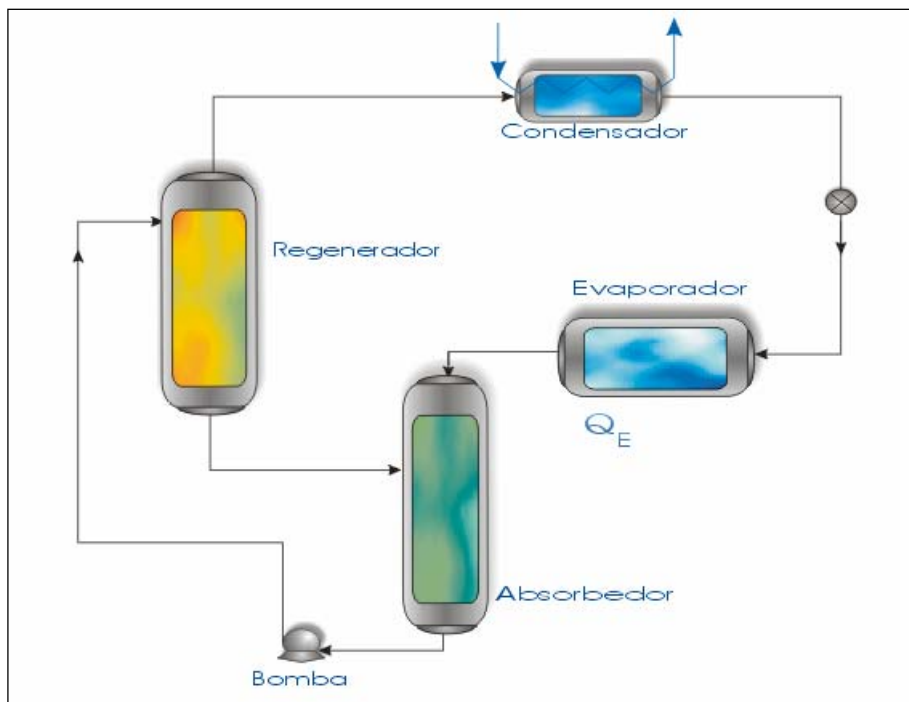


Fig. 3.39 Sistema de refrigeración por absorción de amoníaco

Fuente: Van Ness, 1959

### 3.1.3 Definición de variables

Identificando las variables del sistema en estudio, podemos clasificarlas en:

- a. Variables de entrada
- b. Variables de proceso
- c. Variables de salida

#### a. Variables de entrada

Las variables de entrada para el proceso descrito se presentan en la tabla 3.5:

Tabla 3.5  
Variables de entrada en Simulación de Sistema de Refrigeración por Absorción de Amoníaco

Variable	Descripción
Qe	Calor transferido en evaporador
Tr	Temperatura en regenerador
Te	Temperatura en evaporador
Tc	Temperatura en condensador
Ta	Temperatura en absorbedor

#### b. Variables de proceso

Las variables de proceso se presentan en la tabla 3.6:

Tabla 3.6  
Variables de proceso en Simulación de Sistema de Refrigeración por Absorción de Amoníaco

Variable	Descripción
m	Razón de circulación de amoníaco en evaporador
x	Flujo de solución fuerte del absorbedor al regenerador
y	Flujo de solución débil del regenerador al absorbedor
ds	Densidad de solución débil
Hb	Entalpía de vapor sobrecalentado a la salida del regenerador
Hc	Entalpía de líquido saturado a la salida del condensador
He	Entalpía de vapor saturado a la salida del evaporador
Hr	Entalpía de solución débil a la salida del regenerador
Hf	Entalpía de solución fuerte a la entrada del regenerador
Hg	Entalpía de solución fuerte a la salida del absorbedor

c. Variables de salida

Las variables de proceso se presentan en la tabla 3.7:

Tabla 3.7  
Variables de salida en Simulación de Sistema de Refrigeración por Absorción de Amoníaco

Variable	Descripción
P1	Presión en evaporador y absorbedor
P2	Presión en condensador y regenerador
Xg	Composición de solución fuerte
Xe	Composición de solución débil
Wb	Trabajo de bomba
Qr	Calor transferido en regenerador
Qc	Calor transferido en condensador
Qa	Calor transferido en absorbedor
Qrmin	Calor mínimo transferido en regenerador
w	Coefficiente de desempeño
n	Eficiencia del ciclo de refrigeración

### 3.2.3 Modelamiento del proceso

Desarrollar modelos matemáticos que representen el comportamiento del proceso y de cada una de sus unidades, será el punto de partida para lograr la simulación del proceso. En éste sistema se identifican las siguientes unidades de proceso:

- a. Evaporador
- b. Absorbedor
- c. Regenerador
- d. Condensador
- e. Válvula de expansión
- f. Bomba

a. Modelamiento de Evaporador

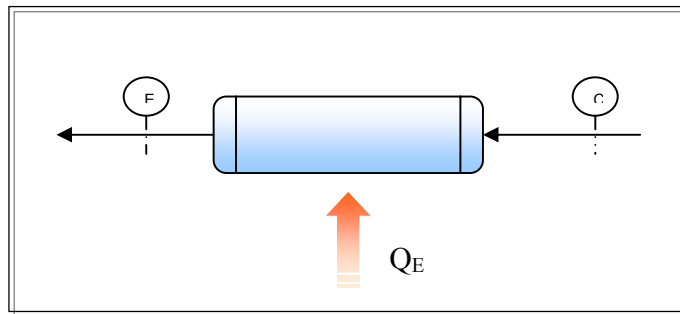


Fig. 3.40 Unidad de proceso: Evaporador

Fuente: construcción propia

El balance de energía da como resultado la razón de circulación de refrigerante en el evaporador:

$$m = \frac{Q_E}{\hat{H}_E - \hat{H}_C} \quad \text{ec. 3.28}$$

b. Modelamiento del Absorbedor

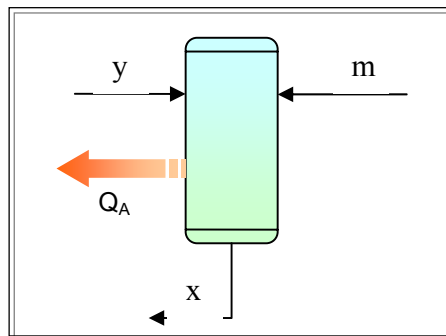


Fig. 3.41 Unidad de proceso: Absorbedor

Fuente: construcción propia

El balance de materia es:

$$\text{Amoníaco: } X_e(y) + m = X_g(x) \quad \text{ecs. 3.29}$$

$$\text{Global : } y + m = x$$

Donde : x, y, m = (flujos máscicos lbmol/h, kgmol/h)

El balance de energía resulta:

$$m \hat{H}_E + y \hat{H}_G = x \hat{H}_R + Q_A \quad \text{ec. 3.30}$$

c. Modelamiento de bomba

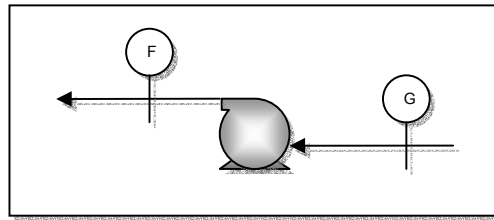


Fig. 3.42 Unidad de proceso: Bomba

Fuente: construcción propia

El trabajo de bomba es:

$$W_S = (\Delta H)_S = - \int_{P_a}^{P_2} V dP \quad (\text{ec. 3.15})$$

Integrando:

$$W_S = (\Delta H)_S = - V (P_2 - P_1) \quad (\text{ec. 3.16})$$

donde V = Volumen específico de solución

expresando el volumen específico en función de la densidad y el flujo de la solución:

$$W_S = - \frac{y}{\rho_S} (P_2 - P_1) \quad \text{ec. 3.31}$$

d. Modelamiento del regenerador

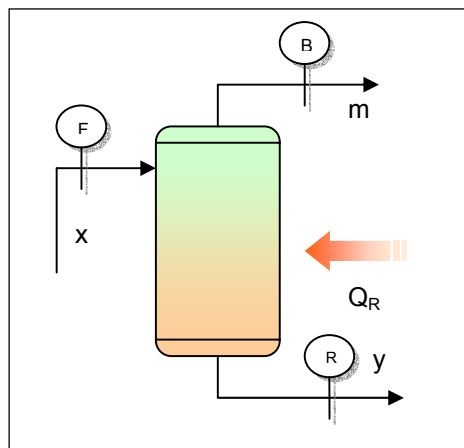


Fig. 3.43 Unidad de proceso: Regenerador

El balance de energía es:

$$x \hat{H}_F + Q_R = y \hat{H}_R + m \hat{H}_B \quad \text{ec. 3.32}$$

e. Modelamiento del condensador

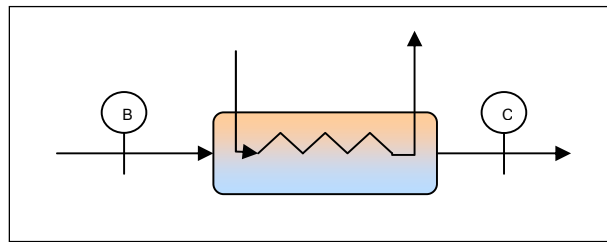


Fig. 3.44 Unidad de proceso: Condensador

Fuente: construcción propia

El calor removido en esta unidad de proceso es:

$$Q_C = m (\hat{H}_C - \hat{H}_B) \quad \text{ec. 3.32}$$

f. Válvula de expansión

En esta unidad ocurre una expansión isentrópica dando como resultado una caída de presión  $\Delta P = P_2 - P_1$

3.2.4 Desarrollo algorítmico

Las unidades de proceso y corrientes de flujo para el sistema a simular se enumeran como se presenta en la figura 3.45:

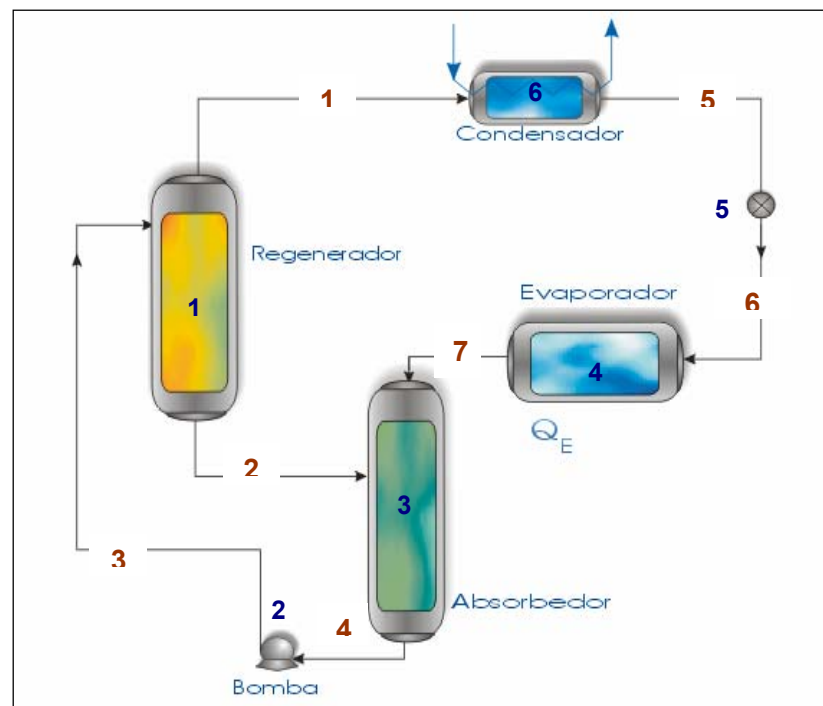


Fig. 3.45 Identificación de unidades de proceso y corrientes de flujo de fig. 3.39

Fuente: construcción propia



El diagrama de flujo de información (DFI), para el proceso de la fig. 3.45, es el que se presenta en la figura 3.46:

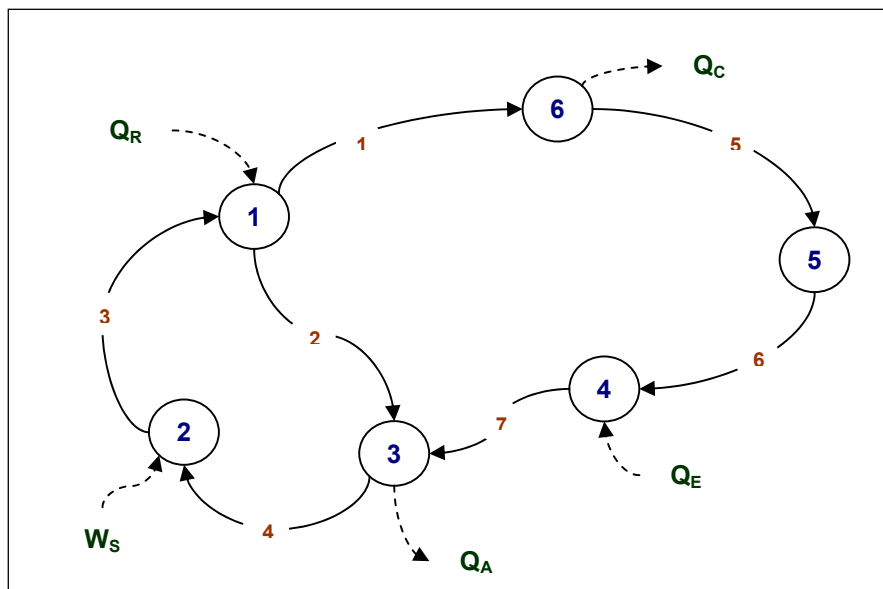


Fig. 3.46 Diagrama de flujo de información para proceso de fig. 3.45

Fuente: construcción propia

En el diagrama de la fig. 3.46 puede observarse el flujo de información de las condiciones termodinámicas y circulación de masa generados por los modelos de cada unidad de proceso, y asimismo la información general generada por el ciclo, esto es el resultado de calor suministrado y removido, y el trabajo de bomba.

Para la solución a éste proceso, se identificarán las variables desconocidas que con la información proporcionada pueden ser determinadas, estas son:

- La presión en cada parte del sistema
- La composición de la solución fuerte y débil

La solución de amoníaco en el absorbedor tiene una presión de vapor  $P_1$  a  $T_A$  y la solución en el regenerador tiene una presión de vapor  $P_2$  a  $T_R$ . Para su cálculo se desarrollan los siguientes algoritmos de solución, de las figuras 3.47 a 3.55.

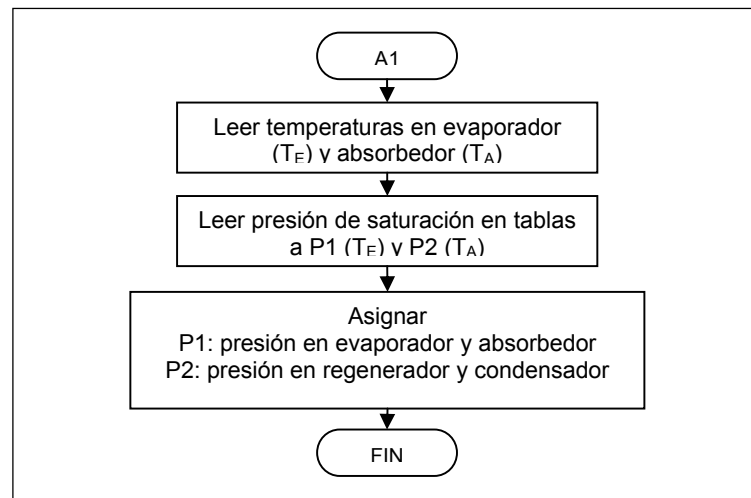


Fig. 3.47 Algoritmo de solución a presiones en cada parte del sistema

El incremento de presión entre absorbedor–regenerador es debido a la bomba y la caída de presión entre condensador–evaporador a la válvula de expansión. Posteriormente habrá de determinarse las concentraciones de la solución débil y fuerte entre estas unidades de proceso, según el algoritmo de la figura 3.48:

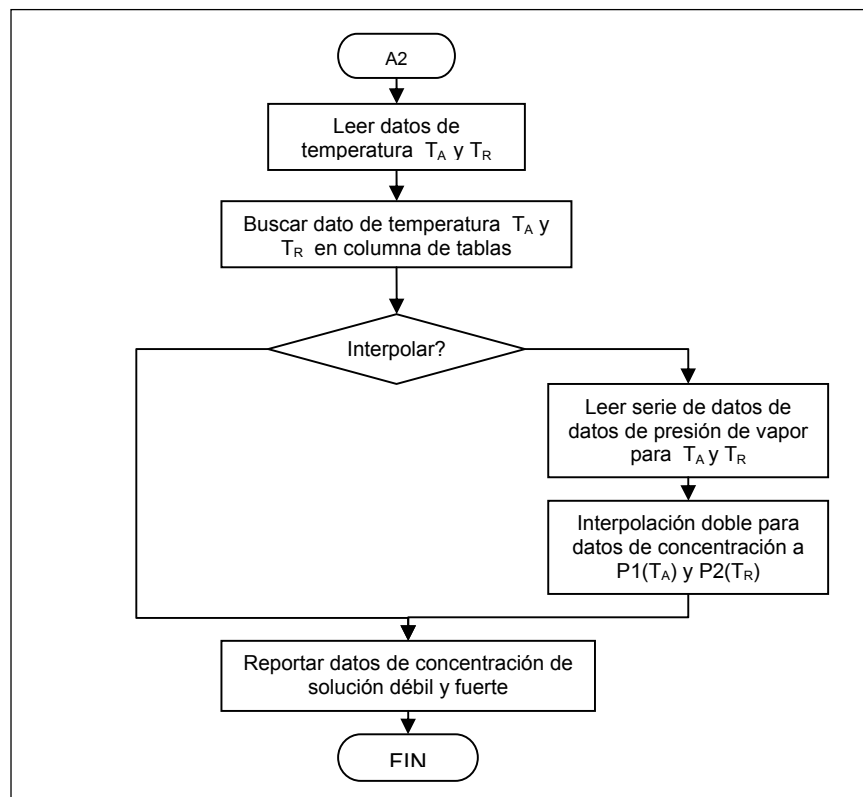


Fig. 3.48 Algoritmo de cálculo de concentraciones de soluciones débil y fuerte

Con la información generada por los algoritmos de las fig. 3.48 y 3.49 puede iniciarse el desarrollo de los algoritmos de las unidades de proceso. Partiendo del dato de calor suministrado en el evaporador (calor de refrigeración), como base para la solución del sistema, el algoritmo solución a la unidad de proceso No. 4 (evaporador) es el de la figura 3.49:

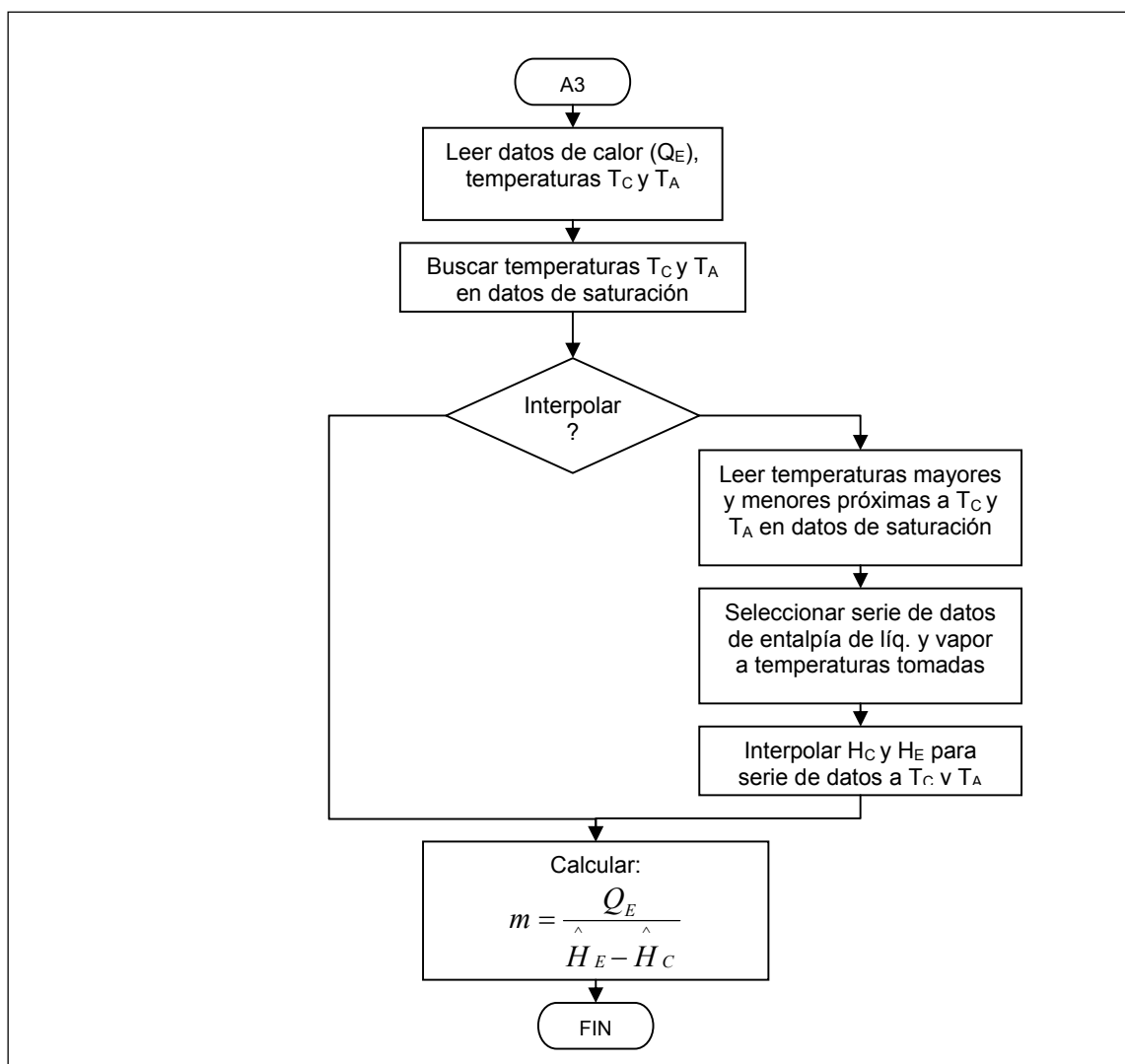


Fig. 3.49 Algoritmo de cálculo de unidad de proceso: Evaporador

Este algoritmo le proporciona información a las unidades de operación 1, 2 y 3 (absorbedor, bomba y regenerador), este es la razón de circulación de refrigerante (“*m*”) a través del evaporador, con el cual se resolverá el balance de materia en la unidad 3 (absorbedor), como se presenta en el algoritmo de la figura 3.50:

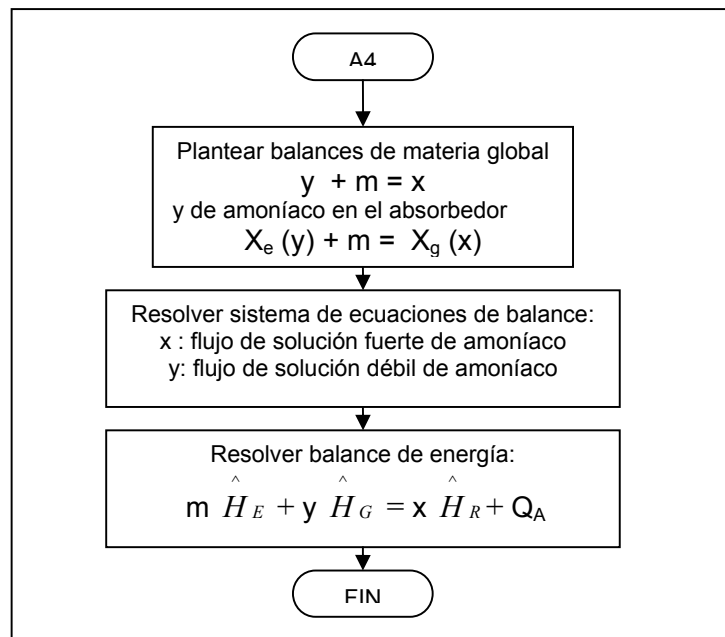


Fig. 3.50 Algoritmo de unidad de proceso: Absorbedor

La siguiente unidad de proceso a resolver corresponde a la No. 2 (bomba), para la cual el algoritmo solución de la figura 3.51:

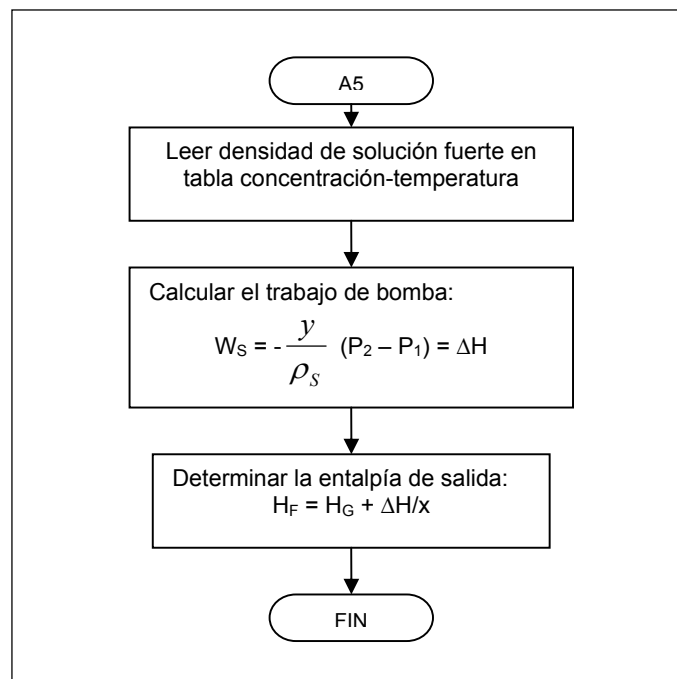


Fig. 3.51 Algoritmo de unidad de proceso: Bomba

Este algoritmo le proporciona información a la siguiente unidad de proceso (regenerador), acerca de la entalpía a la salida de la bomba, por medio de la cual se determina el calor suministrado en el regenerador, se presenta en la figura 3.52:

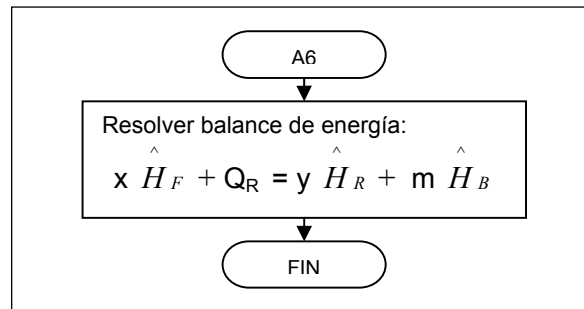


Fig. 3.52 Algoritmo de unidad de proceso: Regenerador

Luego, la siguiente unidad de proceso a resolver corresponde al condensador (unidad No. 6), la cual se resuelve mediante el algoritmo de la figura 3.53:



Fig. 3.54 Algoritmo de unidad de proceso: Condensador

Finalmente los cálculos para el ciclo termodinámico a partir de la información generada por los algoritmos anteriores se presenta en la figura 3.55:

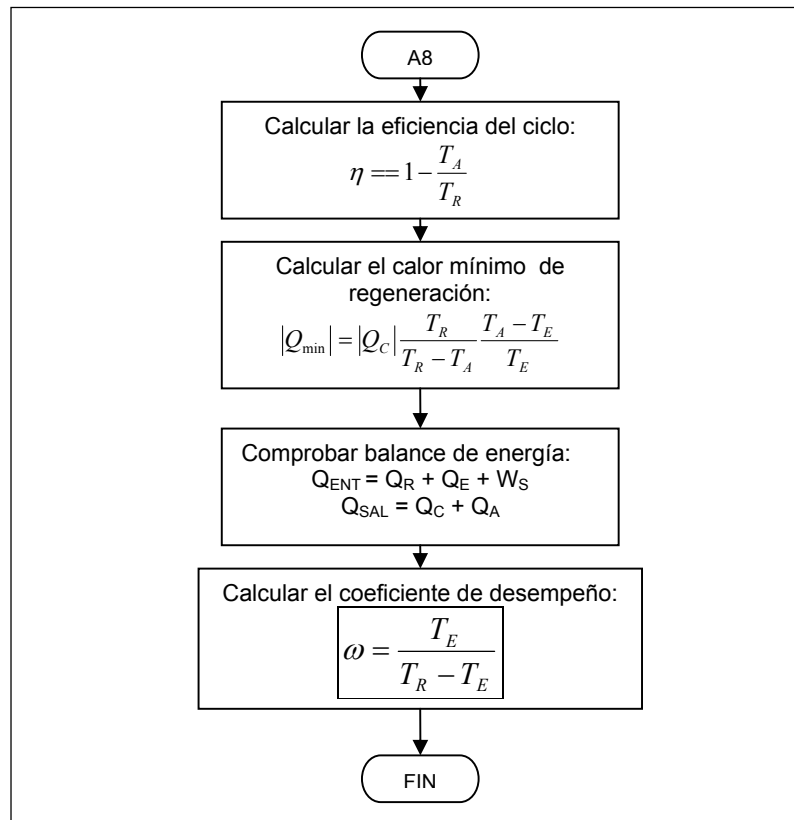


Fig. 3.55 Algoritmo de cálculo del ciclo

Ahora que han sido desarrollados los algoritmos solución, estos son transformados mediante el lenguaje de programación utilizado en la simulación anterior, MATLAB.

### 3.2.5 Simulación del proceso

En cuanto a las variables y ecuaciones que modelan cada unidad individual del proceso, la técnica de simulación que conviene aplicar es la *Simulación modular secuencial*, pues plantear un sistema de ecuaciones que modelen el proceso completo resultará un sistema bastante complejo y dificultad de convergencia.

El programa principal utiliza las siguientes funciones, para la lectura de datos de las tablas de vapor y propiedades termodinámicas, tal como se presentó en los algoritmos desarrollados en la sección anterior:

Tabla 3.4

Resumen de funciones creadas para lectura de valores en tablas de vapor

Función	Resultado
PTX(T,P)	Concentración de solución a presión y temperatura dada (T,P)
DENS(T,X)	Densidad de solución a temperatura y concentración dados (T,X)
HSCAL(T,P)	Entalpía de vapor de amoníaco sobrecalentado a T y P dados (T,P)
ENTALX(X,T)	Entalpía de solución de amoníaco a T y concentración dada (X,T)

La codificación de estas funciones se presentan en el anexo B.1:

Seleccionado el sistema de unidades en una ventana similar al de la fig. 3.26, aparece la ventana de la figura 3.56 de entrada de datos al programa de simulación:

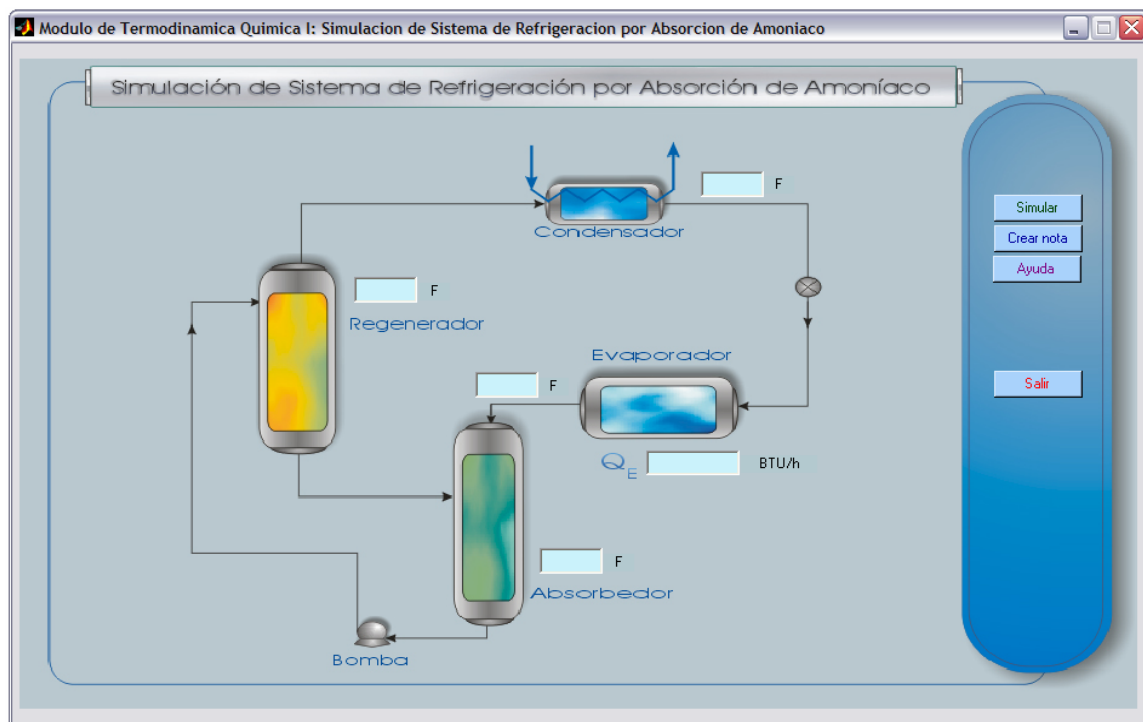


Fig. 3.56 Ventana de entrada de datos al programa de simulación

Esta ventana posee los botones de acción: “Simular”, “Crear nota”, “Ayuda” y “Salir”, los cuales al ejecutarse poseen similares acciones a las presentadas en la “Simulación de Planta de Potencia de Vapor”.

En la fig. 3.57 se muestra la ventana de ayuda para el programa de refrigeración por absorción de amoníaco y en la fig. 3.58 el formato para la entrada de datos.

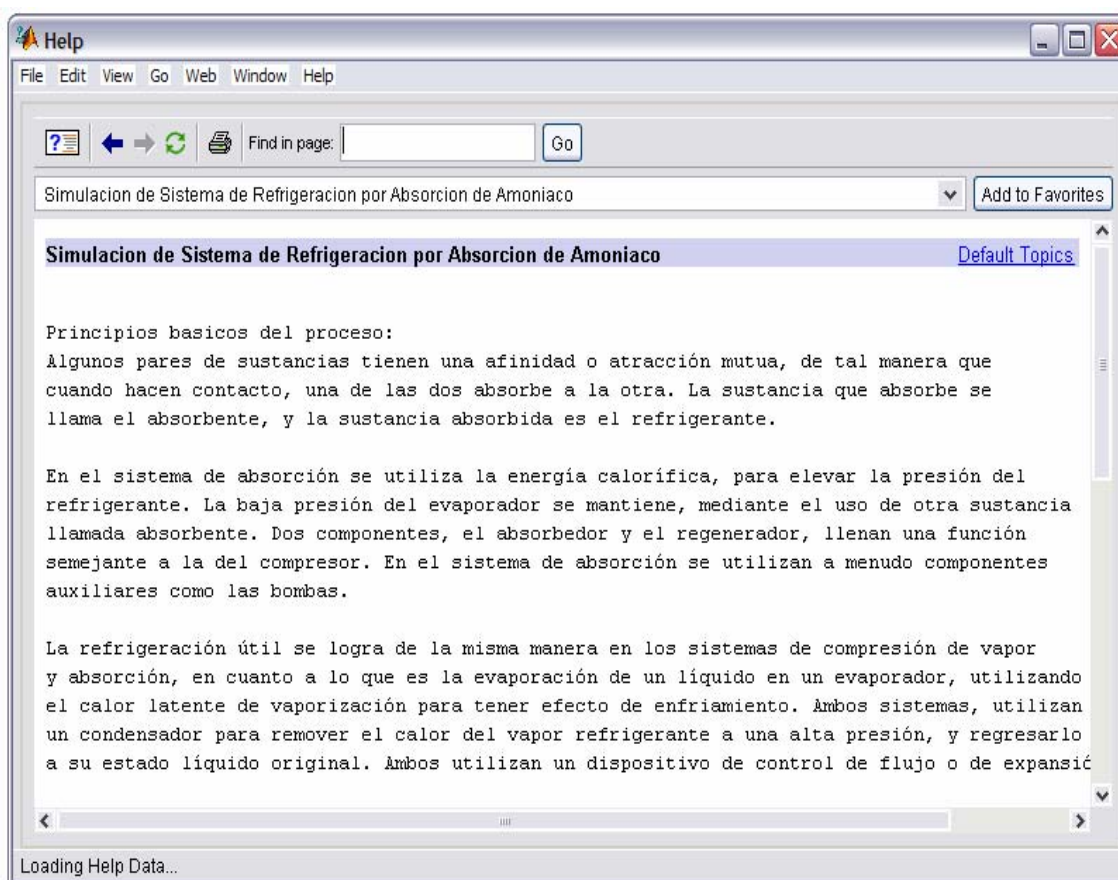


Fig. 3.57 Ventana de ayuda sobre el programa de simulación



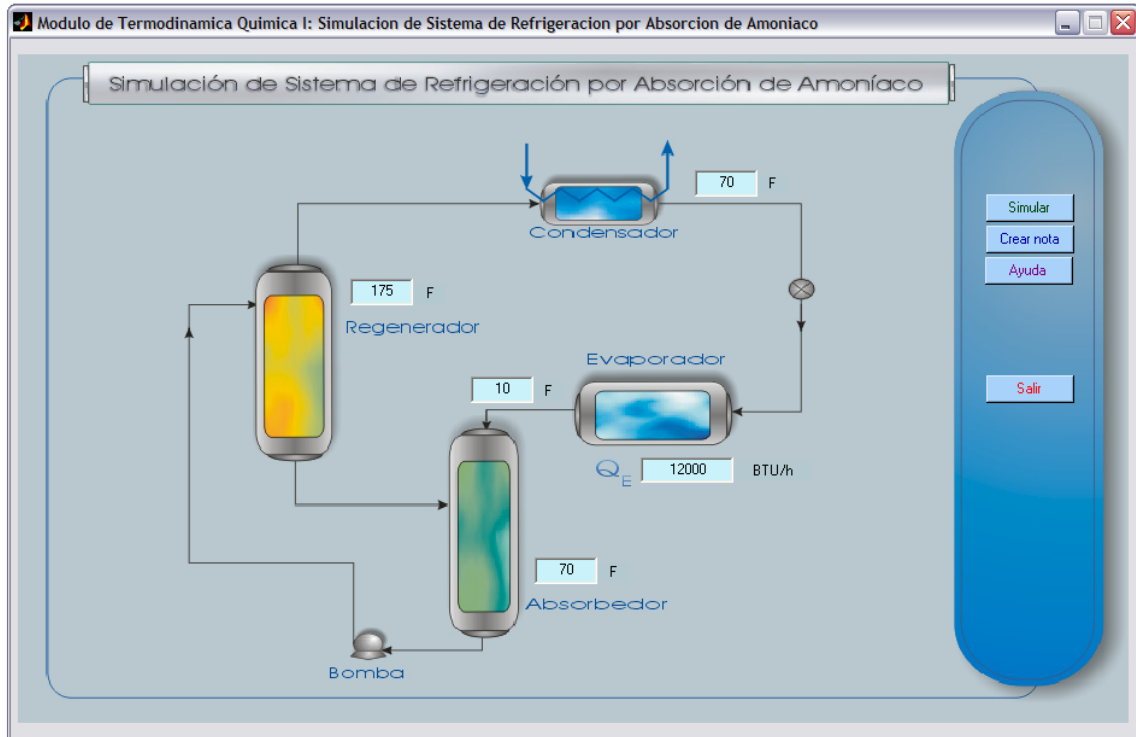


Fig. 3.58 Entrada de datos al programa de simulación

Introducidos todos los datos al programa se ejecuta el botón de acción "Simular", apareciendo en pantalla una ventana de avance del programa similar al de la figura 3.32

Finalizada la simulación del proceso exitosamente, aparece en pantalla el mensaje de conclusión de la ejecución del programa como el de la figura 3.33.

### 3.2.7 Resultados obtenidos

Finalmente aparece en pantalla la ventana con los resultados de la Simulación del Sistema de Refrigeración por Absorción de Amoníaco como se presenta en la figura 3.59.

RESULTADOS DE SIMULACIÓN DE SISTEMA DE REFRIGERACIÓN POR ABSORCIÓN DE AMONIACO			
Ciclo	Eficiencia térmica		Calor Mínimo BTU/h
	0.16544		139742
	Flujo	lb/h	Concentración Amoníaco (%peso)
Refrigerante	24.2718		100
Solución débil	133.451		36.1586
Solución fuerte	157.723		45.9831
Unidad de proceso	Presión psi	T salida F	Calor trasferido BTU/h
<u>EVAPORADOR</u>	38.51	10	12000
<u>ABSORBEDOR</u>	38.51	70	-31069.8
<u>REGENERADOR</u>	128.8	175	33094.5
<u>CONDENSADOR</u>	128.8	70	-13974.2
<u>BOMBA</u>	Cambio de Presión psi		Trabajo Ws BTU/h
<u>VALVULA</u>	90.29		50.4029
	-90.29		



Fig. 3.59 Ventana de resultados del programa de simulación

En la ventana de la fig. 3.59 aparecen los resultados para el ciclo completo, información sobre los flujos de refrigerante, solución débil y fuerte de amoníaco, así como las condiciones para cada unidad de proceso y el calor suministrado o removido de éstos. Esta ventana posee los botones de acción “Imprimir”, que imprime los resultados en la impresora predeterminada en el sistema, el botón “Guardar”, guarda los resultados de la sesión de simulación, el botón “Abrir” que abre un archivo de resultados almacenado previamente y la opción “Cerrar” que cierra la ventada de resultados.

## Capítulo 4

### Desarrollo de módulo de simulación de procesos en Termodinámica de Equilibrio de Fases

El módulo de simulación de procesos correspondiente al área de Termodinámica de Equilibrio de Fases comprende los siguientes programas de simulación:

-  Simulación de proceso de Licuefacción de Gases
-  Simulación de proceso de Evaporación Instantánea

Los cuales se desarrollan a continuación:

#### 4.1 Simulación de Proceso de Licuefacción de Gases

##### 4.1.1 Principios básicos del proceso

El proceso de licuefacción de gases tiene por objetivo el cambio de fase en estado gas al estado líquido por acción de la temperatura y la presión, con propósitos industriales de reducir el espacio de almacenamiento y los costos de transporte, la producción de temperaturas bajas para procesos especiales y la separación de mezclas gaseosas en sus componentes puros por destilación fraccionada de la mezcla líquida.

La licuefacción se obtiene cuando un gas se enfría a una temperatura en la región de dos fases, lo que puede lograrse de dos maneras, (Van Ness, 1997)

- a. Por intercambio de calor a presión constante
- b. Por expansión en una turbina, a partir del cual se obtiene trabajo.
- c. Por un proceso de estrangulamiento.

El primer método requiere un pozo de calor a una temperatura inferior a aquella a la cual se enfría el gas, siendo éste el método más usado comúnmente para preenfriar un gas antes de su licuefacción por alguno de los otros dos métodos. Se requiere un refrigerador externo para que el gas adquiera una temperatura inferior a la del ambiente.

Los tres procesos están ilustrados en la figura 4.1. El proceso a presión constante (1) se aproxima a la región de dos fases (y a la licuefacción) para una caída dada en la temperatura. El proceso de estrangulamiento (3) no da como resultado la licuefacción, a menos que, para el proceso de entalpía constante, el estado inicial tenga una presión lo suficientemente elevada y una temperatura lo suficientemente baja como para cortar dentro de la región de dos fases.

Esto no ocurre cuando el estado inicial está en A. Si el estado inicial está en A' en donde la temperatura es la misma, pero la presión es mayor que en A, entonces la expansión isentálpica mediante el proceso (3') da como resultado la formación del líquido. El cambio de estado de A hasta A' se obtiene con mayor facilidad por compresión del gas a la presión final en B, seguida de enfriamiento a presión constante en A'. La licuefacción por expansión isentrópica a lo largo del proceso (2) se puede lograr a presiones menores (para una temperatura dada) que por estrangulamiento. Por ejemplo la continuación del proceso (2) del estado inicial A finalmente da como resultado la licuefacción, (Van Ness, 1997).

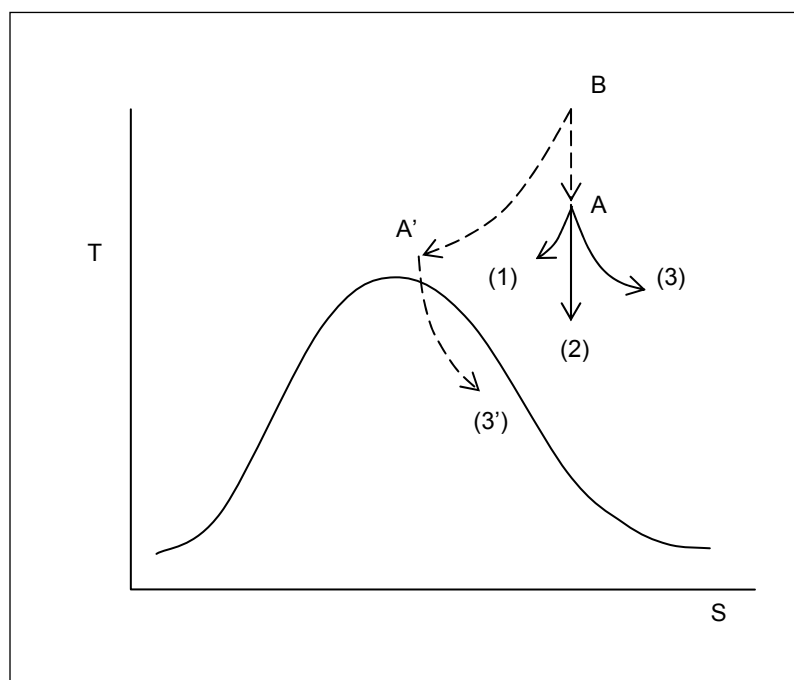


Fig. 4.1 Procesos de enfriamiento sobre un diagrama TS

Fuente: Van Ness, 1997

El proceso de estrangulamiento (3) es el empleado en plantas comerciales de licuefacción a pequeña escala. La temperatura del gas, desde luego debe disminuir durante la expansión. Esto es en realidad lo que sucede con la mayor parte de los gases en las condiciones usuales de temperatura y de presión. Las excepciones son el hidrógeno y el helio, los cuales aumentan su temperatura después del estrangulamiento, a menos que la temperatura inicial sea inferior a 100 K para el hidrógeno y 20 K para el helio, aproximadamente. La licuefacción de estos gases por estrangulamiento requiere una reducción inicial de la temperatura a valores menores mediante el método 1 o 2, (Van Ness, 1997).

La forma más económica para enfriar el aire es por intercambio de calor a contracorriente por la porción no licuada del aire proveniente del proceso de expansión. Esta clase de sistema simple de licuefacción, conocido como proceso Linde, que se muestra en la figura 4.2.

Después de la compresión, el gas es preenfriado a temperatura ambiente, incluso puede ser posteriormente enfriado por refrigeración, mientras más baja sea la temperatura del gas que entra a la válvula de estrangulamiento, mayor será la fracción de gas que sea licuada, (Van Ness, 1997).

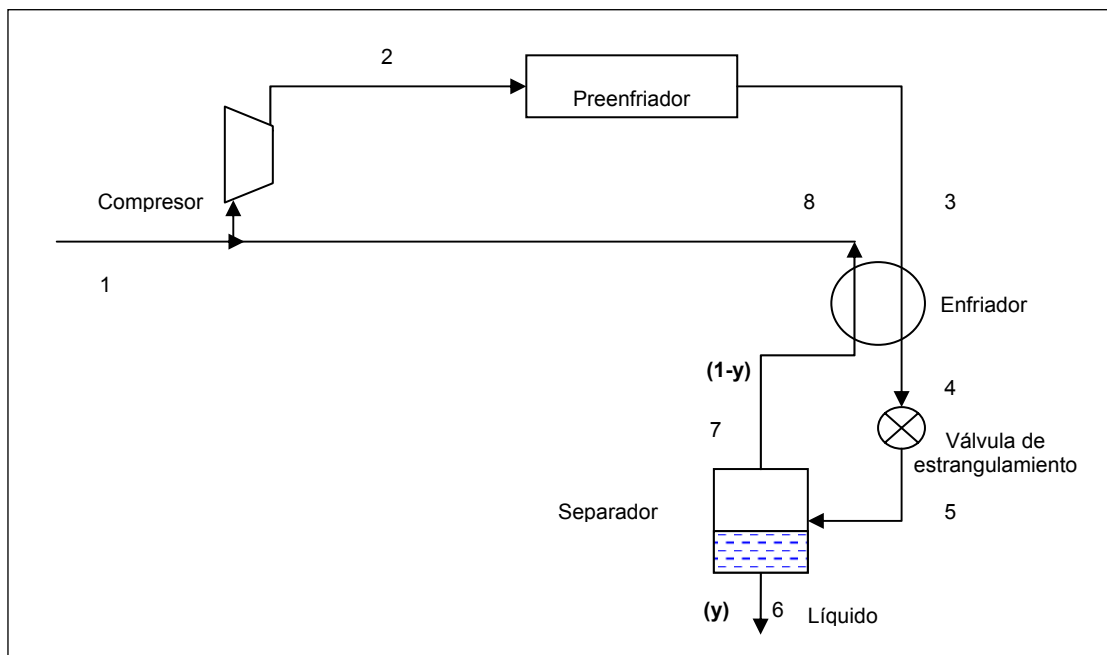


Fig. 4.2 Proceso de licuefacción de Linde

Fuente: Van Ness, 1997

Bajo condiciones de estado estable, un balance de energía alrededor del separador, la válvula y el enfriador, dan:

$$H_6 y + H_8 (1 - y) = H_3 \quad \text{ec. 4.1}$$

en donde las entalpías están, para una unidad de masa de fluido, en las posiciones indicadas en la figura 4.2. El conocimiento de las entalpías permite solucionar la ecuación 4.1 para  $y$ , la fracción de gas que se ha licuado.

El procedimiento de cálculo más satisfactorio de propiedades termodinámicas de gases y vapores requiere de datos PVT y capacidades caloríficas de gas ideal, donde las ecuaciones primarias son basadas en el concepto del estado del gas ideal y de las definiciones de propiedades residuales.

Una definición general de propiedades residuales  $M^R$  es la diferencia entre  $M$  que representa la propiedad de comportamiento real y  $M^{gi}$  que denota a la propiedad del sistema con comportamiento ideal:

$$M^R = M - M^{gi} \quad \text{ec. 4.2}$$

donde  $M$  es el valor molar de cualquier propiedad termodinámica extensiva, ya sea  $V$ ,  $U$ ,  $H$ ,  $G$  ó  $S$ . EL cálculo de las propiedades ideales y residuales se hacen a partir de un mismo estado de referencia.

Aplicando la ecuación la ec. 4.2 a las propiedades termodinámicas  $V$ ,  $U$ ,  $H$ ,  $G$  y  $S$ , obtenemos:

$V^R = V - V^{gi}$ $U^R = U - U^{gi}$ $H^R = H - H^{gi}$ $G^R = G - G^{gi}$ $S^R = S - S^{gi}$	ecs. 4.3
--	----------

Como puede observarse en las ecs. 4.3, cualquier propiedad termodinámica de un gas o vapor podrá evaluarse mediante la suma de tal propiedad evaluada para un gas ideal y una cantidad residual con respecto a la idealidad.

#### 4.1.2 Planteamiento del problema

Se requiere licuar metano mediante el sistema mostrado en la fig. 4.3, con  $P_5 = 102$  atm,  $T_5 = 26.8$  °C,  $P_8 = 10.2$  atm. y  $T_{10} = 23.9$  °C. El gas es alimentado al proceso a 1 atm y 25 °C, pasando por el primer compresor para igualar la presión con la presión del gas de salida del separador. Admitiendo un proceso adiabático sobre la base de 1 Kgmol de metano que entra en el punto 5, calcúlese:

- a) La fracción de metano condensado.
- b) La temperatura en los puntos 2,3,4 y 6.
- c) El calor transmitido en el enfriador.
- d) La temperatura a la salida del compresor.

- e) Trabajo real suministrado a cada compresor.
- f) El calor removido en el preenfriador.

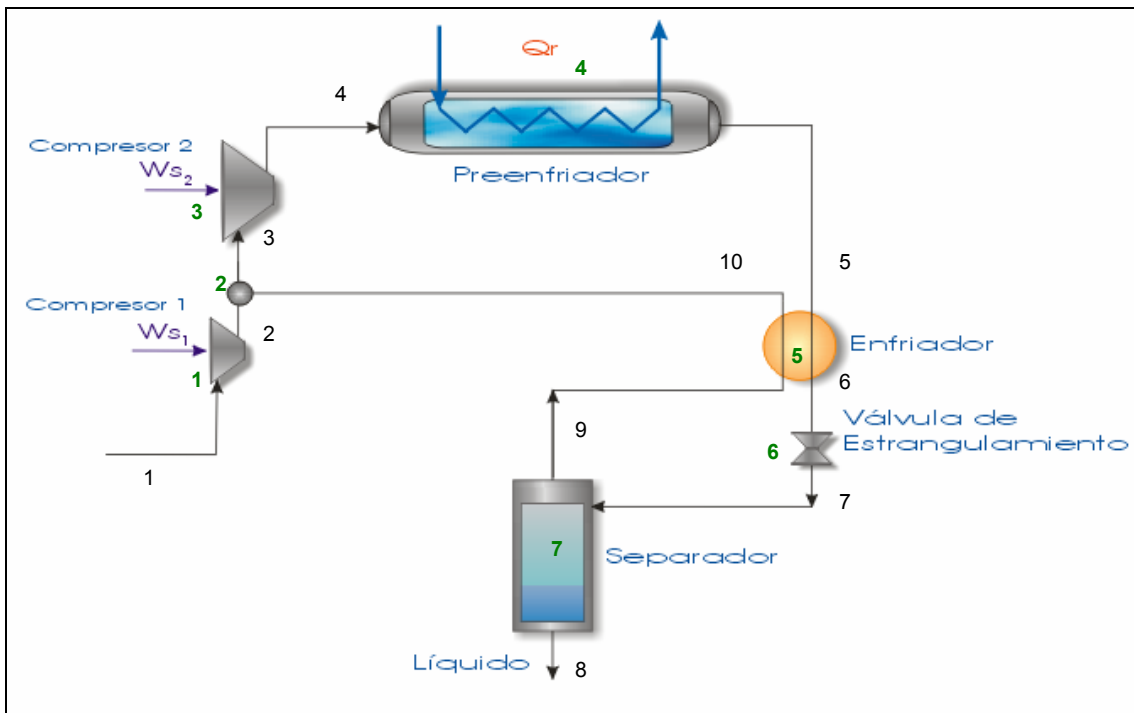


Fig. 4.3 Proceso de licuefacción de gases. Ciclo de Linde

Fuente: construcción propia

La simulación será diseñada para el proceso de licuefacción de cualquier gas de los que se presentan en la tabla 4.1. Por tanto, contará con una base de datos de las propiedades críticas, constantes, etc., por medio de las cuales podrán ser determinadas las propiedades termodinámicas de la sustancia interés en la solución al problema.

Tabla 4.1

Listado de gases opción para simulación del proceso de licuefacción

<b>Especie</b>	<b>Fórmula</b>
<i>Alcanos</i>	
Metano	CH <sub>4</sub>
Etano	C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>
Propano	C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>
Butano	C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>
<i>Alquenos</i>	
Etileno	C <sub>2</sub> H <sub>4</sub>
Propileno	C <sub>3</sub> H <sub>6</sub>
<i>Alquinos</i>	
Acetileno	C <sub>2</sub> H <sub>2</sub>
<i>Inorgánicos</i>	
Hidrógeno	H <sub>2</sub>
Oxígeno	O <sub>2</sub>
Nitrógeno	N <sub>2</sub>
Dióxido de Carbono	CO <sub>2</sub>

### 4.1.3 Definición de variables

Las variables del sistema en estudio, podemos clasificarlas en:

- Variables de entrada
- Variables de proceso
- Variables de salida

#### a. Variables de entrada

Las variables de entrada para el proceso descrito se presentan en la tabla 4.2:

Tabla 4.2  
Variables de entrada en Simulación de Proceso de Licuefacción de Gases

Variable	Descripción
Te	Temperatura de alimentación fresca al proceso
Tp	Temperatura de salida del preenfriador
TI	Temperatura de salida del gas licuado
Tn	Temperatura de salida del enfriador del gas no licuado
Pp	Presión de salida del preenfriador
Pc	Presión de entrada al compresor
Nc <sub>i</sub>	Eficiencia del compresor i

#### b. Variables de proceso

Las variables de proceso se presentan en la tabla 4.3:

Tabla 4.3  
Variables de proceso en Simulación de Proceso de Licuefacción de Gases

Variable	Descripción
Hv	Calor de vaporización del gas
Vg <sub>i</sub>	Volumen del gas <i>real</i> de la corriente <i>i</i>
Hr <sub>i</sub>	Entalpía residual de la corriente <i>i</i>
H <sub>i</sub>	Entalpía real de la corriente <i>i</i>
Do	Cambio de entalpía alrededor de válvula y separador
D	Cambio de entalpía alrededor de válvula y separador a T asumida
DS	Cambio de entropía en compresor
DH	Cambio de entalpía ideal en compresor
Ta	Vector de temperaturas asumidas a la salida del compresor
DIF	Diferencia entre temperatura calculada y asumida a la salida del compresor



c. Variables de salida

Las variables de proceso se presentan en la tabla 4.4:

Tabla 4.4  
Variables de salida en Simulación de Proceso de Licuefacción de Gases

Variable	Descripción
$y_8$	Fracción del gas licuado
$T_i$	Temperatura de la corriente $i$
$Q$	Calor transferido en el cambiador de calor
$W_s$	Trabajo suministrado al compresor
$Q_r$	Calor removido en preenfriador
$T_{C_i}$	Temperatura a la salida del compresor $i$

#### 4.1.4 Modelamiento del proceso

Primeramente son desarrollados los modelos de cada unidad de proceso, los cuales interrelacionados entre sí describen el fenómeno en su totalidad logrando así la simulación del proceso.

Tal como se presenta en la fig. 4.3, el proceso está conformado por las siguientes unidades:

- Compresor
- Mezclador
- Preenfriador
- Enfriador
- Válvula de estrangulamiento
- Separador

Así también se incluye el modelamiento de determinación de propiedades termodinámicas en función de sus valores residuales.

##### 1. Modelamiento del compresor

El proceso de compresión produce un aumento de la presión de un gas, donde el trabajo isentrópico es el trabajo de eje mínimo requerido para comprimir el gas de un estado inicial hasta otro final con una presión de descarga dada, tal como se presenta en la figura 4.4, aquí  $P_{C2} > P_{C1}$  y  $T_{C2} > T_{C1}$ .

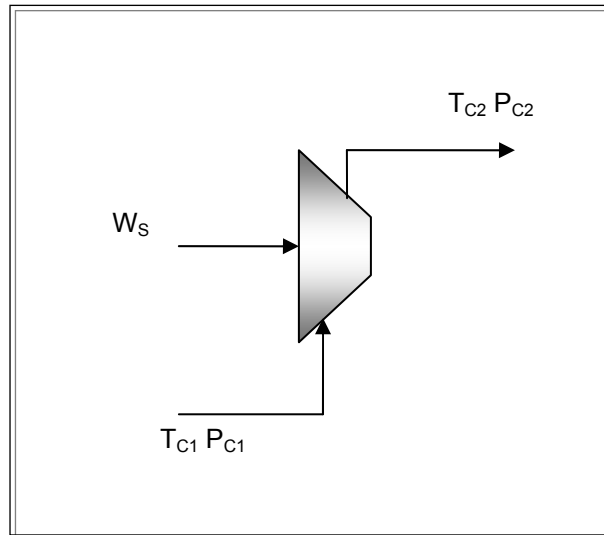


Fig. 4.4 Unidad de proceso: Compresor

Fuente: Construcción propia

La eficiencia del compresor está dada por:

$$\text{eficiencia} = \frac{\text{trabajo isentrópico}}{\text{trabajo real}} = \frac{(\Delta H)_s}{\Delta H} = \eta \quad \text{ec. 4.22}$$

El cambio de entropía para un proceso desde un estado inicial en condiciones  $T_{C1}$  y  $P_{C1}$  hasta un estado final con condiciones  $T_{C2}$  y  $P_{C2}$  es:

$$\frac{\Delta S}{R} = \int_{T_{C1}}^{T_{C2}} \frac{Cp^{g.i.}}{R} \frac{dT}{T} + \ln \frac{P_{C2}}{P_{C1}} \quad \text{ec. 4.23}$$

La capacidad promedio específica para cálculo de entropía, está dada por:

$$\left\langle \frac{Cp^{g.i.}}{R} \right\rangle = \int_{T_{C1}}^{T_{C2}} \frac{Cp^{g.i.}}{R} \frac{dT}{T} \quad \text{ec. 4.24}$$

Sustituyendo la definición de  $Cp^{g.i.}(T)$  e integrando la ec. 4.11 entre los límites definidos obtenemos:

$$\left\langle \frac{Cp^{g.i.}}{R} \right\rangle_s = A + \left[ BT_0 + \left( CT_0^2 + \frac{D}{\tau^2 T_0^2} \right) \left( \frac{\tau + 1}{\tau} \right) \right] \frac{\tau - 1}{\ln(\tau)} \quad \text{ec. 4.25}$$

donde  $\tau = \frac{T}{T_0}$  Para una compresión isentrópica  $\Delta S = 0$ , la ecuación resultante

es:

$$T'_{C2} = T_{C1} \left( \frac{P_{C2}}{P_{C1}} \right)^{R/\langle C_p \rangle_s} \quad \text{ec. 4.26}$$

donde  $T'_{C2}$  es la temperatura resultante cuando se da una compresión desde  $T_{C1}$  y  $P_{C1}$  hasta  $P_{C2}$ , en un proceso *isentrópico* en que  $\langle C_p \rangle_s$  es la capacidad calorífica promedio en un intervalo de temperatura de  $T_{C1}$  a  $T'_{C2}$ .

El cambio de entalpía para una compresión isentrópica esta dado por:

$$(\Delta H)_S = \langle C'_p \rangle_H (T'_{C2} - T_{C1}) = W_{\text{isentrópico}} \quad \text{ec. 4.27}$$

donde  $\langle C'_p \rangle_H$  esta dado por:

$$\langle C'_p \rangle_H = R \left( A + \frac{B}{2} T_0 (\tau + 1) + \frac{C}{3} T_0^2 (\tau^2 + \tau + 1) + \frac{D}{\tau T_0^2} \right) \quad \text{ec. 4.28}$$

El cambio de entalpía real en función de la eficiencia de compresión está definido por la ec. 4.9, sustituyendo el resultado de la ec. 4.14, la temperatura real de descarga del fluido de compresión está dado por:

$$T_2 = T_1 + \frac{\Delta H}{\langle C_p \rangle_H} \quad \text{ec. 4.29}$$

donde  $\langle C_p \rangle_H$  está en función de  $T_2$ , dado que es la capacidad calorífica promedio para el intervalo de  $T_1$  a  $T_2$ . Es de notar que la solución a la ecuación 4.16 es un proceso iterativo para valores de  $T_2$  que cumplan la igualdad.

## 2. Modelamiento del mezclador

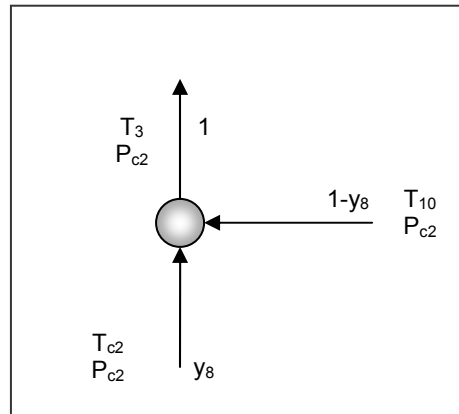


Fig. 4.5 Unidad de proceso: Mezclador

Fuente: construcción propia

En esta unidad de proceso, se busca conocer la temperatura resultante de la unión de la corriente de gas no licuado a la salida del separador y la alimentación fresca al proceso proveniente del compresor 1, la cual es suministrada al compresor 2.

Despreciando las pérdidas de calor en esta unidad, el cambio de entalpía  $\Delta H = 0$ , por tanto el balance de energía resulta:

$$\Delta H = H_3 - (y_8 H_2 + (1 - y_8) H_{10}) = 0$$

$$H_3 = (y_8 H_2 + (1 - y_8) H_{10}) \quad \text{ec. 4.30}$$

donde  $H_3 (T_3)$ , encontrando el valor de  $H_3$ , mediante un proceso iterativo, podemos determinar la temperatura resultante de la unión de éstas dos corrientes.

## 3. Modelamiento del preenfriador

Esta unidad de proceso reduce la temperatura del gas a la salida del compresor 2, manteniendo la presión constante, disminuyendo así el trabajo de enfriamiento en la siguiente unidad.

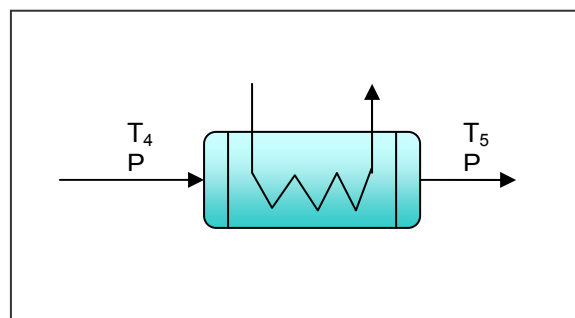


Fig. 4.6 Unidad de proceso: Preenfriador

Fuente: construcción propia

Aquí deseamos conocer el calor removido al gas para reducir la temperatura desde  $T_4$  a  $T_5$  en un proceso a presión constante:

$$Q_P = H_5 - H_4 \quad \text{ec. 4.31}$$

#### 4. Modelamiento de enfriador

En esta unidad existe una transferencia de calor entre el flujo de gas de salida del preenfriador y el gas no condensado a la salida del separador.

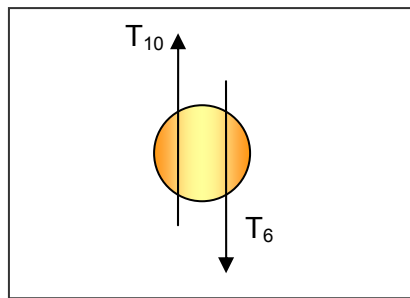


Fig. 4.7 Unidad de proceso: Enfriador

Fuente: construcción propia

El calor transferido en esta unidad resulta del balance de energía como sigue:

$$Q_E = H_6 - H_{10} \quad \text{ec. 4.32}$$

#### 5. Modelamiento de la válvula de estrangulamiento y separador

Cuando el fluido fluye a través de un estrangulamiento, el resultado del proceso es una caída de la presión y consigo la temperatura, lo que da como resultado un cambio de fase de una parte del fluido.

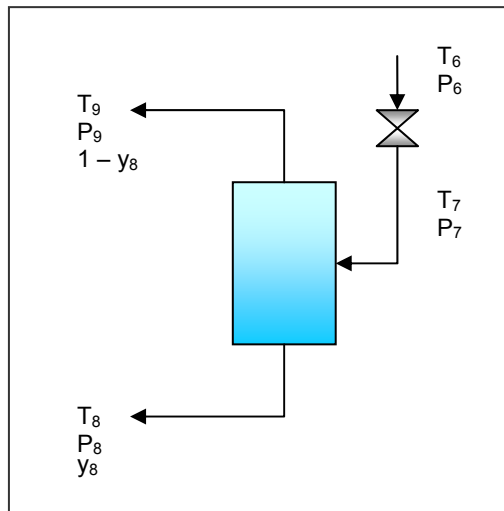


Fig. 4.8 Unidad de proceso: Válvula de estrangulamiento y separador

Fuente: construcción propia

Para un proceso adiabático, siendo  $y_8$  la fracción de condensado, el balance global de energía en estas unidades de proceso resulta:

$$H_6 = y_8 H_8 + (1-y_8) H_9 \quad \text{ec. 4.33}$$

Los cálculos de las propiedades termodinámicas del proceso se hacen a partir de un estado de referencia, el cual seleccionado arbitrariamente las condiciones del gas licuado (líquido) a la salida del separador (corriente 8), por tanto el valor de entalpía para este es  $H_8 = 0$ .

#### 6. Modelamiento de determinación de propiedades termodinámicas

La determinación de propiedades termodinámicas se realiza en función de sus valores residuales utilizando ecuaciones cúbicas de estado, tal como fue desarrollado en la sección anterior de éste capítulo.

El procedimiento de cálculo es en base a un valor de referencia, establecido para éste caso, las condiciones del gas en su estado líquido (gas licuado), el cual se desarrolla a continuación:

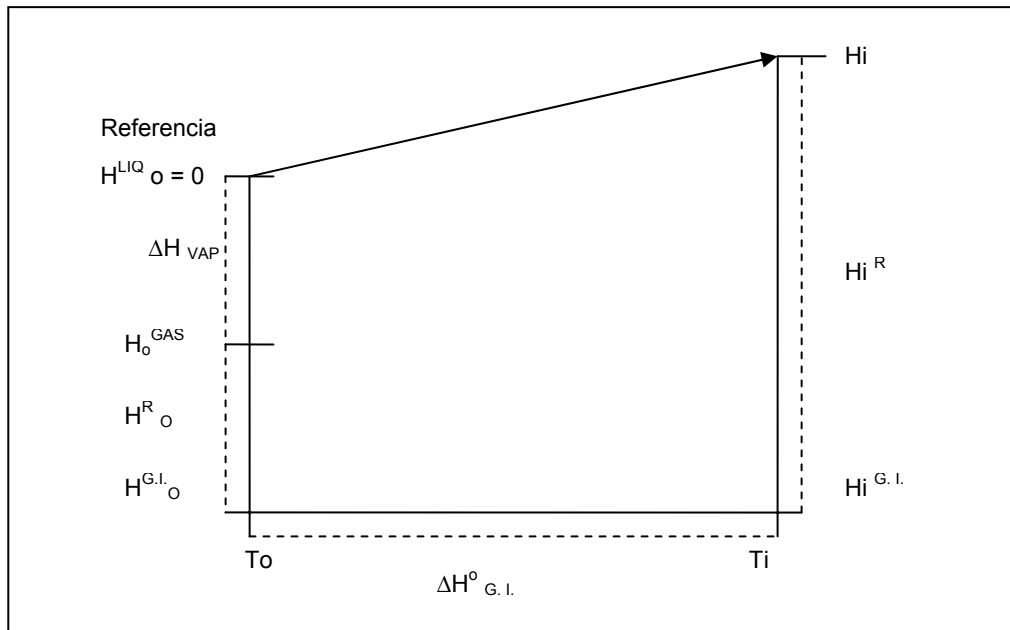


Fig. 4.9 Procedimiento de cálculo de propiedades termodinámicas

Fuente: construcción propia

Dado que la referencia es un estado líquido, para llegar al estado gas a las condiciones de referencia se utiliza el calor de vaporización, obteniendo un cambio de fase utilizando la siguiente ecuación:

$$\Delta H_v = C_1(1 - Tr)^{C_2 + C_3T + C_4Tr^2} \quad \text{ec. 4.34}$$

donde  $Tr$ : temperatura reducida  $Tr = \frac{T}{T_c}$ ,  $T_c$ : temperatura crítica,  $C_1 \dots C_4$  :

constantes según especie.

La entalpía  $H_i$  a la presión  $P_i$  y temperatura  $T_i$  está definida por el siguiente procedimiento de cálculo, como se presenta en la figura 4.9:

$$H_i = \Delta H_v - H_o^R + \Delta H^{GI}(T_o, T_i) + H_i^R \quad \text{ec. 4.35}$$

Donde  $H_o^R$  y  $H_i^R$  son las entalpías residuales del estado de referencia y a las condiciones  $i$  de interés.

Pueden establecerse expresiones de las propiedades residuales en función de ecuaciones cúbicas de estado y relaciones termodinámicas, tal como el procedimiento que se describe a continuación.

La entalpía puede ser definida mediante la relación:

$$H = U + PV \quad \text{ec. 4.4}$$

derivando esta expresión obtenemos:

$$dH = dU + V dP + P dV \quad \text{ec. 4.5}$$

y dado que la expresión diferencial de dU es igual a :

$$dU = T dS - P dV \quad \text{ec. 4.6}$$

sustituyendo la ec. 4.6 en la ec. 4.5, resulta:

$$dH = T dS + V dP \quad \text{ec. 4.7}$$

Considerando a la entropía como función de la presión y temperatura:

$$dS = \left( \frac{\partial S}{\partial P} \right)_T dP + \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_P dT \quad \text{ec. 4.8}$$

y según relaciones de Maxwell:

$$\left( \frac{\partial S}{\partial P} \right)_T = - \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_P \quad \text{y también:} \quad \left( \frac{\partial S}{\partial T} \right)_P = \frac{C_p}{T} \quad \text{ecs. 4.9}$$

reemplazando las relaciones anteriores en la ec. 4.8, se obtiene:

$$dS = - \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_P dP + \frac{C_p}{T} dT \quad \text{ec. 4.10}$$

sustituyendo la ec. 4.10 en la ec. 4.7, resulta:

$$dH = V dP - T \left[ \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_P dP + \frac{C_p}{T} dT \right] \quad \text{ec. 4.11}$$

en un proceso a temperatura constante dT = 0, la ec. 4.11 es:

$$dH = V dP - T \left[ \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_P dP \right] \quad \text{ec. 4.12}$$



La integración de la ec. 4.12, para una ecuación cúbica de estado, requiere una transformación en función de  $dV$ :

$$V dP = d(PV) - P dV \quad \text{ec. 4.13}$$

y se tiene que:

$$\left[ \left( \frac{\partial V}{\partial T} \right)_P dP \right]_T = - \left[ \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_V dV \right]_T \quad \text{ec. 4.14}$$

sustituyendo las ecs. 4.13 y 4.14 en la ec. 4.12, resulta:

$$dH = d(PV) + \left[ T \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_V - P \right] dV \quad \text{ec. 4.15}$$

para un intervalo de integración de  $dH = H - H^{gi} = H^R$ , y los límites de  $P = 0$ ,  $V = \infty$ , y  $PV = RT$ , integrando la ecuación 4.15 resulta:

$$H^R = RT - PV + \int_{\infty}^V \left[ P - T \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_V \right] dV \quad \text{ec. 4.16}$$

La ec. 4.16 es la expresión de la entalpía residual en función de ecuaciones cúbicas de estado PVT, de las cuales pueden seleccionarse la ecuación de Beattie-Brigeman, Van Der Walls, Redlich Kwong, etc.

Para la ecuación de Redlich Kwong:

$$P = \frac{R}{V-b} - \frac{a}{T^{1/2}V(V+b)} \quad \text{ec. 4.17}$$

Obteniendo la expresión:  $T \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_V$  a partir de la ec. 4.17, se obtiene:

$$T \left( \frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = \frac{a}{2T^{1/2}V(V+b)} \quad \text{ec. 4.18}$$

Sustituyendo las ecs. 4.17 y 4.18 en la expresión 4.16 e integrando entre los límites definidos, se obtiene:

$$H^R = RT - PV + \frac{R}{\ln(V-b)} + \frac{3a \ln \left( \frac{V+b}{V} \right)}{2bT^{1/2}} \quad \text{ec. 4.19}$$

La expresión anterior corresponde al valor de la entalpía residual en función de la ecuación cúbica de estado de Redlich-Kwong, donde el valor del volumen puede ser evaluado mediante la ecuación 4.17 expresada en forma polinómica:

$$V^3 - \frac{RT}{P}V^2 - \left( b^2 + \frac{bRT}{P} - \frac{a}{PT^{1/2}} \right)V - \frac{ab}{PT^{1/2}} = 0 \quad \text{ec. 4.20}$$

donde:

$$a = \frac{0.42748R^2T_c^{2.5}}{P_c} \quad \text{y} \quad b = \frac{0.08664RT_c}{P_c} \quad \text{ecs. 4.21}$$

#### 4.1.5 Desarrollo algorítmico

En base a la identificación de unidades de proceso y corrientes de flujo del diagrama de proceso presentado en la figura 4.3, el diagrama de flujo de información (DFI) se presenta en la figura 4.9:

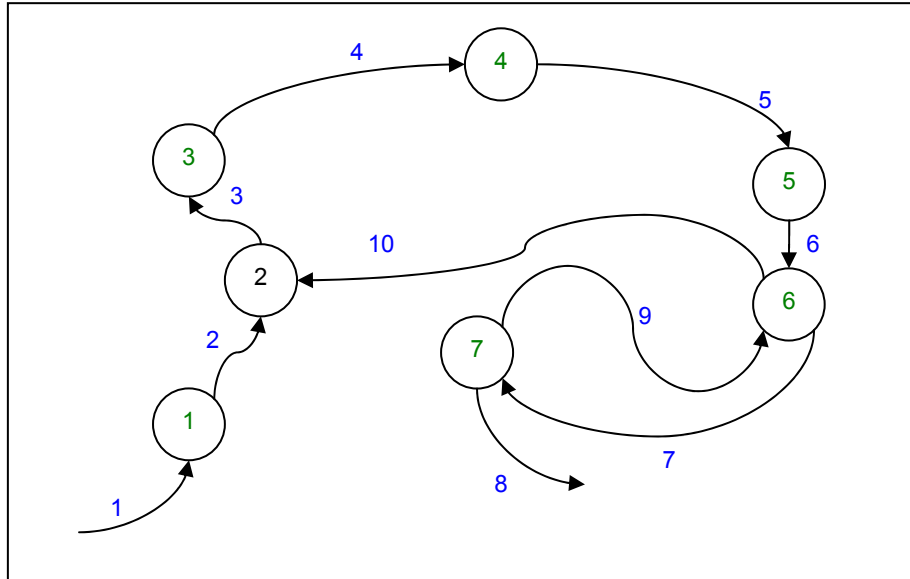


Fig. 4.9 Diagrama de flujo de información del proceso

Fuente: construcción propia

Como puede observarse en el diagrama de la figura 4.9, las interconexiones entre las unidades de proceso y el flujo de información entre éstas a través de las corrientes de flujo.

La unidad de proceso 1 (compresor 1), recibe información externa por la corriente 1, la procesa y luego le proporciona información interna a la unidad de proceso 2 (mezclador) por la corriente 2, la cual a su vez también recibe información de la unidad de proceso 6 (enfriador), por la corriente 10, luego la procesa y la proporciona a la unidad de proceso 3 (compresor 2) por la corriente 3, procesándola y enviándola a la unidad de proceso 4 (preenfriador) por la corriente 4; de ésta forma sucesivamente hasta llegar al separador (unidad 7), quien proporciona información interna a la unidad 6 (enfriador) e información externa correspondiente a la fracción de gas licuado y sus condiciones termodinámicas.

La solución al problema planteado requiere primeramente el cálculo de las propiedades termodinámicas a partir de sus valores residuales, tal como ha sido desarrollado en las secciones anteriores de éste capítulo, éste procedimiento se presenta en la fig. 4.10:

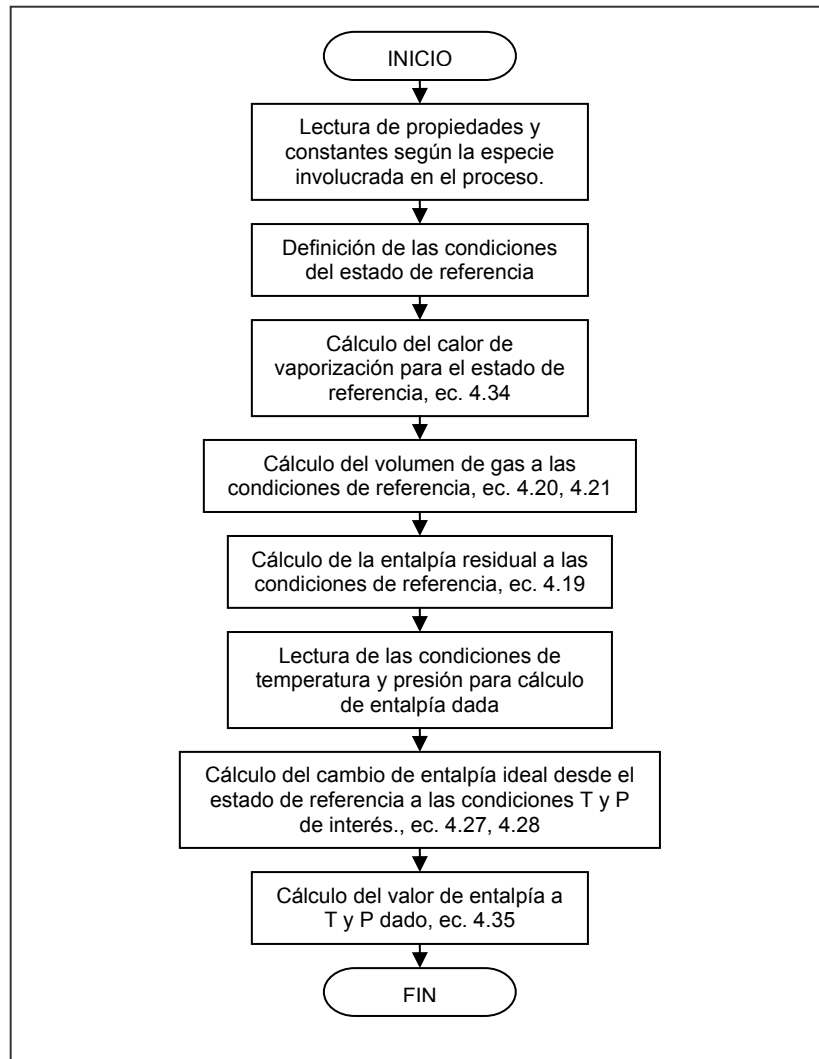


Fig. 4.10 Algoritmo de cálculo de entalpía usando propiedades residuales  
Fuente: construcción propia

Conocidos los valores de entalpía para las distintas corrientes en el proceso, pueden ser resueltas las ecuaciones de cada unidad de proceso, incluyendo el cálculo de la fracción de gas licuado en el separador de fases.

Para conocer la temperatura del gas a la entrada de la válvula de estrangulamiento (corriente 6), habrá que seguir un procedimiento iterativo para su cálculo, el cual se desarrolla en la fig. 4.11:

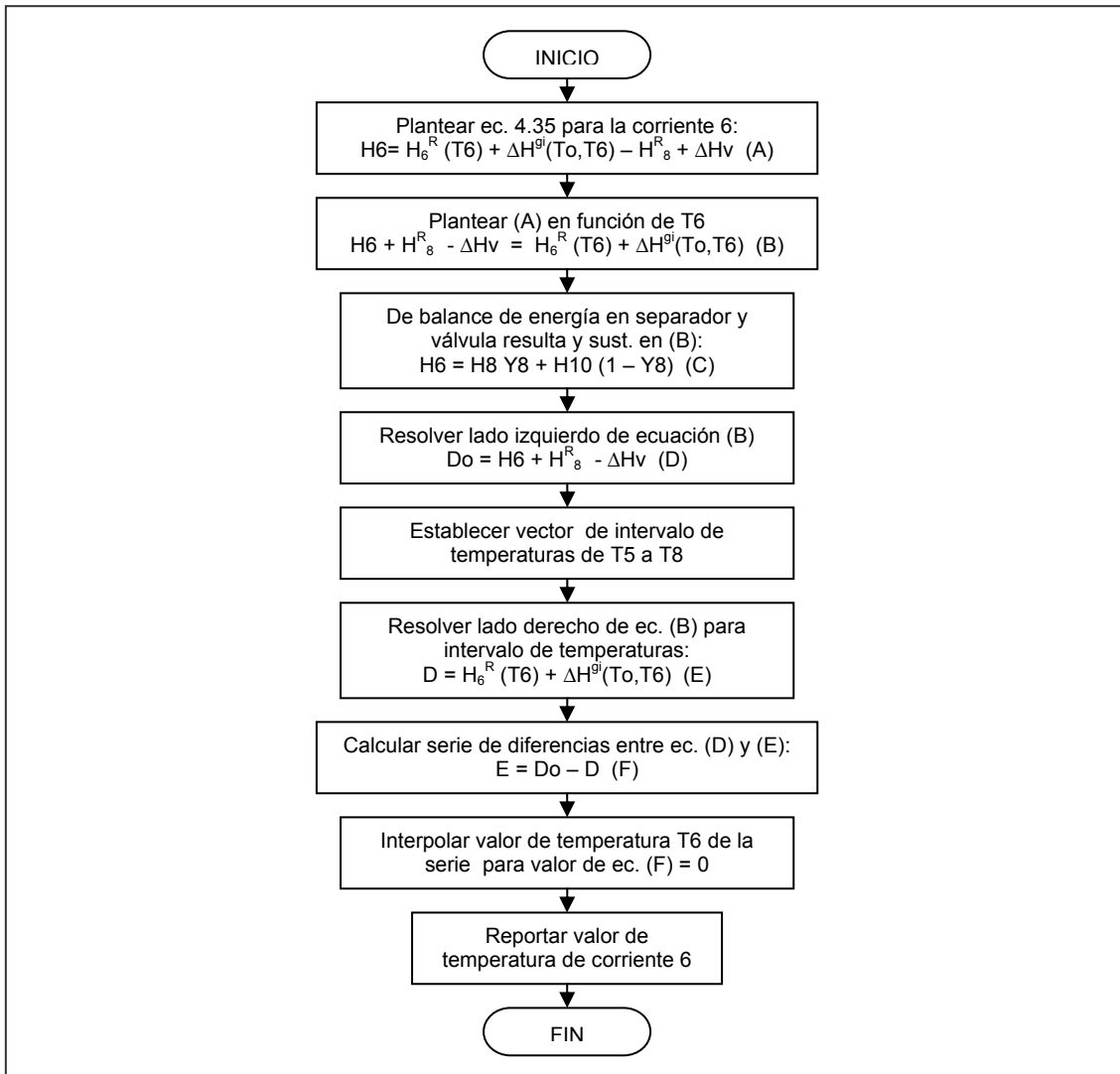


Fig. 4.11 Algoritmo de cálculo de temperatura de entrada de válvula de estrangulamiento

Fuente: construcción propia

Luego habrá de desarrollarse un algoritmo de cálculo de la temperatura de salida de los compresores, para determinar el trabajo suministrado, y posteriormente el calor removido en el preenfriador, resolviendo así el resto de incógnitas propuestas en el problema, ver figura 4.12.

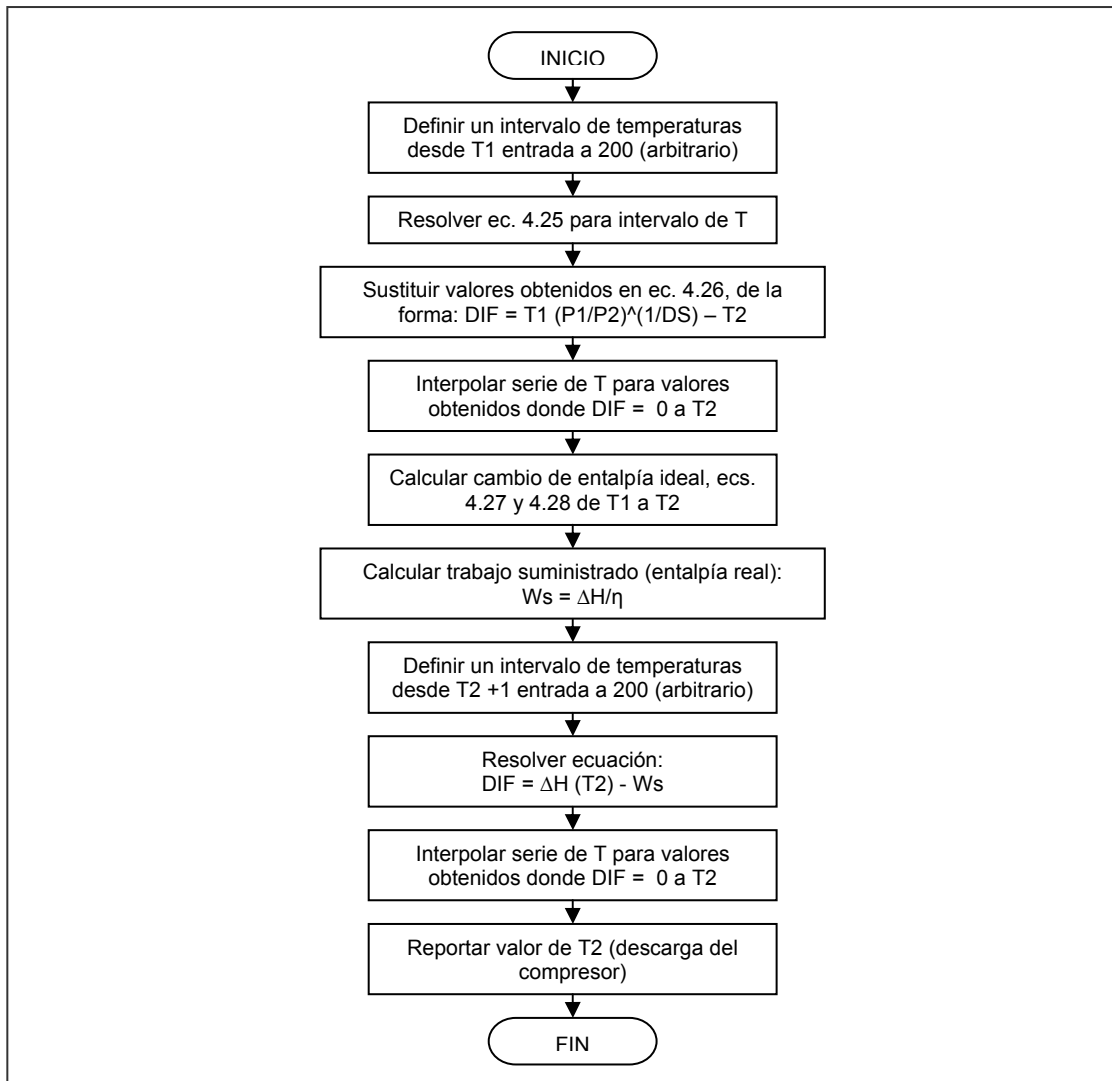


Fig. 4.12 Algoritmo de cálculo de temperatura de salida de compresores  
Fuente: construcción propia

Este procedimiento se repite para ambos compresores, determinando así el trabajo suministrado a cada uno, y finalmente conocida la temperatura de salida del segundo compresor (entrada del preenfriador), mediante el procedimiento de cálculo de entalpía a una  $T$  y  $P$  dados se calcula su respectivo valor de entalpía para dicha corriente, así como el de salida del preenfriador a sus condiciones de  $T$  y  $P$  dados, y con ambos valores se resuelve la ec. 4.31, para el valor de calor removido en dicha unidad.

#### 4.1.6 Simulación del proceso

Dado que para la solución de las unidades individuales del proceso se requiere la solución de un sistema de ecuaciones que modelan las unidades y al proceso global en sí (solución de ecuaciones a partir de un estado de referencia), la técnica de simulación a aplicar es: *Simulación Modular Simultáneo*, incluyendo a todas las corrientes y el estado de referencia para cada subsistema.

Para el cálculo de propiedades termodinámicas, tanto residuales como ideales, se desarrollaron las siguientes funciones de la tabla 4.5:

Tabla 4.5  
Funciones desarrolladas en simulación de licuefacción de gases.

Función	Descripción
HVaporiz(Cv1, Cv2,Cv3,Cv4, T,Tc)	Cálculo del calor de vaporización a una temperatura determinada.
RKwongV(P,T, Pc, R)	Calcula el valor del volumen de gas real con la ecuación de Redlich-Kwong
HrKwong(P,V,T,R,Tc,Pc)	Cálculo de la entalpía residual en función de la ecuación e Redlich-Kwong
ICPH(a,b,c,d, To,T,R)	Cálculo del cambio de entalpía ideal
MCPS(A,B,C,D,T,To)	Cálculo de Cp medio en función de entropía.
compresor(T1,P1,P2,nc,A,B,C,D)	Da como resultado la temperatura de descarga y el trabajo suministrado a un compresor

Las codificaciones de estas funciones se presentan en el anexo C.1.

Al iniciar la ejecución del programa de simulación, primero se hace la selección de la especie involucrada en el proceso de los listados en la tabla 4.1, apareciendo en pantalla la ventana de la figura 4.15:

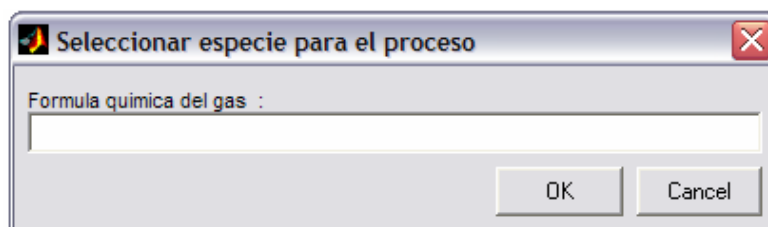


Fig. 4.15 Ventana de selección de especie para el proceso

En caso de obviar la introducción de la especie, aparece en pantalla el siguiente mensaje de error, sin entrar al programa de simulación:

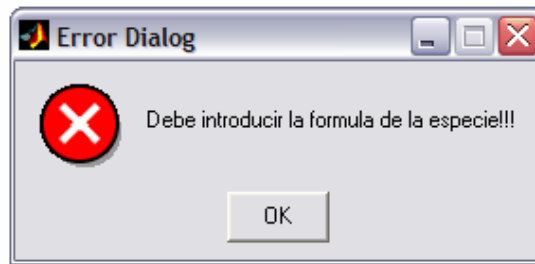


Fig. 4.16 Ventana de error al omitir selección de especie para el proceso

Luego, volviendo al ejecutar el programa e introduciendo, p.ej la formula del metano ( $\text{CH}_4$ ) en la ventana de la fig. 4.15, aparece en pantalla el siguiente ambiente de simulación del proceso mostrado en la fig. 4.17:

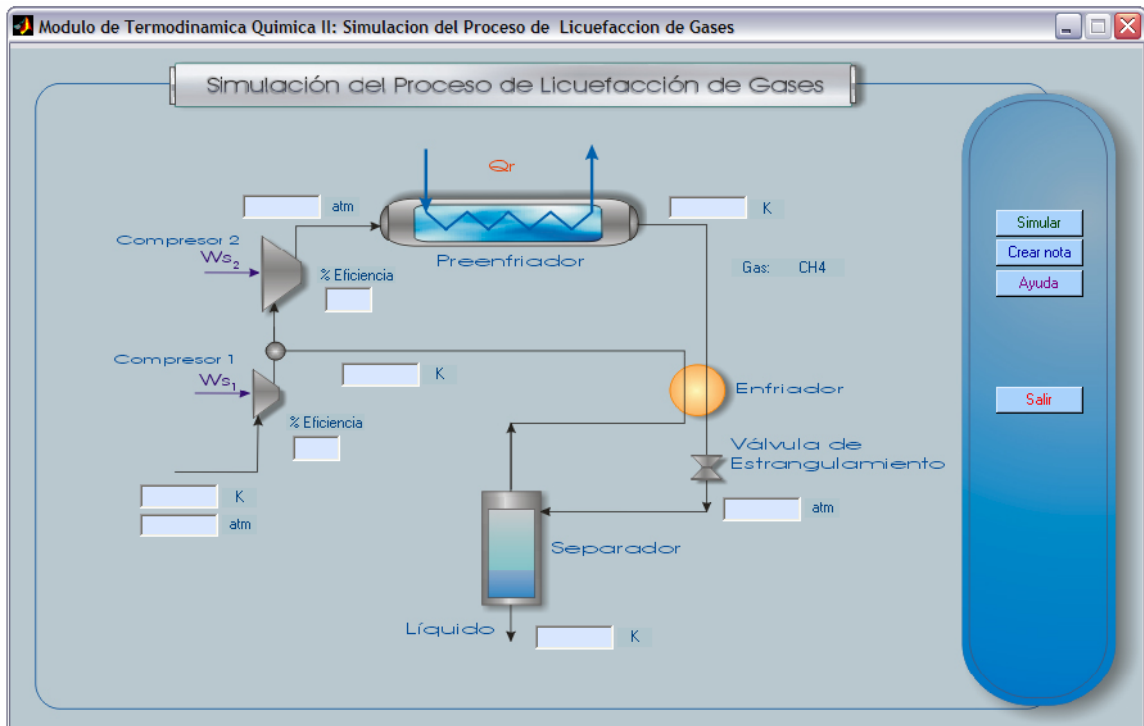


Fig. 4.12 Ventana de ambiente de simulación del proceso



Las funciones de los botones de acción son las mismas de las simulaciones anteriores. Introduciendo los datos propuestos en la ventana de la fig. 4.13:

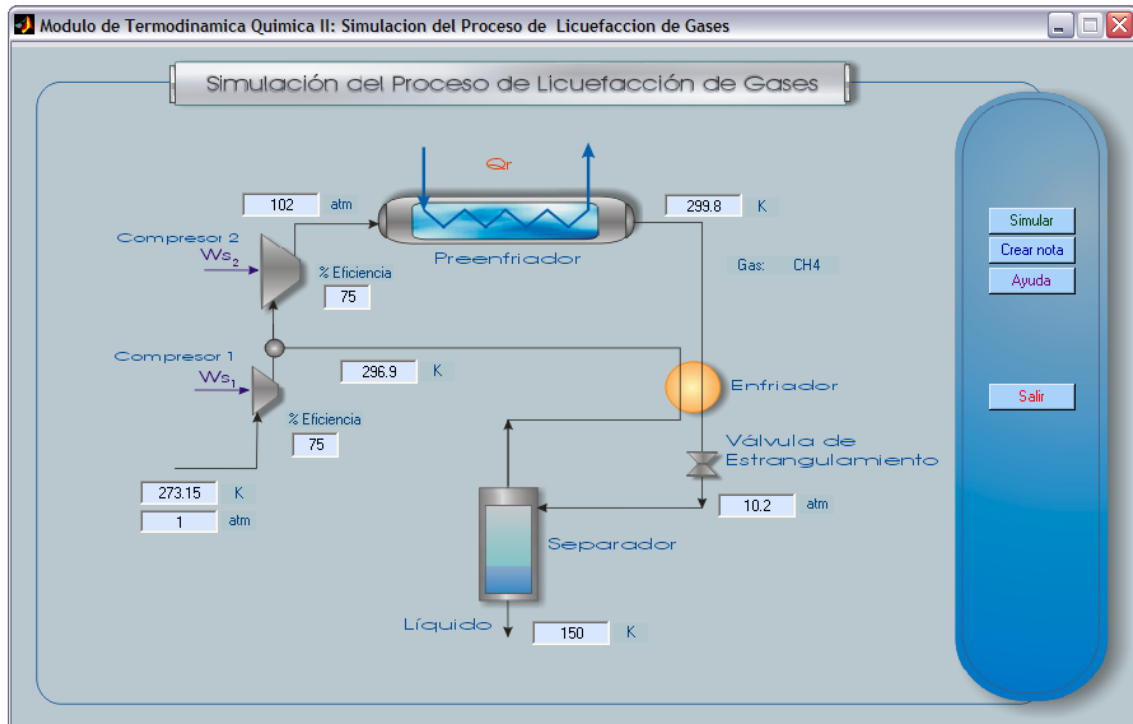


Fig. 4.13 Introducción de datos para simulación del proceso

Luego, ejecutando el botón de acción “Simular”, aparece en pantalla una barra de avance del proceso similar al presentado en la figura 3.32. Ejecutándose la codificación basada en los modelos y algoritmos desarrollados anteriormente presentado en el anexo C.2

Finalizada la simulación, aparece en pantalla el siguiente mensaje de fin de ejecución similar al de la figura 3.33.

Posteriormente se presentan en pantalla los resultados obtenidos en la simulación del proceso.

#### 4.1.7 Resultados de simulación de proceso de licuefacción de gases

Los resultados obtenidos en la simulación del proceso se presentan en la ventana de la figura

Fracción licuada	0.119407			
	T entrada K	P entrada atm	Trabajo (Ws) kJ/mol	Calor (Q) kJ/mol
Compresor 1	273.15	1	9.21894	
Mezclador	499.462 ; 296.9	1		
Compresor 2	330.599	10.2	10.7573	
Pre enfriador	571.808	102		-11.6738
Enfriador	299.8	102		4.28262
Válvula de estrangulamiento	228.396	102		
Separador	150	10.2		

Fig. 4.15 Ventana de presentación de resultados

Los botones de acción de esta ventana tienen las mismas funciones que los utilizados en las simulaciones anteriormente desarrolladas.

## 4.2 Simulación de proceso de evaporación instantánea

### 4.2.1 Principios básicos del proceso

En la mayoría de los procesos industriales las fases coexistentes son el vapor y líquido, lo que implica un estado de equilibrio mutuo entre ellos descritos por el equilibrio líquido-vapor (ELV) en cual no existen cambios en sus propiedades respecto al tiempo.

Una aplicación importante del ELV es el cálculo de evaporación instantánea. Este se originó por el hecho de que un líquido, a una presión igual o mayor que su presión en el punto de burbuja “se evapora instantáneamente” o se evapora parcialmente cuando la presión se reduce por abajo de la presión del punto de rocío, produciendo un sistema de dos fases de vapor y líquido en equilibrio, (Van Ness, 1997).

Un equipo de evaporación instantánea (evaporador flash) consiste en una etapa simple donde la alimentación es parcialmente vaporizada. El esquema de este equipo se presenta en la figura 4.16, donde la alimentación se calienta en el equipo de intercambio y luego se expande en forma adiabática a través de la válvula. La vaporización que se produce debido a la caída brusca de presión, implica la formación de dos fases, las cuales son separadas gracias al tiempo de contacto entre las mismas que permite el tambor separador, (Scenna, Nicolás, 1999).

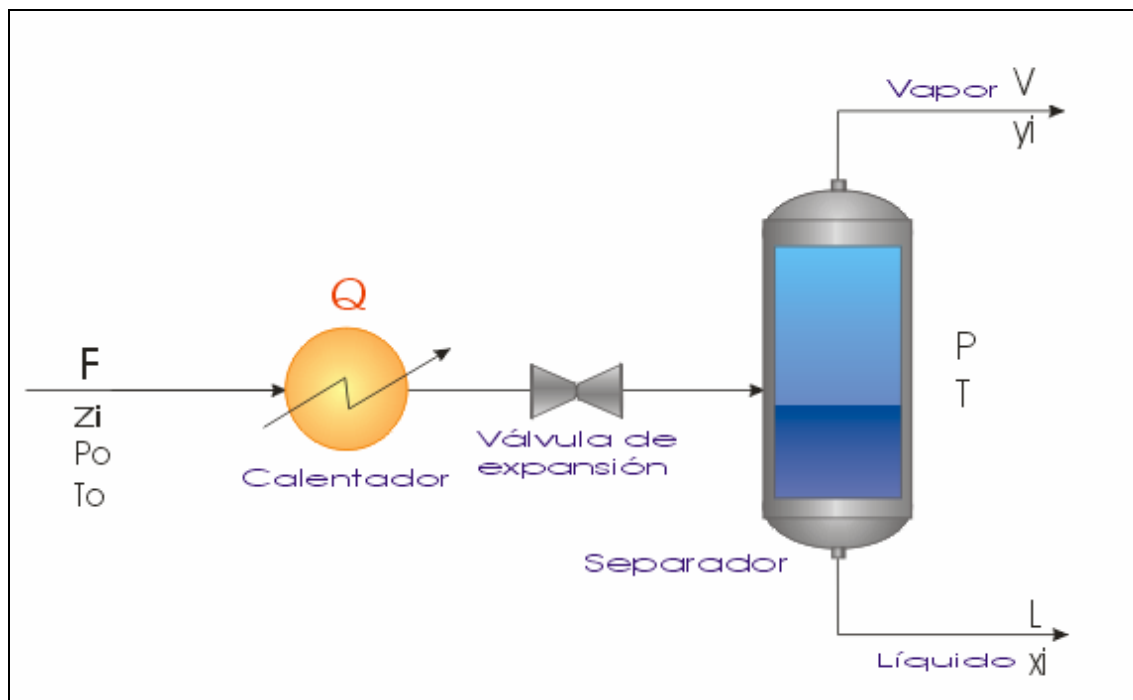


Fig. 4.16 Equipo de evaporación instantánea

Fuente: Scenna, Nicolás, 1999

Para efectos de cálculo se proponen como asunciones del estudio de este proceso:

- a) El vapor y el líquido tienen el tiempo de contacto suficiente para lograr equilibrio (no teniendo en cuenta los parámetros geométricos).
- b) La presión del líquido y vapor son las del tambor separador ( $\Delta P = 0$ ). Esto implica que no se considera componentes usuales del equipo como ser separadores de gotas, etc., y la caída de presión que se origina en ellos.
- c) Existe sólo una fase líquida y vapor (L-V).
- d) No existen reacciones químicas.

#### 4.2.2 Planteamiento del problema

Desarrollar un programa de simulación del proceso de evaporación instantánea, como se muestra en la figura 4.16, que permita determinar:

- a) Seleccionar un sistema binario determinado, de la tabla 4.6.
- b) La temperatura a la salida del calentador y la válvula de expansión.
- c) La presión de rocío y presión de burbuja del sistema, y estime si puede darse o no la evaporación instantánea, para las condiciones del sistema.
- d) Las composiciones y flujos del líquido y vapor a la salida del evaporador.

Debe hacerse uso de modelos de coeficientes de actividad, propiedades residuales, ecuaciones de estado, y otros recursos, para estimar propiedades termodinámicas.

Tabla 4.6

Sistemas binarios de selección del programa de simulación

Acetona (1) / Agua (2)
Metanol (1) / Agua (2)
1-Propanol (1) / Agua (2)
Metanol (1) / Acetonitrilo (2)
Acetona (1) / Metanol (2)
Acetato de metilo (1) / Metanol (2)
Metanol (1) / Benceno (2)
Etanol (1) / Tolueno (2)
Propanol (1) / Agua (2)

### 4.2.3 Definición de variables

#### a. Variables de entrada

Tabla 4.7  
Variables de entrada a programa de simulación

Variable	Descripción
ss	Almacena el nombre del sistema seleccionado
z1	Composición de la especie (1) en la alimentación
P1	Presión del sistema en la alimentación
P2	Presión del sistema a la entrada del evaporador
T1	Temperatura del sistema en la alimentación
Q	Calor suministrado en calentador por mol de alimentación

#### b. Variables de proceso

Tabla 4.8  
Variables de proceso a programa de simulación

Variable	Descripción
c	Coordenadas de cada especie en base de datos del sistema
Tri	Temperatura de referencia la cada especie $i$
Tci	Temperatura crítica de la especie $i$
Pci	Presión crítica de la especie $i$
Vci	Volumen crítico de la especie $i$
wi	Factor acéntrico de la especie $i$
Ai, Bi, Ci	Constantes de ecuación Antoine de la especie $i$
ai,bi,ci,di	Constantes de capacidad calorífica de la especie $i$
Vi, Vj, aij, aji	Constantes de la ecuación de Wilson para sistema binario $ij$

#### c. Variables de salida

Tabla 4.8  
Variables de salida a programa de simulación

Variable	Descripción
Pr	Presión de rocío del sistema a las condiciones P y T
Pb	Presión de burbuja del sistema a las condiciones P y T
T	Temperatura a la entrada del evaporador
L, V	Flujo de líquido y vapor, respectivamente
xi, yi	Composición de la especie $i$ , en el líquido y vapor respectivamente

#### 4.2.4 Modelamiento del proceso

En este proceso se identifican las siguientes unidades:

- Calentador
- Válvula de expansión
- Evaporador

Para los cuales se desarrollan a continuación los modelos que los describen, para luego integrarlos mediante algoritmos.

##### a. Modelamiento del calentador

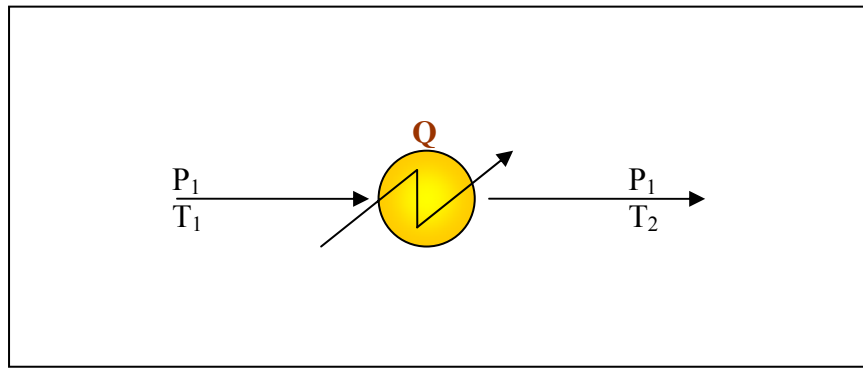


Fig. 4.17 Unidad de proceso: Calentador

Fuente: construcción propia

El calor suministrado en el calentador es:

$$Q = H_2 - H_1 \quad \text{ec. 4.22}$$

Donde  $H_1$  y  $H_2$ , son la entalpía del sistema binario formado por las especies  $i$  y  $j$ , la cual se determina a partir de modelos de coeficientes de actividad y propiedades residuales, siguiendo la siguiente trayectoria de cálculo para la propiedad de la especie  $i$ :

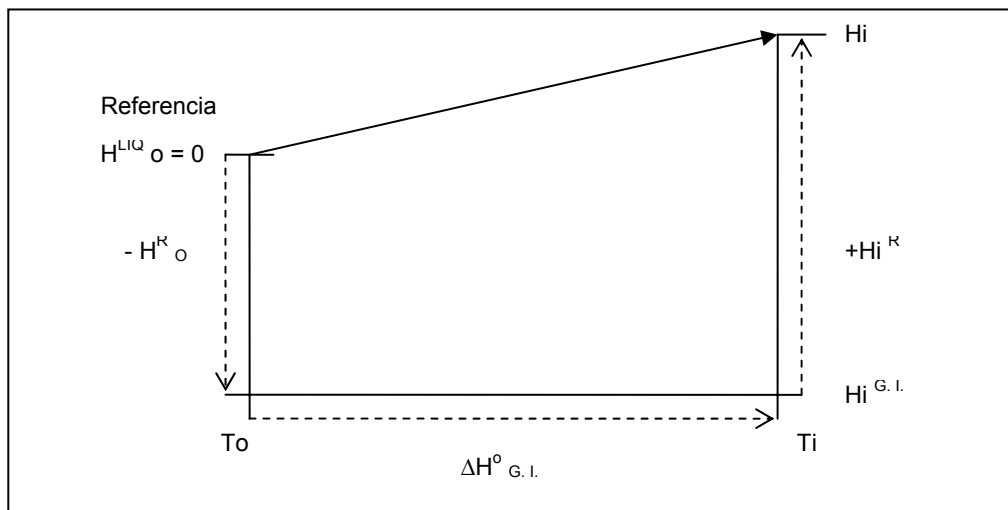


Fig. 4.18 Trayectoria de cálculo de la propiedad de la especie  $i$

Fuente: construcción propia

Donde la propiedad residual para la especie  $i$ , está definida por las ecuaciones 4.19, 4.20 y 4.21, el cambio de entalpía ideal por las ecs. 4.27 y 4.28; tomando como referencia la temperatura de presión de vapor mínima de cada especie; la propiedad en residual de mezclado para un sistema formado por las especies  $i...n$ , se define por:

$$H^R = H - \sum_i x_i H_i \quad \text{ec. 4.23}$$

Podemos ahora despejar el valor de la entalpía del sistema de la ec. 4.23, conocido el valor de la entalpía residual del sistema, el cual puede determinarse por:

$$\frac{H^R}{RT} = -T \left[ \frac{\partial(G^R / RT)}{\partial T} \right]_P \quad \text{ec. 4.24}$$

Uno de los modelos para la energía de Gibbs en exceso en función de dos parámetros de un sistema binario, es la ecuación de Wilson:

$$\frac{G^R}{RT} = -x_1 \ln(x_1 + x_2 \Lambda_{12}) - x_2 \ln(x_2 + x_1 \Lambda_{21}) \quad \text{ec. 4.25}$$

la dependencia con respecto a la temperatura de los parámetros está dada por:

$$\Lambda_{ij} = \frac{V_j}{V_i} \exp \frac{-a_{ij}}{RT}, \text{ con } i \neq j \quad \text{ec. 4.26}$$

donde  $V_j$  y  $V_i$  son los volúmenes molares a la temperatura  $T$  de los líquidos puros  $j$  e  $i$ , y  $a_{ij}$  es una constante independiente de la composición y la temperatura.

Por tanto la entalpía del sistema a las condiciones de  $P$  y  $T$ , está dado por:

$$H = -RT^2 \left[ \frac{\partial(G^R / RT)}{\partial T} \right] + (-H^{Ro}_i + \Delta H^{g.i.}_i + H^R_i) + (-H^{Ro}_j + \Delta H^{g.i.}_j + H^R_j) \quad \text{ec. 4.27}$$

La ec. 4.27 permite conocer el valor de la entalpía a las condiciones  $T_1$  y  $P_1$  de entrada al proceso, la entalpía a la salida del calentador está dado por:

$$H_2 = H_1 + Q \quad \text{ec. 4.28}$$

donde la  $T_2$ , se determina por proceso iterativo,  $H_2(T_2, P_1)$ .

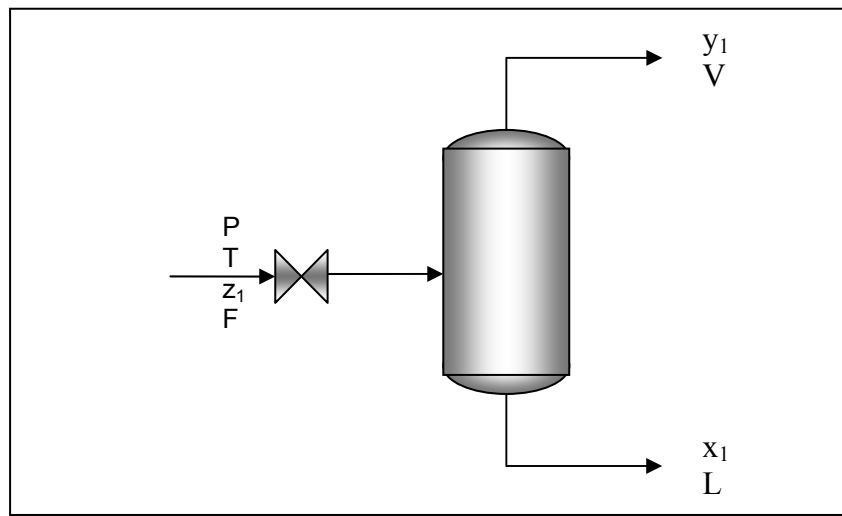
b. Modelamiento de válvula de expansión y evaporador

Fig. 4.20 Unidad de proceso: evaporador flash

Fuente: construcción propia

Al considerar un mol de especie química ( $F = 1$ ) con composición de alimentación  $\{z_i\}$ . Siendo  $L$ , los moles de líquido con fracciones mol  $\{x_i\}$ , y  $V$  los moles de vapor, con fracciones mol  $\{y_i\}$ , el balance de materia para la especie  $i$  resulta:

$$z_i = y_i V + x_i L \quad \text{ec. 4.31}$$

mientras que el balance global de materia, por mol de alimentación es:

$$L + V = 1 \quad \text{ec. 4.32}$$

Despejando "L" de la ec. 4.32 y sustituyendo en la 4.31:

$$z_i = x_i(1 - V) + y_i V \quad \text{ec. 4.33}$$

Los algoritmos solución a esta unidad de proceso se desarrollarán en la siguiente sección, y la codificación se encuentra en el anexo C.4.



Una medida conveniente que represente la relación de equilibrio líquido/vapor  $K_i$ , la cual representa la tendencia de una especie  $i$  a concentrarse en la fase de vapor, y se define por:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} \quad \text{ec. 4.34}$$

Cuando  $K_i$  es mayor a la unidad, la especie  $i$  se concentra en la fase de vapor; cuando es menor; se concentra en la fase líquida y se considera como un constituyente pesado. (Van Ness, 1997).

Despejando  $x_i$  de la ec. 4.34 y sustituyéndola en la ec. 4.33 y despejando el valor de  $y_i$ , resulta:

$$y_i = \frac{z_i K_i}{1 + V(K_i - 1)} \quad \text{ec. 4.35}$$

De igual forma siguiendo el mismo proceso para el valor de  $x_i$  se obtiene una ecuación alternativa:

$$x_i = \frac{z_i}{1 + V(K_i - 1)} \quad \text{ec. 4.36}$$

La sumatoria de cada conjunto de ecuaciones 4.35 y 4.36 son equivalentes a la unidad, de lo cual se obtiene:

$$\sum \frac{z_i K_i}{1 + V(K_i - 1)} - 1 = 0 \quad \text{y} \quad \sum \frac{z_i}{1 + V(K_i - 1)} - 1 = 0 \quad \text{ecs. 4.37}$$

la diferencia entre estas dos ecuaciones son por tanto igual a cero, restando y simplificando :

$$\sum \frac{z_i (K_i - 1)}{1 + V(K_i - 1)} = 0 \quad \text{ec. 4.38}$$

La solución al problema de evaporación instantánea se obtiene al resolver la ec. 4.38 para el valor de  $V$ , los valores de  $K$  provienen de la ecuación:

$$K_i = \frac{y_i}{x_i} = \frac{\gamma_i P_i^{sat}}{\Phi_i P} \quad \text{ec. 4.39}$$

donde  $\Phi_i$  está dado por:

$$\Phi_i = \frac{\phi_i}{\phi_i^{sat}} \quad \text{ec. 4.40}$$

para un sistema binario a *presiones bajas y moderadas* el valor de  $\Phi_i$  puede ser calculado mediante las ecuaciones:

$$\Phi_1 = \frac{B_{11}(P - P_1^{sat}) + Py_2^2 \delta_{12}}{RT} \quad \text{y} \quad \Phi_2 = \frac{B_{22}(P - P_2^{sat}) + Py_1^2 \delta_{12}}{RT} \quad \text{ecs. 4.41}$$

donde los coeficientes  $B_{11}$  y  $B_{22}$  corresponden al segundo coeficiente virial de cada especie individual  $B_{ij}$  y  $B_{ji}$ , calculados a partir de las siguientes ecuaciones:

$$B_{ii} = \frac{RTc_i}{Pc_i} (B_i^o + \omega_i B_i^1)$$

$$B_i^o = 0.083 - \frac{0.422}{Tr_i^{1.6}} \quad \text{y} \quad B_i^1 = 0.139 - \frac{0.172}{Tr_i^{4.2}} \quad \text{ecs. 4.42}$$

donde:

- $Tc_i$  = Temperatura crítica de la especie  $i$
- $Pc_i$  = Presión crítica de la especie  $i$
- $\omega_i$  = Factor acéntrico de la especie  $i$
- $Tr_i$  = Temperatura reducida de la especie  $i$

El valor de  $\delta_{12}$  de las ecuaciones 4.41 está definido por:

$$\delta_{12} = 2B_{12} - B_{11} - B_{22} \quad \text{ec. 4.43}$$

donde  $B_{12}$  es el segundo coeficiente virial para el sistema binario  $ij$  el cual se calcula mediante las siguientes ecuaciones:

$$B_{ij} = \frac{RTc_{ij}}{Pc_{ij}} (B^o + \omega_{ij} B^1) \quad \text{ec. 4.44}$$

$B^0$  y  $B^1$  son funciones de  $Tr_{ij}$ . Las reglas de combinaciones propuestas por Prausnitz para el cálculo de  $Tc_{ij}$ ,  $\omega_{ij}$  y  $Pc_{ij}$  son:

$$\omega_{ij} = \frac{\omega_i + \omega_j}{2}$$

$$Tc_{ij} = (Tc_i Tc_j)^{1/2} \quad \text{y} \quad Tr_{ij} = T / Tc_{ij}$$

$$Pc_{ij} = \frac{Z_{ij} R Tc_{ij}}{Vc_{ij}}$$

en donde

$$Z_{ij} = \frac{Zc_i + Zc_j}{2}$$

y

$$Vc_{ij} = \left( \frac{Vc_i^{1/3} + Vc_j^{1/3}}{2} \right)^3 \quad \text{ecs. 4.45}$$

En la ec. 4.39 el valor de  $P_i^{sat}$  está dado por la ecuación de Antoine:

$$\ln P_i^{sat} = A_i - \frac{B_i}{T + C_i} \quad \text{ec. 4.46}$$

y el valor del coeficiente de actividad  $\gamma_i$  está dada por la correlación de Wilson de la siguiente forma:

$$\ln \gamma_1 = -\ln(x_1 + x_2 \Lambda_{12}) + x_2 \left( \frac{\Lambda_{12}}{x_1 + x_2 \Lambda_{12}} - \frac{\Lambda_{21}}{x_2 + x_1 \Lambda_{21}} \right)$$

$$\ln \gamma_2 = -\ln(x_2 + x_1 \Lambda_{21}) + x_1 \left( \frac{\Lambda_{12}}{x_1 + x_2 \Lambda_{12}} - \frac{\Lambda_{21}}{x_2 + x_1 \Lambda_{21}} \right) \quad \text{ecs. 4.47}$$

donde los valores de  $\Lambda_{12}$  y  $\Lambda_{21}$  están dados por la ec. 4.26.

Para que pueda efectuarse la evaporación instantánea la presión del sistema debe estar entre los valores de la presión de rocío ( $P_{\text{Rocío}}$ ) y la presión de burbuja ( $P_{\text{Burbuja}}$ ) donde el sistema es una mezcla en equilibrio de líquido y vapor. Por tanto habrá de calcularse  $P_{\text{Rocío}}$ , a la  $T$  dada y para  $\{y_i\} = \{z_i\}$ , y  $P_{\text{Burbuja}}$  a la  $T$  dada y para  $\{x_i\} = \{z_i\}$ .

Los algoritmos de cálculo para  $P_{\text{Rocío}}$ ,  $P_{\text{Burbuja}}$  y el proceso iterativo de cálculo de evaporación instantánea se presentan en la siguiente sección.

#### 4.2.5 Desarrollo algorítmico

El diagrama de flujo de información (DFI) para este proceso, identificando cada unidad y corriente de proceso es el mostrado en la fig 4.21:

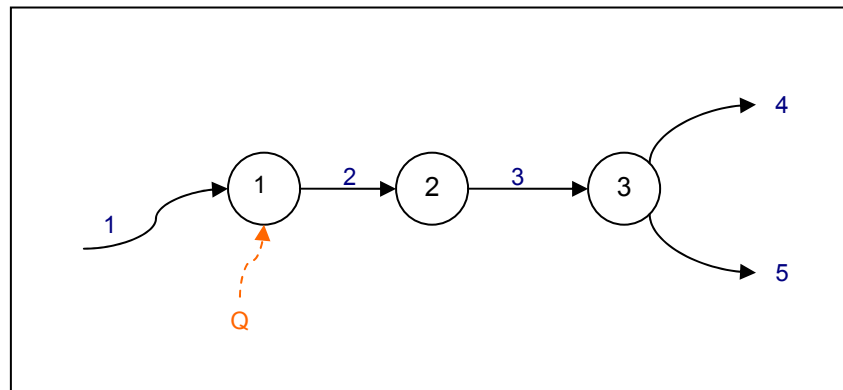


Fig. 4.21 Diagrama de flujo de información del proceso

Fuente: Fuente: construcción propia

Tal como se observa en el DFI de la fig. 4.21, la unidad de proceso 1 que corresponde al calentador recibe información externa como lo son las condiciones de composición, Temperatura y Presión de la alimentación ( $z_i$ ,  $T$  y  $P$ ) y el calor suministrado a la unidad, calcula la temperatura a la salida del calentador para luego proporcionar información a la siguiente unidad de proceso 2, la válvula de expansión, donde se da la caída de presión y consigo una reducción en la temperatura del sistema, información que será utilizada por la siguiente unidad 3, el evaporador, donde se da la separación de las fases líquido/vapor con sus respectivas composiciones.

Un algoritmo para el cálculo de los valores de salida de la unidad de proceso 1 (calentador), es el siguiente:

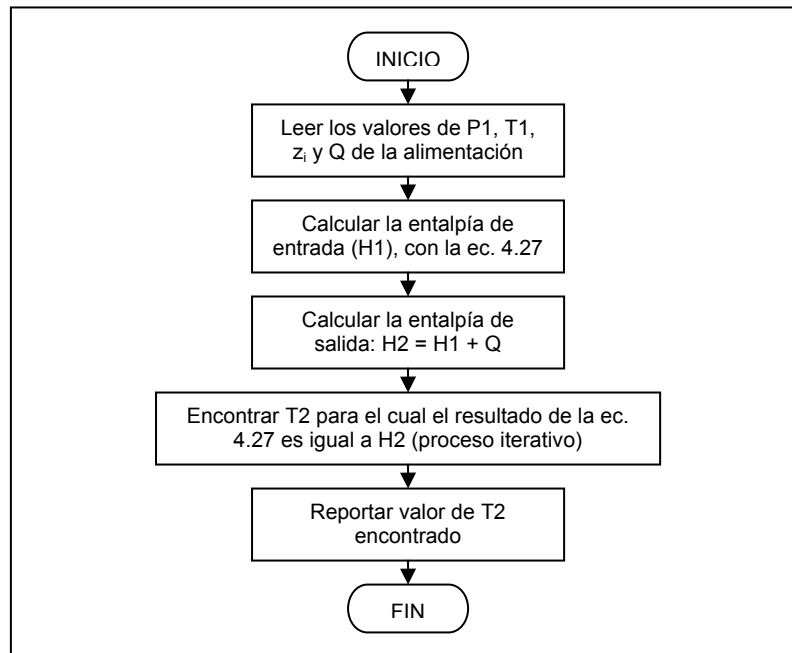


Fig. 4.22 Algoritmo de cálculo de unidad de proceso: calentador  
Fuente: construcción propia

Este algoritmo hace uso de la ec. 4.27 y consigo el resto de ecuaciones y procesos, para el cálculo de la entalpía de la alimentación a la entrada del calentador, luego nuevamente en un proceso iterativo de cálculo de la temperatura de salida del calentador conocida ya su respectiva entalpía. Calculada el valor de la temperatura, proporciona esta información a la siguiente unidad de proceso (válvula de expansión), cuyo algoritmo de cálculo es el presentado en la figura 4.23:

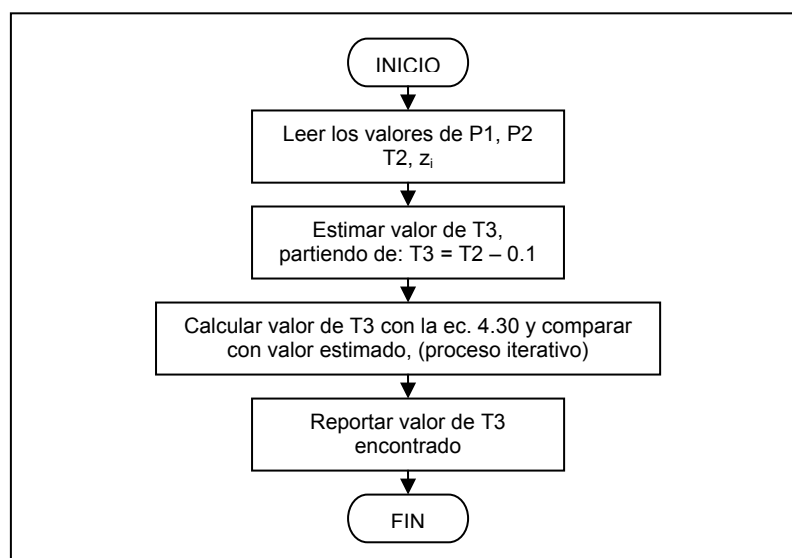


Fig. 4.23 Algoritmo de cálculo unidad de proceso: Válvula de expansión  
Fuente: construcción propia

El algoritmo de la fig. 4.22 procesa información proveniente de la unidad de proceso 1 (calentador), para luego procesarla y proporcionarla a la siguiente unidad 3 (evaporador), en la cual se requiere una serie de cálculos para la evaporación instantánea basados en los siguientes algoritmos.

Un esquema de cálculo para la resolución de la evaporación instantánea se muestra en el algoritmo de la fig. 4.24. La información dada es leída y almacenada, luego se realizan los cálculos respectivos de  $P_{Rocio}$  y  $P_{Burbuja}$ , cuyo procedimiento se presenta en los algoritmos de las fig. 4.25 y 4.26. El cálculo de evaporación instantánea se realiza si la presión dada  $P$  queda entre los valores de  $P_{Rocio}$  y  $P_{Burbuja}$  calculados. Al cumplirse esta condición se utilizan los resultados de los cálculos de  $P_{Rocio}$  y  $P_{Burbuja}$  preliminares para tener estimaciones iniciales de  $\{\gamma_i\}$ ,  $\{\phi_i\}$  y  $V$ . Para el punto de rocío  $V = 1$  y se han calculado los valores de  $P_{Rocio}$ ,  $\{\gamma_{i,Rocio}\}$  y  $\{\phi_{i,Rocio}\}$ ; para el punto de burbuja,  $V = 0$ , y se han calculado los valores de  $P_{Burbuja}$ ,  $\{\gamma_{i,Burbuja}\}$  y  $\{\phi_{i,Burbuja}\}$ . El procedimiento más sencillo es la interpolación entre los valores de punto de rocío y punto de burbuja en relación con la posición de  $P$  entre  $P_{Rocio}$  y  $P_{Burbuja}$ :

$$\frac{\gamma_i - \gamma_{i,rocio}}{\gamma_{i,burbuja} - \gamma_{i,rocio}} = \frac{\phi_i - \phi_{i,rocio}}{\phi_{i,burbuja} - \phi_{i,rocio}} = \frac{P - P_{rocio}}{P_{burbuja} - P_{rocio}} \quad \text{y}$$

$$V = \frac{P_{burbuja} - P}{P_{burbuja} - P_{rocio}} \quad \text{ecs. 4.48}$$

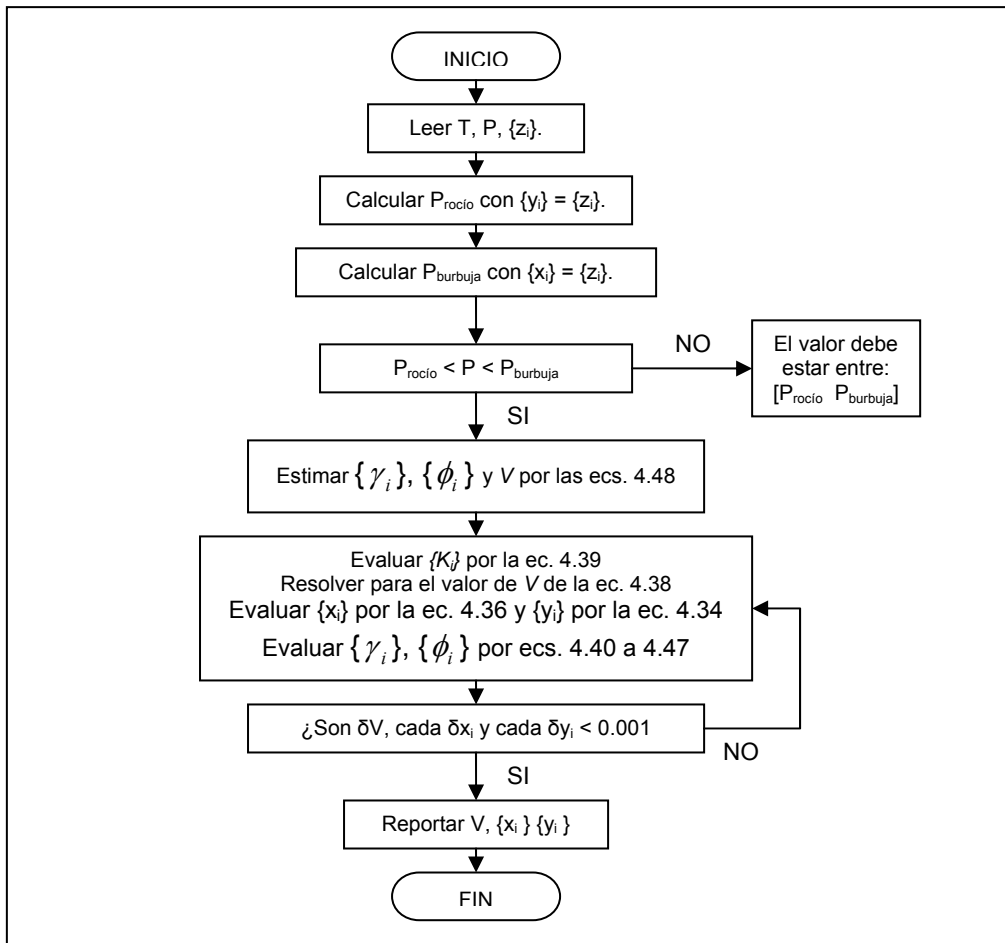


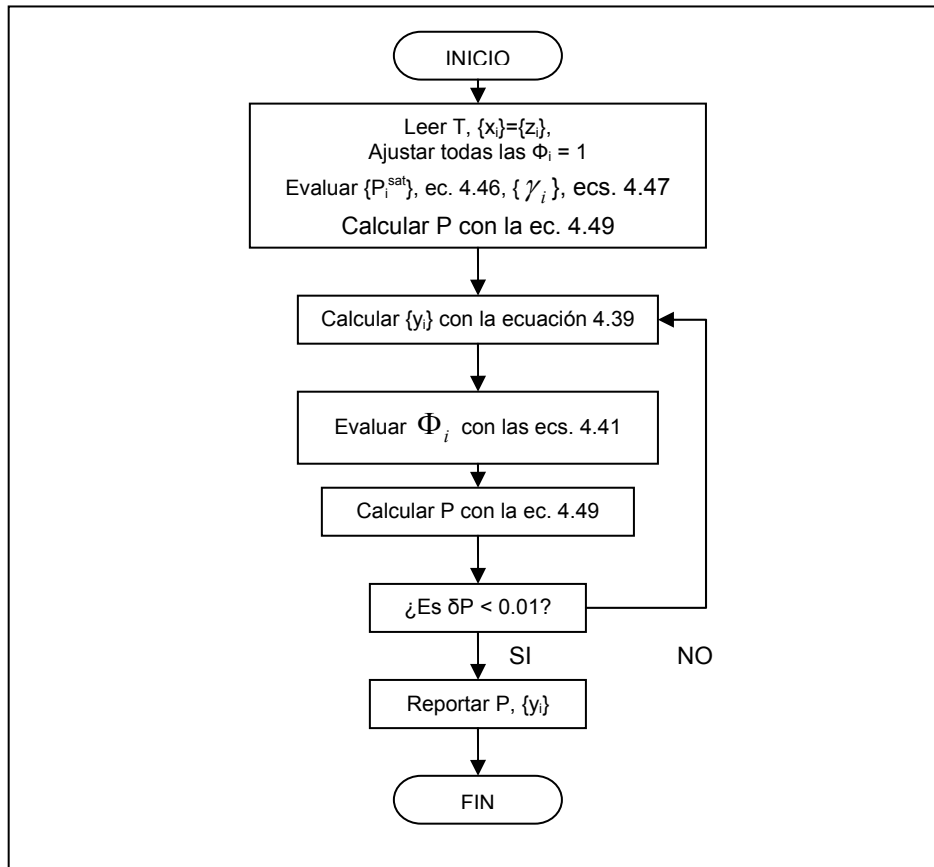
Fig. 4.24 Algoritmo de cálculo para evaporación instantánea a P y T

Fuente: Van Ness, 1997

El esquema de iteración para el cálculo del punto de burbuja se muestra en el Alg. 4, donde primero se lee y almacenan los valores dados de  $T$  y  $\{x_i\}$ , junto con todas las constantes que se requieren para evaluar  $P_i^{sat}$ ,  $\gamma_i$  y  $\Phi_i$ . Dado que  $\{y_i\}$  no se da, aun no se pueden determinar los valores para las  $\Phi_i$  y cada una se ajusta a la unidad. Los valores para  $P_i^{sat}$  provienen de la ecuación de Antoine (ec. 4.46) y los de  $\gamma_i$  se calcula por la correlación de Wilson (ecs. 4.47), el valor de la presión de burbuja está dado por:

$$P = \sum_i \frac{x_i \gamma_i P_i^{sat}}{\Phi_i} \quad \text{ec. 4.49}$$

$$\text{y } P = \sum_i \frac{1}{y_i \Phi_i / \gamma_i P_i^{sat}} \quad \text{ec. 4.50}$$

Fig. 4.25 Algoritmo de cálculo de punto de burbuja ( $P_{\text{burbuja}}$ )

Fuente: Van Ness, 1997

Los valores de  $\Phi_i$  de las ecs. 4.41 permiten volver a calcular a  $P$  mediante la ec. 4.49, llevando la iteración a valores finales de  $P$  y  $\{y_i\}$ .

Un esquema para el cálculo del punto de rocío ( $P_{\text{rocío}}$ ) se muestra en el Alg. 5, donde primero se leen y almacenan los valores de  $T$  y  $\{y_i\} = \{x_i\}$ , junto con las constantes apropiadas. Dado que no se pueden calcular ni las  $\Phi_i$  ni las  $\{\gamma_i\}$ , todos los valores de cada una se ajustan a la unidad. Los valores de  $\{P_i^{\text{sat}}\}$  se encuentran a partir de la ec. de Antoine. La evaluación de  $\{\gamma_i\}$  permite recalculer  $P$  mediante la ec. 4.50. Con esta estimación se puede evaluar  $\Phi_i$  e ingresarla en un rizo interno de iteración que converge en los valores de  $\{x_i\}$  y  $\{\gamma_i\}$ . Volver calcular posteriormente a  $P$  por medio de la ec. 4.50, lleva al rizo exterior de iteración que establece el valor final de  $P$ .



Dado que las  $x_i$  calculadas dentro del rizo interior no están constreñidas para sumar la unidad, cada valor se divide por medio de  $\sum_i x_i$ :

$$x_i = \frac{x_i}{\sum_i x_i} \quad \text{ec. 4.51}$$

Esto produce un conjunto de valores  $x_i$  *normalizados*, los cuales se suman a la unidad.

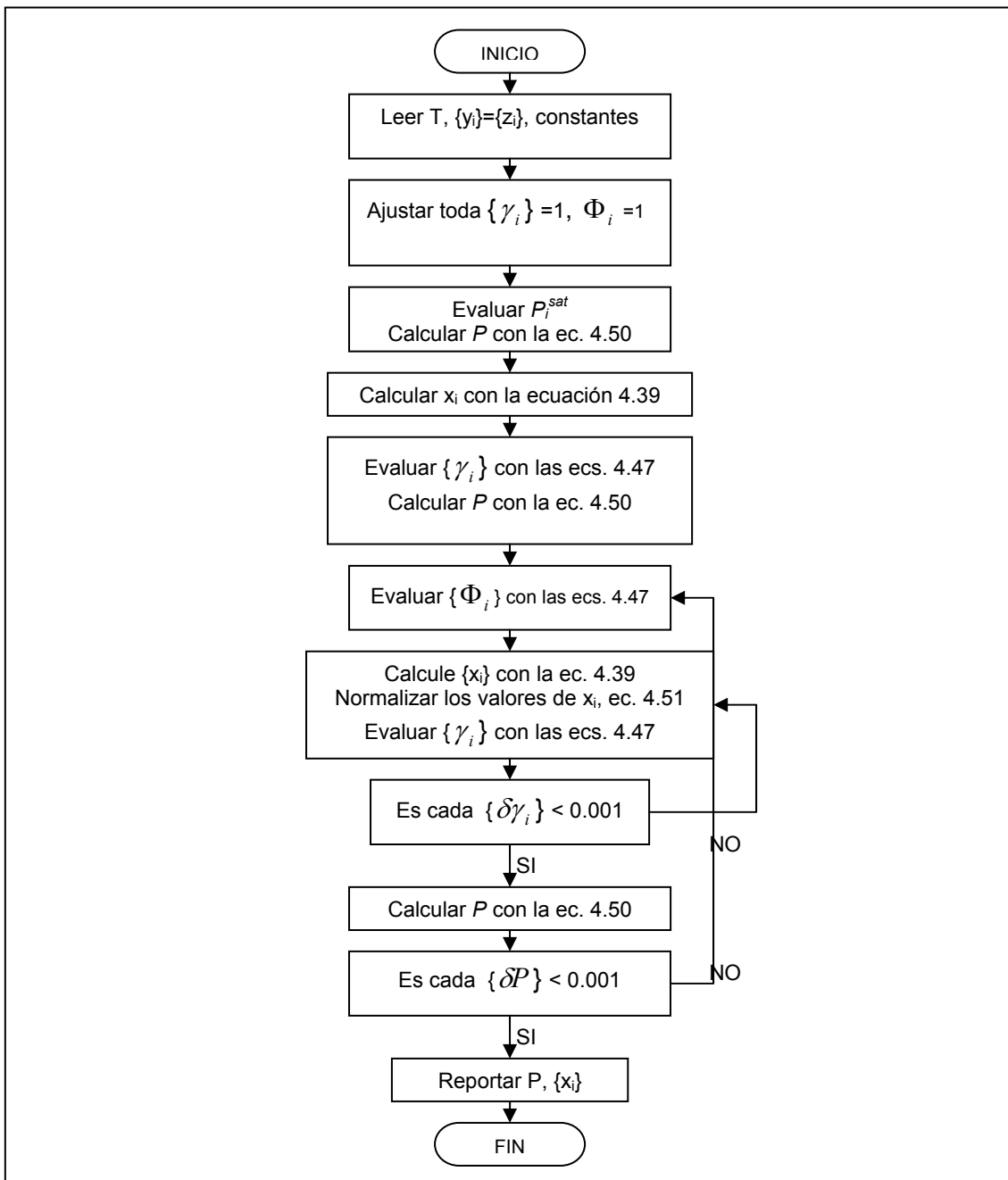


Fig. 4.26 Algoritmo de cálculo de punto de rocío ( $P_{rocío}$ )

Fuente: Van Ness, 1997

#### 4.2.6 Simulación del proceso

La técnica de simulación utilizada para éste proceso es la Simulación Modular Simultáneo, resolviendo los sistemas de ecuaciones de cada módulo individual o unidades de proceso de una manera secuencial, siendo él método más conveniente debido a la complejidad de ciertas ecuaciones y procedimientos y subrutinas iterativas que implican la solución del sistema.

Para la ejecución de los algoritmos planteados se desarrollaron funciones definidas que realizan cálculos específicos requeridos en repetidas veces, las cuales se listan en la tabla 4.10:

Tabla 4.10  
Funciones definidas utilizadas en el programa de simulación

Función	Descripción
ANTOINE(A,B,C,T)	Calcula la presión de vapor de una especie $i$ a $T$ dada
IDEAL(a,b,c,d,To,Ti)	Calcula el cambio de entalpía ideal en función del $C_p(T)$ para un $\Delta T$
MCPS(a,b,c,d,To,Ti)	Da como resultado el $C_p$ medio en función de la entropía
Residual_ij(V1,V2,a12,a21,T)	Calcula la entalpía residual para un sistema binario $ij$
Residual_i(P,T,Pc,Tc)	Calcula la entalpía residual para una especie $i$
virial(Tc,Pc,w,T,R)	Determina el segundo coeficiente virial para una especie $i$
virial_ij(Tci,Pci,Tcj,Pcj,wi,wj,Vci,Vcj,Zci,Zcj,T,R)	Determina el segundo coeficiente virial para una especie $ij$
WILSON(x1,a12,a21,V1,V2,T,R)	Calcula los coeficientes de actividad $\gamma_i$ , utilizando la correlación de Wilson

Estas funciones detalladas en el Anexo D.1, son utilizadas por el programa principal para ejecutar la simulación del proceso, en la cual primero se selecciona el sistema binario del proceso, apareciendo en la siguiente ventana de la figura 4.27.



Fig. 4.27 Ventana de selección del sistema binario del proceso

Para nuestro caso seleccionaremos el sistema 2- Propanol (1) / Agua (2) en la ventana de la fig. 4.27, luego aparece en pantalla el ambiente de simulación mostrado en la fig. 4.28:

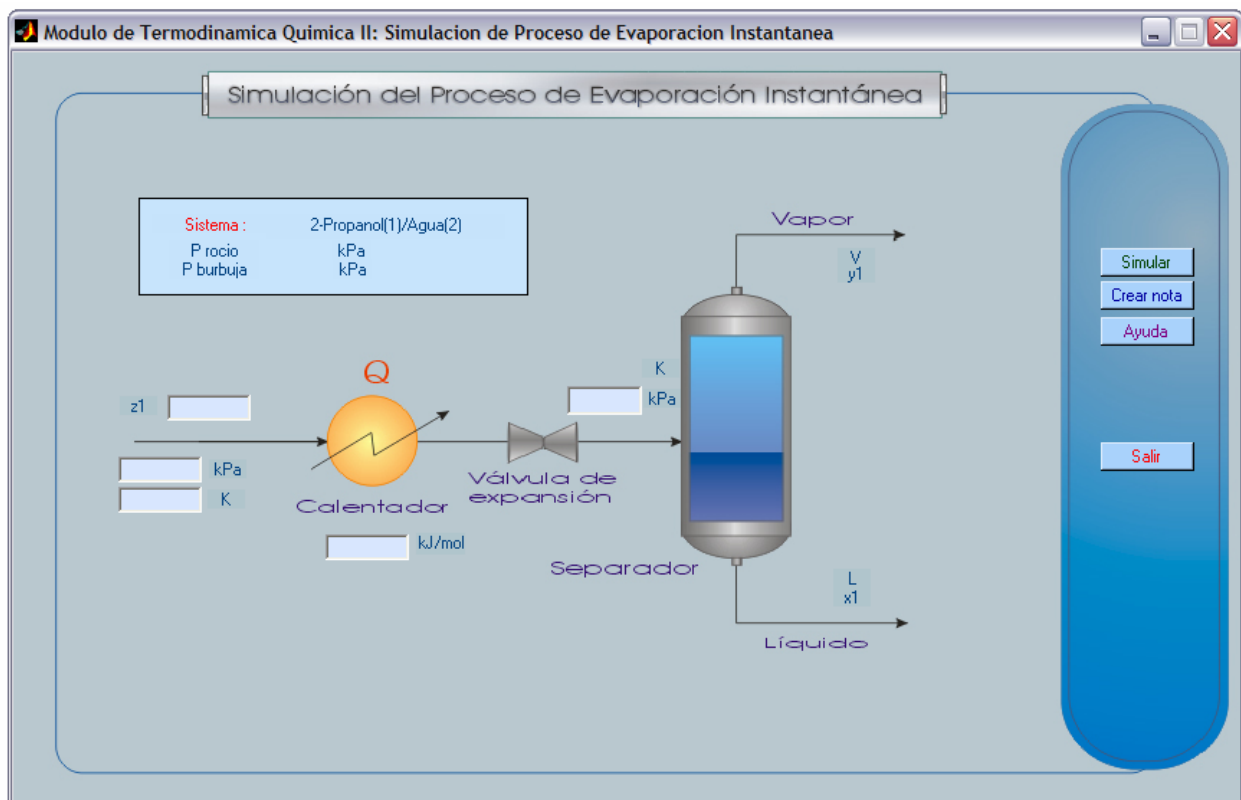


Fig. 4.28 Ventana de simulación del proceso de evaporación instantánea

Las funciones de los botones de acción son las mismas que las simulaciones desarrolladas anteriormente. Al introducirle los datos para el proceso a  $T_1 = 350$  K,  $P_1 = 110$  kPa,  $P_2 = 80$  kPa,  $z_1 = 0.25$  y  $Q = 1500$  kJ/mol, y ejecutar la el botón de acción “Simular”, inicia el proceso de simulación, cuya codificación se presenta en el anexo D.2.

Finalizada la simulación del proceso sin ningún problema, aparece en pantalla el mensaje mostrado en la fig. 3.33.

#### 4.2.7 Resultados de simulación de proceso de evaporación instantánea

Finalmente son presentados en pantalla los resultados en la misma ventana de entrada de datos, como se muestra en la figura 4.28:

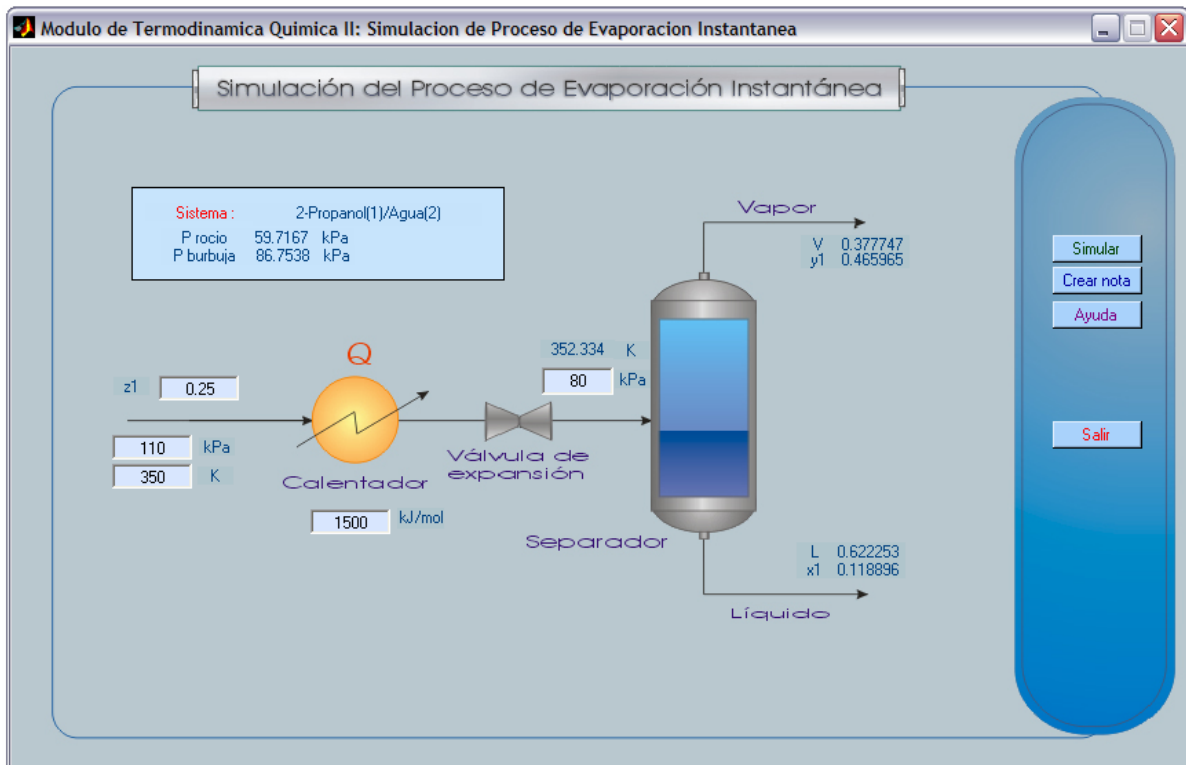


Fig. 4.28 Ventana de simulación con los resultados obtenidos

En la ventana de la fig. 4.28 se presentan los resultados obtenidos de  $P_{\text{rocío}}$ ,  $P_{\text{burbuja}}$ , temperatura a la entrada del evaporador, composiciones y flujos de líquido/vapor, ( $\{x_1\}$ ,  $\{y_1\}$ ,  $L$  y  $V$ ). Como puede observarse la presión en el evaporador está entre los valores de  $P_{\text{rocío}}$  y  $P_{\text{burbuja}}$ .

Si por ejemplo el valor de  $P_2$  (80 kPa) fuese mayor que  $P_{\text{burbuja}}$  (86.75 kPa),  $P_2 = 95$  kPa, aparece el siguiente mensaje en pantalla de la fig. 4.29:



Fig. 4.29 Mensaje de notificación al no ser posible la evaporación instantánea

Pero a la vez, el programa hace la sugerencia de los valores que pueden ser posibles, mostrando los valores obtenidos de  $P_{\text{rocio}}$  y  $P_{\text{burbuja}}$  como se muestra en la fig. 4.30:

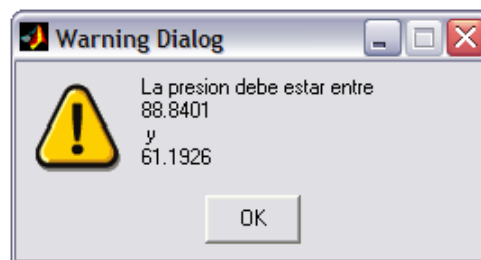


Fig. 4.30 Valores de presión sugeridos para estas condiciones

Puede notarse en la fig. 4.30 que los valores de  $P_{\text{rocio}}$  y  $P_{\text{burbuja}}$  obtenidos varían respecto a los obtenidos en la simulación anterior ( $P_2=80$  kPa), debido que al variar esta presión también varía la temperatura de descarga de la válvula de expansión y la que es a su vez la temperatura a la entrada del evaporador, por tanto  $P_{\text{rocio}}$  y  $P_{\text{burbuja}}$  también varían, hecho que puede analizarse mediante la simulación del proceso y hacer los cambios que más convengan para un buen diseño del proceso.

## Capítulo 5

### Desarrollo de módulo para la simulación de procesos en ingeniería de las reacciones químicas

Este módulo comprende los siguientes programas de simulación de procesos:

- ✚ Simulación de un reactor discontinuo ideal isotérmico
- ✚ Simulación de Sistemas de Reactores Serie/Paralelo
- ✚ Simulación de Reactor de Flujo en Pistón No Isotérmico

El reactor químico se considera como la parte principal de todo proceso químico, el cual es el equipo donde toma lugar la conversión de materia prima en un producto deseado.

El Ingeniero Químico selecciona la configuración y modo de operación de un reactor que permita la obtención de máximos beneficios entre materia prima, costos de producto, costos de capital y operación, seguridad y control ambiental.

Los principios básicos para el diseño técnico de un reactor químico son:

- a. Hacer decisiones preliminares en cuanto al método de operación y en cuanto al tipo de reactor.
- b. Evaluar el funcionamiento del reactor.

El primer paso requiere cálculos de funcionamiento para diversos tipos de reactores seleccionando entre diseños alternativos y evaluando el funcionamiento de éstos es posible lograrlo de un modo eficiente mediante la simulación del diseño del reactor o sistema de interés.

#### 5.1 Simulación de un reactor discontinuo ideal isotérmico

##### 5.1.1 Principios básicos del proceso

Un reactor discontinuo opera sin intercambio de materia con el exterior. Se alimenta inicialmente con los reactantes y, una vez ha terminado la reacción, el reactor se vacía.

Las aplicaciones más usuales de éste tipo de reactor son:

- a) Como reactores de laboratorio o industrias de producción pequeña;
- b) Reacciones en fase líquida y en reacciones a presiones bajas y moderadas.

Entre las ventajas de su uso pueden mencionarse:

- a) Presentan gran simplicidad por lo que son fácilmente manejables especialmente si se trata de una fábrica que elabore a escala relativamente pequeña una amplia variedad de producto.
- b) El costo es menor que el caso de un proceso continuo cuando la producción deseada es baja. Por esta razón se le prefiere para procesos nuevos a probar y que posteriormente se convertirán en procesos continuos, en etapas más avanzadas de su desarrollo.

El reactor discontinuo experimental suele operar isotérmicamente y a volumen constante, debido a la fácil interpretación de los resultados experimentales procedentes de las experiencias efectuadas en éstas condiciones. Este reactor es un dispositivo realmente sencillo, adaptable a las experiencias de laboratorio en pequeña escala y necesita pequeños instrumentos o aparatos auxiliares; este dispositivo preferido para la obtención de datos cinéticos en sistemas homogéneos, (Levenspiel,).

En el caso de trabajar con reacciones en la fase líquida, se supone que el fluido es incompresible, es decir, la densidad permanece constante, y por lo tanto se trabaja con volúmenes de reactor constantes.

Cuando trabajamos con sistemas en fase gaseosa, el volumen del reactor puede variar por cambios en la presión, temperatura y número de moles.

La determinación de datos cinéticos se realiza normalmente midiendo la concentración como función del tiempo y después se utiliza o el método diferencial o el integral de análisis de datos para determinar el orden de reacción,  $n$ , y la constante de velocidad  $k$ . En algunas ocasiones se puede seguir también la evolución de algún parámetro de reacción, como por ejemplo la presión, y el balance molar se rescribe en función de la variable medida (en este caso la presión).

En términos generales, existen dos preguntas con las cuales se enfrenta el diseño de un reactor discontinuo ideal (RDI) que son:

1. ¿Cuál es el tiempo requerido para convertir una cantidad dada de material al nivel deseado, bajo las condiciones de operación de la reacción?
2. ¿Cuál es el volumen de reactor requerido para alcanzar una velocidad de producción dada?

### 5.1.2 Planteamiento del problema

Se desea diseñar un programa de simulación de un reactor discontinuo ideal de volumen constante que permita:

- Introducir los datos cinéticos de la reacción
- Seleccionar un modelo cinético y evaluar si es el apropiado o no.
- Obtener la ecuación cinética de la reacción
- Estimar tiempo de reacción para una conversión deseada.
- Analizar los comportamientos  $C_a$  vrs.  $t$ ,  $X_a$  vrs  $t$  y  $-r_a$  vrs  $t$
- Calcular el volumen de reactor de mezcla completa (RMC) y de reactor de flujo en pistón (RFP) para una alimentación y conversión dada.

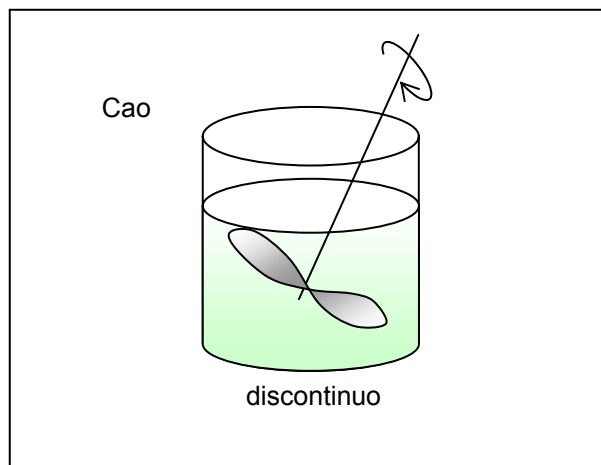


Fig. 5.1 Reactor discontinuo ideal

Fuente: creación propia

### 5.1.3 Definición de variables

Las variables del sistema en estudio, podemos clasificarlas en:

#### a. Variables de entrada

Las variables de entrada para el proceso descrito se presentan en la tabla 5.1:

Tabla 5.1  
Variables de entrada en Simulación de Reactor Discontinuo Ideal (RDI)

Variable	Descripción
$t$	Serie de datos de tiempo de reacción
$C_a$	Serie de datos de concentración de reactante A
$C_{ao}$	Concentración inicial del reactante A
$X$	Dato de conversión deseada
$F_{ao}$	Alimentación al reactor RMC/RFP



b. Variables de proceso

Las variables de proceso se presentan en la tabla 5.2:

Tabla 5.2  
Variables de proceso en Simulación de Reactor Discontinuo Ideal (RDI)

Variable	Descripción
n	Orden de la cinética de reacción
k	Constante de velocidad de reacción
r2	Coefficiente de correlación lineal ( $r^2$ )

c. Variables de salida

Las variables de salida se presentan en la tabla 5.3:

Tabla 5.3  
Variables de salida en Simulación de Reactor Discontinuo Ideal (RDI)

Variable	Descripción
tr	Tiempo de reacción para una conversión dada
-ra	Ecuación de velocidad de reacción
Vrmc	Volumen equivalente a reactor mezcla completa (RMC)
Vrfp	Volumen equivalente a reactor flujo en pistón (RFP)

## 5.1.4 Modelamiento de la cinética del proceso

La forma general de la ecuación cinética para el componente  $i$  en un sistema de volumen constante o variable es:

$$r_i = \frac{1}{V} \frac{dN_i}{dt} = \frac{1}{V} \frac{d(C_i V)}{dt} = \frac{1}{V} \frac{V dC_i + C_i dV}{dt} = \frac{dC_i}{dt} + \frac{C_i}{V} \frac{dV}{dt} \quad \text{ec. 5.1}$$

Para un sistema a volumen constante el segundo término de la ecuación 5.1 se anula, resultando la sencilla expresión de la ecuación cinética para el reactante A:

$$r_A = \frac{1}{V} \frac{dN_A}{dt} \quad \text{ec. 5.2}$$

Los modelos cinéticos a seleccionar se presentan en la tabla 5.4:

Tabla 5.4  
Modelos cinéticos de selección en simulación de Reactor Discontinuo Ideal (RDI)

<b>Orden de reacción</b>	<b>Modelo cinético</b>
Primer orden	$-r_A = kC_A$
Segundo orden	$-r_A = kC_A^2$
Segundo orden	$-r_A = kC_A C_B$
Orden "n"	$-r_A = kC_A^n$

Para una reacción de primer orden el modelo cinético o ley de velocidad es:

$$-r_A = kC_A \quad \text{ec. 5.3}$$

Para una fase líquida sin cambio de volumen, la estequiometría resulta:

$$C_A = \frac{N_A}{V} = \frac{N_A}{V_0} \quad \text{ec. 5.4}$$

$$\frac{1}{V_0} \left( \frac{dN_A}{dt} \right) = \frac{d(N_A/V_0)}{dt} = \frac{dC_A}{dt}$$

Combinando la ley de velocidad (ec. 5.3) y la estequiometría (ec. 5.4) obtenemos:

$$-\frac{dC_A}{dt} = kC_A \quad \text{ec. 5.5}$$

Para una operación isotérmica integrando la ec. 5.5 se obtiene:

$$-\int_{C_{A0}}^{C_A} \frac{dC_A}{C_A} = \int_0^t k dt \quad \text{ec. 5.6}$$

tomando en consideración que a  $t = 0$   $C_A = C_{A0}$ , la integración es:

$$\ln \frac{C_{A0}}{C_A} = kt \quad \text{ec. 5.7}$$

Para confirmar que el modelo cinético es el correcto para el proceso la ec. 5.7 se debe de cumplir, lo que se comprueba mediante un análisis de regresión lineal de datos cinéticos experimentales disponibles. De la ecuación de línea recta:

$$y = m x \equiv \ln \frac{C_{A0}}{C_A} = kt \quad \text{ec. 5.8}$$

los valores de  $y = \ln (C_{A0}/C_A)$ ,  $x = t$ , y el valor de la pendiente  $m = k$ , obteniendo así la constante de velocidad de reacción. El parámetro de comprobación de la linealidad del modelo es el coeficiente de correlación lineal, cuyo valor  $r^2 = 1$ , confirma el modelo seleccionado.

La conversión fraccional ( $X_A$ ) de un reactante A, es definido como la fracción del reactante convertido en producto:

$$X_A = \frac{N_{A0} - N_A}{N_{A0}} \quad \text{ec. 5.9}$$

la ecuación 5.4 puede ser escrita en términos de la conversión:

$$C_A = \frac{N_A}{V} = \frac{N_{A0}(1 - X_A)}{V} = C_{A0}(1 - X_A)$$

diferenciando:

$$-dC_A = C_{A0}dX_A$$

la ec. 5.5 queda de la forma:

$$\frac{dX_A}{dt} = k(1 - X_A) \quad \text{ec. 5.10}$$

separando variables e integrando obtenemos:

$$\int_0^{X_A} \frac{X_A}{1 - X_A} = k \int_0^t dt$$

por tanto:

$$-\ln(1 - X_A) = kt \quad \text{ec. 5.11}$$

que es el equivalente a la ec. 5.8 en términos de la conversión fraccional.

Para las reacciones bimoleculares de segundo grado con la correspondiente ecuación cinética:

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = -\frac{dC_B}{dt} = kC_A C_B \quad \text{ec. 5.12}$$

tomando en cuenta que las cantidades de A y B que han reaccionado en el tiempo son iguales,  $C_{A0} X_A = C_{B0} X_B$ , la ec. 5.12 se puede escribir:

$$-r_A = C_{A0} \frac{dX_A}{dt} = kC_{A0} (1 - C_{A0}) (C_{B0} - C_{A0} X_A) \quad \text{ec. 5.13}$$

si designamos la relación molar de reactantes,  $M = C_{B0}/C_{A0}$ , obtenemos:

$$-r_A = C_{A0} \frac{dX_A}{dt} = kC_{A0}^2 (1 - X_{A0}) (M - X_A) \quad \text{ec. 5.14}$$

separando variables e integrando resulta:

$$\int_0^{X_A} \frac{dX_A}{(1 - X_A)(M - X_A)} = C_{A0} k \int_0^t dt \quad \text{ec. 5.15}$$

obteniendo así:

$$\ln \frac{M - X_A}{M(1 - X_A)} = (C_{B0} - C_{A0})kt \equiv y = m x \quad \text{ec. 5.16}$$

Para las reacciones de segundo grado con ecuación cinética de la forma:

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = kC_A^2 = C_{A0}^2 (1 - X_A)^2 \quad \text{ec. 5.17}$$

integrando resulta:

$$\frac{1}{C_A} - \frac{1}{C_{A0}} = \frac{1}{C_{A0}} \frac{X_A}{1 - X_A} = kt \equiv y = m x \quad \text{ec. 5.18}$$

Cuando no se conoce el mecanismo de reacción, a veces intentamos ajustar los datos con una ecuación cinética de orden  $n$ , de la forma:

$$-r_A = -\frac{dC_A}{dt} = kC_A^n \quad \text{ec. 5.19}$$

separando variables e integrando se obtiene:

$$C_A^{1-n} - C_{A0}^{1-n} = (n-1)kt, \quad n \neq 1 \quad \equiv y = m x \quad \text{ec. 5.20}$$

Para el cálculo del volumen equivalente para un reactor de mezcla completa (RMC) se utiliza la siguiente ecuación de diseño:

$$V_{RMC} = \frac{F_{A0} X}{(-r_A)_{salida}} \quad \text{ec. 5.21}$$

que da el volumen  $V_{RMC}$  necesario para lograr una conversión  $X$ , para un flujo de alimentación  $F_{A0}$  dado, para lo cual se determina la velocidad de reacción correspondiente a la salida del reactor.

De igual forma para el cálculo del volumen equivalente de un reactor de flujo en pistón (RFP) se tiene la forma integral de la ecuación de diseño:

$$V = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{-r_A} \quad \text{ec. 5.22}$$

Si sustituimos la ley de velocidad para el caso de una reacción de segundo orden obtenemos:

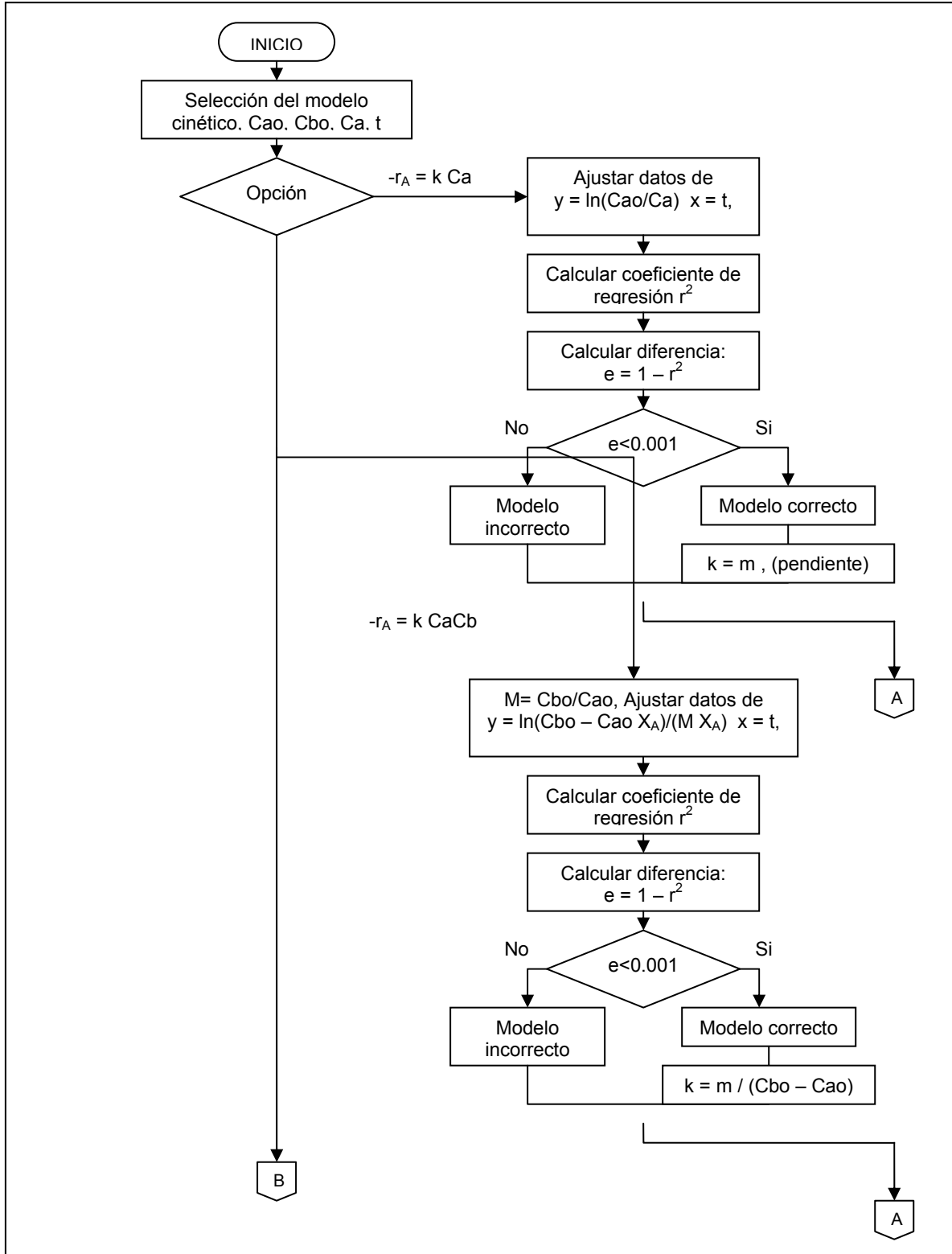
$$V = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{kC_A^2} \quad \text{ec. 5.23}$$

al disponer de los datos de conversión pueden ser resueltos mediante un método de integración numérica.

El tiempo de reacción para una conversión dada se determina a partir de la ecuación cinética, conocida ya la constante de velocidad.

**5.1.5 Desarrollo algorítmico**

La solución algorítmica al proceso consiste primeramente en la evaluación de la selección del modelo cinético en cuanto al ajuste lineal de los datos y su análisis de regresión, como se desarrolla en el algoritmo de la fig. 5.2:



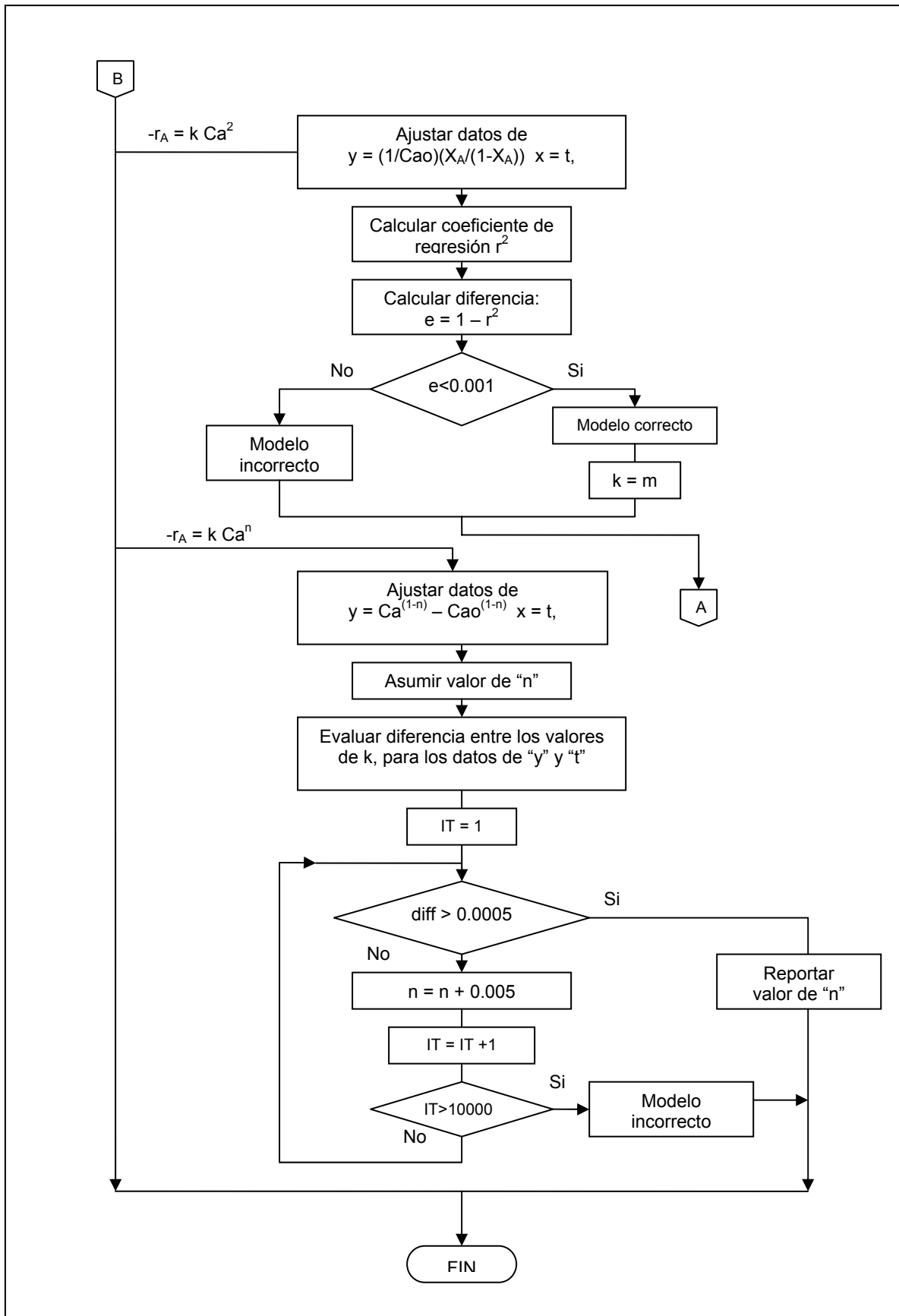


Fig. 5.2 Algoritmo de evaluación de modelo cinético seleccionado

Si el modelo seleccionado es el correcto se procede al cálculo del tiempo de reacción y velocidad de reacción para una conversión dada, a partir de la ecuación cinética según el orden de reacción, como se muestra en el algoritmo de la fig 5.3:

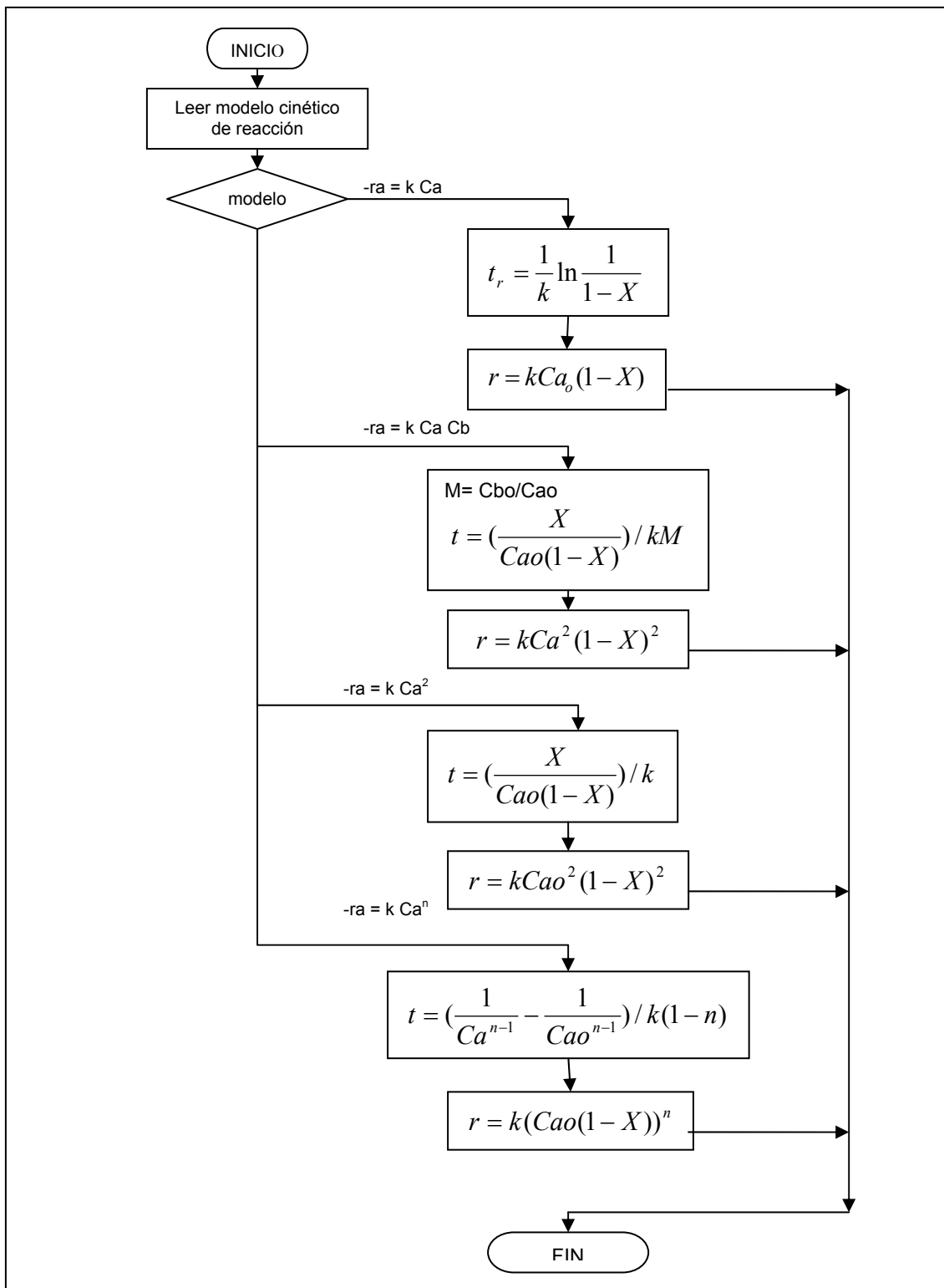


Fig. 5.3 Algoritmo de cálculo de tiempo y velocidad de reacción dado  $X$



Finalmente comportamientos  $C_A$  vs.  $t$ ,  $X_A$  vs  $t$  y  $-r_A$  vs  $t$  son generados a partir de las ecuaciones correspondientes y los datos ya conocidos. Los volúmenes equivalentes a reactor de mezcla completa y reactor de flujo en pistón se calculan a partir de las ecuaciones 5.21 y 5.22 en función de la ley de velocidad de reacción estimada.

### 5.1.6 Simulación del proceso

Para la ejecución de la simulación del proceso se crearon las funciones principales presentadas en la tabla 5.5

Tabla 5.5  
Funciones creadas en simulación de Reactor Discontinuo Ideal (RDI)

<b>Función</b>	<b>Descripción</b>
opcion(opt,t,Cao,Ca)	Almacena la opción seleccionada y los datos de entrada.
modelo(op,t,Cao,Ca)	Evalúa al modelo seleccionado
timerx	Realiza el cálculo del tiempo de reacción dado $X$
VRMC	Calcula el volumen equivalente a reactor de mezcla completa
VRFP	Calcula el volumen equivalente a reactor de flujo en pistón

La codificación de estas funciones se presenta en el anexo E.1.

Al iniciar la ejecución del programa, primero se introducen los datos cinéticos en la ventana de la fig. 5.2:

The screenshot shows a window titled 'Introducir datos cinéticos' with a sub-header 'Datos cinéticos'. It contains a table with two columns: 'Tiempo (min)' and 'CA (mol/L)'. The data points are as follows:

Tiempo (min)	CA (mol/L)
0.0	1.00
0.5	0.855
1.0	0.730
1.5	0.624
2.0	0.533
3.0	0.390
4.0	0.285
6.0	0.152
10.0	0.043

At the bottom right of the window, there are two buttons: 'Salir' and 'OK'.

Fig. 5.2 Ventana de introducción de datos cinéticos

Luego se selecciona el modelo cinético en la ventana de la fig. 5.3:

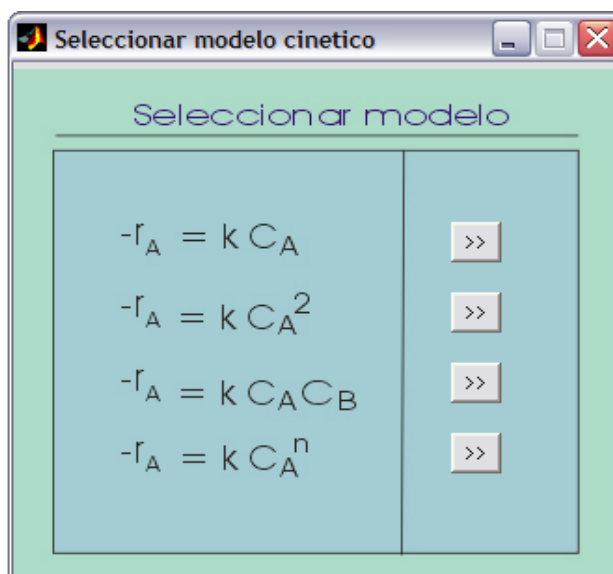


Fig. 5.3 Ventana de selección de modelo cinético

Al seleccionar el modelo de segundo orden  $-r_A = k C_A^2$ , obtenemos la ventana de la fig. 5.4:



Fig. 5.4 Mensaje de selección de modelo cinético erróneo

Si luego seleccionamos al modelo de primer orden  $-r_A = k C_A$ , obtenemos la ventana mostrada en la fig. 5.5:

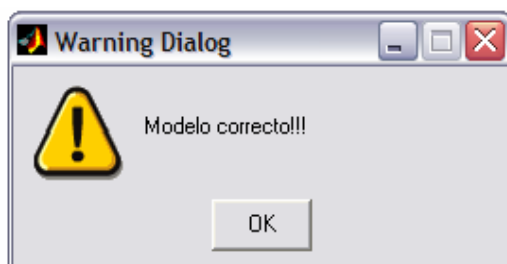


Fig. 5.5 Mensaje de selección de modelo cinético correcto

El mensaje mostrado en la figura 5.5 notifica que el modelo seleccionado es el correcto, para nuestro caso de primer orden.

Posteriormente aparece en pantalla el ambiente de simulación mostrado en la fig. 5.6:

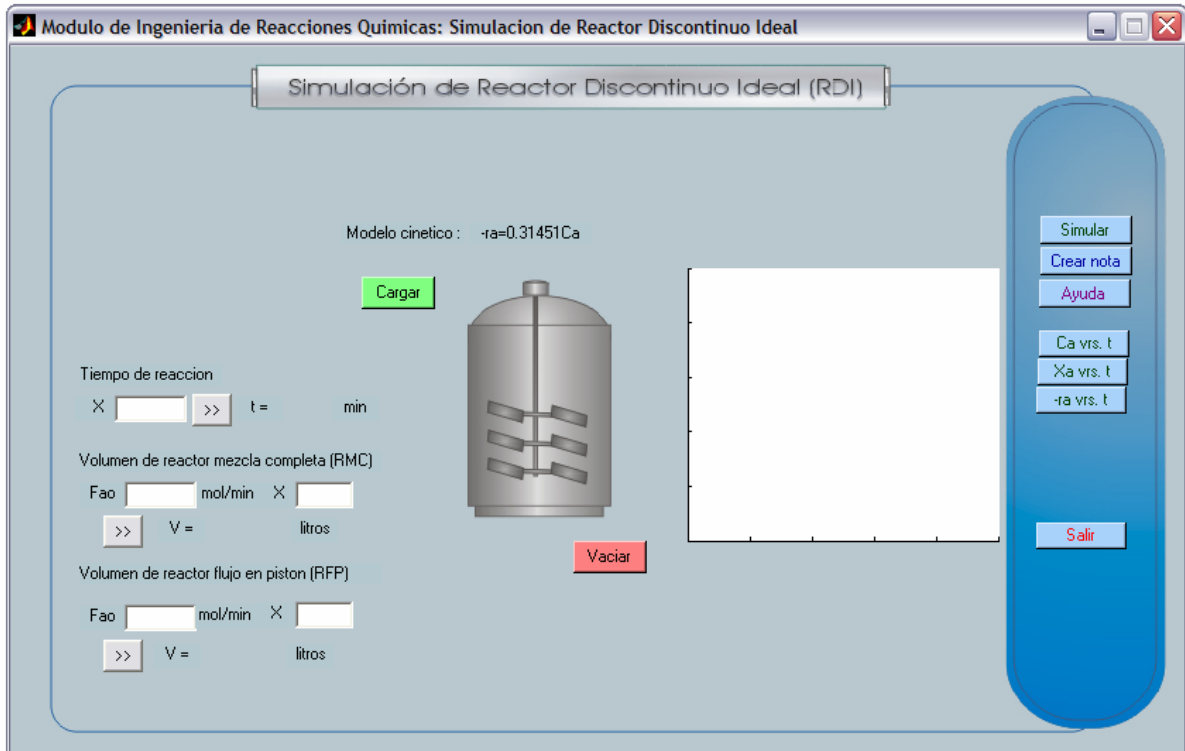


Fig. 5.6 Ambiente de simulación del RDI

En la ventana de la figura 5.6 puede observarse que aparece la ecuación cinética incluyendo el valor de la constante de velocidad de reacción “ $k$ ”, así mismo regiones para el cálculo del tiempo de reacción, volumen de RMC, volumen de RFP, una escala de ejes donde se evalúa el comportamiento, las funciones de carga y descarga del reactor, los botones de acción “Simular”, “Crear nota”, “Ayuda”, “Ca vrs t”, “Xa vrs. t”, “-ra vrs t” y “Salir”.

Para iniciar el proceso primero se carga el reactor, como el proceso batch, en caso contrario de ejecutarse cualquier función aparece el mensaje mostrado en la fig. 5.7:

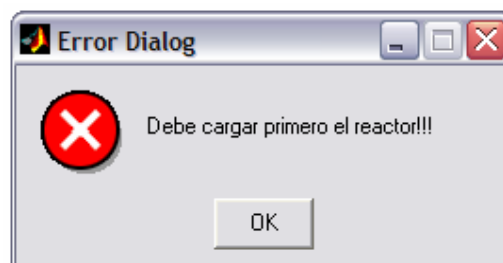


Fig. 5.7 Mensaje de reactor vacío.

Si quisiéramos vaciar el reactor sin haberlo cargado aparece en pantalla el mensaje de la fig. 5.8:

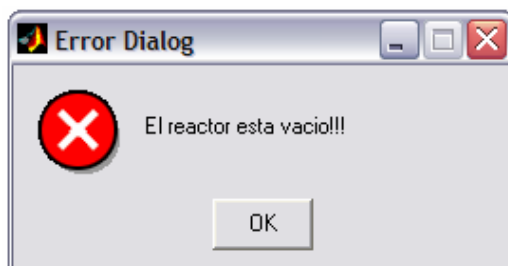


Fig. 5.8 Mensaje al intentar vaciar reactor sin contener productos en él.

Al cargar el reactor aparece la ventana de entrada de datos de la fig. 5.9:

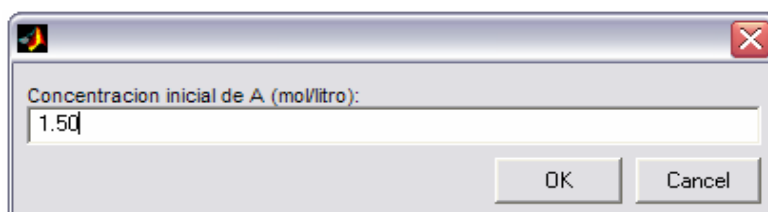


Fig. 5.9 Ventana de entrada de concentración inicial de reactante A.

Al ejecutar el botón de acción "Simular", aparece la ventana de entrada de datos de la fig. 5.10:

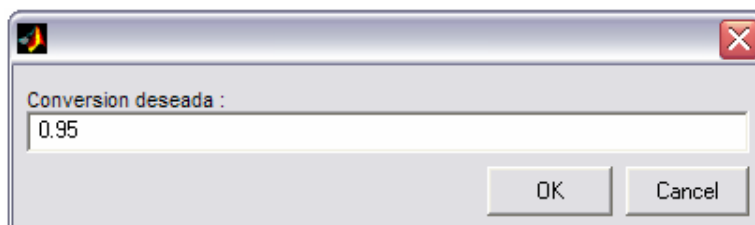


Fig. 5.10 Ventana de entrada de conversión fraccional deseada.

Luego de una barra de avance del proceso, finalizada la reacción aparece el mensaje de la fig. 5.11, permitiendo así el resto de cálculos:

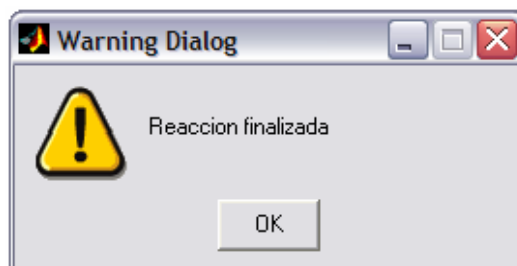


Fig. 5.11 Mensaje de reacción finalizada.

Como sabemos, un reactor discontinuo o por lotes consta de las etapas: carga, reacción y descarga, hasta este momento nuestro reactor posee los productos obtenidos en el proceso recién ejecutado, al intentar una nueva simulación aparece el mensaje mostrado en la fig. 5.12:

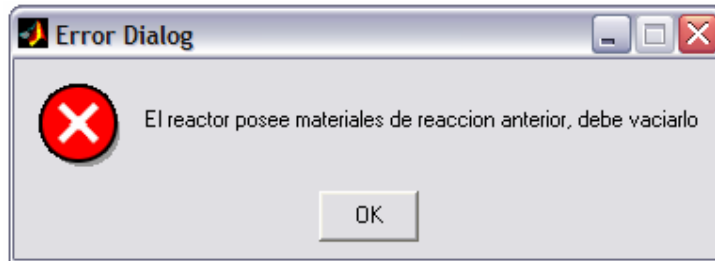


Fig. 5.12 Mensaje al intentar ejecutar reacción conteniendo productos de reacción anterior.

### 5.1.7 Resultados obtenidos

Ahora realizamos los siguientes cálculos:

- Tiempo de reacción cuando se ha alcanzado una conversión del 90%
- Volumen de reactor de mezcla completa y flujo en pistón con una alimentación de 10 mol/min y una conversión de 95%.
- Evaluar el comportamiento de conversión contra el tiempo.

Introduciendo estos datos en la ventana de simulación y ejecutando los botones de acción correspondientes se obtiene lo mostrado en la fig 5.13:

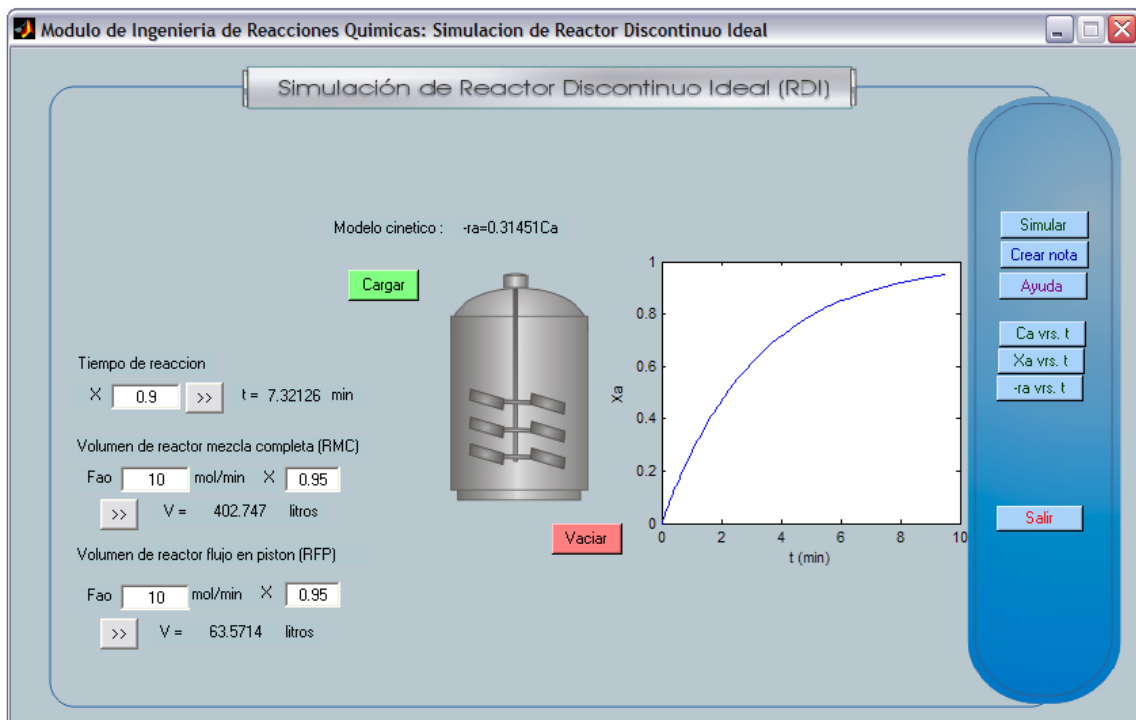


Fig. 5.13 Ventana con resultados obtenidos para los cálculos deseados

Como puede observarse en la fig. 5.13, que el volumen del reactor de flujo en pistón es menor que el volumen del reactor de mezcla completa a las mismas condiciones, tal como se plantea en la teoría.

Al evaluar otro comportamiento, por ejemplo: “ $-r_A$  vs.  $t$ ”, y si la alimentación del reactor de flujo en pistón es ahora 100 mol/min a una conversión de 80%, se obtiene lo mostrado en la fig. 5.14:

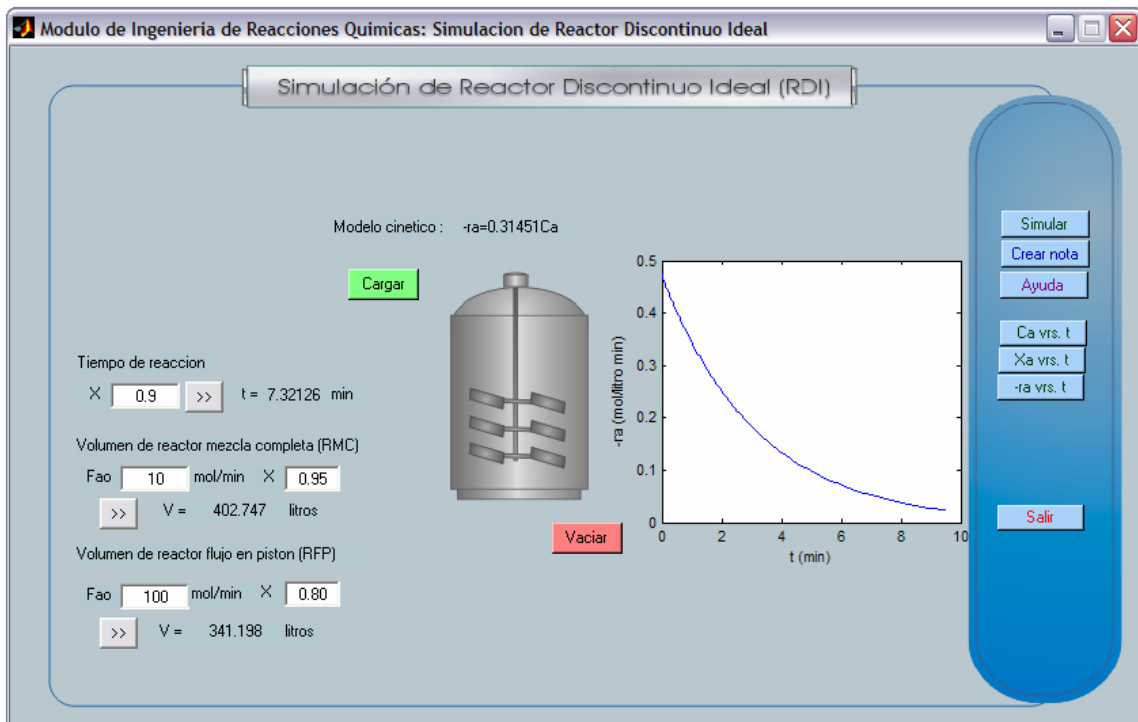


Fig. 5.14 Ventana con resultados obtenidos para los cálculos deseados

Como se observa en la fig. 5.14, que la velocidad de reacción disminuye en función del tiempo, así mismo al incrementar la alimentación del RFP y reducir un poco la conversión, el volumen del RFP es menor que volumen del RMC.

## 5.2 Simulación de Sistemas de Reactores en Serie/Paralelo

### 5.2.1 Principios básicos del proceso

Con el objeto de alcanzar incrementos en la capacidad de producción o para obtener niveles más altos de conversión es necesario proveer volúmenes de reactores adicionales a través del uso de combinaciones en serie y/o paralelo de varios reactores de tipo continuo, o sea reactor de mezcla completa y reactor de flujo en pistón, así como combinaciones de ambos.

### 5.2.2 Planteamiento del problema

Se desea desarrollar un programa que permita la simulación de sistemas de reactores de mezcla completa y flujo en pistón en serie/paralelo con el cual sea posible conocer la conversión intermedia y de salida, el tiempo espacial, evaluando así el comportamiento de dicho sistema, para una reacción de primer orden cuya constante de velocidad es conocida.

### 5.2.3 Definición de variables

Las variables del sistema en estudio, podemos clasificarlas en:

#### a. Variables de entrada

Las variables de entrada para el proceso descrito se presentan en la tabla 5.6:

Tabla 5.6  
Variables de entrada en Simulación de Sistemas de Reactores Serie/Paralelo

Variable	Descripción
Cao	Concentración inicial del reactante A
vo	Flujo volumétrico de alimentación al sistema
k	Constante de velocidad de reacción
V1, V2	Volúmenes de las unidades de reactor del sistema
ar	Arreglo del sistema (serie o paralelo)
rx	Tipo de reactores (RMC o RFP)

#### b. Variables de proceso

Las variables de proceso son las mostradas en la tabla 5.7

Tabla 5.7

Variables de proceso en Simulación de Sistemas de Reactores Serie/Paralelo

Variable	Descripción
Fo	Alimentación molar al sistema
tao	Tiempo espacial del sistema

c. Variables de salida

Las variables de salida son los de la tabla 5.8:

Tabla 5.8  
Variables de salida en Simulación de Sistemas de Reactores Serie/Paralelo

Variable	Descripción
X1, X2	Conversión intermedia y de salida del sistema
tao1, tao2	Tiempo espacial de reactor 1 y 2

## 5.2.4 Modelamiento de la cinética proceso

a. *Reactor de mezcla completa en serie*

Una reacción de primer orden sin cambio de volumen ( $V = V_0$ ) se efectuará en dos RMC's colocados en serie. El tiempo espacial en el primer y segundo reactor se define por:

$$\tau_1 = \frac{V_1}{v_0} \quad \tau_2 = \frac{V_2}{v_0} \quad \text{ecs. 5.24}$$

recordando que en un sistema en serie  $v_0$  es el mismo en cada unidad.

La conversión a la salida del primer reactor esta dado por:

$$X_1 = \frac{\tau_1 k}{1 + \tau_1 k} \quad \text{ec. 5.25}$$

y a la salida del segundo reactor por:

$$X_2 = 1 - \frac{1}{(1 + \tau_1 k)^2} \quad \text{ec. 5.26}$$

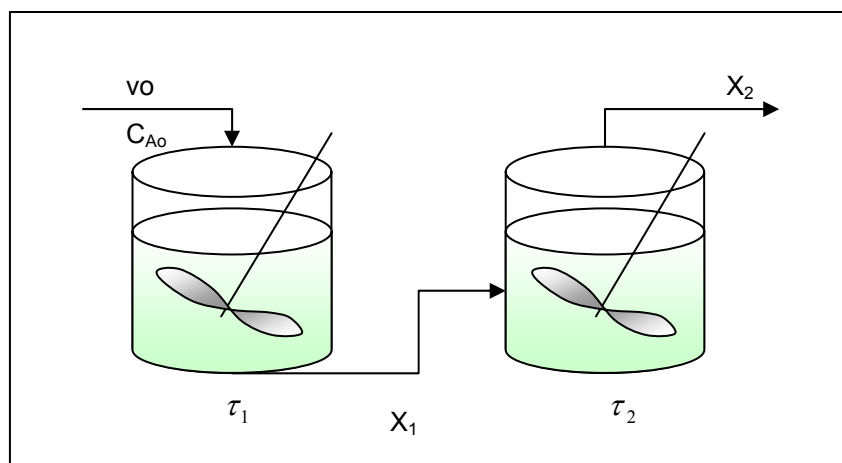


Fig. 5.15 Sistema de dos reactores de mezcla completa en serie

Fuente: construcción propia



b. *Reactor de mezcla completa en paralelo*

Para sistemas de reactores en paralelo se busca que el tiempo espacial sea el mismo en cada rama en paralelo, para que así la alimentación sea eficaz. Por tanto el flujo de alimentación al segundo reactor está dado por la relación:

$$\tau_1 = \tau_2 = \frac{V_1}{v_{o,1}} = \frac{V_2}{v_{o,2}}$$

$$v_{o,2} = v_{o,1} \frac{V_2}{V_1} \quad \text{ec. 5.27}$$

El tiempo espacial viene dado por las ecs. 5.24, y la conversión a la salida de cada unidad esta dado por la ec. 5.25.

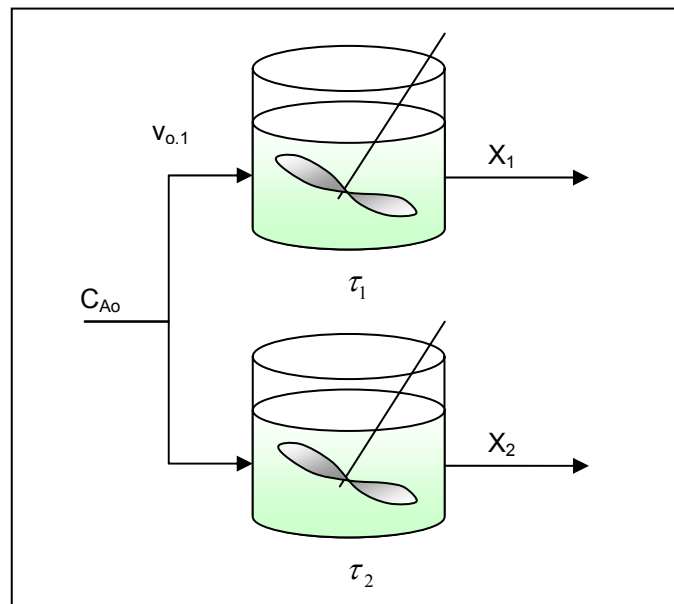


Fig. 5.16 Sistema de dos reactores de mezcla completa en paralelo

Fuente: Construcción propia

c. *Reactor de flujo en pistón en serie*

El volumen de un reactor de flujo en pistón se obtiene integrando la ec. 5.22:

$$V = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{-r_A} \quad (\text{ec. 5.22})$$

para una reacción de primer orden  $-r_A = k C_A = k C_{A0}(1-X)$ , resulta:

$$V_1 = \frac{F_{A0}}{k C_{A0}} \ln\left(\frac{1}{1-X_1}\right) \quad \text{ec. 5.28}$$

dato que  $F_{A_0} = C_{A_0} v_0$ ,  $\tau = V / v_0$  sustituyendo y despejando la conversión de la ec. 5.28 se obtiene la ecuación:

$$X_1 = 1 - \frac{1}{\exp(\tau_1 k)} \quad \text{ec. 5.29}$$

la cual es la conversión alcanzada a la salida del primer reactor. Para obtener la conversión a la salida del segundo reactor integramos la ecuación 5.22 entre los límites  $X_1$  a  $X_2$ , y resolviendo para  $X_2$ :

$$X_2 = 1 - \frac{1 - X_1}{\exp(\tau_2 k)} \quad \text{ec. 5.30}$$

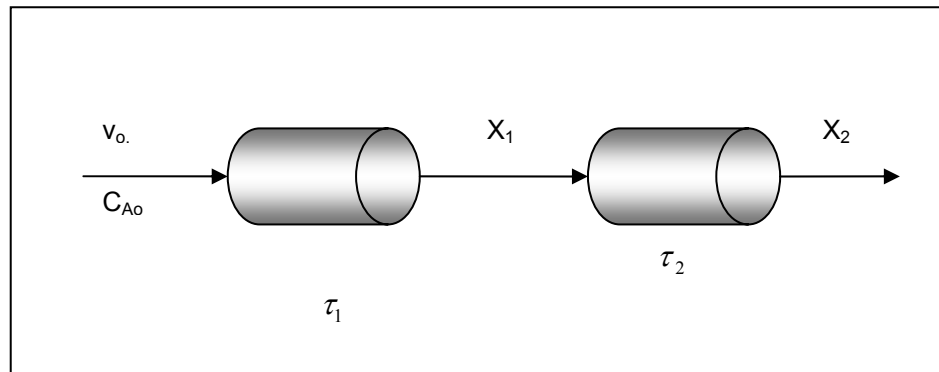


Fig. 5.17 Sistema de dos reactores de flujo en pistón en serie

d. *Reactor de flujo en pistón en paralelo.*

Para reactores de flujo en pistón conectados en paralelo, puede tratarse en sistema global como un solo reactor de flujo en pistón y volumen igual al volumen total de las unidades individuales, si la alimentación está distribuida de tal manera que las corrientes de fluido tienen la misma composición, así también el valor del tiempo espacial, cualquier arreglo distinto a este el sistema es menos eficaz.

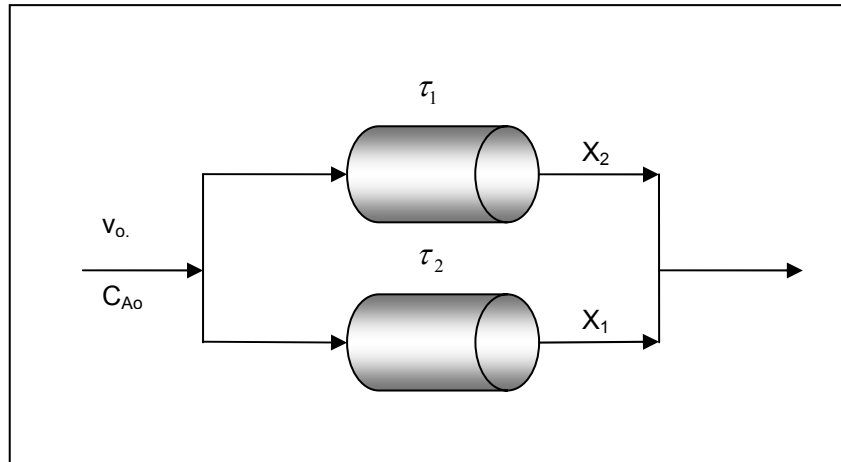


Fig. 5.17 Sistema de dos reactores de flujo en pistón en paralelo

Por tanto para lograr obtener el mismo tiempo espacial en ambas ramas el flujo volumétrico para la segunda rama por la ec. 5.27 y la conversión a la salida del sistema por ec. 5.29.

### 5.2.5 Desarrollo algorítmico

El algoritmo de cálculo consiste en un principio en la selección del tipo de reactor (RFP o RMC), luego el arreglo del sistema (serie o paralelo), para luego el desarrollo de las ecuaciones correspondientes que se muestran en la fig. 5.18;

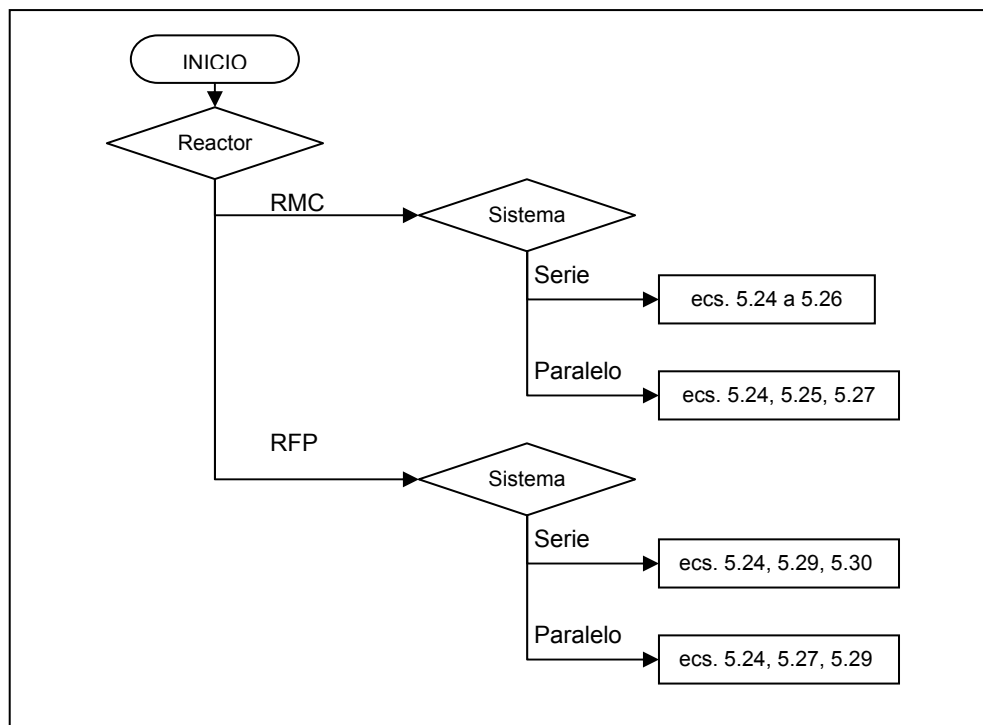


Fig. 5.18 Algoritmo solución a simulación de sistemas de reactores serie/paralelo

### 5.2.6 Simulación del proceso

La técnica de simulación empleada es la de *Orientada a Ecuaciones*, resolviendo simultáneamente el sistema de ecuaciones para cada tipo de sistema como una unidad individual.

Para el desarrollo del programa de simulación se crearon las siguientes figuras (objetos), que contienen la información para el ambiente de simulación para cada tipo de sistema, presentado en a tabla5.9:

Tabla 5.9  
Figuras (objetos) en Simulación de Sistemas de Reactores Serie/Paralelo

Programa	Descripción
RMC1	Reactor de mezcla completa en serie
RMC2	Reactor de mezcla completa en paralelo
RFP1	Reactor de flujo en pistón en serie
RFP2	Reactor de flujo en pistón en paralelo

Para lo cual la selección del tipo de sistema lo ejecuta el programa basado en el algoritmo de la fig. 1, presentado en el Anexo B,2

Al ingresar al programa de simulación aparecen en pantalla los siguientes mensajes de selección (fig. 5.18 y 5.19)



Fig. 5.19 Mensaje de selección del tipo de reactor del sistema

Seleccionamos el tipo de reactor de mezcla completa (RMC), luego aparece el siguiente mensaje:



Fig. 5.20 Mensaje de selección del tipo de arreglo del sistema

Ahora seleccionamos el tipo de arreglo en serie, apareciendo en pantalla el siguiente ambiente de simulación, el cual a su vez permite cambiar de sistema de reactores mostrados en la figura 5.20.

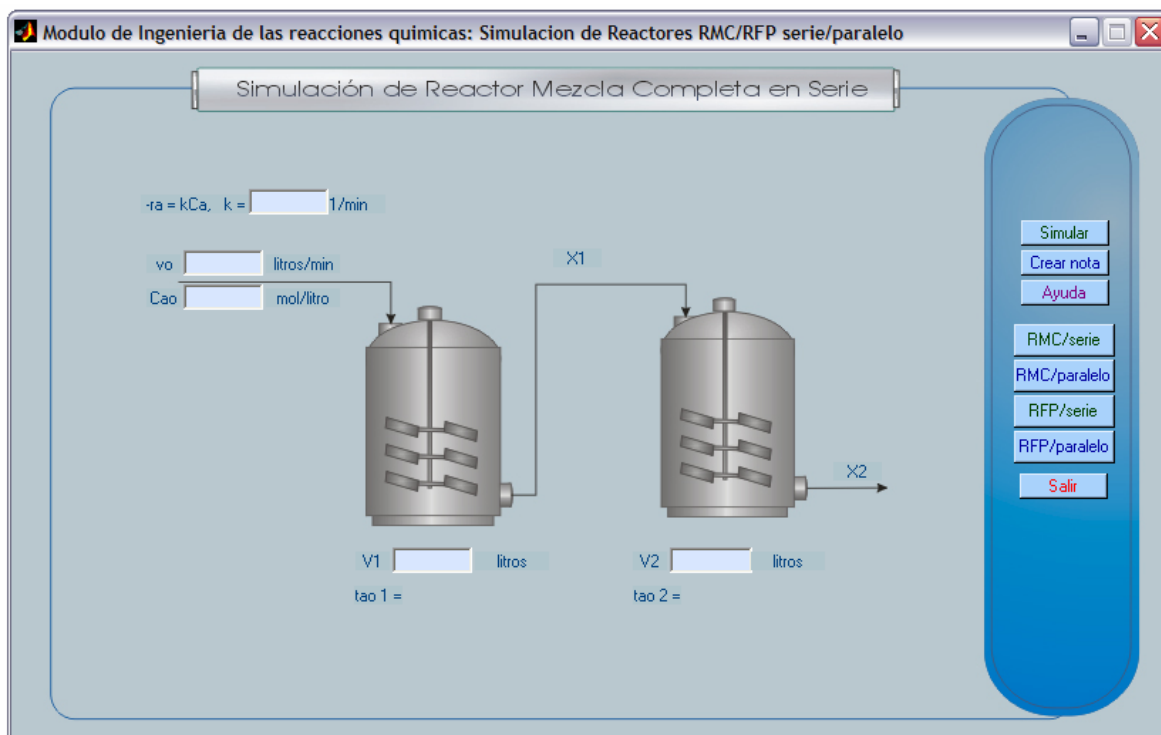


Fig. 5.20 Ambiente de simulación para un sistema RMC en serie.

### 5.2.7 Resultados obtenidos

Ejecutaremos la simulación del proceso con los distintos sistemas de reactores con los siguientes valores:  $k = 0.55 \text{ min}^{-1}$ ,  $v_0 = 15 \text{ litros/min}$ ,  $C_{A0} = 2.0 \text{ mol/litro}$ ,  $V_1 = 80 \text{ litros}$  y  $V_2 = 70 \text{ litros}$ . Para un sistema de dos reactores de mezcla completa conectados en serie y en paralelo se obtiene lo mostrado en la fig. 5.21.

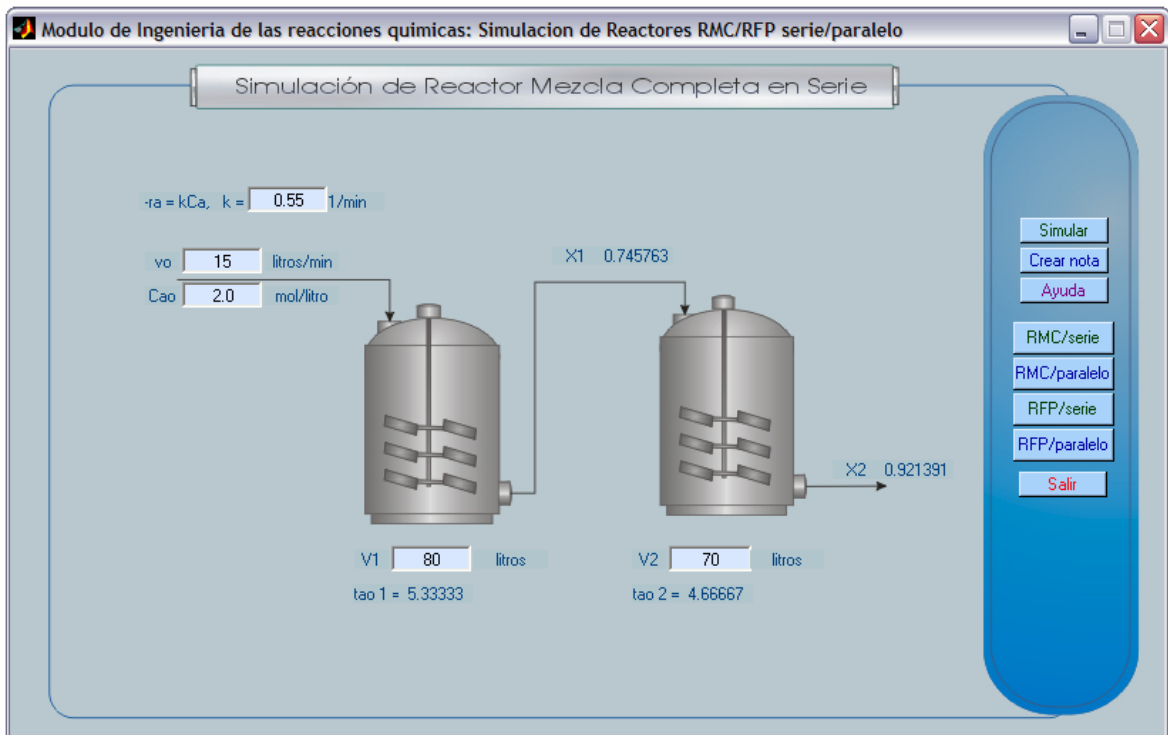


Fig. 5.21 Resultados obtenidos en simulación de sistema RMC en serie.

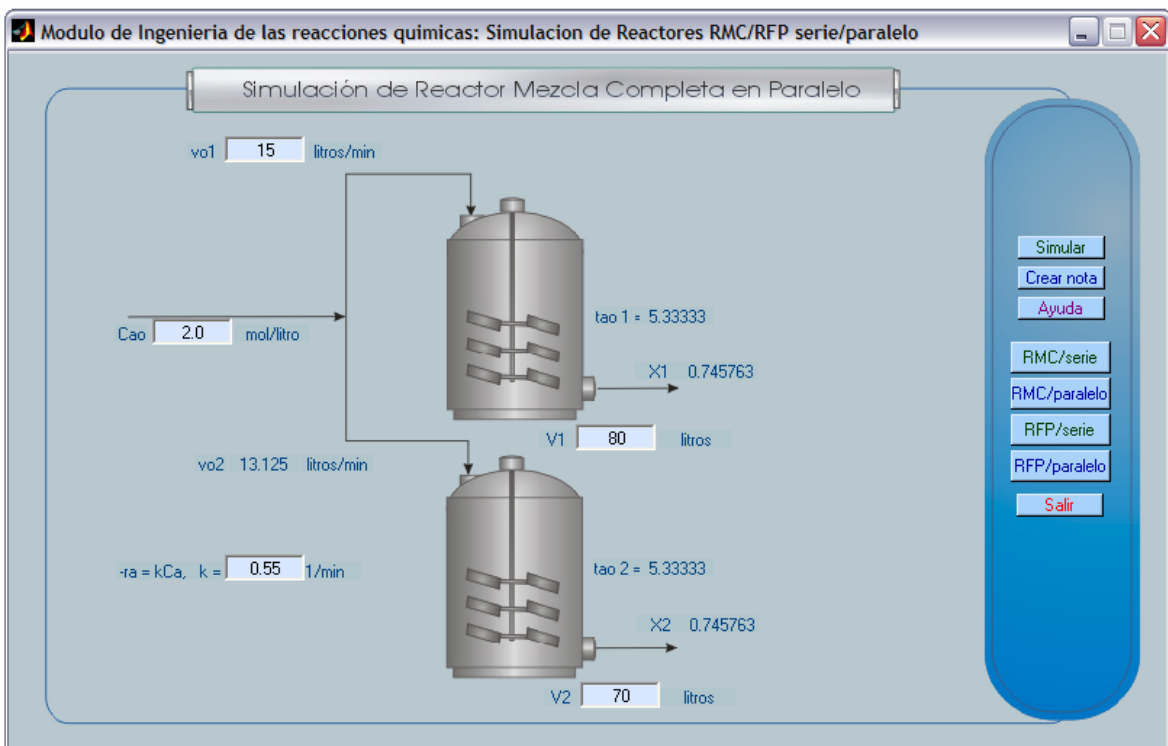


Fig. 5.22 Resultados obtenidos en simulación de sistema RMC en paralelo.

Podemos notar que a las mismas condiciones de alimentación y tamaño de reactor, obtenemos una mayor conversión en un arreglo en serie. Así mismo para lograr la misma conversión en ambas ramas tenemos un mismo tiempo espacial ajustando la entrada de flujo a la segunda rama. Para los sistemas de reactor de flujo en pistón tenemos:

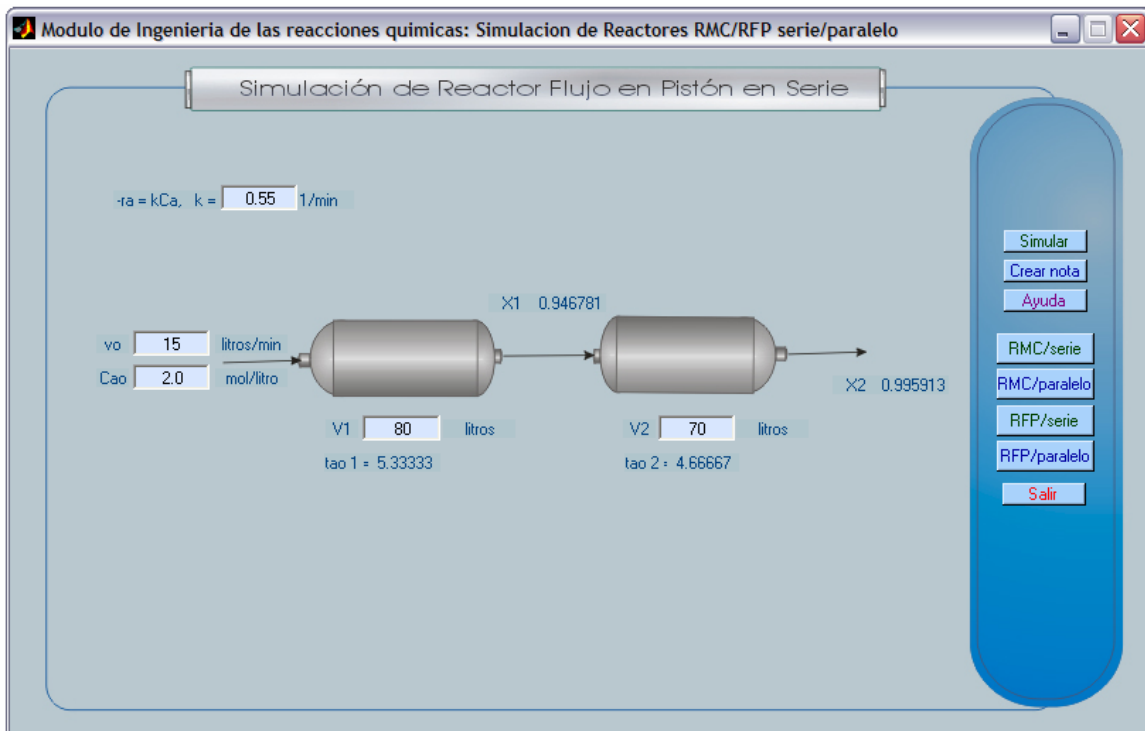


Fig. 5.23 Resultados obtenidos en simulación de sistema RFP en serie.

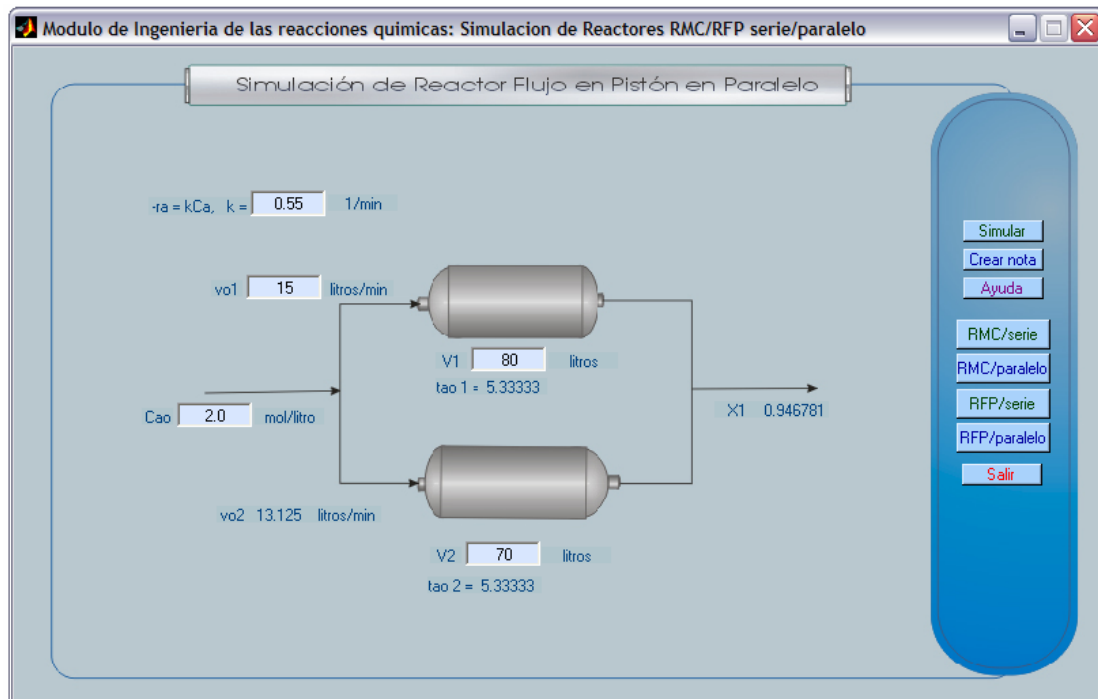


Fig. 5.24 Resultados obtenidos en simulación de sistema RFP en serie.

Ahora notamos de igual forma que obtenemos una mayor conversión en un arreglo en serie. Pero comparado con el sistema de reactores de mezcla completa se alcanzan mayores conversiones en los de sistemas de reactores de flujo en pistón; recordando aquí que para una misma conversión:  $V_{RFP} < V_{RMC}$ .

### 5.3 Simulación de Reactor de Flujo en Pistón no isotérmico en estado estacionario.

#### 5.3.1 Principios básicos del proceso

La diferencia principal entre un sistema isotérmico y un no isotérmico radica en la manera de evaluar la ecuación de diseño cuando la temperatura varía a lo largo de un RFP o cuando se elimina calor de un RMC. En esta simulación estudiaremos el comportamiento de la temperatura, conversión y concentración a lo largo de un reactor de flujo en pistón.

#### 5.3.2 Planteamiento del problema

Se desea diseñar un programa de simulación de un reactor de flujo en pistón que opera adiabáticamente en fase líquida a alta presión, utilizando un catalizador (considerado inerte) que produce una constante de velocidad específica ( $k_1$ ) a una temperatura ( $T_1$ ) conocidas, el cual permita calcular el volumen de reactor necesario para procesar una alimentación de reactante A dada, cuya cinética es de primer orden.

Así también permita evaluar los perfiles de conversión, temperatura y velocidad de reacción. Son datos conocidos: calor de reacción, capacidades caloríficas, energía de activación, constante de equilibrio y concentraciones iniciales.

#### 5.3.3 Definición de variables

##### d. Variables de entrada

Las variables de entrada para el proceso descrito se presentan en la tabla 5.10:

Tabla 5.10  
Variables de entrada en Simulación de Reactor Continuo No Isotérmico

Variable	Descripción
Xa, Xin	Fracción mol de las especie A e inerte respectivamente
Fao	Alimentación molar de la especie A
DHrx	Calor de reacción
Ea	Energía de activación
Te	Temperatura a la entrada del reactor
To	Temperatura de constante de velocidad específica
Cpa, Cpi	Capacidades caloríficas de especie A e inerte.
Kco	Constante de equilibrio químico
Tc	Temperatura de constante de equilibrio dado
ko	Constante de velocidad de reacción inicial
Cao	Concentración inicial de la especie A



e. Variables de proceso

Las variables de proceso se presentan en la tabla 5.11:

Tabla 5.11  
Variables de proceso en Simulación de Reactor Continuo No Isotérmico

Variable	Descripción
SCpi	Sumatoria de capacidades caloríficas
k	Constante de velocidad de reacción en función de T
Kc	Constante de equilibrio de reacción en función de T
Xe	Conversión de equilibrio

f. Variables de salida

Las variables de salida se presentan en la tabla 5.12:

Tabla 5.12  
Variables de salida en Simulación de de Reactor Continuo No Isotérmico

Variable	Descripción
V	Volumen de reactor calculado
Xi	Serie de datos de conversión
Ti	Serie de datos de temperatura, en función de (X)
rai	Serie de datos de velocidad de reacción en función de (X,T)

### 5.3.4 Modelamiento de la cinética del proceso

La ecuación de balance de moles diferencial para un reactor de flujo continuo no isotérmico está dada por:

$$F_{A0} \frac{dX}{dV} = -r_A(X, T) \quad \text{ec. 5.31}$$

la cual permite obtener los perfiles de temperatura, conversión y concentración a lo largo del reactor. Una forma de evaluación de esta ecuación es construyendo una tabla de  $T$  en función de  $X$ , para luego obtener  $k(T)$  y de ahí  $-r_A$  en función exclusivamente de  $X$ .

Para la reacción elemental reversible de primer orden:



con una caída de presión despreciable, el balance de moles resulta:

$$\frac{dX}{dV} = \frac{-r_A}{F_{A0}} \quad \text{ec. 5.32}$$

la ley de velocidad para esta reacción:

$$-r_A = k \left( C_A - \frac{C_B}{Kc} \right) \quad \text{ec. 5.33}$$

con

$$k = k_1 \exp \left[ \frac{E}{R} \left( \frac{1}{T_1} - \frac{1}{T} \right) \right] \quad \text{ec. 5.34}$$

$$Kc = K(T_2) \exp \left[ \frac{\Delta H_{Rx}^o}{R} \left( \frac{1}{T_2} - \frac{1}{T_1} \right) \right] \quad \text{ec. 5.35}$$

por estequiometría se obtiene:

$$C_A = C_{A0} (1 - X) \frac{T_0}{T} \quad \text{ec. 5.36}$$

$$C_B = C_{A0} X \frac{T_0}{T} \quad \text{ec. 5.37}$$

combinando las ecs. 5.35 a 5.36 con la ley de velocidad se obtiene:

$$-r_A = k C_{A0} \left[ (1 - X) - \frac{X}{Kc} \right] \frac{T_0}{T} \quad \text{ec. 5.38}$$

Para relacionar la temperatura y la conversión aplicamos el balance de energía a un RFP adiabático, mediante un reacomodo del balance de energía en estado estacionario:

$$-X \left[ \Delta H_{Rx}^{\circ}(T_R) + \Delta \hat{C}_p (T - T_R) \right] = \sum \Theta_i \bar{C}_{pi} (T - T_0) \quad \text{ec. 5.39}$$

resolviendo la ec. 5.39 para la temperatura en función de la conversión, entrando A puro y  $\Delta \hat{C}_p = 0$ , entonces:

$$T = T_0 + \frac{X \left[ -\Delta H_{Rx}^{\circ}(T_R) \right]}{C_{p,A}^-} \quad \text{ec. 5.40}$$

el volumen del reactor esta dado por la forma integrada del balance molar (ec. 5.32):

$$V = F_{A0} \int_0^X \frac{dX}{-r_A} = F_{A0} \int_0^X \frac{1}{-r_A} dX \quad \text{ec. 5.41}$$

en el equilibrio la velocidad de reacción es igual a cero y la conversión de equilibrio se calcula:

$$X_e = \frac{Kc}{1 + Kc} \quad \text{ec. 5.42}$$

estas ecuaciones se pueden resolver mediante un método matemático o un procedimiento iterativo el cual se desarrolla en la siguiente sección.

### 5.3.5 Desarrollo algorítmico

El procedimiento de resolución para el reactor de flujo continuo no isotérmico adiabático se muestra en la figura 5.30:

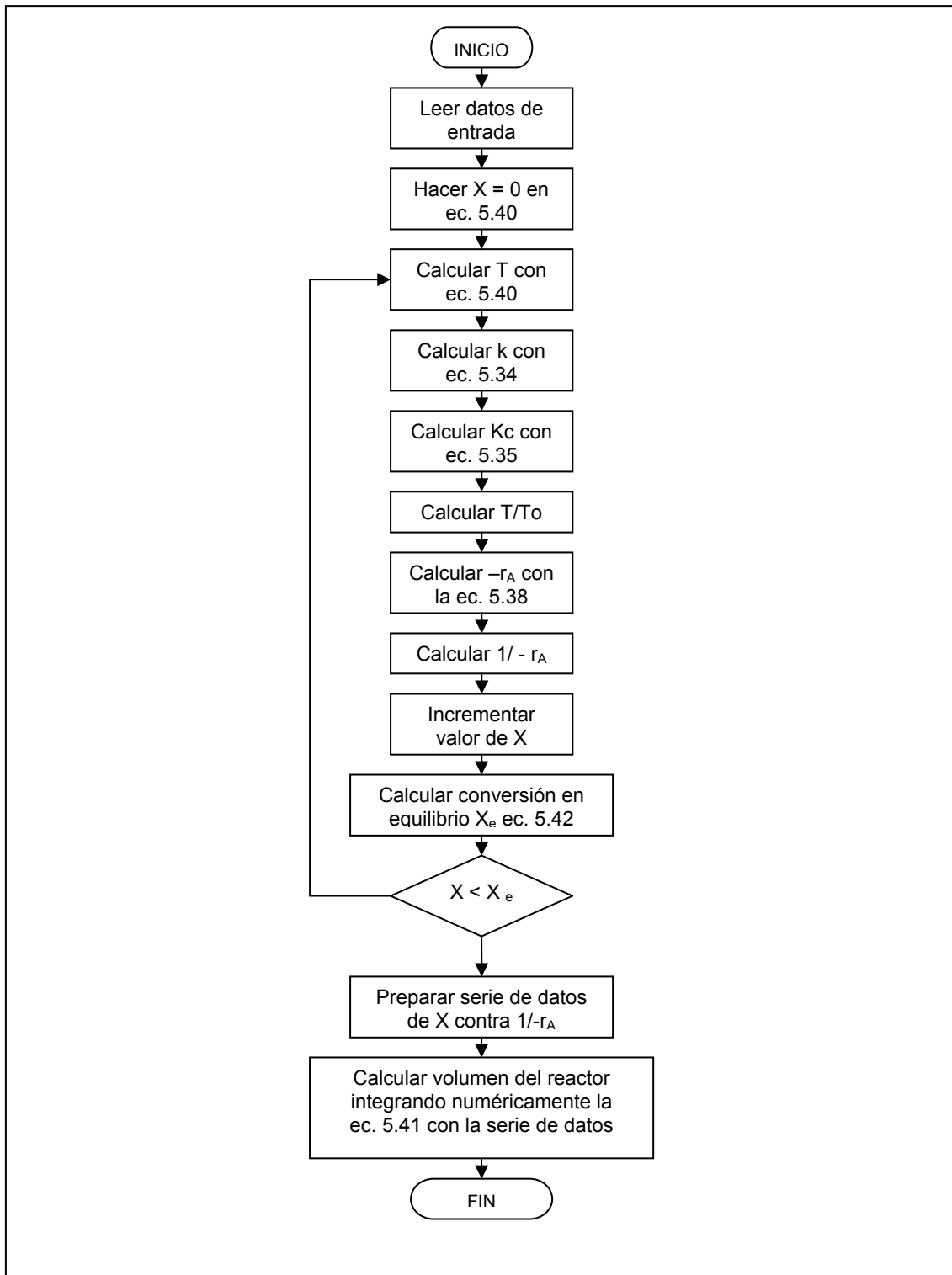


Fig. 5.30 Algoritmo de cálculo de volumen de reactor de flujo continuo no isotérmico

Fuente: construcción propia

### 5.3.6 Simulación del proceso

Para la simulación del proceso utilizando la técnica de orientada a ecuaciones, en el cálculo del volumen del reactor hace uso de la técnica de integración numérica trapezoidal, para la cual Matlab posee una función predefinida mostrada en la tabla 5.9:

Tabla 5.9  
Funciones en Simulación de Sistemas de Reactor de Flujo en Pistón No Isotérmico

Función	Descripción
trapz(x,y)	Función de integración numérica trapezoidal de "y" respecto de "x"

El ambiente de simulación para este proceso se presenta en la figura 5.31:

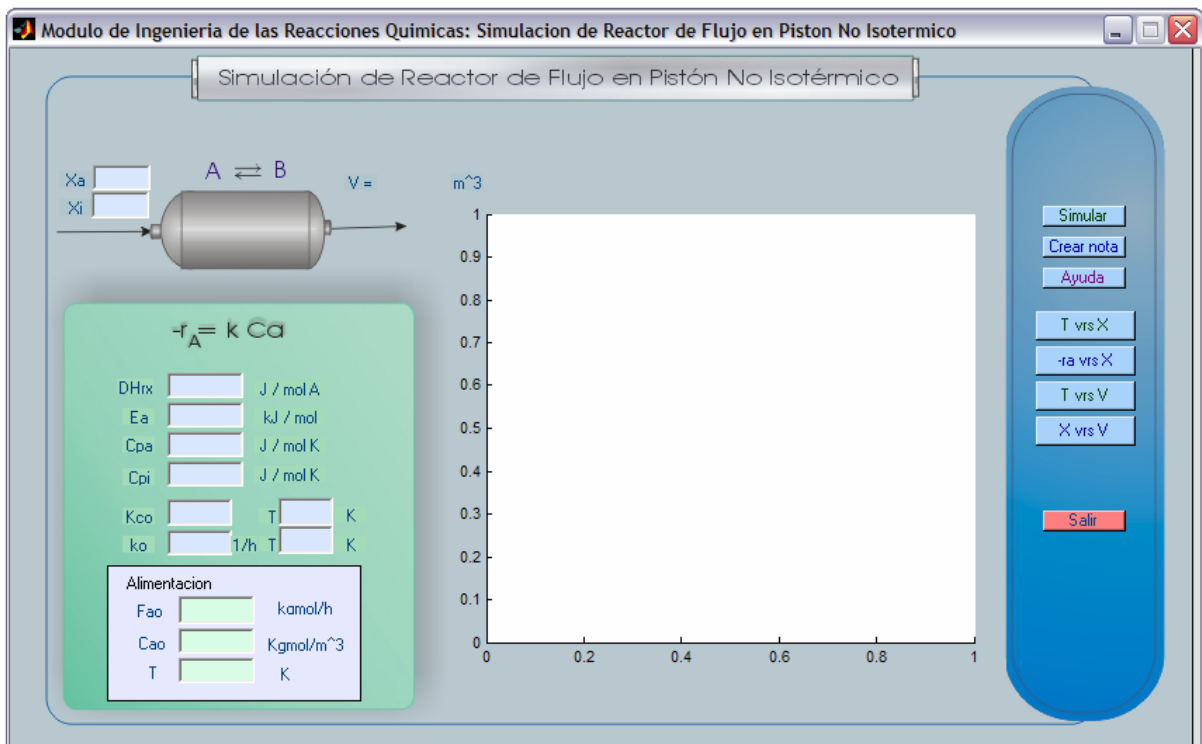


Fig. 5.31 Ambiente de simulación de reactor de flujo en pistón no isotérmico.

El programa principal posee codificación basado en el Algoritmo de la fig. 5.30 y se presenta en Anexo E.1.

Luego de la entrada de datos y la ejecución del botón de acción "Simular" aparece en pantalla el volumen de reactor requerido para este proceso, así como también permite evaluar los distintos comportamientos de las variables, lo que se presenta a continuación.

### 5.3.7 Resultados obtenidos

El programa de simulación será ejecutado con los siguientes datos, evaluando el comportamiento –  $-r_A$  vs.  $X$  mostrado en la fig. 5.32

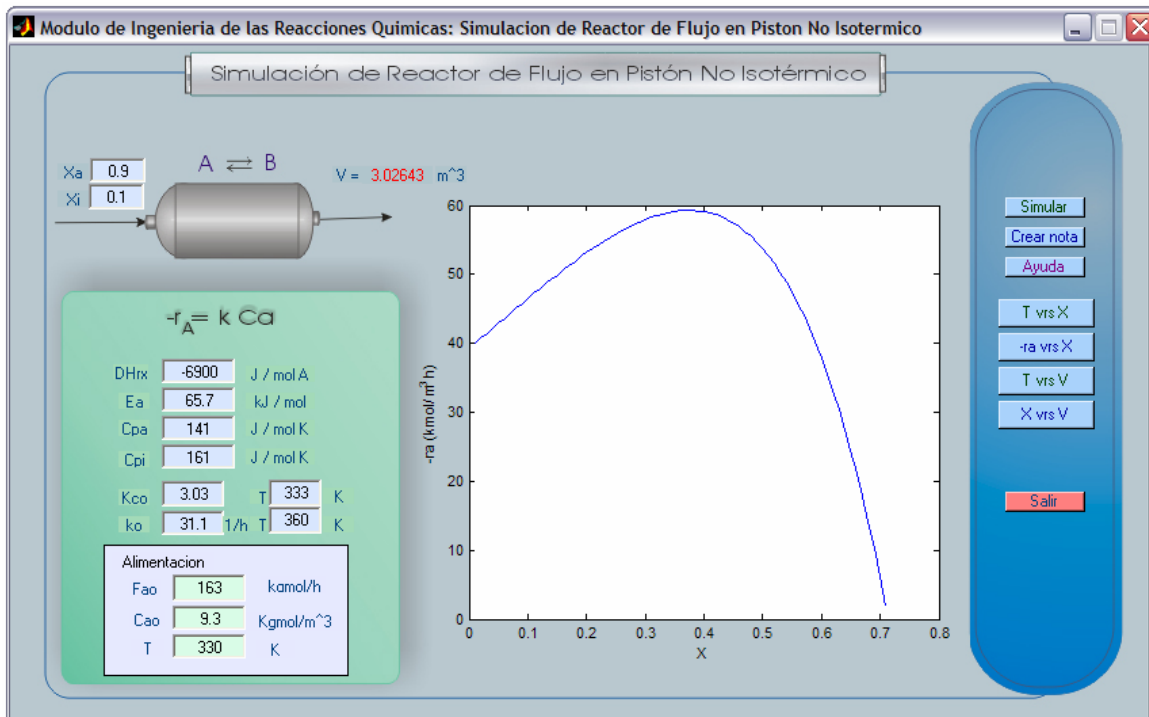


Fig. 5.32 Resultados de simulación de reactor de flujo en pistón no isotérmico,  $-r_A$  vs.  $X$

Obteniendo un volumen de reactor de  $V = 3.026 \text{ m}^3$ , ahora evaluando el resto de comportamientos tenemos lo mostrado en las figuras 5.33, 5.34 y 5.35:

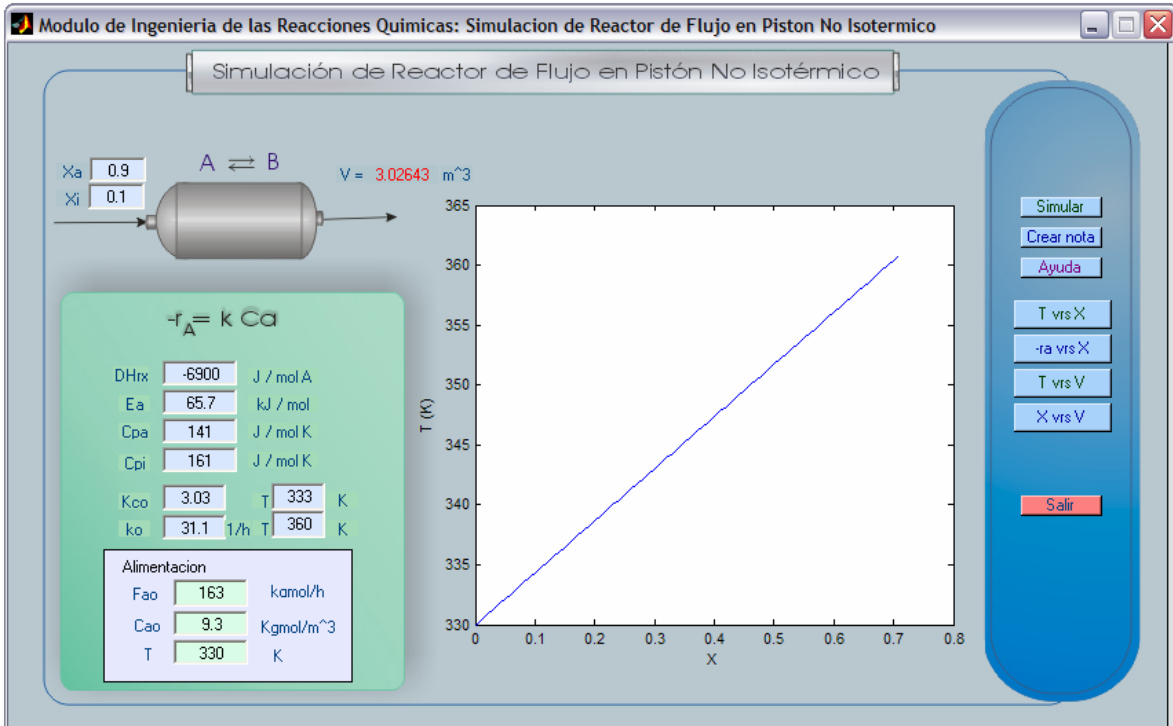


Fig. 5.33 Resultados de simulación de reactor de flujo en pistón no isotérmico, T vr. X

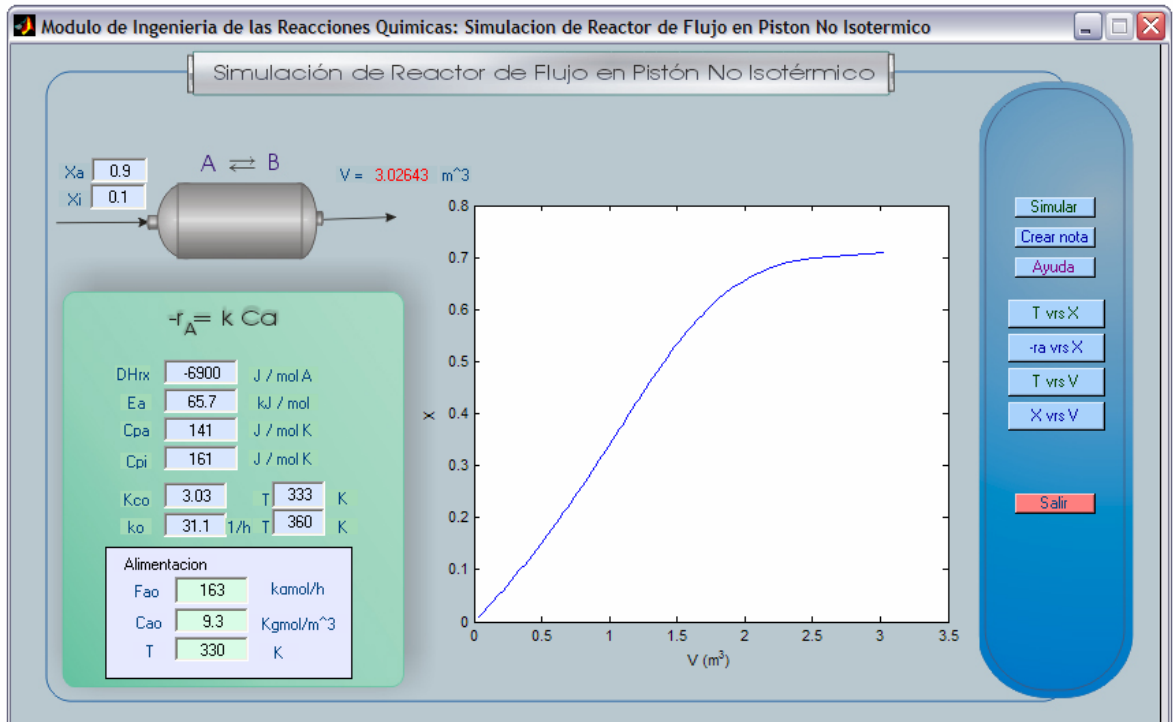


Fig. 5.34 Resultados de simulación de reactor de flujo en pistón no isotérmico, X vr. V

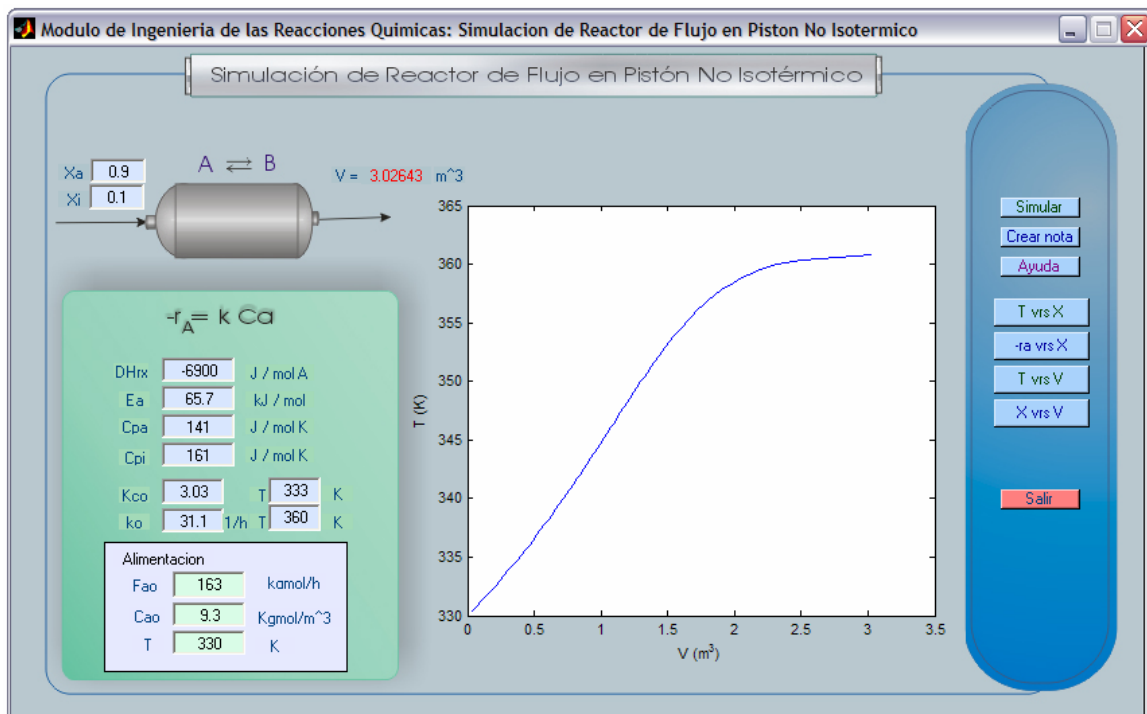


Fig. 5.35 Resultados de simulación de reactor de flujo en pistón no isotérmico,  $T$  vs.  $V$



## Capítulo 6

### Desarrollo de herramientas para el uso de los módulos de simulación de procesos

#### 6.1 Integración de los módulos como sistema de simulación de procesos

La siguiente etapa es la integración de los diferentes módulos en un programa. A través del cual tener acceso al material ya presentado. Las etapas a realizar hasta concluir el programa y ser utilizado como herramienta de apoyo académico, son las siguientes:

##### a. Definición de las especificaciones

Primero se especifican las funciones que tendrá el programa, es decir, lo que hará, abarcando los tipos de análisis que abarcará, los modelos que incluirá, las características más importantes de la interface del usuario y los requerimientos del sistema operativo del ordenador, (Solé, 1989). Para una mejor visualización del ambiente de simulación se recomienda cambiar la resolución de pantalla a 1024 por 758 píxeles, con una calidad de color mínima de 32 bits, memoria RAM de 128 KB y un procesador de 750 MHz, mínimos.

Las características de interface son importantes con el objeto que el usuario reconozca sin dificultad los datos de entrada y los datos de salida del simulador, existiendo una comunicación máquina-humano, lo que permite centrar atención en la Ingeniería del proceso.

##### b. Diseño del sistema de simulación

El diseño del sistema de simulación engloba la arquitectura del programa, la estructura de los datos, interface con la base de datos del sistema y la elección del programa de simulación.

Para realizar este diseño en forma óptima, ha sido creado un diseño estructurado que partiendo del sistema completo lo divide en subsistemas donde define el flujo de datos y las interfaces respectivas para cada área de estudio de este trabajo.

El sistema de simulación desarrollado, nombrado: *SimuLab I.Q. v1.0*, (versión 1.0, que podría ser actualizado a futuro), incluye los subsistemas correspondientes a los módulos de simulación para cada área desarrollados, como se presenta en el siguiente diagrama de la fig 6.1.

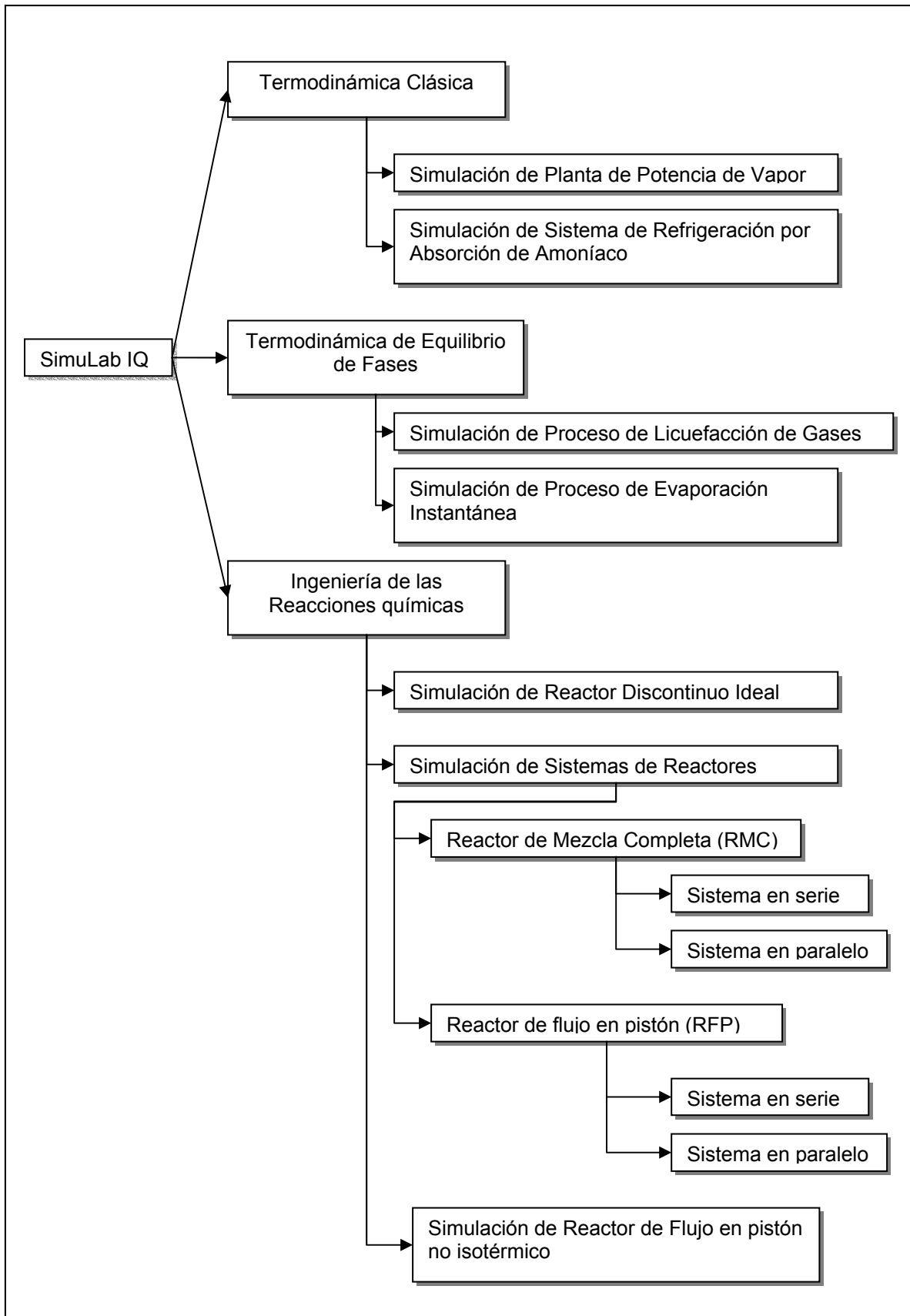


Fig. 6.1 Estructura del sistema de simulación SimuLab IQ.

Fuente: construcción propia

Un simulador de procesos consta de un programa ejecutivo, el conjunto de modelos matemáticos que representan las unidades de cálculo del proceso y una base de datos con propiedades físicas y termodinámicas de las especies que intervienen en el proceso.

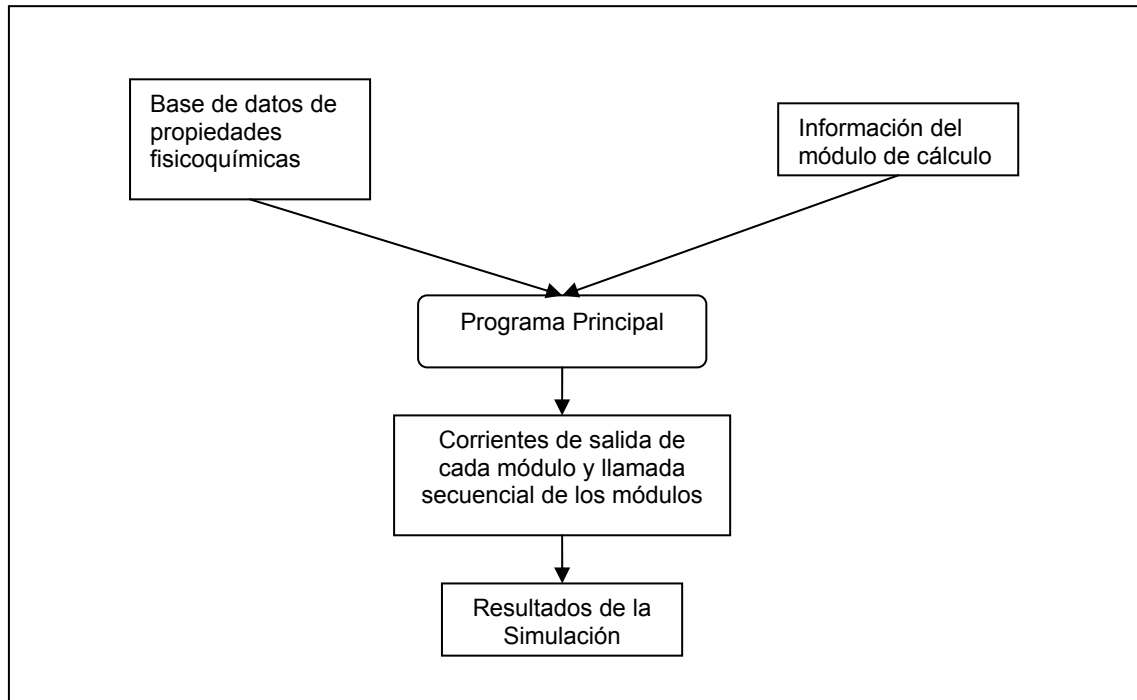


Fig. 6.2 Programa ejecutivo de simulación

El sistema principal consiste de los elementos siguientes:

1. Un programa traductor de entrada, que lee la entrada realizada por el usuario y genera la entrada principal de ejecución, correspondiente al ambiente de simulación donde se presenta la imagen del proceso con sus correspondientes celdas de entrada de datos, como se presenta en la fig. 6.2.
2. El programa ejecutivo o principal propiamente dicho, que establece la estructura de los datos y genera la secuencia de cálculo de los modelos del equipo. Esta secuencia de cálculo parte del conocimiento de las corrientes de entrada y de los parámetros que a través de las operaciones de cálculo en el módulo correspondiente, proporcionan los valores de las corrientes de salida del módulo en particular. Correspondiente al programa ejecutado al activar los botones de acción "Simular" en los programas.

3. El flujo de información que permite ejecutar un número cualquiera de programas de modelos, insertando bloques de cálculo. Además se encuentran sistemas de gestión de base de datos, sistemas de correlación de datos de propiedades físicas de los componentes de la simulación, para los cuales fueron creadas funciones que ejecutan tareas específicas como la lectura de temperaturas, entalpías, etc. en la base de datos de tabla de vapor, o la correlación de coeficientes de actividad utilizando la ecuación de Wilson.

Dentro de toda la información disponible se encuentran las características de los flujos o corrientes de materias que circulan entre las unidades del proceso, tal como fue analizado mediante los Diagramas de Flujo de Información (DFI). Dependiendo del programa de simulación, los flujos o las corrientes se distinguen los flujos de materia y los flujos de información.

Los flujos de materia corresponden a las características de los fluidos que circulan entre las unidades del proceso (presiones, temperaturas, caudales, concentraciones, etc.).

Los flujos de información permiten la circulación de información de parte o de todos los parámetros de los modelos para su uso dentro del programa de simulación.

## **6.2 Programa principal de simulación de procesos, SimuLab I.Q. v1.0**

El programa principal o ejecutivo de simulación de procesos desarrollado en este trabajo que incorpora todos los módulos de simulación de una forma organizada, permitiendo una selección entre las áreas de estudio, tal como se presenta en la fig. 6.1, inicia con la siguiente ventana de presentación del programa:



Fig. 6.3 Ventana de presentación del programa de simulación SimuLab IQ v1.0

Luego de ejecutando el botón de acción “OK” en la ventana de la fig. 6.3, aparece la siguiente ventana de selección de los módulos de simulación de procesos desarrollados como se muestra en la figura 6.4:



Fig. 6.4 Ventana de selección de módulos de simulación de procesos desarrollados

Al seleccionar el módulo de simulación de procesos en “termodinámica clásica”, aparece en pantalla mostrada en la ventana de la fig. 6.5

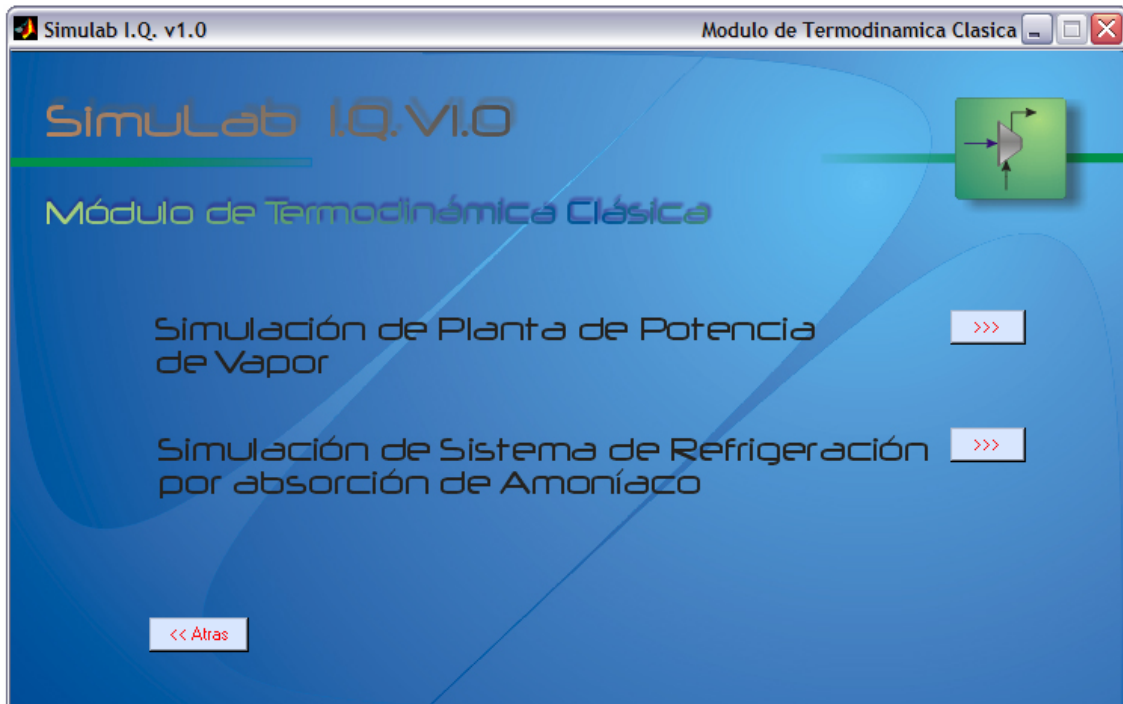


Fig. 6.5 Módulos de simulación desarrollados en termodinámica clásica

Seleccionando la simulación de una planta de potencia de vapor, obtenemos la pantalla mostrada en la ventana de la fig. 6.6

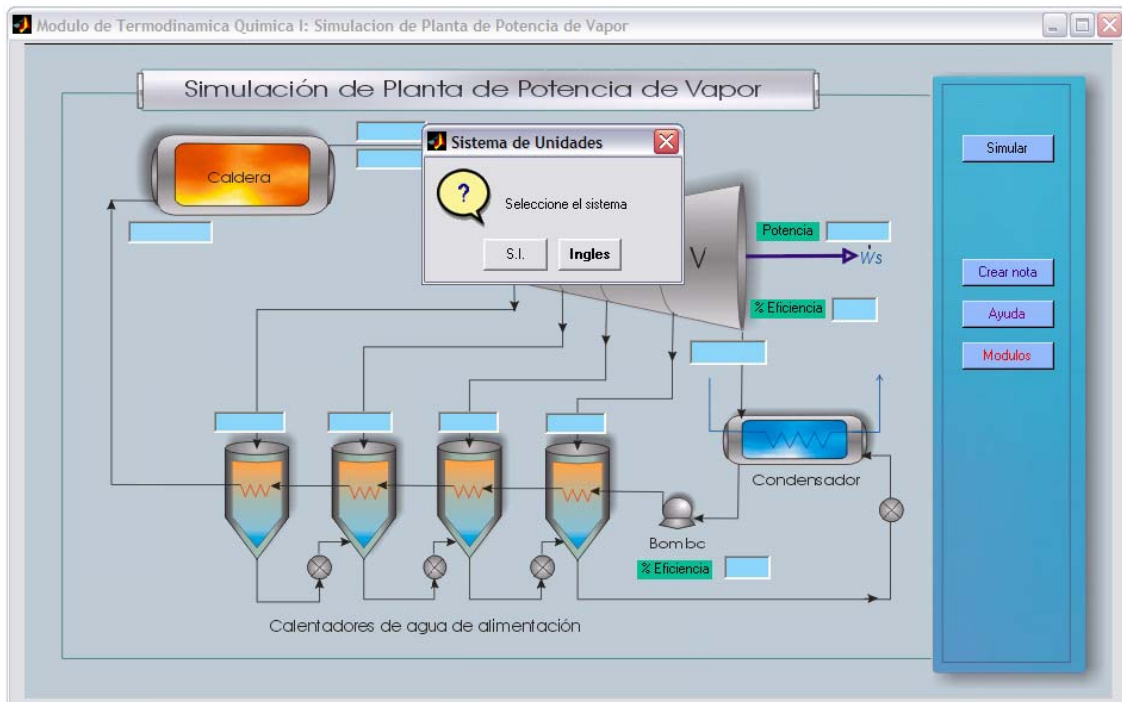


Fig. 6.6 Simulación de una planta de potencia de vapor

El cual corresponde a la simulación 3.1, desarrollada en el capítulo 3. Podemos observar que ha sido cambiado el botón de acción “Salir” por uno que enuncia “Módulos”, el cual al ejecutarse, regresamos a la ventana de la fig. 6.4.

Al seleccionar el módulo correspondiente a “termodinámica de equilibrio de fases”, aparece la ventana de la fig. 6.8

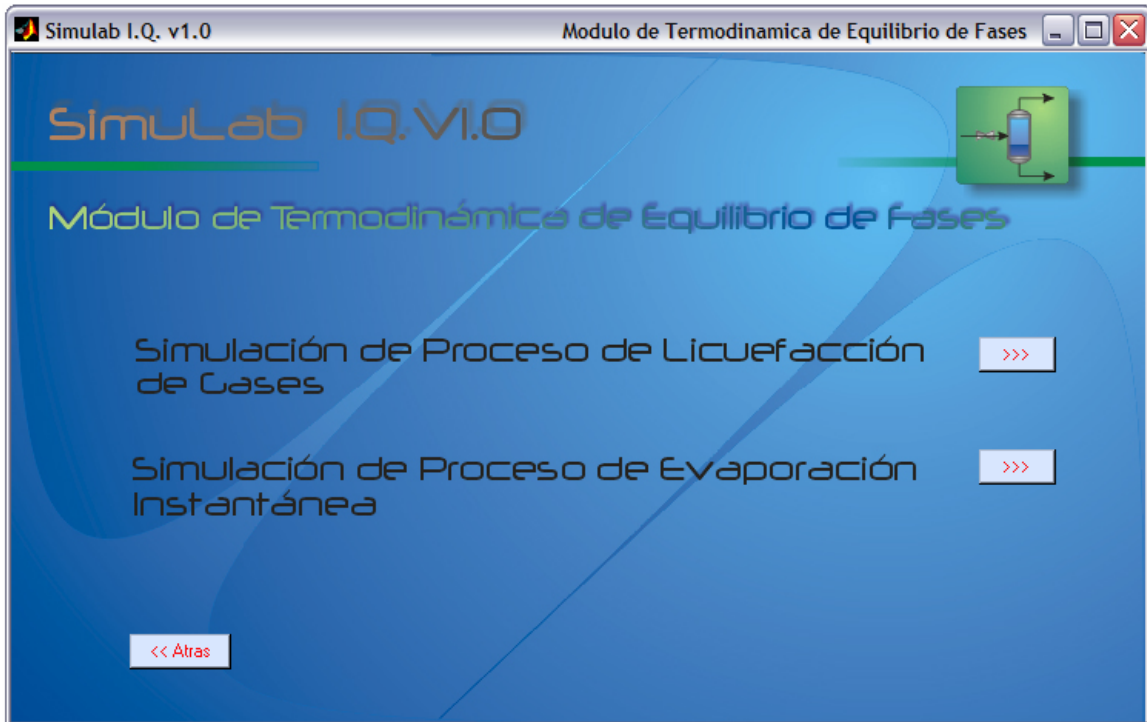


Fig. 6.7 Módulo de simulación en termodinámica de equilibrio de fases

Al ejecutar la Simulación de proceso de evaporación instantánea, aparece en pantalla la ventana de la fig. 6.8



Fig. 6.8 Ventana de selección del sistema binario del proceso de evaporación instantánea

Ahora, al seleccionar el módulo de Ingeniería de las reacciones químicas en la ventana de la fig. 6.4, aparece en pantalla la ventana de la fig. 6.9:

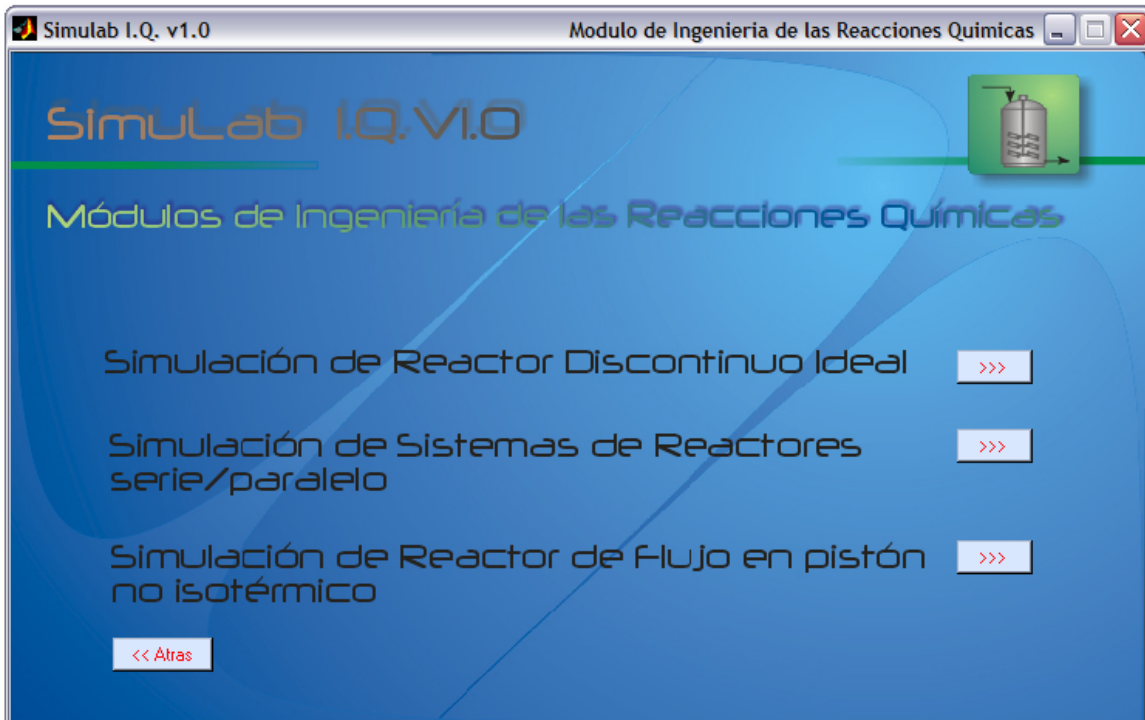


Fig. 6.9 Módulo de simulación en Ingeniería de las reacciones químicas

En la cual, al seleccionar la Simulación de sistemas de reactores serie/paralelo, aparece en pantalla el mensaje de la fig. 6.10:



Fig. 6.10 Mensaje de selección del tipo de reactor del sistema

Correspondiente a la simulación 5.2 desarrollada en el capítulo 5 de este trabajo.

La codificación para cada una de estas ventanas ha sido creada utilizando la Interfaz Gráfica de Usuario (GUI)<sup>1</sup> de Matlab el cual se basa en programación orientada a objetos y las distintas imágenes utilizando un programa de diseño (Corel Draw). Esta codificación se encuentra en el CD de este trabajo para su consulta.

<sup>1</sup> GUI = Interfaz gráfica de usuario de Matlab



### 6.3 Guía de usuario de programa de simulación de procesos

#### 6.3.1 Requerimientos de software

El programa de simulación SimuLab IQ v1.0, requiere del software del lenguaje de programación Matlab versión 6.0, 6.5 o 7.0 o posterior. Como se mencionó en el capítulo anterior, se recomienda cambiar la resolución de pantalla a 1024 por 758 píxeles en *Propiedades de Pantalla*, como se presenta en la fig. 6.11, dado que bajo esta configuración fue desarrollado el ambiente gráfico, lo que se ve afectado en el tamaño de los objetos en el ambiente de simulación.

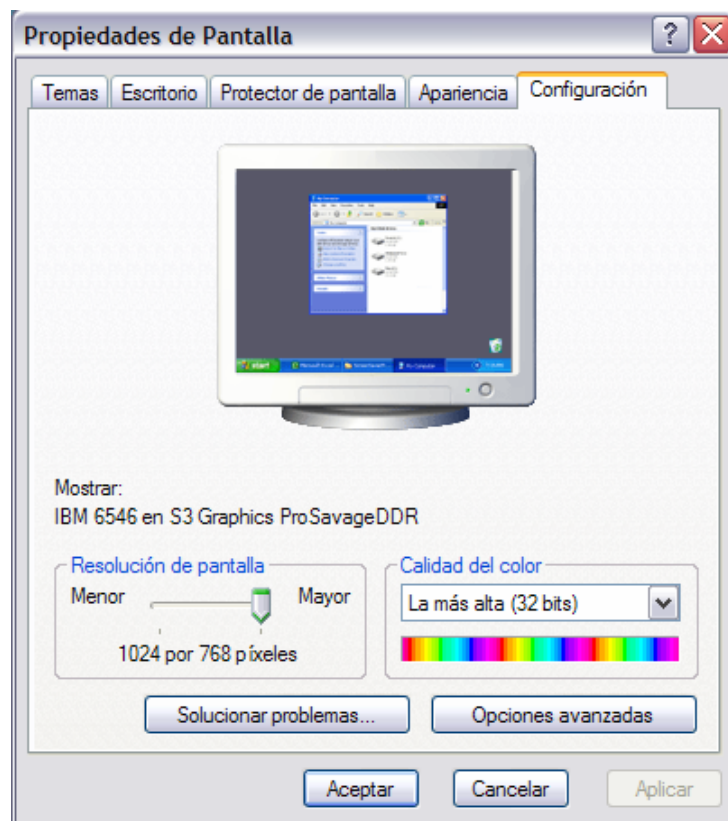


Fig. 6.11 Ajuste de resolución de pantalla

Para poder procesar la información con mayor velocidad en la ejecución de los programas de simulación se recomienda además una memoria RAM de 128 KB y un procesador de 750 MHz, como mínimo, especificaciones menores no limitan la funcionalidad del programa, pero si la velocidad de respuesta de este.

### 6.3.2 Ejecución del programa de simulación en Matlab

El programa de simulación puede ser ejecutado solamente desde el CD que acompaña a este documento de tesis, para ejecutarlo desde una copia de archivo debe ser consultado previamente a la escuela de Ingeniería Química de la Facultad de Ingeniería Química de la UES.

Para ejecutar el programa desde Matlab, primero debe ser especificada la ruta de acceso “D: \SimuLabIQ\Simulab”, (“D: \” corresponde a la unidad de CD-ROM/RW de la computadora, que puede ser también “G: \” o “E: \”), en la casilla de entrada que se presenta en la fig. 7.2:

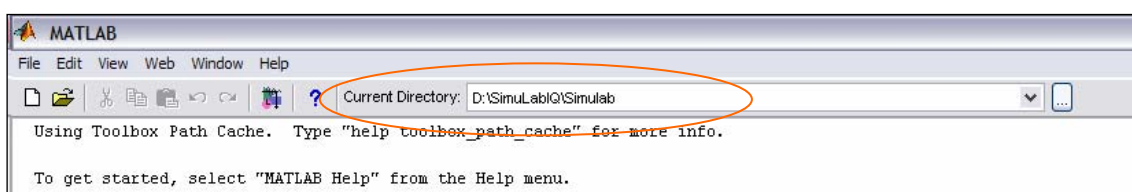


Fig. 6.12 Entrada de ruta de acceso a programa de simulación de procesos

Luego se digita en la línea de comandos del espacio de trabajo de Matlab el nombre del programa de simulación “simulab” (todo minúscula), como sigue:

```
>>simulab
```

ejecutando “Enter”, aparece en pantalla la ventana de presentación del programa (fig. 6.3 del capítulo 6), iniciando la ejecución del programa de simulación de procesos en Ingeniería Química *SimuLab IQ v1.0*.

Los datos introducidos deben ser lógicos y coherentes, analizados previamente, ya que puede darse un error de ejecución o convergencia de los módulos de simulación, lo cual será estudiado e interpretado en las Guías de Laboratorio de Simulación desarrolladas. Para ello, se dispone de información en el botón de acción “Ayuda”, en el ambiente de simulación.

#### **6.4 Guías de laboratorio de simulación de procesos aplicando la metodología del ABP.**

Para lograr que la incorporación de la simulación de procesos sea una herramienta eficiente para el desarrollo de los temas abordados en las distintas áreas en el transcurso de la asignatura, se han diseñado guías de laboratorio de simulación, orientados a incentivar y motivar el interés por aprender al estudiante. Desarrollando habilidades y destrezas en el razonamiento, análisis y lógica en la resolución de problemas y que en general presentan el siguiente contenido:

- ✓ Objetivo
- ✓ Introducción
- ✓ Planteamiento del problema
- ✓ Procedimiento de análisis

Se presentan las guías de laboratorio de simulación desarrolladas, a emplearse en cada módulo, para lo cual se recomienda resolverlos en grupo máximo de tres alumnos, guiados por el docente, bajo la metodología de Aprendizaje Basado en Problemas.

##### **6.4.1 Guía de laboratorio No.1: Simulación de Planta de Potencia de vapor.**

**Objetivo:** Conocer el fundamento termodinámico en el cual se basa el funcionamiento de una planta de potencia de vapor, evaluando y analizando las condiciones del proceso, así como el comportamiento del fenómeno, a través de la simulación del proceso.

**Introducción:** Una planta de potencia de vapor opera en un ciclo termodinámico, esta es considerada como una máquina térmica a gran escala en la que el fluido de trabajo (agua) se encuentra fluyendo continuamente, en estado uniforme, sucesivamente a través de una bomba, una caldera, una turbina y condensador para que finalmente regrese a su estado inicial.

Las plantas de energía más modernas operan con una modificación del ciclo de Rankine, que incorpora calentadores del agua de alimentación.

**Planteamiento del problema:** En el proceso representado en la figura 6.13, las condiciones de operación de la caldera son 8,600 kPa y 500 °C y la presión de descarga de la turbina, 10 kPa.

El condensador produce un ligero enfriamiento del condensado, a 45 °C. La bomba del agua de alimentación causa un ligero aumento de temperatura de 1 °C, haciendo que la temperatura del agua de alimentación que entra a la serie de calentadores sea de 46 °C.

Se ha especificado la temperatura para la corriente de alimentación que entra a la caldera de 226 °C, así también los cuatro calentadores del agua de alimentación alcanzan el mismo incremento de temperatura.

El vapor suministrado a un calentador del agua de alimentación debe estar a una presión suficientemente elevada para que su temperatura de saturación sea más alta que la temperatura de la corriente del agua de alimentación que sale del calentador.

El condensado de cada calentador del agua de alimentación se lanza a través de una válvula de estrangulamiento al calentador que tiene la siguiente presión más baja, y el condensado que se recolecta en el calentador final de la serie se lanza dentro del condensador. Así todo el condensado regresa del condensador a la caldera por vía de los calentadores del agua de alimentación.

El propósito de calentar de ésta forma el agua de alimentación es elevar la temperatura promedio a la cual el calor se añade a la caldera, lo que eleva la eficiencia térmica de la planta, operando por tanto bajo un ciclo de regeneración.

Se desea conocer las condiciones termodinámicas a la salida de cada sección de la turbina, así como su aporte de trabajo de eje, también conocer la cantidad de vapor extraído en cada sección que pasa a través de cada calentador, la eficiencia térmica del ciclo, la velocidad del vapor a la turbina, la velocidad de transferencia de calor en la caldera y al agua de enfriamiento en el condensador.

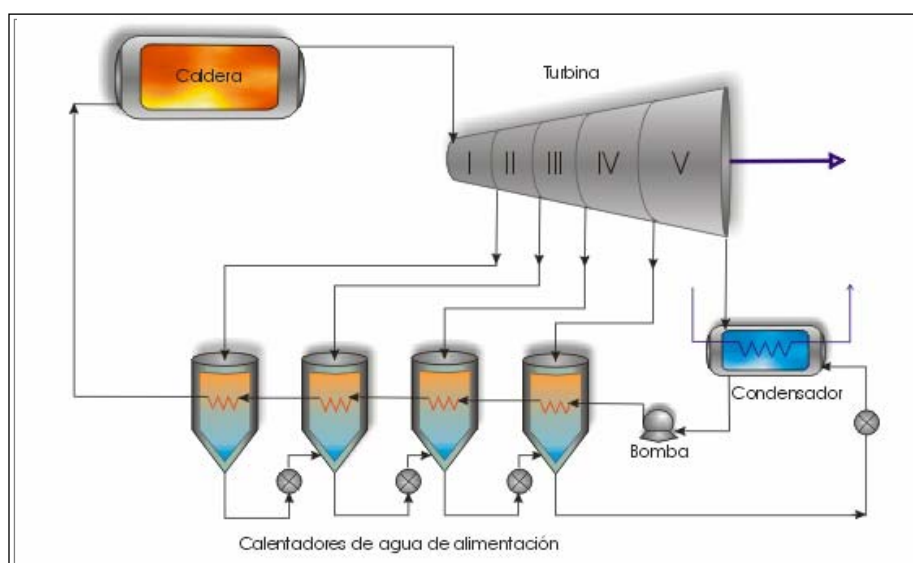


Fig. 6.13 Planta de energía de vapor con calentamiento del agua de alimentación

**Procedimiento:**

- Realizar el modelamiento del proceso, evaluando para cada unidad las ecuaciones y variables involucradas que lo representan.
- Diseñar una estrategia de cálculo para la resolución del problema mediante un diagrama de flujo de información (DFI) y un procedimiento algorítmico.
- Utilizando el simulador del proceso, resolver el problema para los datos sugeridos.
- Analizar y fundamentar teóricamente la relación existente entre la temperatura y presión a la entrada de la caldera, a la entrada del condensador y la eficiencia térmica del ciclo termodinámico.
- ¿Cómo se ve influenciada la cantidad de trabajo producida por unidad de sección de turbina reduciendo el flujo de vapor extraído de la sección precedente?, ¿Qué sucede con la eficiencia del ciclo?, estableciendo qué suposiciones son necesarias, y porque.

**6.4.2 Guía de laboratorio No.2: Simulación de Sistema de Refrigeración por absorción de amoníaco.**

**Objetivo:** Conocer el fundamento termodinámico en el cual se basa la refrigeración por absorción de amoníaco, evaluando y analizando las condiciones del proceso, así como el comportamiento del fenómeno, a través de la simulación del proceso.

**Introducción:** Las plantas de potencia en general, operan en un ciclo termodinámico, esto es, la sustancia de trabajo sufre una serie de procesos y finalmente regresa a su estado inicial. La palabra *refrigeración* significa mantenimiento de una temperatura inferior a la del ambiente. Algunos pares de sustancias tienen una afinidad o atracción mutua, de tal manera que cuando hacen contacto, una de las dos absorbe a la otra. La sustancia que absorbe se llama el absorbente, y la sustancia absorbida es el refrigerante.

**Planteamiento del problema:** Un sistema de refrigeración por absorción mostrado en la fig. 6.14, emplea amoníaco como refrigerante y agua como absorbente.

El calor es proporcionado al regenerador por condensación del vapor a presión atmosférica. La temperatura del regenerador es de 175 °F, las temperaturas del condensador y absorbedor son de 70 °F. El amoníaco es evaporado a 10 °F.

Asumiendo que la operación es adiabática, excepto donde el calor es intencionalmente adicionado o retirado, y despreciando la caída de presión debido a la fricción del fluido, habrá que determinarse lo siguiente:

- La presión en cada parte del sistema.
- La composición de la solución débil y fuerte de amoníaco.
- El trabajo de bomba mínimo requerido por tonelada de refrigeración.
- El calor transferido en el regenerador, condensador, y absorbedor por tonelada de refrigeración (12,000 BTU/h).

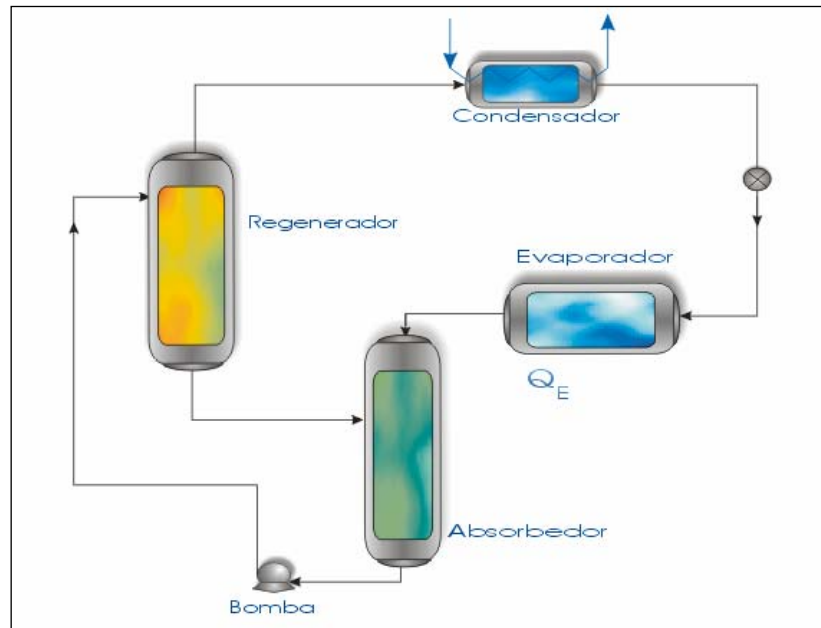


Fig. 6.14 Sistema de refrigeración por absorción de amoníaco

### Procedimiento:

- Realizar el modelamiento del proceso, evaluando para cada unidad las ecuaciones y variables involucradas que lo representan.
- Diseñar una estrategia de cálculo para la resolución del problema mediante un diagrama de flujo de información (DFI) y un procedimiento algorítmico.
- Utilizando el simulador del proceso, resolver el problema para los datos sugeridos.
- Evaluar cómo se ve afectado el flujo de soluciones débil y fuerte al incrementar la temperatura en el evaporador fundamentando teóricamente sus conclusiones.
- ¿De qué manera podemos obtener una mayor eficiencia térmica del ciclo sin incrementar el calor requerido en la torre de regeneración?
- ¿Qué ocurriría con la eficiencia del ciclo si el calor removido en el condensador fuera mayor, y menor?

### 6.4.3 Guía de laboratorio No.3: Simulación de Proceso de Licuefacción de Gases.

**Objetivo:** Conocer el fundamento termodinámico en el cual se basa el proceso de licuefacción de gases, evaluando y analizando las condiciones del proceso, así como el comportamiento del fenómeno, a través de la simulación del proceso.

**Introducción:** El proceso de licuefacción de gases tiene por objetivo el cambio de fase en estado gas al estado líquido por acción de la temperatura y la presión, con propósitos industriales de reducir el espacio de almacenamiento y los costos de transporte, la producción de temperaturas bajas para procesos especiales y la separación de mezclas gaseosas en sus componentes puros por destilación fraccionada de la mezcla líquida.

La licuefacción se obtiene cuando un gas se enfría a una temperatura en la región de dos fases, lo que puede lograrse de dos maneras:

- a. Por intercambio de calor a presión constante
- b. Por expansión en una turbina, a partir del cual se obtiene trabajo.
- c. Por un proceso de estrangulamiento.

**Planteamiento del problema:** Se requiere licuar metano mediante el sistema mostrado en la fig. 7.5, con  $P_5 = 102 \text{ atm}$ ,  $T_5 = 26.8 \text{ °C}$ ,  $P_8 = 10.2 \text{ atm}$ . y  $T_{10} = 23.9 \text{ °C}$ . El gas es alimentado al proceso a  $1 \text{ atm}$  y  $25 \text{ °C}$ , pasando por el primer compresor para igualar la presión con la presión del gas de salida del separador. Admitiendo un proceso adiabático sobre la base de  $1 \text{ Kgmol}$  de metano que entra en el punto 5, calcúlese:

- a) La fracción de metano condensado.
- b) La temperatura en los puntos 2,3,4 y 6.
- c) El calor transmitido en el enfriador.
- d) La temperatura a la salida del compresor.
- e) Trabajo real suministrado a cada compresor.
- f) El calor removido en el preenfriador.

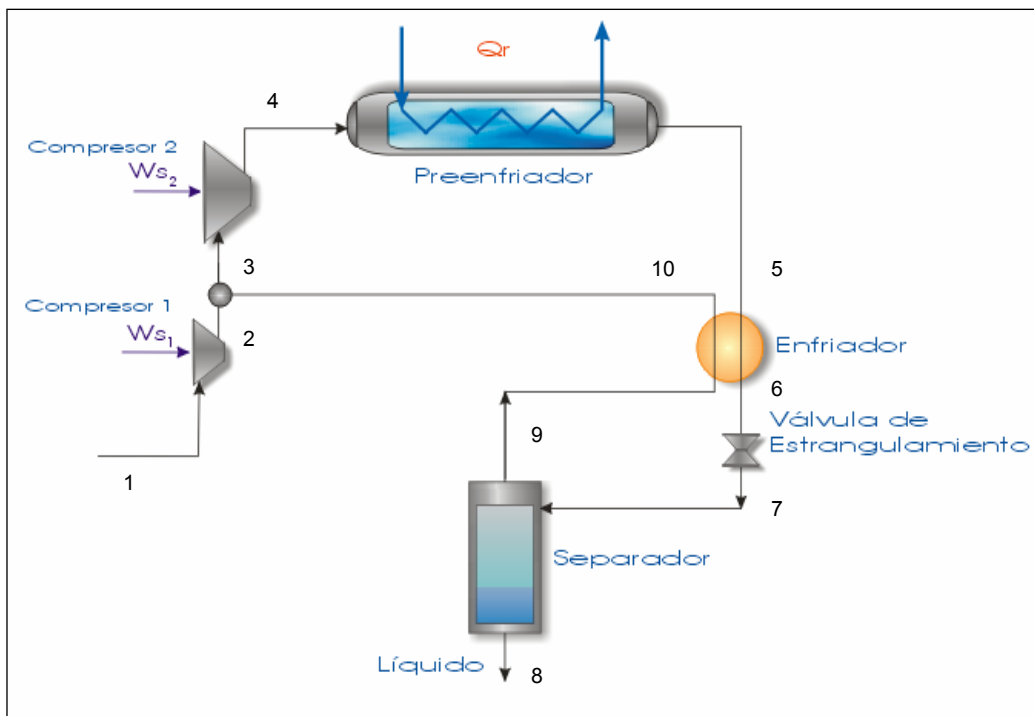


Fig. 6.15 Proceso de licuefacción de gases. Ciclo de Linde

**Procedimiento:**

- Realizar el modelamiento del proceso, evaluando para cada unidad las ecuaciones y variables involucradas que lo representan.
- Diseñar una estrategia de cálculo para la resolución del problema mediante un diagrama de flujo de información (DFI) y un procedimiento algorítmico.
- Utilizando el simulador del proceso, resolver el problema para los datos sugeridos.
- Analizar y justificar la necesidad del compresor 1 para este proceso.
- ¿De qué manera se ve influenciada un incremento o un decremento de la presión de salida de la válvula de estrangulamiento en la fracción de gas licuado?, ¿Para propósitos de diseño, es recomendable presiones demasiado bajas?
- ¿Es recomendable presión y temperatura bajas en la alimentación fresca al proceso?
- ¿Cómo cambiaría el procedimiento de cálculo si el estado referencia fuese las condiciones de la alimentación fresca al proceso?



#### 6.4.4 Guía de laboratorio No.4: Simulación de Proceso de Evaporación Instantánea.

**Objetivo:** Conocer el fundamento termodinámico en el cual se basa el proceso de evaporación instantánea, evaluando y analizando las condiciones del proceso, así como el comportamiento del fenómeno, a través de la simulación del proceso.

**Introducción:** Una aplicación importante del equilibrio líquido-vapor (ELV) es el cálculo de evaporación instantánea. Este se originó por el hecho de que un líquido, a una presión igual o mayor que su presión en el punto de burbuja “se evapora instantáneamente” o se evapora parcialmente cuando la presión se reduce por abajo de la presión del punto de rocío, produciendo un sistema de dos fases de vapor y líquido en equilibrio.

Un equipo de evaporación instantánea (evaporador flash) consiste en una etapa simple donde la alimentación es parcialmente vaporizada. El esquema de este equipo se presenta en la figura 6.16, donde la alimentación se calienta en el equipo de intercambio y luego se expande en forma adiabática a través de la válvula. La vaporización que se produce debido a la caída brusca de presión, implica la formación de dos fases, las cuales son separadas gracias al tiempo de contacto entre las mismas que permite el tambor separador.

**Planteamiento del problema:** Desarrollar un programa de simulación del proceso de evaporación instantánea, como se muestra en la figura 6.16, que permita determinar:

- a) Seleccionar un sistema binario determinado de la tabla 6.1, asignando un sistema distinto a cada grupo de alumnos.
- b) La temperatura a la salida del calentador y la válvula de expansión.
- c) La presión de rocío y presión de burbuja del sistema, y estime si puede darse o no la evaporación instantánea, para las condiciones del sistema.
- d) Las composiciones y flujos del líquido y vapor a la salida del evaporador.

Debe hacerse uso de modelos de coeficientes de actividad, propiedades residuales, ecuaciones de estado, y otros recursos, para estimar propiedades termodinámicas.

Tabla 6.1  
Sistemas binarios de selección del programa de simulación

Acetona (1) / Agua (2)
Metanol (1) / Agua (2)
1-Propanol (1) / Agua (2)
Metanol (1) / Acetonitrilo (2)
Acetona (1) / Metanol (2)
Acetato de metilo (1) / Metanol (2)
Metanol (1) / Benceno (2)
Etanol (1) / Tolueno (2)
Propanol (1) / Agua (2)

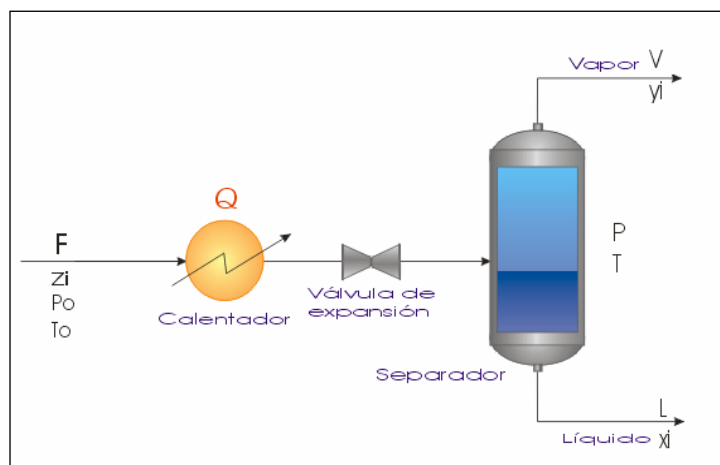


Fig. 6.16 Equipo de evaporación instantánea

### Procedimiento:

- Realizar el modelamiento del proceso, evaluando para cada unidad las ecuaciones y variables involucradas que lo representan, para un sistema binario, sin asumir idealidad.
- Diseñar una estrategia de cálculo para la resolución del problema mediante un diagrama de flujo de información (DFI) y un procedimiento algorítmico.
- Utilizando el simulador del proceso, resolver el problema para los datos sugeridos.
- ¿Cómo se relaciona la constante de equilibrio  $K_i$  con la tendencia de la especie  $i$  a concentrarse en la fase vapor?
- ¿De qué manera es posible obtener una mayor fracción de vapor sin necesidad de aumentar el calor suministrado?, Justifique su respuesta en base a relaciones termodinámicas.

- Al ser incrementada la temperatura a la entrada de la válvula de expansión, ¿cómo son afectados los coeficientes de actividad?, ¿esto significaría obtener mayor o menor fracción de vapor?, ¿Por qué?

#### **6.4.5 Guía de laboratorio No.5: Simulación de Reactor Discontinuo Ideal (RDI) isotérmico e isovolumétrico.**

**Objetivo:** Conocer y desarrollar las ecuaciones que modelan a un reactor discontinuo, evaluando y analizando las condiciones del proceso, así como el comportamiento del fenómeno, a través de la simulación del proceso.

**Introducción:** Un reactor discontinuo opera sin intercambio de materia con el exterior. Se alimenta inicialmente con los reactantes y, una vez ha terminado la reacción, el reactor se vacía.

Las aplicaciones más usuales de éste tipo de reactor son:

- a) Como reactores de laboratorio o industrias de producción pequeña;
- b) Reacciones en fase líquida y en reacciones a presiones bajas y moderadas.

En el caso de trabajar con reacciones en la fase líquida, se supone que el fluido es incompresible, es decir, la densidad permanece constante, y por lo tanto se trabaja con volúmenes de reactor constantes.

Cuando trabajamos con sistemas en fase gaseosa, el volumen del reactor puede variar por cambios en la presión, temperatura y número de moles.

**Planteamiento del problema:** Se desea diseñar un programa de simulación de un reactor discontinuo ideal de volumen constante que permita:

- Introducir los datos cinéticos de la reacción
- Seleccionar un modelo cinético y evaluar si es el apropiado o no.
- Obtener la ecuación cinética de la reacción
- Estimar tiempo de reacción para una conversión deseada.
- Analizar los comportamientos  $C_a$  vrs.  $t$ ,  $X_a$  vrs  $t$  y  $-r_a$  vrs  $t$
- Calcular el volumen de reactor de mezcla completa (RMC) y de reactor de flujo en pistón (RFP) para una alimentación y conversión dada.

**Procedimiento:**

- Realizar el modelamiento del proceso, evaluando para cada unidad las ecuaciones y variables involucradas que lo representan, para un sistema binario, sin asumir idealidad.
- Diseñar una estrategia de cálculo para la resolución del problema mediante un diagrama de flujo de información (DFI) y un procedimiento algorítmico.
- Utilizando el simulador del proceso, resolver el problema para los datos sugeridos.
- ¿De qué forma se relaciona la velocidad de reacción con el volumen del reactor?
- Para las condiciones planteadas, ¿conviene el uso de un reactor de flujo en pistón o un reactor de mezcla completa? Justifique su respuesta en base a las ecuaciones de diseño.
- ¿Qué modificaciones se requieren para un sistema a volumen variable?, ¿Se requerirá mayor o menor volumen de reactor?

**6.4.6 Guía de laboratorio No.6: Simulación de Sistemas de Reactores Serie/Paralelo.**

**Objetivo:** Conocer y desarrollar las ecuaciones que modelan a un sistema de reactores arreglados en serie o paralelo, evaluando y analizando las condiciones del proceso, así como el comportamiento del fenómeno, a través de la simulación del proceso.

**Introducción:** Con el objeto de alcanzar incrementos en la capacidad de producción o para obtener niveles más altos de conversión es necesario proveer volúmenes de reactores adicionales a través del uso de combinaciones en serie y/o paralelo de varios reactores de tipo continuo, o sea reactor de mezcla completa y reactor de flujo en pistón, así como combinaciones de ambos.

**Planteamiento del problema:** Se desea desarrollar un programa que permita la simulación de sistemas de reactores de mezcla completa y flujo en pistón en serie/paralelo con el cual sea posible conocer la conversión intermedia y de salida, el tiempo espacial, evaluando así el comportamiento de dicho sistema, para una reacción de primer orden cuya constante de velocidad es conocida.

**Procedimiento:**

- Realizar el modelamiento del proceso, evaluando para cada unidad las ecuaciones y variables involucradas que lo representan, para un sistema binario, sin asumir idealidad.
- Diseñar una estrategia de cálculo para la resolución del problema mediante un diagrama de flujo de información (DFI) y un procedimiento algorítmico.
- Utilizando el simulador del proceso, resolver el problema para los datos:  
 $k=0.55 \text{ min}^{-1}$ ,  $v_o = 15 \text{ litros/min}$ ,  $C_{A0} = 2.0 \text{ mol/litro}$ ,  $V_1 = 80 \text{ litros}$  y  $V_2 = 70 \text{ litros}$ .
- Para los distintos sistemas, ¿que modificaciones son más convenientes para obtener mejores conversiones?
- Para cada tipo de reactor, ¿qué arreglo resulta más factible implementar?
- ¿Qué disposición resulta mejor, si se desean utilizar un RMC y un RFP conectados en serie?

**6.4.7 Guía de laboratorio No.7: Simulación de Reactor de Flujo en Pistón No Isotérmico.**

**Objetivo:** Conocer y desarrollar las ecuaciones que modelan a un reactor de flujo en pistón no isotérmico, evaluando y analizando las condiciones del proceso, así como el comportamiento del fenómeno, a través de la simulación del proceso.

**Introducción:** La diferencia principal entre un sistema isotérmico y un no isotérmico radica en la manera de evaluar la ecuación de diseño cuando la temperatura varía a lo largo de un RFP o cuando se elimina calor de un RMC. En esta simulación estudiaremos el comportamiento de la temperatura, conversión y concentración a lo largo de un reactor de flujo en pistón.

**Planteamiento del problema:** Se desea diseñar un programa de simulación de un reactor de flujo en pistón que opera adiabáticamente en fase líquida a alta presión, utilizando un catalizador (considerado inerte) que produce una constante de velocidad específica ( $k_1$ ) a una temperatura ( $T_1$ ) conocidas, el cual permita calcular el volumen de reactor necesario para procesar una alimentación de reactante A dada, cuya cinética es de primer orden.

Así también permita evaluar los perfiles de conversión, temperatura y velocidad de reacción. Son datos conocidos: calor de reacción, capacidades caloríficas, energía de activación, constante de equilibrio y concentraciones iniciales.

**Procedimiento:**

- Realizar el modelamiento del proceso, evaluando para cada unidad las ecuaciones y variables involucradas que lo representan, para un sistema binario, sin asumir idealidad.
- Diseñar una estrategia de cálculo para la resolución del problema mediante un diagrama de flujo de información (DFI) y un procedimiento algorítmico.
- Utilizando el simulador del proceso, resolver el problema para los datos:  
 $X_a = 0.9$ ,  $DH_{rx} = -6,900 \text{ J/mol K}$ ,  $E_a = 65.7 \text{ kJ/mol}$ ,  $C_{pa} = 141 \text{ J/mol}$ ,  
 $C_{pi} = 161 \text{ J/mol}$ ,  $K_{co} = 3.03 \text{ a } 333 \text{ K}$ ,  $k_o = 31.1 \text{ a } 360 \text{ K}$ ,  $F_a = 163 \text{ kgmol/h}$ ,  
 $C_{ao} = 9.3 \text{ kgmol/m}^3$ ,  $T_o = 330 \text{ K}$
- ¿Qué modificación podría realizarse al proceso para obtener mejores conversiones para un menor volumen de reactor?
- ¿Por qué se utiliza como parámetro iterativo la conversión de equilibrio?
- ¿Cómo afectaría la conversión de equilibrio si la alimentación se introduce a una temperatura menor?

**6.5 Creación de sitio Web sobre información del programa de simulación de procesos, SimuLab IQ v1.0**

El sitio Web fue creado con el objeto de disponer de información sobre el trabajo realizado desde cualquier computadora conectada a Internet, tanto como para el estudiante, el docente como para cualquier persona que tenga interés en una de las aplicaciones de la Simulación de Procesos, para este caso, en Ingeniería Química.

**6.5.1 Contenido del sitio Web**

El sitio Web desarrollado posee información sobre el trabajo de tesis, como la teoría aplicada, los módulos de simulación, etc., estructurado de la siguiente forma:

- Página de inicio
- Teoría de simulación de procesos
  - Definición
  - Etapas de desarrollo
  - Clasificación
  - Aplicaciones
  - Modelamiento

- Teoría del aprendizaje basado en problemas
  - Definición
  - Características del ABP
  - Objetivos del ABP
  - Ventajas del ABP
  - Aplicaciones del ABP
  
- Información sobre los módulos de simulación de procesos desarrollados
  - (principios básicos, planteamiento del problema, simulación)
  
- Descarga de las guías de laboratorio de simulación
  
- Información general sobre Matlab y SimuLab IQ

## 6.5.2 Página de inicio del sitio Web

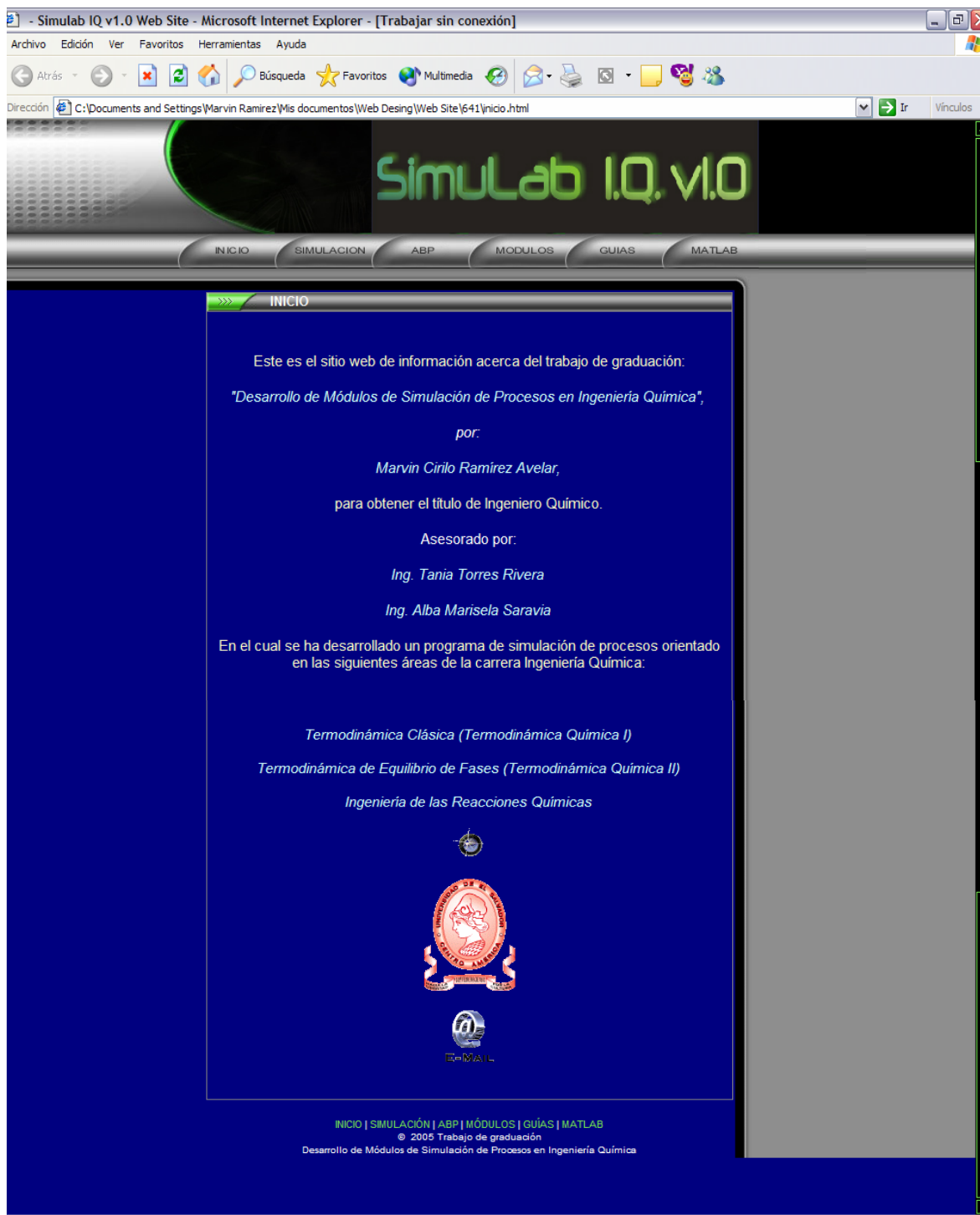


Fig. 6.17 Página de inicio al sitio Web



## 6.5.3 Página de teoría de simulación de procesos

The screenshot shows a web browser window titled "- Simulab IQ v1.0 Web Site - Microsoft Internet Explorer - [Trabajar sin conexión]". The address bar shows the path "C:\Documents and Settings\Marvin Ramirez\Mis documentos\Web Desin\Web Site\641\simulacion.html". The website has a dark blue header with the text "Simulab I.Q. v1.0" and a navigation menu with buttons for "INICIO", "SIMULACION", "ABP", "MODULOS", "GUIAS", and "MATLAB". On the left side, there is a vertical menu with green arrows pointing to "Definición", "Etapas de desarrollo", "Clasificación", "Aplicaciones", and "Modelamiento". The main content area has a blue background and is titled "SIMULACIÓN DE PROCESOS". It contains the following text:

**¿Qué es la Simulación de Procesos?**

La simulación se define como una técnica para evaluar en forma rápida un proceso con base en una representación del mismo, mediante modelos matemáticos. La solución de éstos se lleva a cabo por medio de programas de computadora y permite tener un mejor conocimiento del comportamiento del proceso.

La simulación de procesos está vinculada al cálculo de los balances de materia, energía y eventualmente la cinética, termodinámica y velocidad de transferencia de un proceso cuya estructura, y datos preliminares de los equipos que los componen, son conocidos.

La simulación de un proceso empieza por el desarrollo de un programa capaz de repetir las características de comportamiento de dicho proceso ante las variaciones en sus variables.

**Etapas de desarrollo**

En la preparación de la simulación de un proceso químico existen ciertos pasos importantes a seguir en pequeña o gran escala.

- Identificar y formular el problema**

En este paso debe quedar perfectamente establecido el objeto de la simulación. El alcance del problema a solucionar puede ser obvio en su análisis, pero identificarlo en las primeras etapas de un proyecto de simulación no es a menudo tan fácil.

- Definición del sistema**

El sistema a simular debe estar perfectamente definido, identificando dónde estará la frontera del sistema a estudiar y las interacciones con el exterior que serán consideradas.

- Formulación del modelo**

Comienza con el desarrollo de un modelo simple que captura los aspectos relevantes del sistema real, en los que éstos dependen de la formulación del problema.

- Localizar los datos necesarios**

El diseño y simulación de procesos químicos necesita de datos de propiedades físicas, termodinámicas, cinéticos y de transporte, los cuales se calculan a partir de modelos de propiedades con base teórica o empíricos.

- Seleccionar el paquete de modelamiento**

On the right side of the page, there is a circular logo of the "UNIVERSIDAD DE LA CAJON" with a central emblem.

Fig. 6.18 Página de teoría de simulación de procesos

## 6.5.4 Página de teoría del Aprendizaje Basado en Problemas

The screenshot displays a web browser window titled '- SimuLab I.Q. v1.0 Web Site - Microsoft Internet Explorer - [Trabajar sin conexión]'. The address bar shows the path 'C:\Documents and Settings\Marvin Ramirez\Mis documentos\Web Desin\Web Site\641\abp.html'. The website header features the 'SimuLab I.Q. v1.0' logo and a navigation menu with options: NICIO, SIMULACION, ABP, MODULOS, GUIAS, and MATLAB. The main content area is titled 'APRENDIZAJE BASADO EN PROBLEMAS (ABP)' and includes a sidebar with a table of contents: Definición, Características del ABP, Objetivos del ABP, Ventajas del ABP, and Aplicaciones del ABP. The main text is on a dark blue background and covers three sections: '¿Qué es el Aprendizaje Basado en Problemas?', 'Características del ABP', and 'Objetivos del ABP'. A logo of the 'UNIVERSIDAD DE LA GUAYANA' is visible on the right side of the page.

**APRENDIZAJE BASADO EN PROBLEMAS (ABP)**

**¿Qué es el Aprendizaje Basado en Problemas?**

Es una estrategia de enseñanza-aprendizaje en la que tanto la adquisición de conocimientos como el desarrollo de habilidades y actitudes resultan importantes, en el ABP un grupo pequeño de alumnos se reúne, con la facilitación de un tutor, a analizar y resolver un problema seleccionado o diseñado especialmente para el logro de ciertos objetivos de aprendizaje.

Durante el proceso de interacción de los alumnos para entender y resolver el problema se logra, además del aprendizaje del conocimiento propio de la materia, que puedan elaborar un diagnóstico de sus propias necesidades de aprendizaje, que comprendan la importancia de trabajar cooperativamente, que desarrollen habilidades de análisis y síntesis de información, además de comprometerse con su proceso de aprendizaje

**Características del ABP**

A continuación se describen algunas características del ABP:

- Es un método de trabajo activo donde los alumnos participan constantemente en la adquisición de su conocimiento.
- El método se orienta a la solución de problemas que son seleccionados o diseñados para lograr el aprendizaje de ciertos objetivos de conocimiento.
- El aprendizaje se centra en el alumno y no en el profesor o sólo en los contenidos.
- Es un método que estimula el trabajo cooperativo en diferentes disciplinas, se trabaja en grupos pequeños.
- Los cursos con este modelo de trabajo se abren a diferentes disciplinas del conocimiento.
- El maestro se convierte en un facilitador o tutor del aprendizaje

**Objetivos del ABP**

El ABP busca un desarrollo integral en los alumnos y conjuga la adquisición de conocimientos propios de la especialidad de estudio, además de habilidades, actitudes y valores. Se pueden señalar los siguientes objetivos del ABP:

- Promover en el alumno la responsabilidad de su propio aprendizaje.
- Desarrollar una base de conocimiento relevante caracterizada por profundidad y flexibilidad.
- Desarrollar habilidades para la evaluación crítica y la adquisición de nuevos conocimientos con un compromiso de aprendizaje de por vida.
- Desarrollar habilidades para las relaciones interpersonales.
- Involucrar al alumno en un reto (problema, situación o tarea) con iniciativa y entusiasmo

Fig. 6.18 Página de teoría del Aprendizaje Basado en problemas

## 6.5.5 Página de información de los módulos de simulación de procesos

The screenshot shows a web browser window titled "- SimuLab IQ v1.0 Web Site - Microsoft Internet Explorer - [Trabajar sin conexión]". The address bar shows the path "C:\Documents and Settings\Marvin Ramirez\Mis documentos\Web Desin\Web Site\6411modulos.html". The website has a dark blue background with a navigation menu at the top: INICIO, SIMULACION, ABP, MÓDULOS, GUÍAS, and MATLAB. The main content area is titled "MÓDULOS DE SIMULACIÓN DE PROCESOS" and lists three modules:

- Módulo de Termodinámica Clásica**: Este módulo de simulación de procesos está orientado en el área de la Termodinámica Clásica (Termodinámica Química I), y comprende los siguientes programas de simulación:
  - Simulación de Planta de Potencia de Vapor.
  - Simulación de Sistema de Refrigeración por Absorción de Amoniaco.
- Módulo de Termodinámica de Equilibrio de Fases**: Este módulo de simulación de procesos está orientado en el área de la Termodinámica de Equilibrio de Fases (Termodinámica Química II), y comprende los siguientes programas de simulación:
  - Simulación de proceso de Licuefacción de Gases.
  - Simulación de proceso de Evaporación Instantánea.
- Módulo de Ingeniería de las Reacciones Químicas**: Este módulo de simulación de procesos está orientado en el área de Ingeniería de las Reacciones Químicas, y comprende los siguientes programas de simulación:
  - Simulación de Reactor Discontinuo Ideal Isotérmico
  - Simulación de Sistemas de Reactores Serie/Paralelo
  - Simulación de Reactor de Flujo en Pistón No Isotérmico.

At the bottom of the page, there is a footer with the text: "INICIO | SIMULACIÓN | ABP | MÓDULOS | GUÍAS | MATLAB", "© 2005 Tesis de graduación", and "Desarrollo de Módulos de Simulación de Procesos en Ingeniería Química".

Fig. 6.20 Página de información de módulos de simulación

Al seleccionar un módulo en particular se presenta la información correspondiente a este, por ejemplo al seleccionar el módulo de “Simulación de planta de potencia de vapor”, obtenemos:

The screenshot shows a web browser window displaying the SimuLab I.Q. v1.0 website. The page is titled "SIMULACIÓN DE PLANTA DE POTENCIA DE VAPOR" and contains the following content:

**Principios básicos del proceso**

Una planta de potencia de vapor opera en un ciclo termodinámico, esta es considerada como una máquina térmica a gran escala en la que el fluido de trabajo (agua) se encuentra fluyendo continuamente, en estado uniforme, sucesivamente a través de una bomba, una caldera, una turbina y condensador para que finalmente regrese a su estado inicial.

El ciclo de Carnot opera reversiblemente y consiste en dos etapas isotérmicas conectadas mediante dos etapas adiabáticas. En la etapa isotérmica a temperatura más elevada,  $T_H$ , el calor  $|Q_H|$  es absorbido por el fluido de trabajo de la máquina, mientras que en la etapa isotérmica a temperatura más baja,  $T_C$ , el calor  $|Q_C|$  es desechado por el fluido. El trabajo producido es  $|W| = |Q_H| - |Q_C|$ , y la eficiencia térmica del ciclo de Carnot está dado por la ecuación:

$$\eta = \frac{|W|}{|Q_H|} = 1 - \frac{T_C}{T_H}$$

Aquí puede observarse que,  $\eta$  aumenta al incrementarse  $T_H$  y decrece  $T_C$ , así también al aumentar la temperatura promedio a la cual el calor es absorbido y cuando disminuye la temperatura promedio a la cual el calor es expulsado.

Dado que la eficiencia térmica de un ciclo de energía de vapor puede ser incrementada al elevar la presión y, por tanto, la temperatura de vaporización de la caldera, así como también existe el factor de sobrecalentamiento en la caldera, por lo tanto las presiones y temperaturas elevadas en la caldera favorecen las eficiencias. Aunque para condiciones de temperaturas y presiones elevadas de operación de las plantas de potencia posee sus limitantes, tanto económicas como de construcción más pesada.

Las plantas de energía más modernas operan con una modificación del ciclo de Rankine, que incorpora calentadores del agua de alimentación. El agua proveniente del condensador, en lugar de ser bombeada directamente de regreso a la caldera, primero se calienta con vapor extraído de la turbina.

**Planteamiento del problema**

En el proceso representado en la figura, las condiciones de operación de la caldera son 8,600 kPa y 500 °C y la presión de descarga de la turbina, 10 kPa. El condensador produce un ligero enfriamiento del condensado, fijando la temperatura del agua líquida del condensador a 45 °C. La bomba del agua de alimentación causa un ligero aumento de temperatura de 1 °C, haciendo que la temperatura del agua de alimentación que entra a la serie de calentadores sea de 46 °C.

Fig. 6.21 Página de información de módulo de simulación de planta de potencia de vapor

## 6.5.6 Página de descarga de guías de laboratorio de simulación de procesos

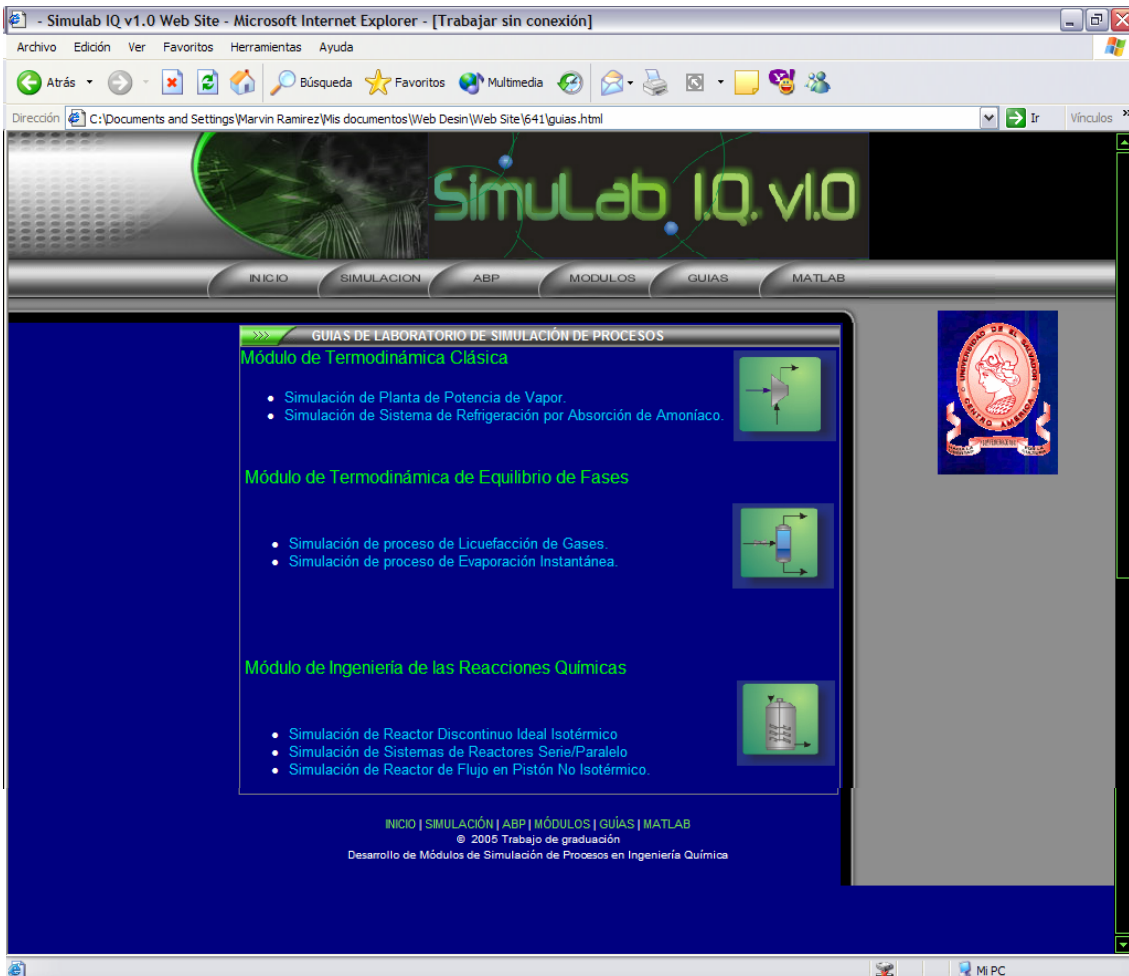


Fig. 6.22 Página de descarga de guías de laboratorio de simulación

Desde las cuales es posible descargar el archivo de la guía de laboratorio al seleccionar el vínculo de éste, apareciendo en pantalla el cuadro de diálogo:

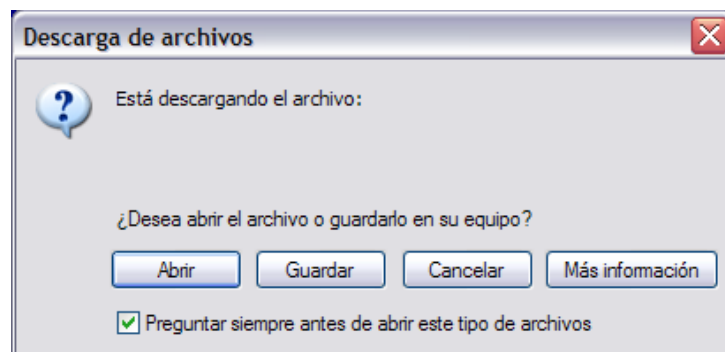


Fig. 6.23 Cuadro de diálogo de descarga de archivo de guía de laboratorio

## 6.5.7 Página de información de Matlab y SimuLab IQ

SimuLab IQ v1.0 Web Site - Microsoft Internet Explorer - [Trabajar sin conexión]

Archivo Edición Ver Favoritos Herramientas Ayuda

Dirección C:\Documents and Settings\Marvin Ramirez\Mis documentos\Web Desin\Web Site\641\matlab.html

INICIO SIMULACION ABP MODULOS GUIAS MATLAB

**MATLAB**

MATLAB es el nombre abreviado de "MATrix LABORatory". MATLAB es un programa para realizar cálculos numéricos con vectores y matrices.

Una de las capacidades más atractivas es la de realizar una amplia variedad de gráficos en dos y tres dimensiones. MATLAB tiene también un lenguaje de programación propio.

MATLAB es un gran programa de cálculo técnico y científico. Para ciertas operaciones es muy rápido, cuando puede ejecutar sus funciones en código nativo con los tamaños más adecuados para aprovechar sus capacidades de vectorización.

The MathWorks

**SimuLab IQ v1.0**

La ventana de inicio de SimuLab IQ v1.0, programa que reúne el paquete de programas de simulación de procesos desarrollados, es la siguiente:

SimuLab IQ v1.0

Simulación de Procesos en Ingeniería Química

OK

Trabajo de Graduación  
Desarrollo de Módulos de Simulación de  
Procesos en Ingeniería Química  
Por:  
Marvin Cirilo Ramirez, Avellar

Luego de ejecutando el botón de acción "OK" en la ventana de la fig. 6.3, aparece la siguiente ventana de selección de los módulos:

SimuLab IQ v1.0 Módulos de Simulación de Procesos en Ingeniería Química.

Fig. 6.24 Página de información de Matlab y SimuLab IQ

## **7.0 Conclusiones**

- ✚ La simulación de procesos como aplicación en Ingeniería Química, resulta ser una importante herramienta complementaria dentro de las diversas áreas de la carrera, así como también, proyectos de investigación, proceso de enseñanza-aprendizaje, etc.
- ✚ El uso de esta herramienta como recurso didáctico permite abarcar temáticas complejas y extensas, mediante una comprensión del fenómeno simulando diversas condiciones y casos que puedan presentarse, que por razones de tiempo en muchas ocasiones no es posible lograrlo, siendo además una forma de motivación hacia el aprendizaje e investigación.
- ✚ Los programas de simulación desarrollados permiten visualizar los resultados de las interacciones entre las variables y parámetros de diseño y operación que intervienen en los procesos.
- ✚ Las Guías de Laboratorio de Simulación serán de mucha utilidad en la incorporación de los módulos de simulación dentro del contenido de la asignatura correspondiente.
- ✚ La metodología del aprendizaje basado en problemas permite desarrollar habilidades y destrezas de análisis en el estudiante y un trabajo en equipo junto con el docente guiador, comparado con la metodología tradicional basada sólo en la teoría.
- ✚ La comprensión de un fenómeno o proceso, mediante una construcción estructurada del mismo, permite la comprensión y aplicación de la teoría en casos particulares y experiencias de campo que puedan presentarse en nuestro desenvolvimiento profesional.

## 8.0 Referencias bibliográficas

- ✚ Carlson, Eric C., **“Don’t Gamble With Physical Properties For Simulations”**, (Octubre, 1996), Chemical Engineering Progress.
- ✚ Cerquera, Armando, **“Algorítmica para programación”**, Octubre, 2001 <http://www.monografias.com/>
- ✚ Creus Solé, Antonio **“Simulación de procesos con PC”**, (1989); Marcombo S.A. España, Barcelona.
- ✚ Dirección de Investigación y Desarrollo Educativo, ITESM, **“El ABP como técnica didáctica”** (1999), <http://www.sistema.itesm.mx>.
- ✚ Duch, Bárbara, **“Aprendizaje Basado en Problemas”**, Julio, 1999 <http://www.sistema.itesm.mx>.
- ✚ Fogler, Scout **“Elementos de Ingeniería de las Reacciones Químicas”**, (2001), Prentice-Hall, México.
- ✚ Glasscock, David, **“Process Simulation: The Art and Science of Modeling”**, (Noviembre, 1994), Chemical Engineering.
- ✚ Levenspiel, Octave **“Ingeniería de las Reacciones Químicas”**, (1995), Editorial Reverté, 2ª. Edición, México.
- ✚ Martínez Sifuentes, Victor Hugo, y col **“Simulación de Procesos en Ingeniería Química”** (2000); Plaza y Valdés Editores, México, Tamaulipas
- ✚ Perry, Robert H, **“Perry’s Chemical Engineer’s Handbook”**, (1999), The McGraw-Hill Companies, Estados Unidos.
- ✚ Pita, Edward G. **“Principios y sistemas de refrigeración”** (1991), Editorial Limusa S.A. de C.V., México
- ✚ Reklaitis, G.V., **“Balances de Materia y Energía”** (1989), McGraw-Hill/ Interamericana, México.
- ✚ Scenna, J. Nicolás. **“Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos”**, (1999), 2ª edición, Editorial de la Universidad Tecnológica Nacional, Buenos Aires Argentina
- ✚ Smith, J. M. y Van Ness, H. C. **“Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química”**, (1997), 5ª Edición, McGraw-Hill Co, México
- ✚ Smith, J. M. y Van Ness, H. C. **“Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics”**, (1959), 2ª Edición, McGraw-Hill Co, Estados Unidos
- ✚ Van Wylen, Gordon, **“Fundamentos de Termodinámica”**, (1994), Editorial Limusa S.A. de C.V., México D.F.
- ✚ Sitio Web : **“Traditional versus PBL Classroom”**, (Junio, 1999). <http://www.samford.edu/pbl/what3.html>.



## Capítulo 9

# ANEXOS

Codificaciones de funciones y programas principales

- ❖ Termodinámica Clásica
  - A. Simulación de planta de potencia de vapor.
  - B. Simulación de proceso de refrigeración por absorción de amoníaco.
  
- ❖ Termodinámica de Equilibrio de Fases
  - C. Simulación de procesos de licuefacción de gases
  - D. Simulación del proceso de evaporación instantánea
  
- ❖ Ingeniería de Reacciones Químicas
  - E. Simulación de reactor discontinuo ideal isotérmico
  - F. Simulación de sistemas de reactores serie/paralelo: mezcla completa y flujo en pistón.
  - G. Simulación de reactor de flujo en pistón no isotérmico.

## Anexo A.1 Programa de selección de sistema de unidades en Simulación de Planta de Potencia de Vapor

```
% Selección de sistema de Unidades
OP=0; % Parámetro de afirmación de selección de unidades
while OP==0;
    UNIT=questdlg('Seleccione el sistema', 'Sistema de Unidades','S.I.','Ingles','Ingles');
    switch UNIT,
        case 'S.I.', % Asigna unidades del sistema internacional
            UP='kPa'; UT='K'; UPT='kW';
            OP=1;
        case 'Ingles', % Asigna unidades del sistema ingles
            UP='psi'; UT='F'; UPT='hp';
            OP=1;
        otherwise % Caso de no selección de unidades
            errordlg('Debe seleccionar sistema de unidades!!','Error de ejecucion') % Mensaje de
error
            pause(3) % Espera 3 seg. para aceptación de mensaje
    end % switch
end %while
global UNIT % Definimos a la variable UNIT como global
```

El sistema de unidades seleccionado se almacena en la variable “UNIT”, que se utilizará en el resto del programa para la selección de datos.

## Anexo A.2 Funciones creadas para la lectura de datos

```
o Función TempSat(P)
% Función de lectura de temperatura de saturación a una temperatura determinada
% Esta función tiene como argumento el dato de presión de saturación y como valor de salida
% la temperatura de saturación a la presión P determinada
function T=TempSat(P)
global UNIT % lee el valor de la variable global de unidades
switch UNIT, % selecciona la hoja de cálculo según las
unidades
    case 'S.I.',
        M=xlsread('TVP.xls','Saturado SI'); % asigna los datos de saturación a la matriz M
    case 'Ingles',
        M=xlsread('TVP.xls','Saturado ENG');
end
```

```

Tx=M(:,1);          %Los datos de temperatura de saturación son los valores de la columna 1
de M
Px=M(:,2);          %Los datos de presión de saturación son los valores de la columna 2 de M
a=max(find(Px<P));  % Busca posición de datos de presión cercanos a P
T=interp1(Px([a-10:a+10]),Tx([a-10:a+10]),P); % Interpola el valor de temperatura a la presión

```

○ Función *PresSat(T)*

% Función que da como resultado la presión de saturación a una temperatura determinada

% Tiene como argumento la temperatura de saturación y resultado la presión de saturación a T

```
function P=PresSat(T)
```

```
global UNIT          % lee el valor de la variable global de unidades
```

```
switch UNIT,        % selecciona la hoja de cálculo según las
unidades
```

```
    case 'S.I.'
```

```
        M=xlsread('TVP.xls','Saturado SI'); % asigna los datos de saturación a la matriz M
```

```
    case 'Ingles'
```

```
        M=xlsread('TVP.xls','Saturado ENG');
```

```
end
```

```
Tx=M(:,1);          %Los datos de temperatura de saturación son los valores de la columna 1 de M
```

```
Px=M(:,2);          %Los datos de presión de saturación son los valores de la columna 2 de M
```

```
P=interp1(Tx,Px,T); % Interpola el valor de presión de saturación a la temperatura T
```

○ Función *EntalfSat(T)*

% Función que da como resultado la entalpía de saturación de un líquido saturado a una

% temperatura, teniendo como entrada el dato de temperatura y como valor de salida la entalpía

% del líquido saturado a la temperatura T

```
function Hf=EntalfSat(T)
```

```
global UNIT          % lee el valor de la variable global de unidades
```

```
switch UNIT,        % selecciona la hoja de cálculo según las
unidades
```

```
    case 'S.I.',
```

```
        M=xlsread('TVP.xls','Saturado SI'); % asigna los datos de saturación a la matriz M
```

```
    case 'Ingles',
```

```
        M=xlsread('TVP.xls','Saturado ENG');
```

```
end
```

```
Tx=M(:,1);      %Los datos de temperatura de saturación son los valores de la columna 1 de M
Hx=M(:,3);      %Los datos de entalpía de líquido saturado son los valores de la columna 3 de
M
Hf=interp1(Tx,Hx,T);      % Interpola el valor de entalpía de líquido saturado a la temperatura
```

○ Función *HLiqComp(P,T)*

% Función de lectura de entalpía de líquido comprimido a presión y temperatura determinadas  
 % Esta función tiene como argumento de entrada el dato de temperatura y presión del líquido  
 % comprimido y como resultado el valor de la entalpía del líquido comprimido a P y T

```
function H=HLiqComp(P,T)
global UNIT      % lee el valor de la variable global de unidades
switch UNIT,    % selecciona la hoja de cálculo según las
unidades
    case 'S.I.'
        HLC=xlsread('TVP.xls','liqcomp SI'); % asigna datos de liq. comp. a la matriz HLC
    case 'Ingles'
        HLC=xlsread('TVP.xls','liqcomp ENG');
end
Thx=HLC(1,:);    %Los datos de temperatura son los valores de la fila 1 de HLC
Phy=HLC(:,1);    %Los datos de presión son los valores de la columna 1 de
HLC
Thx(1)=[];Phy(1)=[]; %Elimina los primeros valores (vacíos) de los vectores
HLC(1,:)=[];HLC(:,1)=[]; % Elimina la columna 1 y fila 1 de la matriz HLC
H=interp2(Thx,Phy,HLC,T,P); %Interpola el dato de entalpía de líquido comprimido a T y P
```

○ Función *EntalPT(P,T)*

% Función que calcula la entalpía del vapor sobrecalentado dados presión y %temperatura (P,  
 T)

```
function H=EntalPT(P,T)
global UNIT      % lee el valor de la variable global de unidades
switch UNIT,    % selecciona la hoja de cálculo según las
unidades
    case 'S.I.',
        Hscal=xlsread('TVP.xls','HSobrecal SI'); % asigna los datos de entalpía a la matriz
Hscal
    case 'Ingles',
        Hscal=xlsread('TVP.xls','HSobrecal ENG');
end
```

```

Thx=Hscal(1,:);      % Los valores de temperatura son los datos de la fila 1 de la matriz
Hscal
Phy=Hscal(:,1);     % Los valores de presión son los datos de la columna 1 de la matriz
Hscal
Thx(1)=[];Phy(1)=[]; % Elimina los primeros elementos (vacíos) de los vectores Thx y Phy
Hscal(1,:)=[];Hscal(:,1)=[]; %Elimina la fila 1 y columna 1 de la matriz
Hscal
a=min(find(Phy>P));  % Busca la posición del dato de presión más próximo a P
b=min(find(Thx>T));  % Busca la posición del dato de temperatura más próxima a T
c=max(find(Zh(a,:)==0)); % Busca "ceros" (datos vacíos en tablas de vapor)
H=interp2(Thx(c+1:b+1),Phy(a-1:a+1),Hscal([a-1:a+1],[c+1:b+1]),T,P); % Interpola H, a (T,P)

```

o Función *EntroPT(P,T)*

% Función que calcula la entropía del vapor sobrecalentado a presión y temperatura dado (P, T)

```
function S=EntroPT(P,T)
```

```
global UNIT % lee el valor de la variable global de unidades
```

```
switch UNIT, % selecciona la hoja de cálculo según las unidades
```

```
case 'S.I.',
```

```
Sscal=xlsread('TVP.xls','SSobrecal SI'); % asigna los datos de entropía a la matriz
```

```
Sscal
```

```
case 'Ingles',
```

```
Sscal=xlsread('TVP.xls','SSobrecal ENG');
```

```
end
```

```
Tsx=Sscal(1,:); % Los valores de temperatura son los datos de la fila 1 de la matriz
```

```
Sscal
```

```
Psy=Sscal(:,1); % Los valores de presión son los datos de la columna 1 de la matriz
```

```
Sscal
```

```
Tsx(1)=[];Psy(1)=[]; % Elimina los primeros elementos (vacíos) de los vectores Tsx y Psy
```

```
Sscal(1,:)=[];Sscal(:,1)=[]; %Elimina la fila 1 y columna 1 de la matriz Hscal
```

```
Zs=Sscal;
```

```
a=min(find(Psy>P)); % Busca la posición del dato de presión más próximo a P
```

```
b=min(find(Tsx>T)); % Busca la posición del dato de temperatura más próxima a T
```

```
c=max(find(Zs(a,:)==0)); % Busca "ceros" (datos vacíos en tablas de vapor)
```

```
S=interp2(Tsx(c+1:b+1),Psy(a-1:a+1),Zs([a-1:a+1],[c+1:b+1]),T,P); % Interpola S, a (T,P)
```

○ Función *EntalPS(P,S,Tlim)*

% Función que calcula la entalpía del vapor sobrecalentado a una presión y entropía definidos, el % valor de la variable *Tlim* es un parámetro de temperatura en la lectura de datos

**function** H=EntalPS(P,S,Tlim)

```

global UNIT                                % lee el valor de la variable global de unidades
switch UNIT,                               % selecciona la hoja de cálculo según las unidades
    case 'S.I.',
        Hscal=xlsread('TVP.xls','HSobrecal SI'); %asigna los datos de entalpía a la matriz
        Sscal=xlsread('TVP.xls','SSobrecal SI'); % asigna los datos de entropía a la matriz
    case 'Ingles',
        Hscal=xlsread('TVP.xls','HSobrecal ENG');
        Sscal=xlsread('TVP.xls','SSobrecal ENG');
end

Tx=Hscal(1,:);                               % Los datos de temperatura son los valores de la fila 1 de la matriz
Py=Hscal(:,1);                               % Los datos de presión son los valores de la columna 1 de la matriz
Tx(1)=[];Py(1)=[];                           % Elimina los primeros elementos (vacíos) de los vectores Tx y
Py Hscal(1,:)=[];Hscal(:,1)=[];             % Elimina la fila 1 y columna 1 de la matriz Hscal
Sscal(1,:)=[];Sscal(:,1)=[];                % Elimina la fila 1 y la columna 1 de la matriz Sscal
a=max(find(Py<P));                             % Busca la posición de los valores de presión próximos a P
p1=Py(a);                                     % Asigna el dato de presión menor que P
p2=Py(a+1);                                   % Asigna el datos de presión mayor que P
s1=Sscal(a,:);                               % Asigna los datos de entropía a presión menor que P
s2=Sscal(a+1,:);                             % Asigna los datos de entropía a presión mayor que P
h1=Hscal(a,:);                               % Asigna datos de entalpía a presión menor que P
h2=Hscal(a+1,:);                             % Asigna datos de entalpía a presión mayor que P
lim=max(find(Tx<Tlim));                       % Define un rango máximo de temperatura de lectura de datos
T=Tx(1:lim);                                 % Define los datos de temperatura hasta temperatura límite
Sa=s1(1:lim);                                % Define los datos de entropía < P hasta temperatura límite
Sb=s2(1:lim);                                % Define los datos de entropía > P hasta temperatura límite
Ha=h1(1:lim);                                % Define los datos de entalpía < P hasta temperatura límite
Hb=h2(1:lim);                                % Define los datos de entalpía > P hasta temperatura límite
M=[T;Ha;Hb;Sa;Sb];                           % Agrupa los datos de en la matriz M
v=max([length(find(Sa==0)) length(find(Sb==0))]); % busca datos con valores nulos en tablas
M(:,[1:v])=[];                               % Elimina las columnas con valores nulos

```

```

Hx=interp1([p1;p2],[M(2,:);M(3,:)],P,'spline');      % Interpola serie de datos de entalpía a P
Sx=interp1([p1;p2],[M(4,:);M(5,:)],P,'spline');      % Interpola serie de datos de entropía a P

if S<Sx          % Evalúa si el datos de entropía es menor que los datos de la serie
    H=SATURADO(P,S); %Si es menor que los datos de la serie calcula la entalp. a saturación
else
    H=interp1(Sx,Hx,S); % Si el dato está dentro de la serie calcula la entalpía sobrecalentada
end

```

○ Función SATURADO(P,S)

% Función que calcula la entalpía del vapor húmedo para una presión y entropía (cte.) conocidas

```

function H=SATURADO(P,S)
global UNIT          % lee el valor de la variable global de unidades
switch UNIT,        % selecciona la hoja de cálculo según las unidades
    case 'S.I.'
        M=xlsread('TVP.xls','Saturado SI'); % asigna los datos de saturación a la matriz M
    case 'Ingles'
        M=xlsread('TVP.xls','Saturado ENG');
End

```

```

Px=M(:,2); % Los datos de presión son los valores de la columna 2 de la matriz M
Hf=M(:,3); % Los datos de entalpía de líquido son los valores de la columna 3 de la matriz M
Hg=M(:,4); % Los datos de entalpía de vapor son los valores de la columna 4 de la matriz M
Sf=M(:,5); % Los datos de entropía de líquido son los valores de la columna 5 de la matriz M
Sg=M(:,6); % Los datos de entropía de vapor son los valores de la columna 6 de la matriz M
a=max(find(Px<P)); % Busca la posición de los valores cercanos a P
Po=Px([a-20:a+20]); % Crea vector con presiones menores y mayores próximos a P
SG=Sg([a-20:a+20]); % Crea vector con entropía de vapor menores y mayores próximos a P
SF=Sf([a-20:a+20]); % Crea vector con entropía de líquido menores y mayores próximos a P
HF=Hf([a-20:a+20]); % Crea vector con entalpía de líquido menores y mayores próximos a P
HG=Hg([a-20:a+20]); % Crea vector con entalpía de de vapor menores y mayores próximos a P

```

%Cálculo de la calidad de lvapor en la mezcla con datos de entropía

```

X=(S-interp1(Po,SF,P,'spline'))/(interp1(Po,SG,P,'spline')-interp1(Po,SF,P,'spline'));
H=X*interp1(Po,HG,P,'spline')+(1-X)*interp1(Po,HF,P,'spline'); %Calcula la entalpía de mezcla

```

- Función *EntroTempPSH*

% Función que da como resultado la entropía, temperatura, calidad y el estado del vapor a la salida de una sección de turbina, teniendo como argumento la presión y entalpía de salida, y un % valor de entropía como parámetro de cálculo.

```
function [T,S,X,Est]=EntroTempPSH(P,Tlim,H)
global UNIT % lee el valor de la variable global de unidades
switch UNIT, % selecciona la hoja de cálculo según las unidades
    case 'S.I.',
        Hscal=xlsread('TVP.xls','HSobrecal SI'); % asigna los datos de entalpía a la matriz
        Sscal=xlsread('TVP.xls','SSobrecal SI'); % asigna los datos de entropía a la matriz
        SAT=xlsread('TVP.xls','Saturado SI'); % asigna los datos de saturación a la matriz
    case 'Ingles',
        Hscal=xlsread('TVP.xls','HSobrecal ENG');
        Sscal=xlsread('TVP.xls','SSobrecal ENG');
        SAT=xlsread('TVP.xls','Saturado ENG');
end

Tx=SAT(:,1); % Los datos de temperatura en saturación es la columna 1 de matriz SAT
Px=SAT(:,2); % Los datos de presión en saturación es la columna 2 de matriz SAT
Hf=SAT(:,3); % Los datos de entalpía de líquido saturado es la columna 3 de matriz SAT
Hg=SAT(:,4); % Los datos de entalpía de vapor saturado es la columna 4 de matriz SAT
Sf=SAT(:,5); % Los datos de entropía de líquido saturado es la columna 5 de matriz SAT
Sg=SAT(:,6); % Los datos de entropía de vapor saturado es la columna 1 de matriz SAT
Tx=Hscal(1,:); % Los datos de temperatura en sobrecalentamiento es la fila 1 de matriz Hscal
Py=Hscal(:,1); % Los datos de presión en sobrecalentamiento es la columna 1 de matriz
Tx(1)=[];Py(1)=[]; % Elimina los primeros elementos (vacíos) de los vectores Tx y Py
Hscal(1,:)=[];Hscal(:,1)=[]; % Elimina la fila 1 y columna 1 de la matriz Hscal
Sscal(1,:)=[];Sscal(:,1)=[]; % Elimina la fila 1 y columna 1 de la matriz Sscal
a=max(find(Py<P)); % Busca la posición de los valores mayores y menores próximos a P
p1=Py(a); % Asigna el dato de presión menor a P
p2=Py(a+1); % Asigna el dato de presión mayor a P
s1=Sscal(a,:); % Lee la serie de datos de entropía a presiones menores que P
s2=Sscal(a+1,:); % Lee la serie de datos de entropía a presiones mayores que P
h1=Hscal(a,:); % Lee la serie de datos de entalpía a presiones menores que P
h2=Hscal(a+1,:); % Lee la serie de datos de entalpía a presiones mayores que P
lim=min(find(Tx>Tlim)); % Lee la posición de la temperatura límite de la serie
```



```

T=Tx(1:lim);           % Asigna datos de temperatura hasta la temperatura límite
Sa=s1(1:lim);         % Asigna datos de entropía < P hasta la temperatura límite
Sb=s2(1:lim);         % Asigna datos de entropía > P hasta la temperatura límite
Ha=h1(1:lim);         % Asigna datos de entalpía < P hasta la temperatura límite
Hb=h2(1:lim);         % Asigna datos de entalpía > P hasta la temperatura límite
M=[T;Ha;Hb;Sa;Sb];   % Agrupa los datos en la matriz M

v=max([length(find(Sa==0)) length(find(Sb==0))]); % Busca valores nulos y posición en la tabla
M(:,[1:v])=[];       % Elimina las columnas con valores nulos en la matriz M
Hx=interp1([p1;p2],[M(2,:);M(3,:),P]); % Interpola serie de datos de entalpía a la presión P
Sx=interp1([p1;p2],[M(4,:);M(5,:),P]); % Interpola serie de datos de entropía a la presión P

if H<Hx                % Evalúa si el dato de entalpía es menor que la serie
    a=max(find(Pxs<P)); % Busca la posición de los valores cercanos a P
    Po=Pxs([a-20:a+20]); % Crea vector con presiones menores y mayores próximos a P
    To=Txs([a-20:a+20]); % Crea vector con temperaturas menores y mayores próximos a P
    SG=Sg([a-20:a+20]); % Crea vector con entropía de vapor menores y mayores próximos a P
    SF=Sf([a-20:a+20]); % Crea vector con entropía de líquido menores y mayores próximos a P
    HF=Hf([a-20:a+20]); % Crea vector con entalpía de líquido menores y mayores próximos a P
    HG=Hg([a-20:a+20]); % Crea vector con entalpía de vapor menores y mayores próximos a P

    % Calcula la calidad del vapor dado un valor de entalpía de vapor húmedo
    X=(H-interp1(Po,HF,P))/(interp1(Po,HG,P)-interp1(Po,HF,P));
    S=X*interp1(Po,SG,P)+(1-X)*interp1(Po,SF,P); % Calcula la entropía de mezcla
    T=interp1(Po,To,P); % Interpola el dato de temperatura
    Est='Vap. Humedo'; % Almacena el estado del vapor

else
    T=interp1(Hx,M(1,:),H,'spline'); % Interpola el dato de temperatura
    S=interp1(M(1,:),Sx,T,'spline'); % Interpola el dato de entropía
    X=1; % Define calidad como 100% vapor
    Est='Sobrecalentado'; % Almacena el estado del vapor
end

```

### Anexo A.3 Programa principal de simulación de Planta de Potencia de Vapor

```
% Llama a la variable global que almacena al sistema de unidades seleccionado
global UNIT
% Hace la selección de tablas de vapor en hoja de cálculo en Excel según el sistema de
unidades
switch UNIT
    case 'S.I.',
        M=xlsread('TVP.xls','Saturado SI'); % Asigna datos de Saturación a la matriz M en S.I.
        HLC=xlsread('TVP.xls','liqcomp SI'); % Asigna datos de Líquido comprimido a la matriz
HLC
        f=1000; % factor de conversión de cm3 a m3
    case 'Ingles',
        M=xlsread('TVP.xls','Saturado ENG');
        HLC=xlsread('TVP.xls','liqcomp ENG');
        f=778/144; % factor de conversión a unidades de energía y plg2. a ft2
end
P1=P5; % La presión de entrada a la bomba es la presión de salida de sec. V de la turbina
P2=Po; % La presión de salida a la bomba es la presión de entrada de sec. I de la turbina
Ts=M(:,1); % La temperatura de saturación es la columna 1 de la matriz M
Ps=M(:,2); % La presión de saturación es la columna 2 de la matriz M
Hs=M(:,3); % La entalpía de líquido saturado es la columna 3 de la matriz M
Vs=M(:,7); % El volumen de líquido saturado es la columna 7 de la matriz M
a=max(find(Ps<P1)); % Busca la posición de la presión de saturación cercana a P1
Hb1=interp1(Ps(a-10:a+10),Hs(a-10:a+10),P1,'cubic'); %Interpola entalp de sat. P1 en el rango
Tb1=interp1(Ps(a-10:a+10),Ts(a-10:a+10),P1,'cubic'); %Interpola temp de saturación a P1
V=interp1(Ps(a-10:a+10),Vs(a-10:a+10),P1,'cubic'); % Interpola volumen de liq. saturado a P1
Wsb=(V*(P2-P1))/f; % Calcula el trabajo de bomba a entropía constante
DH=Wsb/nb;Wb=DH; %Calcula el cambio de entalp real del agua y asigna al trabajo de bomba
Hb2=Hb1+DH; % Calcula la entalpía real de salida
Plc=HLC(:,1);Plc(1)=[]; % La presión del liq. comprimido es la columna 1 de matriz HLC y
elimina % el primer elemento (vacío) de la columna
Tlc=HLC(1,:);Tlc(1)=[]; % La temperatura del líquido comprimido es la fila 1 de la matriz HLC
HLC(1,:)=[];HLC(:,1)=[]; % Elimina la fila 1 y columna 1 de la matriz HCL quedando solo datos
de entalpía
```

```

a=max(find(Plc<P2)); % Busca la posición de la presión de liq. comp. cercana a P2
Hx=interp1(Plc(a:a+1),HLC([a:a+1],:),P2,'cubic'); % Interpola datos de entalp en un rango a P2
b=min(find(Hx==0)); % Busca elementos vacíos en datos de entalpía encontrados
Tb2=interp1(Hx(1:b),Tlc(1:b),Hb2); % Interpola el dato de temperatura a la entalpía de salida
DTb=Tb2-Tb1; % Calcula el incremento de temperatura del agua en la bomba

```

### %CALENTADORES

%temperaturas de saturación en calentadores

```
Tsat=[Tempsat(P(2)) Tempsat(P(3)) Tempsat(P(4)) Tempsat(P(5)) Tempsat(P(6))];
```

%temperatura a la salida de la bomba

```
Tsb=Tsat(5)+DTb;
```

%incremento de temperatura en calentadores

```
DT=(Tecal-Tsb)/4;
```

%temperatura a la entrada de los calentadores

```
Tec=[Tecal (Tsb+3*DT) (Tsb+2*DT) (Tsb+DT) Tsb];
```

%entalpía de saturación de flujo extraído a la salida de los calentadores

```
Hsat=[EntalfSat(Tsat(1)) EntalfSat(Tsat(2)) EntalfSat(Tsat(3)) EntalfSat(Tsat(4))];
```

%entalpía del agua de alimentación (líquido comprimido) a la salida de los calentadores

```
Hec=HLiqComp(P(1),Tec);
```

### %% CALDERA

```
H1=Hec(1); % Lectura del valor de entalpía de entrada = salida del calentador 1
```

```
Ho=EntalPT(P(1),Tscal); % Lectura del valor de entalpía de salida (vapor sobrecalentado)
```

```
Q=(H2-H1); % Calculo del calor suministrado en caldera
```

```
So=EntroPT(P(1),Tscal); % Cálculo de la entropía de salida de la caldera
```

### %%%% Turbina seccion: I

```
F1= 1 % Se toma como base de cálculo 1 Kg. de vapor a la entrada de la turbina
```

```
H1=Ho; % Se designa como entalpía de entrada el valor de entalpía de salida de la caldera
```

```
S1=So; % Se designa como entropía de entrada el valor de entropía de salida de la caldera
```

```
S2=S1; % Se realiza el cálculo para un proceso de expansión isentrópica
```

```
H2=EntalPS(P(2),S2,Tscal); % Se calcula la entalpía isentrópica de salida a S2 y P2
```

```
DHs=H2-H1; % Se calcula el cambio de entalpía isentrópica
```

```
W=nt*DHs*F1; % Cálculo del trabajo producido por la sección con el dato de eficiencia
```

```
H2=H1+W; % Se calcula la entalpía real de salida de la sección
```

% Se determinan los valores de temperatura, entropía, calidad y estado del vapor a la salida de la sección de turbina:

[T2 S2 X Est]=EntroTempPSH(P(2),Tscal,H2);

%%Calentador : 1

n=1; % Número de calentador

f1=0; % No hay entrada de líquido saturado de un calentador precedente

m=(f1\*(h1-Hsat(1))-LC\*(Hec(1)-Hec(2)))/(Hsat(1)-H2); % Vapor extraído de la sección de turbina

F1=F1-m; % Alimentación de vapor a la siguiente sección de turbina

f1=f1+m;h1=Hsat(1); % Valores de líquido saturado y su entalpía para calentador 2.

ms(n)= m; % Almacenamiento de valor de "m" en vector "ms"

% Cálculo del trabajo total producido por las secciones de turbina

Wp=sum(Ws);

% Trabajo neto producido por el ciclo = trabajo total + trabajo de bomba

Wnet=sum(Ws)+Wb;

% Cálculo de la eficiencia térmica del ciclo termodinámico

nc=abs(Wnet)/Q;

% Velocidad del flujo de vapor a la entrada de la turbina para la producción de energía estimada

mo=(-POT)/(sum(Ws)-Wb);

% Flujos de vapor extraídos de cada sección de turbina

mst=[ms F1].\*mo;

% Velocidad de transferencia de calor en la caldera

Qcal=mo\*Q;

% Velocidad de transferencia de calor en el condensador

Qcon=-Qcal-(-POT);

% Flujo de agua de enfriamiento en el condensador

me=((Hb1-Hst(5))/Qcon)\*mo;

#### A.4 Codificación de diagrama Temperatura-Entropía (T-S)

##### % Asignacion de propiedades a figura

```
h1 = figure(...  
'PaperUnits',get(0,'defaultfigurePaperUnits'),...  
'Color',[0.87843137254902 0.874509803921569 0.890196078431373],...  
'Colormap',get(0,'defaultfigureColormap'),...  
'InvertHardcopy',get(0,'defaultfigureInvertHardcopy'),...  
'MenuBar','none',...  
'Name','Modulo de Termodinamica I: Ciclo de Regenerativo de Rankine',...  
'NumberTitle','off',...  
'PaperPosition',[0.6345175 6.345175 20.30456 15.22842],...  
'PaperSize',[20.98404194812 29.67743169791],...  
'PaperType',get(0,'defaultfigurePaperType'),...  
'Position',[95 75 848 579],...  
'Resize','off');
```

```
global UNIT %Lectura de variable global de unidades
```

```
switch UNIT, %Seleccion de sistema de unidades
```

```
case 'S.I.',
```

```
SA=xlsread('TVP.xls','Saturado SI'); %Asignacion de saturacion a matriz SA
```

```
SSC=xlsread('TVP.xls','SSobrecal SI'); %Asignacion de sobrecalentamiento a matriz
```

```
C=xlsread('TVP.xls','SLicomp SI'); %Asignacion de comprimido a matriz C
```

```
US=' kJ/ kg K'; UT=' K'; %Etiquetas de unidades
```

```
ax=[0 9 250 850]; %Valores min. y max. de ejes
```

```
tx=[0.75 3.75 3.85 8.2]; %coordenadas para viñetas
```

```
case 'Ingles',
```

```
SA=xlsread('TVP.xls','Saturado ENG');
```

```
SSC=xlsread('TVP.xls','SSobrecal ENG');
```

```
C=xlsread('TVP.xls','SLicomp ENG');
```

```
US=' BTU/lb °R'; UT=' °F';
```

```
ax=[0.05 St(5)+0.35 Tst(5)-50 Tscal+50];
```

```
tx=[0.2 0.9 0.925 ax(2)-0.15];
```

```
end
```

##### % Lectura de datos generados en simulacion

```
Tsa=SA(:,1);Psa=SA(:,2);Tc=C(1,2:9);Pc=C(2:10,1);Tsc=SSC(1,2:length(SSC(1,:)));Psc=SSC(2  
:length(SSC(:,1)),1);
```

```
C(1,:)=[];C(:,1)=[];SSC(1,:)=[];SSC(:,1)=[];
```

```

SL=SA(:,5); % Entropia de liquido saturado = datos de columna 5 de matriz SA
SG=SA(:,6); % Entropia de vapor saturado = datos de columna 6 de matriz SA
Tts=[Tscal Tst]; % Datos de temperatura a la entrada y salida de secciones de turbina
Sst=[So St]; % Datos de entropia a la entrada y salida de secciones de turbina
S=interp2(Tc,Pc,C,Tec,Po); % Interpolacion de datos de entropia de liquido comprimido

plot(SL,Tsa,SG,Tsa) % Grafico de curvas de equilibrio de saturacion
title('CICLO REGENERATIVO DE RANKINE DE PLANTA DE POTENCIA DE VAPOR') % titulo
de %grafico
xlabel(['ENTROPIA S ' US]),ylabel(['TEMPERATURA T ' UT]) % Etiquetado de ejes
axis(ax) % Ajuste de ejes
hold on % Grafico estatico

% Interpolacion de datos de saturacion a las presiones de entrada y salida
% de cada seccion de turbina
for i=1:6
    Tgo(i)=TempSat(P(i));
    a=min(find(Psa>P(i)));
    Sgo(i)=interp1(Tsa(a-10:a+10),SG(a-10:a+10),Tgo(i));
    Sl(i)=interp1(Tsa(a-10:a+10),SL(a-10:a+10),Tgo(i));
end

vph=length(find(Xs<1)); % Identificacion de secciones con salida de vapor humedo
n=6-vph;
% Grafico de isobaras para cada seccion de turbina
for i=1:n
    if Sst(i)>Sgo(i)
        Ta=linspace(Tgo(i),Tts(i),50);
        Sa=interp2(Tsc,Psc,SSC,Ta,P(i));
        x=find(Sa>Sgo(i));
        y=Ta(min(x)+1:max(x));
        x=Sa(min(x)+1:max(x));
        yi=linspace(Tgo(i),Tts(i),100);
        xi=interp1(y,x,yi,'cubic');
        plot(xi,yi,[Sgo(i) min(xi)],[Tgo(i) min(yi)],'b')
    end
end

```

```

% Grafico de cambio de fase en caldera y calentadores
for i=1:n
    plot(Sgo(i),Tgo(i),'*r');
    plot([Sgo(i) SI(i)],[Tgo(i) Tgo(i)],['k' '--'])
end

% Grafico de linea de entropia creciente
for i=1:6
    plot(Sst(i),Tts(i),'*r');
end

% Grafico de curva de liquido comprimido a través de calentadores
plot([SI(1) S(1)],[Tgo(1) Tec(1)],'r')
plot(S,Tec,['r' '-*']);
plot([Sst(6) S(5)],[Tec(5) Tec(5)],['k' '--'])
plot(Sst,Tts)
% Etiquetado de unidades de operación
text(tx(4)-0.05,Tts(1),'TURBINA');text(tx(3),Tgo(1)+14,'CALDERA')
text(tx(1),Tts(6)-10,'BOMBA')
text(tx(3),Tts(6)-10,'CONDENSADOR')
for i=1:5
    N=num2str(i);
    text(tx(4),Tts(i+1),['Sec.' N])
end
for i=1:4
    N=num2str(i);
    text(tx(2),Tgo(i+1)+14,['Calentador ' N])
end

```

## B.1 Funciones creadas para simulación del proceso

- Función  $PTX(T,P)$

% Esta función da como resultado la composición de una solución de amoníaco-agua a  
% una presión y temperatura dados

```
function X=PTX(T,P)
```

```
global UNIT % Declara valor de variable global
```

```
switch UNIT % Selecciona valor de unidades
```

```
case 'S.I.',
```

```
DAT=xlsread('Tablas amoniaco','PTX SI'); % Asigna datos a matriz DAT
```

```
case 'Ingles',
```

```
DAT=xlsread('Tablas amoniaco','PTX ENG');
```

```
end
```

```
Tx=DAT(2:23,1); % Asigna los valores de temperatura a vector Tx
```

```
Xx=DAT(1,2:20); % Asigna los datos de composición a vector Xx
```

```
DAT(1,:)=[];DAT(:,1)=[]; %Elimina fila 1 y columna 1 de matriz DAT
```

```
a=min(find(Tx>T)); %Busca posición de temperatura mayores a T
```

```
b=min(find(Px>P)); %Busca posición de temperatura mayores a P
```

```
Px=interp1([Tx(a-1) Tx(a)],[DAT(a-1,:);DAT(a,:)],T,'spline'); %Interpola Presión
```

```
X=interp1(Px(1:b),Xx(1:b),P); %Interpola composición
```

- Función  $DENS(T,X)$

% Función que da como resultado la densidad de una solución de amoníaco-agua a  
% una temperatura y composición dadas

```
function d=DENS(T,X)
```

```
global UNIT % Declara valor de variable global
```

```
switch UNIT % Selecciona valor de unidades
```

```
case 'S.I.',
```

```
D=xlsread('Tablas amoniaco','Densidad SI'); % Asigna datos a matriz D
```

```
case 'Ingles',
```

```
D=xlsread('Tablas amoniaco','Densidad ENG');
```

```
end
```

```
Xd=D(2:21,1); %Asigna los valores de composicion al vector Xd
```

```
Td=D(1,2:8); %Asigna los valor de temperatura al vector Td
```

```
D(:,1)=[];D(1,:)=[]; % Elimina fila 1 y columna 1 de matriz D
```

```
d=interp2(Td,Xd,D,T,X*100); %Interpola el valor de densidad a T,X
```



- Función HSCAL(T,P)
  - % Función que da como resultado la entalpía de vapor sobrecalentado de amoníaco
  - % a una presión y temperatura dada
  - function H=HSCAL(T,P)
  - global UNIT % Declara valor de variable global
  - switch UNIT % Selecciona valor de unidades
    - case 'S.I.',
      - HSC=xlsread('Tablas amoniaco','HScal SI');% Asigna datos a matriz HSC
    - case 'Ingles',
      - HSC=xlsread('Tablas amoniaco','HScal ENG');
  - end
  - Py=HSC(2:21,1); % Asigna los valores de presión a vector Py
  - Tx=HSC(1,2:16); % Asigna los datos de temperatura a vector Tx
  - HSC(:,1)=[];HSC(1,:)=[]; %Elimina fila 1 y columna 1 de matriz HSC
  - x=min(find(Tx>T)); %Busca posición de temperatura mayores a T
  - y=min(find(Py>P)); %Busca posición de presión mayores a P
  - H=interp2(Tx(x-1:x+1),Py(y-1:y+1),HSC([y-1:y+1],[x-1:x+1]),T,P); % Interpola entalpía

- Función ENTALX(X,T)
  - % Función que da como resultado la entalpía de solución de amoníaco a una
  - % concentración y temperatura dada. Trabaja con una base de datos leídos de la
  - % gráfica de Entalpía-Concentración de Hougen-Watson
  - function H=ENTALX(Xx,Tx)
  - global UNIT % Declara valor de variable global de unidades
  - X=xlsread('TABLA HX','X'); % Lee datos de composición de hoja de cálculo
  - switch UNIT % Selecciona valor de unidades
    - case 'S.I.',
      - H=xlsread('TABLA HX','H SI'); % Lee datos de entalpía de hoja de cálculo
    - case 'Ingles',
      - H=xlsread('TABLA HX','H ENG');
  - end
  - T=X(1,:); % Asigna datos de temperatura a vector T
  - X(1,:)=[];H(1,:)=[]; % Elimina fila 1 de matrices X y H
  - a=max(find(T>Tx)); % Busca posición de datos de temperatura
  - H1=interp1(X(:,a),H(:,a),Xx,'cubic'); % Lee datos de entalpía a > Tx
  - H2=interp1(X(:,a+1),H(:,a+1),Xx,'cubic'); % Lee datos de entalpía a < Tx
  - H=interp1([T(:,a) T(:,a+1)],[H1 H2],Tx,'cubic'); % Interpola datos a Tx

## B.2 Programa principal de simulación de sistema de refrigeración por absorción de amoníaco.

```
h = waitbar(0,'Ejecutando simulacion...');
global UNIT
switch UNIT % Selecciona valor de unidades
    case 'S.I.',
        SAT=xlsread('Tablas amoniaco','Saturado SI');
        Fd=1000;Fe=1;
    case 'Ingles',
        SAT=xlsread('Tablas amoniaco','Saturado ENG');
        Fd=62.3;Fe=144/778;
end
n=1;
Tc=str2num(get(tc,'string'));
Ta=str2num(get(te,'string'));
Te=str2num(get(tr,'string'));
Td=str2num(get(ta,'string'));
Qe=str2num(get(qe,'string'));

% Presion a saturacion en regenerador y absorbedor
Pd=interp1(SAT(:,1),SAT(:,2),Td,'spline');
Pa=interp1(SAT(:,1),SAT(:,2),Ta,'spline');
dPb=Pd-Pa,
dPv=-dPb;

% Concentracion de solucion fuerte que deja el absorbedor
XG=PTX(Td,Pa)/100;
% Concentracion de la solucion debil que deja el regenerador
XE=PTX(Te,Pd)/100;
waitbar(n/6,h);
% Entalpias de soluciones debil y fuerte
He=ENTALX(XE,Te);
Hg=ENTALX(XG,Td);
%%EVAPORADOR
% Entalpia a la entrada del evaporador
Hd=interp1(SAT(:,1),SAT(:,3),Tc,'spline');
% Entalpia a la salida del evaporador
Ha=interp1(SAT(:,1),SAT(:,4),Ta,'spline');
```

```

% Razon de circulacion de amoniaco en evaporador
m=Qe/(Ha-Hd);
n=n+1;
waitbar(n/6,h);
%%%%%ABSORBEDOR
% Balance de materia en el absorbedor
A=[XG -XE;1 -1];
c=[m;m];
s=A\c;x=s(1);y=s(2);
Qa=x*Hg-m*Ha-y*He;
n=n+1;
waitbar(n/6,h);
%%%%%BOMBA
%Calculando el trabajo de bomba
d=DENS(Td,XG);
Ws=((x/(Fd*d))*(Pd-Pa)*Fe);
DH=Ws/x;
Hf=Hg-DH;
n=n+1;
waitbar(n/6,h);
%%%%%CONDENSADOR
%Determinando el calor removido en el condensador
Hc=interp1(SAT(:,1),SAT(:,3),Tc);
Hb=HSCAL(Te,Pd);
Qc=m*(Hc-Hb);
n=n+1;
waitbar(n/6,h);
%%%%%REGENERADOR
%Realizando balance de energia en regenerador
Qr=y*He+m*Hb-x*Hf;

%%%%%CICLO
%Eficiencia del ciclo de refrigeracion
nc=1-((Td-32)/1.8+273.15)/((Te-32)/1.8+273.15);
% Calor minimo requerido en regeneracion
Qm=abs(Qc)*(Te/(Te-Td))*(Td-Ta)/Ta;
%Balance global de energia
%Energia de entrada:
Qen=Qr+Qe+Ws/778.158

```

%Energia de salida

Qsal=Qc+Qa;

n=n+1;

waitbar(n/6,h);

pause(1)

close(h)

warndlg('Simulacion finalizada con exito!!!','');

pause(3)

RESULT02(nc,Qm,m,x,y,XE,XG,Pd,Pa,Tc,Ta,Te,Td,Qe,Qr,Qa,Qc,dPb,dPv,Ws)

## C.1 Funciones creadas para simulación del proceso de licuefacción de gases

○ Función HVaporiz(Cv1, Cv2, Cv3, Cv4, T, Tc)

% Funcion que calcula el calor de vaporización para una especie dada

function Hv=HVaporiz(Cv1,Cv2,Cv3,Cv4,T,Tc);

Tr=T./Tc; % Temperatura reducida

Hv=(Cv1.\*(1-Tr).^(Cv2+Cv3.\*Tr+Cv4.\*Tr.^2))./1000;

○ Función HrKwong(P, V, T, R, Tc, Pc)

% Función que calcula el valor de la entalpía residual para una especie dado T y P

function Hr=HrKwong(P,V,T,R,Tc,Pc)

a=(0.42748\*(R.^2)\*(Tc.^2.5))/Pc; % constantes de ecuacion Redlich-Kwong

b=0.08664\*R\*Tc/Pc;

Hr=-(R.\*T-P.\*V+R/(log(V-b))+3\*a.\*log((V+b)./V))./(2\*b.\*T.^(1/2)));

○ Función RKwongV(P, T, Pc, R)

% Función RKwongV(P,T,Pc,Tc,R) que calcula el volumen

% del gas/vapor a partir de la ecuación de estado de

% Redlich Kwong, para una serie de T y P

function V=RKwongV(P,T,Pc,Tc,R)

a=(0.42748\*(R.^2)\*(Tc.^2.5))/Pc;

b=0.08664\*R\*Tc/Pc;

x=sym('x');

n=length(P);V=[];

for i=1:n

eq=x.^3-(R.\*T(i).\*x.^2)./P(i)-(b.^2+b.\*R.\*T(i)./P(i)-a./(P(i).\*T(i).^(1/2))).\*x-...

a.\*b./(P(i).\*T(i).^(1/2)));

y=vpa(eq,5);

r=roots(sym2poly(y));

V(i)=real(r(1));

end

○ Función ICPH(P, T, Pc, R)

%Esta función evalúa el cambio de entalpía ideal a,b,c,d : ctes. de Cp Smith Van Ness  
 %To, T límites de temperatura en [K] Valor de constante de gases R define las unidades de DH

```
function dH=ICPH(a,b,c,d,To,T,R)
tao=T./To;
MCPH=a+(b/2).*To.*(tao+1)+(c/3).*To^2.*(tao.^2+tao+1)+d./(tao.*To^2);
dH=MCPH.*(T-To).*R;
```

○ Función ICPH(P, T, Pc, R)

% Función que evalúa el valor de la capacidad calorífica promedio en función del  
 % cambio de entropía ideal

```
function DS=MCPS(A,B,C,D,T,To)
tao=T./To;
DS=A+(B.*To+(C.*To.^2+D./((tao.^2).*To.^2)).*((tao+1)./2)).*((tao-1)./log(tao));
```

○ Función compresor(T1,P1,P2,nc,A,B,C,D)

% Función que calcula la temperatura de descarga y el trabajo suministrado a un  
 % compresor

```
function [T2,Ws]=compresor(T1,P1,P2,nc,A,B,C,D)
T2=[T1+1:T1+300];
DS=MCPS(A,B,C,D,T2,T1);
DIF=T1.*(P2/P1).^(1./DS)-T2;
T2o=interp1(DIF,T2,0);
DH=ICPH(A,B,C,D,T1,T2o,8.3145)
Ws=DH/nc;
T2=[T2o+1:T2o+200];
DIF=ICPH(A,B,C,D,T1,T2,8.3145)-Ws;
T2=interp1(DIF,T2,0);
```

**C.2 Programa principal de simulación del proceso de licuefacción de gases**

```
h = waitbar(0,'Ejecutando simulacion...');
% Lista de especies posibles para el proceso
esp={'CH4' 'C2H6' 'C3H8' 'C4H10' 'C2H4' 'C3H6' 'C2H2' 'H2' 'O2' 'N2' 'CO2'};

% Lectura de propiedades termodinamicas en hoja de calculo de Excel
CP=xlsread('DATA.xls','CP');
PCT=xlsread('DATA.xls','CRITICOS');
CV=xlsread('DATA.xls','HVAP');
% Lectura de valores introducidos en ventana
T1=str2num(get(t1,'string'));
```

```

T10=str2num(get(t10,'string'));
T5=str2num(get(t5,'string'));
T8=str2num(get(t8,'string'));
P1=str2num(get(p1,'string'))*101325;
P4=str2num(get(p4,'string'))*101325;
P7=str2num(get(p7,'string'))*101325;
Nc1=str2num(get(nc1,'string'))/100;
Nc2=str2num(get(nc2,'string'))/100;
% Variable global que almacena la formula de la especie
global comp
A=0;
% Búsqueda de especie en lista y lectura de su correspondientes propiedades
for i=1:11
    if isequal(strvcat(esp(i)),comp)
        A=CP(i,1); B=CP(i,2); C=CP(i,3); D=CP(i,4);
        Tc=PCT(i,1); Pc=PCT(i,2); Vc=PCT(i,3); R=8.3145; w=PCT(i,4);
        Cv1=CV(i,1); Cv2=CV(i,2);Cv3=CV(i,3);Cv4=CV(i,4);
    end
end
if A==0
    errordlg('No se encuentra la especie!!!')
    return
end
n=1;
waitbar(n/6,h);
% Propiedades a condiciones de referencia
To=150;
H8=0;
% Calculando el calor de vaporización
Hv=HVaporiz(Cv1,Cv2,Cv3,Cv4, T8,Tc);
% Volumen de gas de a condiciones de referencia
Vg8=RKwongV(P7, T8,Pc, Tc,R);
% Propiedades Residuales a condiciones de referencia
Hr8=HrKwong(P7,Vg8, T8,R, Tc,Pc);
% Volumen de gas de corriente 5
Vg5=RKwongV(P4, T5,Pc, Tc,R);
% Propiedades Residuales de corriente 5
Hr5=HrKwong(P4,Vg5, T5,R, Tc,Pc);

```

```

% Volumen de gas de corriente 10
Vg10=RKwongV(P7,T10,Pc,Tc,R);
% Propiedades Residuales de corriente 10
Hr10=HrKwong(P7,Vg10,T10,R,Tc,Pc);
n=n+1; waitbar(n/6,h);
% Valores de entalpía real a partir de sus valores residuales e ideales respecto a la referencia
H5=Hr5+ICPH(A,B,C,D,To,T5,R)-Hr8+Hv;
H10=Hv-Hr8+ICPH(A,B,C,D,To,T10,R)+Hr10;
H9=Hv;
% Cálculo de fracción licuada del gas
Y8=(H5-H10)/(H8-H10)
H6=H8*Y8+H9*(1-Y8);
Do=H6+Hr8-Hv;
% Cálculo del valor de la temperatura de corriente 6
T6=[T8:T5];
E=[];
for i=1:length(T6)
    % Volumen de gas
    Vg6=RKwongV(P4,T6(i),Pc,Tc,R);
    % Propiedades Residuales
    D=HrKwong(P4,Vg6,T6(i),R,Tc,Pc)+ICPH(A,B,C,D,To,T6(i),R);
    E(i)=D-Do;
end
n=n+1;waitbar(n/6,h);
T6=interp1(E,T6,0,'cubic');
% Calor transferido en enfriador
Q=H5-H6
% Condiciones de salida de Compresor 1
[T2,Ws1]=compresor(T1,P1,P7,Nc1,A,B,C,D)
% Mezcla de corrientes de gases
Vg1=RKwongV(P1,T1,Pc,Tc,R);
Hr1=HrKwong(P1,Vg1,T1,R,Tc,Pc);
H1=Hr1+ICPH(A,B,C,D,To,T1,R)-Hr8+Hv
H2=Ws1+H1;
n=n+1;waitbar(n/6,h);
% Balance de energía en el mezclador
H3=Y8*H2+(1-Y8)*H10;
if T2>T10
    T3=[T10:5:T2];
else

```

```

T3=[T2:5:10];
end

Vg3=RKwongV(P7,T3,Pc,Tc,R);
Hr3=HrKwong(P7,Vg3,T3,R,Tc,Pc);
H3o=Hr3+ICPH(A,B,C,D,To,T3,R)-Hr8+Hv;

%Temperatura resultante de mezcla de gases
T3=interp1(H3-H3o,T3,0,'cubic')
n=n+1;waitbar(n/6,h);
% Condiciones de salida de Compresor 2
[T4,Ws2]=compresor(T3,P7,P4,Nc2,A,B,C,D)

Vg4=RKwongV(P4,T4,Pc,Tc,R);
Hr4=HrKwong(P4,Vg4,T4,R,Tc,Pc);
H4=Hr4+ICPH(A,B,C,D,To,T4,R)-Hr8+Hv;
n=n+1;waitbar(n/6,h);

Vg5=RKwongV(P7,T5,Pc,Tc,R);
Hr5=HrKwong(P7,Vg5,T5,R,Tc,Pc);
H5=Hr5+ICPH(A,B,C,D,To,T5,R)-Hr8+Hv;
%Calor removido en preenfriador
Qr=H5-H4
n=n+1;waitbar(n/6,h);
close(h)
warndlg('Simulación finalizada con éxito!!!','');
pause(3)

```

## D.1 Funciones creadas para simulación de proceso de Evaporación Instantánea

- *Función ANTOINE*

% función que calcula la presión de vapor de una especie i a una T dada

**function** Po=ANTOINE(A,B,C,T)

Po=exp(A-B/(T+C));                   % Ecuación de Antoine

- *Función IDEAL*

% Funcion que calcula el cambio de entalpia ideal

**function** DHgi=IDEAL(a,b,c,d,To,Ti)

T=sym('T');                                   % Variable simbolica

DHgi=numeric(int(a+b\*T+c\*T^2+d\*T^3,To,Ti))/1000; % Integracion de ecuacion de Cp



○ *Función MCPS*

% Funcion que calcula el Cp medio como funcion de la entropia

`function` CPs=MCPS(a,b,c,d,To,Ti)

T=sym('T'); % Variable simbolica

CPs=(numeric(int((a+b\*T+c\*T^2+d\*T^3)/T,To,Ti)))/log(Ti/To); % Integracion de ec. dS

○ *Función Residual\_i*

% Funcion que calcula la entalpia residual para una especie i

`function` Hr=Residual\_i(P,T,Pc,Tc)

R=8314;P=P\*100;Pc=Pc\*100;

a=(0.42748\*(R.^2)\*(Tc.^2.5))./Pc; % parametros de ecuacion de Redlich Kwong

b=0.08664\*R\*Tc/Pc;

x=sym('x');

eq=x.^3-(R.\*T.\*x.^2)./P-(b.^2+b.\*R.\*T./P-a./(P.\*T.^(1/2))).\*x-...

a.\*b./(P.\*T.^(1/2)); % Ec. Redlich Kwong en forma polinomial

y=vpa(eq,5);

r=roots(sym2poly(y)); % Raices del polinomio

V=real(r(1)); % Valor de volumen de gas

Hr=-(R.\*T-P.\*V+R/(log(V-b))+3\*a.\*log((V+b)./V)./(2\*b.\*T.^(1/2))); % Ec. H residual

○ *Función Residual\_ij*

% Funcion que calcula la entalpia residual para un sistema binario ij

% utilizando la correlacion de Wilson

`function` Hr=Residual\_ij(V1,V2,a12,a21,T)

Tr=sym('Tr');

x2=1-x1;

Rr=8.3145;

A12=(V2/V1)\*exp(-a12/(Rr\*Tr)); % Parametros de ec. Wilson

A21=(V1/V2)\*exp(-a21/(Rr\*Tr));

F=-x1\*log(x1+x2\*A12)-x2\*log(x2+x1\*A21); % Ec. Wilson para Ge/RT

Hr=subs(diff(F,Tr)\*Rr\*Tr^2,'Tr',T)/1000 % Entalpia residual

○ *Función virial*

% Funcion que calcula el segundo coeficiente virial para una especie i

**function** B=virial(Tc,Pc,w,T,R)

Tr=T/Tc; % Temperatura reducida

Bo=0.083-(0.422/(Tr<sup>1.6</sup>));

B1=0.139-(0.172/(Tr<sup>4.2</sup>));

B=(R\*Tc/Pc)\*(Bo+w\*B1); % Segundo coeficiente virial

○ *Función virial\_ij*

% Funcion que calcula el segundo coeficiente virial para

% un sistema binario ij

**function** Bij=virial\_ij(Tci,Pci,Tcj,Pcj,wi,wj,Vci,Vcj,Zci,Zcj,T,R)

wij=(wi+wj)/2; % Factor acentrico para sistema binario

Tcij=(Tci\*Tcj)<sup>(1/2)</sup>; % Temperatura critica para sistema binario

Zcij=(Zci+Zcj)/2; % Factor de compresividad para sistema binario

Vcij=((Vci<sup>(1/3)</sup>+Vcj<sup>(1/3)</sup>)/2)<sup>3</sup>; % Volumen critico para sistema binario

Pcij=Zcij\*R\*Tcij/Vcij; % Presion critica para sistema binario

Trij=T/Tcij; % Temperatura reducida para sistema binario

Bo=0.083-(0.422/(Trij<sup>1.6</sup>));

B1=0.139-(0.172/(Trij<sup>4.2</sup>));

Bij=(R\*Tcij/Pcij)\*(Bo+wij\*B1); % Segundo coeficiente virial para sistema binario

○ *Función WILSON*

% Funcion que da como resultado los coeficientes de actividad

% utilizando la correlacion de Wilson

**function** [gamma1,gamma2]=WILSON(x1,a12,a21,V1,V2,T,R)

A12=(V2/V1)\*exp(-a12/(R\*T)); % Parametros de ec. Wilson

A21=(V1/V2)\*exp(-a21/(R\*T));

x2=1-x1;

gamma1=exp(-log(x1+x2\*A12)+x2\*(A12/(x1+x2\*A12)-A21/(x2+x1\*A21))); % Ec. Wilson

gamma2=exp(-log(x2+x1\*A21)+x1\*(A21/(x2+x1\*A21)-A12/(x1+x2\*A12)));

## D.2 Programa principal de simulación de proceso de Evaporación Instantánea

%%% Programa principal de simulacion del proceso de evaporacion instantanea

% Lectura de propiedades en base de datos de las especies

IJ=xlsread('DATA.xls','Wilson');

PV=xlsread('DATA.xls','Antoine');

CP=xlsread('DATA.xls','CP');

VN=xlsread('DATA.xls','Criticos');

% Identificacion de especies i, j

```

i=VN(c(1),:);
j=VN(c(2),:);
% Lectura de parametros de ec. de Wilson
a12=IJ(sistema,3); a21=IJ(sistema,4);
V1=IJ(sistema,1); V2=IJ(sistema,2);
% Constantes de presion de vapor para cada especie
e1=PV(c(1),:);
e2=PV(c(2),:);
% Constantes de capacidad calorifica de cada especie
cpi=CP(c(1),:);
cpj=CP(c(2),:);
% Temperatura referencia de las especies
Tri=e1(4);Trj=e2(4);
% Temperatura y presion criticas de cada especie
Tci=VN(c(1),2);Pci=VN(c(1),3);
Tcj=VN(c(2),2);Pcj=VN(c(2),3);

%%%%%%%%%%
% Lectura de datos introducidos a simulacion
T=str2num(get(t1,'String'));
P1=str2num(get(p1,'String'))/100;
P2=str2num(get(p2,'String'))/100;
z1=str2num(get(z,'String'));
Q=str2num(get(q,'String'));

%%%%%%%%%%
P=P1;
R=83.14;Rg=1.987;
%%% Modulo del Calentador
% Entalpia a la entrada del calentador
H1=Residual_ij(V1,V2,a12,a21,T,z1)+z1*(-Residual_i(P,Tri,Pci,Tci)...
+IDEAL(cpi(1),cpi(2),cpi(3),cpi(4),Tri,T)...
+Residual_i(P,T,Pci,Tci))+(1-z1)*(-Residual_i(P,Trj,Pcj,Tcj)...
+IDEAL(cpj(1),cpj(2),cpj(3),cpj(4),Trj,T)+Residual_i(P,T,Pcj,Tcj));
% Entalpia de salida
H2=Q+H1;
Tx=[T:T+500];
To=T;
d=1;k=1;

```

% Iteracion de busqueda de temperatura de salida

```
while d>0;
    T1=Tx(k);
    T2=Tx(k+1);
    Ho1=Residual_ij(V1,V2,a12,a21,T1,z1)+z1*(-Residual_i(P,Tri,Pci,Tci)...
+ IDEAL(cpi(1),cpi(2),cpi(3),cpi(4),Tri,T1)...
+Residual_i(P,T1,Pci,Tci))+(1-z1)*(-Residual_i(P,Trj,Pcj,Tcj)...
+IDEAL(cpj(1),cpj(2),cpj(3),cpj(4),Trj,T1)+Residual_i(P,T1,Pcj,Tcj));...
    Ho2=Residual_ij(V1,V2,a12,a21,T2,z1)+z1*(-Residual_i(P,Tri,Pci,Tci)...
+IDEAL(cpi(1),cpi(2),cpi(3),cpi(4),Tri,T2)...
+Residual_i(P,T2,Pci,Tci))+(1-z1)*(-Residual_i(P,Trj,Pcj,Tcj)...
+IDEAL(cpj(1),cpj(2),cpj(3),cpj(4),Trj,T2)+Residual_i(P,T2,Pcj,Tcj));
    d=H2-Ho2;
    k=k+1;
    if k==500;
        return
    end
end
```

% Tempetarura a la salida del calentador

```
T2=interp1([H2-Ho1 H2-Ho2],[T1 T2],0);
```

%%% Modulo de Valvula de expansion

% Temperatura estimada a la salida

```
T3=T2-0.1;
```

```
d=1;
```

% Iteracion de busqueda de temperatura de salida

```
while d>0.001
    T3o=exp((log(P2/P1))/(z1*MCPS(cpi(1),cpi(2),cpi(3),cpi(4),T2,T3)...
+(1-z1)*(MCPS(cpj(1),cpj(2),cpj(3),cpj(4),T2,T3))))+log(T2));
    d=T3-T3o;
    T3=T3-0.1;
end
```

% Temperatura de salida

```
T3=(T3+T3o)/2;
```

%%% Modulo de Evaporador flash

```

% Condiciones a la entrada
T=T3; P=P2;
% Presion de saturacion de i,j
Po1=ANTOINE(e1(1),e1(2),e1(3),T)/100;
Po2=ANTOINE(e2(1),e2(2),e2(3),T)/100;
% Coeficientes viriales
B11=virial(i(2),i(3),i(1),T,R);
B22=virial(j(2),j(3),j(1),T,R);
B12=virial_ij(i(2),i(3),j(2),j(3),i(1),j(1),i(5),j(5),i(4),j(4),T,R);
d12=2*B12-B11-B22;
%%P ROCIO
y1=z1;y2=1-y1;
Pr=1/(y1/Po1+(1-y1)/Po2);
x1=y1*Pr/Po1;
x2=1-x1;
Fi1r=1;Fi2r=1;
[gamma1r,gamma2r]=WILSON(x1,a12,a21,V1,V2,T,Rg);
Pr=1/(y1*Fi1r/(gamma1r*Po1)+(1-y1)*Fi2r/(gamma2r*Po2));
D=1; n=1;
while abs(D)>0.001
    Fi1r=exp((B11*(Pr-Po1)+Pr*(y2^2)*d12)/(R*T));
    Fi2r=exp((B22*(Pr-Po1)+Pr*(y1^2)*d12)/(R*T));
    d=1;
    while d>0.001
        x1=y1*Pr*Fi1r/(gamma1r*Po1);
        x2=(1-y1)*Pr*Fi2r/(gamma2r*Po2);
        x1=x1/(x1+x2);
        gamma1ro=gamma1r;
        [gamma1r,gamma2r]=WILSON(x1,a12,a21,V1,V2,T,Rg);
        d=abs(gamma1ro-gamma1r);
    end
    Pi=Pr;
    Pr=1/(y1*Fi1r/(gamma1r*Po1)+(1-y1)*Fi2r/(gamma2r*Po2));
    D=abs(Pr-Pi);
    n=n+1;
    if n>10000
        warndlg('No coverage resultado!!!!')
        return
    end
end
end

```

```
%%% P BURBUJA
```

```
x1=z1;  
[gamma1b,gamma2b]=WILSON(x1,a12,a21,V1,V2,T,Rg);  
Pb=x1*gamma1b*Po1+(1-x1)*gamma2b*Po2;  
y1=x1*gamma1b*Po1/Pb;  
D=1;  
n=1;  
while D>0.01  
    y2=1-y1;  
    Fi1b=exp((B11*(Pb-Po1)+Pb*(y2^2)*d12)/(R*T));  
    Fi2b=exp((B22*(Pb-Po1)+Pb*(y1^2)*d12)/(R*T));  
    Pb=(x1*gamma1b*Po1/Fi1b)+((1-x1)*gamma2b*Po2/Fi2b);  
    yi=y1;  
    y1=x1*gamma1b*Po1/(Pb*Fi1b);  
    D=abs(yi-y1)/yi;  
    n=n+1;  
    if n>10000  
        warndlg('No coverage resultado!!!!')  
        return  
    end  
end  
end
```

```
% Evaporacion instantanea
```

```
if (P>Pr)&(P<Pb)  
    F=(P-Pr)/(Pb-Pr);  
    gamma1=gamma1r+(gamma1b-gamma1r)*F;  
    gamma2=gamma2r+(gamma2b-gamma2r)*F;  
    Fi1=Fi1r+(Fi1b-Fi1r)*F;  
    Fi2=Fi2r+(Fi2b-Fi2r)*F;  
    V=(Pb-P)/(Pb-Pr);  
    DV=1;  
    while DV>0.001  
        K1=gamma1*Po1/(Fi1*P);  
        K2=gamma2*Po2/(Fi2*P);  
        Vo=V;  
        V=sym('V');  
        V=numeric(solve(z1*(K1-1)/(1+V*(K1-1))+(1-z1)*(K2-1)/(1+V*(K2-1)), 'V'));  
        x1=z1/(1+V*(K1-1));  
        y1=K1*x1;y2=1-y1;  
        [gamma1,gamma2]=WILSON(x1,a12,a21,V1,V2,T,Rg);  
    end  
end
```

```

    Fi1=exp((B11*(P-Po1)+P*(y2^2)*d12)/(R*T));
    Fi2=exp((B22*(P-Po1)+P*(y1^2)*d12)/(R*T));
    DV=abs(Vo-V);
end
else
    error('No existe evaporacion instantanea!!!!!!!!!!');
    pause(3)
    Pbs=num2str(Pb*100);Prs=num2str(Pr*100);
    warndlg({'La presion debe estar entre ', Pbs, ' y ',Prs})
    pause(5)
    return
end
L=1-V; % Fase liquida separada
Pb=Pb*100; Pr=Pr*100;
warndlg(' Simulacion finalizada con exito!!!');
pause(3)

```

## E.1 Funciones creadas para la simulación de reactor discontinuo ideal

- Función *opcion(opt,t,Cao,Ca)*

% Función que almacena la opcion de modelo cinético seleccionada y luego los envia  
% a la función modelo junto con los datos de entrada

```
function [op,k,n]=opcion(opt,t,Cao,Ca)
```

```
op=opt;
```

```
close
```

```
[k,n]=modelo(op,t,Cao,Ca);
```

- Función *modelo(op,t,Cao,Ca)*

% Funcion que evalua al modelo cinetico seleccionado a partir de los datos  
% introducidos mediante regresion lineal

```
function [k,n]=modelo(op,t,Cao,Ca)
```

```
Xa=(Cao-Ca)./Cao;
```

```
switch op
```

```
    case 1
```

```
        % PRIMER ORDEN -ra = kCa
```

```
        y=log(Cao./Ca);
```

```
        c=polyfit(t,y,1); % Ajuste lineal da valor de pendiente "m"
```

```

k=c(1);
ks=num2str(k);
r=corrcoef(t,y); % Calculo de coeficiente de regresion
r2=r(2)^2

e=abs(1-r2);
if e<0.001
    warndlg('Modelo correcto!!!')
    pause(3)
    model=['-ra=',ks,'Ca'];
    prg2(model);
else
    errorDlg('Modelo incorrecto!!!')
    return
end
n=1;

case 2
    % -ra = kCa^2
    y=(1/Cao).*(Xa./(1-Xa));
    c=polyfit(t,y,1);
    k=c(1);
    ks=num2str(k);
    r=corrcoef(t,y);
    r2=r(2)^2
    n=0;
    e=abs(1-r2);
    if e<0.001
        warndlg('Modelo correcto!!!')
        pause(3)
        model=['-ra=',ks,'Ca^2'];
        prg2(model);
    else
        errorDlg('Modelo incorrecto!!!')
        return
    end
end

```



case 3

```
% SEGUNDO ORDEN -ra = kCaCb
Cbo=str2double(inputdlg('Concentracion inicial de B (mol/litro):'));
M=Cbo/Cao;
y=log((Cbo-Cao.*Xa)/(M.*Ca));
c=polyfit(t,y,1);
k=c(1)/(Cbo-Cao);
ks=num2str(k);
r=corrcoef(t,y);
r2=r(2)^2;
n=0;
e=abs(1-r2);
if e<0.001
    warndlg('Modelo correcto!!!')
    pause(3)
    model=['-ra=',ks,'CaCb'];
    prg2(model);
else
    errordlg('Modelo incorrecto!!!')
    return
end
```

case 4

```
% ORDEN "n" -ra = kCa^n
n=0.005;
DK=1;
it=1;
while DK>0.0005
    y=Ca.^(1-n)-Cao.^(1-n);
    k=y(2:length(t))./((n-1).*t(2:length(t)));
    DK=abs(mean(diff(k(1:length(k)))));
    n=n+0.005;
    if n==1
        n=n+0.05;
    end
    it=it+1;
    if it>10000
        errordlg(' Modelo incorrecto ')
        return
    end
end
```

```

warndlg('Modelo correcto')
k=mean(k)
ks=num2str(k);
model=['-ra=',ks,'Ca^n'];
prg2(model);

if n==1
    warndlg('Orden de reaccion n=1');
    return
end
end

```

o Subprograma *timerx*

% Funcion que calcula el tiempo de reaccion para un RDI

```
global out;
```

```
if out==0
```

```
    errordlg('Debe cargar primero el reactor!!!')
```

```
    return
```

```
elseif rxn==1
```

```
    X=str2num(get(xc,'string'));
```

```
    switch op
```

```
        % PRIMER ORDEN
```

```
        case 1
```

```
            tr=(1/k).*log(1./(1-X));
```

```
        case 2
```

```
            tr=((X./(1-X)).*(1/Cao))./k;
```

```
        case 3
```

```
            % SEGUNDO ORDEN
```

```
            M=Cbo/Cao;
```

```
            tr=((X./(1-X)).*(1/Cao))./(M*k);
```

```
        case 4
```

```
            % ORDEN "n"
```

```
            tr=((1./(Ca.^(n-1)))-(1./(Cao.^(n-1))))/(k.*(1-n));
```

```
    end
```

```
% Aparicion del resultado en ventana
```

```
h47 = uicontrol(...
```

```
'Parent',1,...
```

```
'Units','normalized',...
```

```
'BackgroundColor',[0.70588235294 0.788235294117647 0.811764705882353],...
```

```

'ListboxTop',0,...
'Position',[0.225961538461538 0.47 0.0504807692307692 0.03],...
'String',tr,...
'Style','text',...
'Tag','text22');
elseif rxn==0
    errordlg('Debe activar reactor');
    return
end

```

○ Subprograma VRMC

% Funcion que calcula el volumen equivalente a un reactor de  
% mezcla completa (RMC)

```

global out;
if out==0
    errordlg('Debe cargar primero el reactor!!!')
    return
elseif rxn==1
    Fao=str2num(get(faom,'string'));
    Xr=str2num(get(xm,'string'));
    % Volumen de reactor mezcla completa
    switch op
        % PRIMER ORDEN -ra = kCa
        case 1
            ra=k.*Cao.*(1-Xr);
        % SEGUNDO ORDEN -ra = kCa^2
        case 2
            ra=k*(Cao^2)*(1-Xr).^2;
        % SEGUNDO ORDEN -ra = kCaCb
        case 3
            M=Cbo/Cao;
            ra=k.*(Cao.^2).*(1-Xr).*(M-Xr);
        % ORDEN "n" -ra = kCa^n
        case 4
            ra=k.*(Cao.*(1-Xr)).^n;
    end
    Vrmc=Fao*Xr/ra;
    h28 = uicontrol(...
'Parent',1,...
'Units','normalized',...

```

```

'BackgroundColor',[0.705882352941176 0.788235294117647 0.811764705882353],...
'ListboxTop',0,...
'Position',[0.165865384615385 0.296 0.0745192307692308 0.034],...
'String',Vrnc,...
'Style','text',...
'Tag','text13');
elseif rxn==0
    errordlg('Debe activar reactor');
    return
end

```

○ Subprograma VRFPP

% Programa que calcula el volumen equivalente a un reactor  
% de flujo en piston (VRFPP)

```

global out;
if out==0
    errordlg('Debe cargar primero el reactor!!!')
    return
elseif rxn==1;
    Fao=str2num(get(faof,'string'));
    Xf=str2num(get(xf,'string'));
    Xrfp=[0:0.01:Xf];

    switch op
        % PRIMER ORDEN -ra = kCa
        case 1
            rarfp=k.*Cao.*(1-Xrfp);
        % SEGUNDO ORDEN -ra = kCa^2
        case 2
            rarfp=k*(Cao^2)*(1-Xrfp).^2;
        % SEGUNDO ORDEN -ra = kCaCb
        case 3
            M=Cbo/Cao;
            rarfp=k.*(Cao.^2).*(1-Xrfp).*(M-Xrfp);
        % ORDEN "n" -ra = kCa^n
        case 4
            rarfp=k.*(Cao.*(1-Xrfp)).^n;
    end
end

```

```
% Volumen de reactor flujo en piston
```

```
Vrfp=Fao.*trapz(Xrfp,1./rarfp)
```

```
h31 = uicontrol(...
```

```
'Parent',1,...
```

```
'Units','normalized',...
```

```
'BackgroundColor',[0.7058823529416 0.788235294117647 0.811764705882353],...
```

```
'ListboxTop',0,...
```

```
'Position',[0.162259615384615 0.118 0.0745192307692308 0.034],...
```

```
'String',Vrfp,...
```

```
'Style','text',...
```

```
'Tag','text16');
```

```
else
```

```
errordlg('Debe activar reactor');
```

```
return
```

```
end
```

### B.3 Programa principal de simulación de simulación de sistemas de reactores, serie/paralelo

```
% Programa de seleccion del sistema de reactores RMC/RFP serie/paralelo
```

```
rx=questdlg('Seleccione el tipo de reactor','Tipo de reactor','RMC','RFP','RFP');
```

```
ar=questdlg('Seleccione el tipo de arreglo','Tipo de arreglo','Serie','Paralelo','Paralelo');
```

```
switch rx
```

```
case 'RMC'
```

```
switch ar
```

```
case 'Serie'
```

```
RMC1;
```

```
case 'Paralelo'
```

```
RMC2;
```

```
end
```

```
case 'RFP'
```

```
switch ar
```

```
case 'Serie'
```

```
RFP1;
```

```
case 'Paralelo'
```

```
RFP2;
```

```
end
```

```
end
```

```
% Solución al sistema de ecuaciones del sistema de simulación
```

```
vo=str2num(get(vox,'String'));
```

```
V1=str2num(get(v1,'String'));
```

```
V2=str2num(get(v2,'String'));
```

```
Cao=str2num(get(cao,'String'));
```

```
k=str2num(get(ka,'String'));
```

```
switch rx
```

```
case 'RMC'
```

```
switch ar
```

```
case 'Serie'
```

```
tao1=V1/vo;
```

```
tao2=V2/vo;
```

```
X1=tao1*k/(1+tao1*k);
```

```
X2=1-1/(1+tao2*k)^2;
```

```
case 'Paralelo'
```

```
vo2=vo*(V2/V1);
```

```
tao1=V1/(vo);
```

```
tao2=V2/(vo2);
```

```
X1=tao1*k/(1+tao1*k);
```

```
X2=tao2*k/(1+tao2*k);
```

```
end
```

```
case 'RFP'
```

```
switch ar
```

```
case 'Serie'
```

```
Fo=vo*Cao;
```

```
tao1=V1/vo;
```

```
tao2=V2/vo;
```

```
X1=1-1/exp(tao1*k);
```

```
X2=1-(1-X1)/(exp(tao2*k));
```

```
case 'Paralelo'
```

```
vo2=vo*(V2/V1);
```

```
V=V1+V2;
```

```
tao1=V1/vo;
```

```
tao2=V2/vo2;
```

```
Fo=(vo+vo2)*Cao;
```

```
X1=1-1/(exp(tao1*k));
```

```
end
```

```
end
```

## E.1 Programa principal de simulación de reactor de flujo en pistón no isotérmico

```
% Lectura de datos de entrada de ventana de simulacion
Xa=str2num(get(xa,'String'));
Xin=str2num(get(xin,'String'));
Fao=str2num(get(fao,'String'));
DHrx=str2num(get(dhrx,'String'));
Ea=str2num(get(ea,'String'));
To=str2num(get(to,'String'));
Te=str2num(get(te,'String'));
Cpa=str2num(get(cpa,'String'));
Cpi=str2num(get(cpi,'String'));
Kco=str2num(get(kco,'String'));
Tc=str2num(get(tc,'String'));
ko=str2num(get(koo,'String'));
Cao=str2num(get(cao,'String'));
% Sumatoria de Ci
SCpi=Cpa+(Xin/Xa)*Cpi;
X=0;
% Procedimiento iterativo
Xe=1; i=1;M=[];
while X<Xe
    T=Te+(-DHrx/SCpi)*X;
    k=ko*exp((Ea*1000/8.3145)*((T-To)/(To*T)));
    Kc=Kco*exp((DHrx/8.3145)*(1/Tc-1/T));
    ra=k*Cao*(1-(1+1/Kc)*X);
    Xe=Kc/(1+Kc);
    M(i,:)=X T Xa.*Fao./ra;
    X=X+0.01;
    i=i+1;
end
% Calculo del volumen del reactor por integracion numerica
V=trapz(M(:,1),M(:,3));
% Serie de datos de volumen
Vi=[];
for k=1:i-2
    Vi(k)=trapz(M(1:k+1,1),M(1:k+1,3));
end
```

```

% Serie de datos de conversion
Xi=M(2:i-1,1);
% Serie de datos de temperatura
Ti=M(2:i-1,2);
% Serie de datos de velocidad de reaccion
rai=Xa.*Fao./M(2:i-1,3);

% Presentación en ventana de simulación resultado del volumen de reactor
h61 = uicontrol('Parent',1,...
'Units','normalized',...
'BackgroundColor',[0.690196078431373 0.776470588235294 0.8],...
'CDATA',zeros(1,0),...
'FontSize',7,...
'ForegroundColor',[1 0 0],...
'ListboxTop',0,...
'Position',[0.30696576151 0.794768611 0.06139315230 0.02615694164],...
'String',V,...
'Style','text','Tag','text41',...
'UserData',zeros(1,0));

```