



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

**UNIVERSIDAD NACIONAL AUTÓNOMA DE  
MÉXICO.**

---

---

**FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES  
ZARAGOZA.**

Modelado y simulación de Procesos de Separación  
usando PRO II. Aplicación a Tanques Flash y  
Torres de Destilación Multicomponente.

**TESIS**

**QUE PARA OBTENER EL TÍTULO DE  
INGENIERO QUÍMICO.**

PRESENTA:

**JAZMÍN ALEJANDRA SAUZA ORTEGA.**

**SERGIO MARTÍNEZ MORA.**

DIRECTOR.

**I.Q RENE DE LA MORA MEDINA**

**México D.F.**

**Abril 2016.**





Universidad Nacional  
Autónoma de México



**UNAM – Dirección General de Bibliotecas**  
**Tesis Digitales**  
**Restricciones de uso**

**DERECHOS RESERVADOS ©**  
**PROHIBIDA SU REPRODUCCIÓN TOTAL O PARCIAL**

Todo el material contenido en esta tesis esta protegido por la Ley Federal del Derecho de Autor (LFDA) de los Estados Unidos Mexicanos (México).

El uso de imágenes, fragmentos de videos, y demás material que sea objeto de protección de los derechos de autor, será exclusivamente para fines educativos e informativos y deberá citar la fuente donde la obtuvo mencionando el autor o autores. Cualquier uso distinto como el lucro, reproducción, edición o modificación, será perseguido y sancionado por el respectivo titular de los Derechos de Autor.



UNIVERSIDAD NACIONAL  
AUTÓNOMA DE  
MÉXICO

FACULTAD DE ESTUDIOS  
SUPERIORES "ZARAGOZA"

DIRECCIÓN

JEFE DE LA UNIDAD DE ADMINISTRACIÓN  
ESCOLAR  
PRESENTE.

Comunico a usted que al alumno(a) **Martínez Mora Sergio** con número de cuenta **40808318-0** de la carrera **Ingeniería Química**, se le ha fijado el día **29** del mes de **Abril** de **2016** a las **13:00 horas** para presentar su examen profesional, que tendrá lugar en la sala de exámenes profesionales del Campus II de esta Facultad, con el siguiente jurado:

PRESIDENTE	BIOL. MARÍA EUGENIA IBARRA HERNÁNDEZ
VOCAL	I.Q. RENÉ DE LA MORA MEDINA*
SECRETARIO	M. EN M. GENARO ALTAMIRANO GARCÍA
SUPLENTE	I.Q. BLAS MALDONADO SÁNCHEZ
SUPLENTE	M. EN I. OLGA BERENICE BENÍTEZ LÓPEZ

*[Firma]*  
\_\_\_\_\_  
*[Firma]*  
\_\_\_\_\_  
*[Firma]*  
\_\_\_\_\_  
*[Firma]*  
\_\_\_\_\_  
*[Firma]*  
\_\_\_\_\_

El título de la tesis que se presenta es: "Modelado y simulación de procesos de separación usando PRO II. Aplicación a tanques flash y torres de destilación multicomponente".

Opción de Titulación: Convencional

ATENTAMENTE  
"POR MI RAZA HABLARÁ EL ESPÍRITU"  
DE ESTUDIOS  
México, D. F. a 07 de Abril de 2016.

*[Firma]*  
FACULTAD DE ESTUDIOS SUPERIORES  
ZARAGOZA  
DR. VÍCTOR MANUEL MENDOZA RIVERA  
DIRECCIÓN  
DIRECTOR

RECIBÍ:  
OFICINA DE EXÁMENES PROFESIONALES  
Y DE GRADO

Vo.Bo. *[Firma]*  
I.Q. DOMINGA GORTIZ BAUTISTA  
JEFA DE LA CARRERA DE I.Q.

## **AGRADECIMIENTOS JAZMIN.**

A Dios por permitirme llegar hasta aquí.

A mi querida UNAM, por brindarme la oportunidad en la máxima casa de estudios. Por hacerme una profesionista, que además de darme las herramientas y conocimientos técnicos para una carrera profesional, ayudándome como ser humano.

A mis familiares y amigos que sin duda alguna son el más grande tesoro que hubiera podido imaginar. En particular a:

Mi abuelita Mercedes Ortega González. Por ser la mejor persona que Dios pudo poner en mi camino, por todo el cariño, confianza y horas de desvelo que me ha dedicado, gracias por adoptarme como su hija pequeña.

Mi abuelito Miguel Ángel Sauza Jiménez. Por ser el mejor Padre que pude imaginar, gracias por ser como un roble fuerte siempre, ante todo y para todos. Sin duda alguna gracias por sus lecciones, consejos, regaños, por su enorme amor, por dejarme tanto que aprender.

Mi madre Graciela Sauza Ortega. Por darme la vida, por su apoyo a lo largo de todos estos años.

Mis hermanos: Michael, Carlos y Tania. Por recordarme lo bello que es ser niño y la importancia del compartir, gracias por soportarme en malos momentos, gracias por llegar, por no dejarme sola.

Mi tío Ángel Sauza Ortega. Por su cariño, por todo su apoyo, por enseñarme a ser exigente y una mejor persona, aunque de una manera ruda, pero al final del día me enseñó a ser fuerte.

A mi mejor amigo, hermano postizo y ahora compañero de tesis, Sergio Martínez Mora. Gracias querido amigo por: Permitirme realizar este trabajo contigo, para con esto ver culminado una meta más en nuestras vidas, una vez más juntos. Gracias por estos 12 años de amistad y los que faltan, gracias por toda tu paciencia, consejos, cariño, regaños en fin .Gracias por todo.

Gracias al Ingeniero Rene de la Mora Medina por ser nuestro asesor de tesis, gracias también, por darme la primera oportunidad en el campo laboral, al creer en mí como profesionista. Por todos y cada uno de sus consejos laborales y humanos.

A los profesores de la FES Zaragoza, por todos sus conocimientos en especial al profesor Genaro Altamirano García, por enseñarme que humildad es algo de grandes y que siempre hay tiempo para aprender algo más.

A mis amigos: Víctor Prado Beltrán, Omar Calixto, Edmundo Ortiz, Ana Santiago, Kristian Alberto Macías, porque más allá del tiempo compartido en las aulas me han enseñado que podemos ser una segunda familia, gracias por tantas risas y buenos momentos.

También gracias a Daniela Cruz Garnica y a su señora madre Rosa Garnica, por su gran cariño, por su apoyo a lo largo de todo este tiempo, gracias por sus consejos.

A Clara Urrieta y Fernando Torres porque a pesar del corto tiempo de conocernos me han enseñado tantas cosas, entre ellas la pasión por el deporte y que nada es imposible, que todo es una cuestión de actitud y de perseverancia.

A Elsa García Altos, Leticia García altos, por brindarme su apoyo incondicional en todos los años que labore a su lado, grandes pláticas y sin duda alguna sin su ayuda no hubiera llegado a culminar mis estudios.

## **DEDICATORIA JAZMIN.**

Muchos fueron los días de desvelo, de arduo trabajo, de caídas de nuevos comienzos, pero siempre el firme propósito de continuar este proyecto. Sin olvidar que alguien siempre ha creído en mí, desde niña desde toda la vida. A mi Abuelita Mercedes Ortega González, gracias por ser la mejor madre, amiga la mejor persona que dios me pudo haber regalado en esta vida. Porque sin usted no hubiera llegado a ser lo que soy. Sin duda alguna mi guía, mi motor.

A mi abuelo Miguel Ángel Sauza Ortega, que partió hace 15 años. Gracias por ser mi padre, por enseñarme que la vida es dura, pero que todo tiene solución, gracias por su cariño, sus consejos por ser un gran ejemplo a seguir.

A mi madre Graciela Sauza Ortega, por apoyarme a lo largo de todos estos años, por sus grandes palabras en momentos difíciles.

A mis hermanos: Michael, Carlos, Tania Sauza Ortega, porque a pesar de ser unos pequeños en edad, son grandes maestros de vida, gracias por enseñarme que nunca es suficiente, que siempre se puede dar más, que no hay límites. Pero sobre todo gracias por soportarme y por no dejarme sola, por enseñarme que cuatro, son mejor que una.

## **AGRADECIMIENTOS SERGIO.**

“Gracias a la vida que me ha dado tanto  
Me dio dos luceros que cuando los abro  
Perfecto distingo lo negro del blanco  
Y en el alto cielo su fondo estrellado  
Y en las multitudes la mujer que yo amo.

Gracias a la vida que me ha dado tanto  
Me ha dado el oído que en todo su ancho  
Cada noche y días  
Grillos y canarios, martillos, turbinas  
Ladridos, chubascos  
Y la voz tan tierna de mi bien amada.

Gracias a la vida que me ha dado tanto  
Me ha dado el sonido y el abecedario  
Con el las palabras que pienso y declaro  
Madre, amigo, hermano y luz alumbrando,  
La ruta del alma del que estoy amando

Gracias a la vida que me ha dado tanto  
Me ha dado la marcha de mis pies cansados  
Con ellos anduve ciudades y charcos  
Playas y desiertos, montañas y llanos  
Y la casa tuya, tu calle y tu patio.

Gracias a la vida que me ha dado tanto  
Me dio el corazón que agita su marco  
Cuando miro el fruto del cerebro humano  
Cuando miro el bueno tan lejos del malo  
Cuando miro el fondo de tus ojos claros.

Gracias a la vida que me ha dado tanto  
Me ha dado la risa y me ha dado el llanto  
Así yo distingo dicha de quebranto  
Los dos materiales que forman mi canto  
Y el canto de ustedes que es el mismo canto  
Y el canto de todos que es mi propio canto.”

**Violeta Parra.**

La vida, que bella es la vida y más cuando cuentas con un familia que pese a la adversidad y prosperidad siempre está allí. Mi mamá María Mora Martínez, mi Pápa Sergio Martínez Tufiño, mi hermana Ma. Del Pilar Martínez Mora a quienes amo mucho, que siempre están allí cuando me caigo y cuando tengo ganas de llorar siempre están para consolarme, sin ustedes no sería nada. Gracias por su apoyo y enseñanza.

A mi abuelita Marcela Martínez y Francisca Tufiño, que partieron de este mundo terrenal hace 16 años, pero que donde quieran que estén se sentirían orgullosas de este momento tan especial para mí.

Al IMP e Ingeniero Ismael Núñez Barrón por permitirme desarrollarme como Ingeniero Químico, aprender, y hacerme ver lo que más me encanta y apasiona de esta profesión.

A la UNAM por ser mi segunda casa y desarrollarme como profesionista, por enseñarme que no solo es el estudio si no también es la convivencia, el conocimiento, la cultura, los valores y los antivalores.

A mi mejor amigo y hermano Cesar Ávila Rosas por esos 15 años de amistad, y los que faltan. Gracias por lo aprendido en todo este tiempo y hacer de tu familia mi segunda familia. Gracias enseñarme a no seguir la línea.

A mi mejor amiga Jazmín A. Sauza Ortega por estar conmigo en la realización de este proyecto y compartir un momento tan bello como este, gracias por estos 12 años de amistad, por estar siempre allí para escucharme, y que pese a las dificultades del pasado seguimos aquí y que sea así siempre. Gracias por todo.

A mi Asesor el Ingeniero Rene de la Mora, por darme todas las oportunidades sociales y laborales, gracias por el apoyo, sus consejos y enseñanzas.

A mis amigos: Víctor Prado, Omar Calixto, Edmundo Ortiz, Ana Santiago, Kristian Alberto Macías, Daniela Cruz Garnica gracias por compartir todos los buenos y malos momentos, que pese a todo seguimos aquí de pie compartiendo este momento tan especial para mí, y espero que sea así siempre.

## Índice.

Objetivos.....	10
Justificación.....	11
.....	11
Introducción.....	12
CAPÍTULO 1. GENERALIDADES.....	14
1.1 ¿Qué es modelación y simulación?.....	15
1.1.1 Modelación.....	15
1.2 Simulación de procesos.....	15
1.3 Clasificación de los simuladores de procesos.....	17
1.3.1 Simulador de procesos en estado estacionario.....	17
1.3.2 Estructura del simulador en estado estacionario.....	18
1.4 Pasos para la modelación y simulación de procesos.....	23
1.5 Otros simuladores de Procesos.....	25
CAPÍTULO 2.....	27
INTRODUCCIÓN AL SIMULADOR DE PROCESOS SIMSCI-PRO II.....	27
2.1 Características del simulador de procesos PRO II.....	28
2.2 Sugerencias para la selección del modelo termodinámico.....	29
2.3 Manejo del simulador de procesos PRO II, paso a paso.....	30
2.3.1 Descripción de la barra de herramientas.....	32
2.3.2 Selección de los elementos básicos de la simulación.....	33
2.3.4 Ejecución de la simulación.....	46
2.4 Planteamiento de los problemas prácticos y casos de estudio.....	47
CAPÍTULO 3.....	49
MODELADO DE SISTEMAS DE SEPARACIÓN LÍQUIDO - VAPOR.....	49
3.1 Tanque separador flash.....	50
3.1.1 Especificación del tanque flash.....	51
3.1.3 Punto de rocío.....	55
3.1.4 Punto de burbuja.....	65
3.1.5 Flash Isotérmico.....	71
3.1.6 Flash Adiabático.....	77
3.2 Torres de destilación.....	83
3.2.1 Método corto.....	83
3.2.2 Método Riguroso.....	91



CAPÍTULO 4 .....	108
RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS DE TANQUES FLASH Y TORRES DE DESTILACIÓN MULTICOMPONENTE.....	108
4.1 Flash adiabático.....	110
4.1.3 Definición de la línea de alimentación.....	112
4.1.4 Selección del equipo.....	113
4.1.5 Especificación del equipo. ....	114
4.1.6 Ejecución del programa y obtención de resultados. ....	114
4.2 Flash isotérmico.....	118
4.2.1 Selección de los elementos básicos. ....	118
4.2.2 Definición de la línea de alimentación.....	120
4.2.3 Especificación del equipo. ....	121
4.2.4 Ejecución del programa y obtención de resultados. ....	122
4.3 Punto de rocío.....	123
4.3.1 Selección de los elementos básicos. ....	123
4.3.2 Definición de la línea de alimentación.....	125
4.3.4 Especificación del equipo. ....	126
4.3.5 Ejecución del programa y obtención de resultados. ....	127
4.4 Punto de burbuja.....	128
4.4.1 Selección de los elementos básicos. ....	128
4.4.2 Definición de la línea de alimentación.....	130
4.4.3 Especificación del equipo. ....	131
4.4.4 Ejecución del programa y obtención de resultados. ....	132
4.5 Caso de estudio Splitter (Propano-Propileno). ....	133
4.5.1 Descripción del proceso.....	134
4.5.2 Planteamiento de problema. ....	134
4.6 Método corto.....	136
4.6.1 Selección de los elementos básicos .....	136
4.6.2 Selección y especificación de la línea de alimentación. ....	136
4.6.4 Selección del equipo.....	137
4.6.5 Conexión de la línea de alimentación y productos al equipo.....	138
4.6.6 Especificación del equipo. ....	138
4.7 Método riguroso. ....	145
4.7.1 Selección y especificación de la línea de alimentación. ....	145

4.7.3 Selección de equipo. ....	145
4.7.4 Conexión de la línea de alimentación y productos al equipo. ....	146
4.7.5 Especificación de equipo. ....	147
Conclusiones. ....	164
ANEXO. ....	166
Índice de Figuras. ....	167
Índice de Tablas. ....	174
Bibliografía. ....	175

## Objetivos.

### A. General.

- Mostrar la participación del Ingeniero Químico como especialista en el área de Ingeniería de Procesos, en la modelación de Procesos tanques flash y torres de destilación multicomponente, mediante el empleo de un simulador de procesos PRO II.

### B. Específicos.

- Describir de manera práctica el uso del simulador PRO II.
- Establecer la modelación del proceso de separación en tanques flash.
- Establecer la modelación del proceso de separación en torres de destilación multicomponente.
- Simular los modelos establecidos para los procesos de separación: tanques flash y torres de destilación multicomponentes, usando PRO II.
- Dar una herramienta de apoyo para el aprendizaje del uso del simulador de procesos PRO II que permita al alumno solucionar problemas de ingeniería química y que le sirva como apoyo para las materias: diseño procesos de separación, transferencia de masa, e ingeniería de procesos.

## **Justificación.**

---

---

En los últimos años, la simulación de procesos se ha convertido en una herramienta aceptada para el diseño de procesos y la comprensión de los procesos químicos y un requisito en la educación de ingeniería química. El interés creciente en esta área es bien ejemplificado por el número de programas de simulación de procesos que se ofrecen para la venta a la industria química y por el fuerte aumento en el número de investigaciones en campo de la ingeniería química.

Por ello es de suma importancia considerar el empleo de un simulador de procesos en la realización de problemas de procesos de separación, con ello el ingeniero químico obtendría mayor criterio en la solución de estos problemas, permitiéndole seleccionar la solución óptima del proceso según las condiciones de este.

## Introducción.

---

El ingeniero químico de hoy se enfrenta a un mundo de grandes retos, donde el entorno cambia constantemente y exige que los ingenieros asimilen rápidamente nuevas y emergentes tecnologías. Para poder sobrevivir a este mercado laboral tan competitivo, el ingeniero de químico debe desarrollar ciertas habilidades y competencias, con los que responda eficazmente a los requerimientos en la práctica de su profesión, para esto los estudiantes y egresados deben desarrollar dichas habilidades y competencias durante su formación universitaria. La simulación en la actualidad es una herramienta de suma importancia que ayuda dentro de la industria a nivel mundial.

La simulación de procesos es una herramienta que proporciona innumerables facilidades a la industria química, petrolera y energética para convertir los objetivos de una compañía en realidad, ahorrando dinero y tiempo, protegiendo el medio ambiente y las vidas humanas de quienes trabajan en las plantas.

En este trabajo se plantea una guía práctica que lleve al alumno de la mano en el cómo utilizar el simulador de procesos PRO II, esto le será de utilidad para las materias de: Termodinámica, Diseño de equipo e Ingeniería de Procesos impartidas en la carrera de Ingeniería Química de la FES Zaragoza, con el fin de ayudarlo a que conozca esta herramienta y pueda poner en práctica sus conocimientos adquiridos en las asignaturas previas

En el capítulo uno se abordan en las generalidades de la simulación explicando, que es una simulación de procesos y es así, como se introduce a los simuladores de procesos como una herramienta para resolver problemas de una manera más rápida y precisa de la ingeniería química, describiendo que existe una amplia variedad de simuladores de procesos en el mercado en estado estacionario y dinámico.

En el capítulo dos se habla de las principales características del simulador PRO II, para posteriormente describir el uso del simulador con el método “paso a paso”, lo cual describe la selección de los elementos básicos para iniciar una simulación, permitiendo entender de manera muy clara el contenido del simulador para su uso.

En el capítulo tres se modelan los sistemas de separación líquido-vapor, que para nuestro caso de estudio nos enfocamos en: Tanques Flash (Flash adiabático y Flash

isotérmico) y torres de destilación multicomponentes; describiendo de forma clara como se simula cada uno de estos a su vez se describe la ventana de especificación de cada equipo y sus principales características. Esta ventana de especificación la tienen todos los equipos la cual contienen diversas opciones que permite simular al equipo siendo un componente básico y necesario.

Es así donde la ventana de especificación permite conocer que datos se necesitan para simular cada equipo. Una vez descrita la ventana de especificación, a través del planteamiento de problemas y su resolución se describe como se simula cada una de las operaciones de separación líquido-vapor, de manera sencilla y clara.

En el capítulo cuatro se resolverán problemas de diversos procesos los cuales son de interés en carrera ingeniería química: Flash adiabático, Flash isotérmico, punto de burbuja punto de rocío utilizando diferentes variantes que se presentan en la vida real. Así también la simulación de una torre destilación de un splitter, usando el simulador de procesos PRO II.

Para lograr lo antes mencionado, se requiere de los conocimientos adquiridos en las asignaturas de: Balance de materia y energía, flujo de fluidos, transferencia de calor, transferencia de masa, termodinámica e ingeniería de procesos.

# **CAPÍTULO 1. GENERALIDADES.**

## 1.1 ¿Qué es modelación y simulación?

### 1.1.1 Modelación.

La modelación es el desarrollo de un modelo; un modelo es la representación de modo de operación de un sistema de interés. Su propósito es permitir que el analista pronostique el efecto de los cambios del sistema con este modelo. Por otra parte, debe ser una aproximación cercana al sistema real e incorporar la mayor parte de sus características más destacadas. Un buen modelo es una solución acertada entre lo realista y la simplicidad. Una cuestión importante en el modelado es la validez del modelo. Las técnicas de validez incluyen la simulación bajo condiciones de entrada y la comparación de los resultados del modelo con los resultados de salida.

Generalmente, un modelo diseñado para un estudio de simulación es un modelo matemático desarrollado con la ayuda de un software de simulación. Las clasificaciones de los modelos matemáticos incluyen determinista (variables de entrada y de salida son valores fijos) o estocástico (al menos una de las variables de entrada o de salida es probabilístico); estático (el tiempo no se toma en cuenta) o dinámico (la interacción de la variación del tiempo entre las variables se toma en cuenta).

### 1.1.2 Simulación.

Una simulación de un sistema es la operación de un modelo en un sistema. El funcionamiento del modelo puede ser estudiado reconfigurado, y por lo tanto, las propiedades referentes al comportamiento del sistema real o su subsistema se pueden inferir. En un sentido más amplio, la simulación es una herramienta para evaluar el desempeño de un sistema, ya sea existente o propuesto, bajo diferentes configuraciones de interés y durante largos periodos de tiempo real.

La simulación se utiliza antes de que un sistema existente sea alterado o un sistema nuevo sea construido, para reducir las posibilidades de incumplimiento de las especificaciones, para eliminar los cuellos de botella imprevistos, para evitar baja o sobre utilización de recursos, y para optimizar el rendimiento del sistema.

## 1.2 Simulación de procesos.

La simulación de un proceso es el diseño de un conjunto de modelos matemáticos que permite comprender como se comporta un sistema y conocer información acerca de los diferentes procesos unitarios en diferentes condiciones.



Por lo tanto, la simulación de procesos es una práctica común en todas las fases de diseño de un proceso químico.

La simulación, como una herramienta le permite al ingeniero químico estudiar diferentes procesos en diferentes panoramas. El corazón del análisis es el modelo matemático, un conjunto de ecuaciones que relacionan variables de proceso, como temperatura, presión, flujo, composición de las corrientes, posición de las válvulas, configuración geométrica, etc.

Existen muchos niveles de análisis, que en orden de complejidad, son los siguientes: balances de materia y energía, dimensionamiento de equipo, análisis de costos.

La forma de resolver consiste en un conjunto de ecuaciones que relacionan las variables de proceso, como son: temperatura, presión, flujo, composición de las corrientes, etc. Este conjunto de ecuaciones son generalmente modelos termodinámicos que prevén el equilibrio de fases y las propiedades fisicoquímicas, utilizando modelos rigurosos del comportamiento de las operaciones unitarias ahorrando mucho tiempo durante el diseño. La lógica interna de trabajar con un simulador de procesos requiere de una serie de etapas que deben llevar un cierto orden.

Los principales elementos que componen un simulador de procesos son:

- **Base de datos de componentes:** Contiene las constantes necesarias para calcular las propiedades físicas a partir de ecuaciones de estado o correlaciones empíricas.
- **Bloque de modelos termodinámicos:** Ofrece diversas opciones para el cálculo del equilibrio líquido-vapor, de la entalpía y otras propiedades termodinámicas.
- **Bloque del diagrama de flujo:** Está relacionado con las corrientes y los equipos que se van a simular.
- **Bloque de operaciones unitarias:** Permite realizar los balances de materia y energía en los distintos equipos.
- **Bloque generadores de datos de salida:** Sirve para generar un informe con todos los resultados de la simulación.

### 1.3 Clasificación de los simuladores de procesos.

Para clasificar los simuladores de procesos es necesario tomar en cuenta la forma de trabajar de cada tipo de simulador, esto depende del planteamiento del problema, es decir del tipo de proceso que se va a resolver, desde la solución de un balance de materia en estado estacionario, hasta el análisis dinámico de un equipo para conocer su capacidad. La solución de modelos en estado estacionario resuelve ecuaciones algebraicas, mientras que un sistema dinámico suele ser necesario resolver simultáneamente sistemas de ecuaciones algebraicas, ecuaciones diferenciales y ecuaciones con derivadas parciales.

#### 1.3.1 Simulador de procesos en estado estacionario.

En estado estacionario se refiere a que las características propias del sistema o proceso no varían con el tiempo.

A su vez los simuladores de procesos en estado estacionario pueden dividirse de acuerdo a la forma de planteamiento del modelo matemático que representa los procesos a simular, y estos son los siguientes:

- Simuladores modulares - secuenciales. En estos, los cálculos se realizan por módulos, donde se calculan los valores de salida de cada módulo en función de los valores de entrada al mismo y así siguen la misma forma de evaluar cada una de las operaciones unitarias, es decir, si se tiene el diagrama de flujo de proceso este se descompone en “trozos”, a cada equipo: bomba, válvula, intercambiadores de calor, tanques flash, etc.; cada módulo es tratado por ecuaciones independientes.
- Simuladores basados en ecuaciones. Todas las operaciones unitarias del diagrama de flujo se representa en forma de sistema de ecuaciones, que se resuelven simultáneamente, por lo que su modulación puede ser una tarea compleja ya que se resuelve el proceso de forma simultánea. Los aspectos importantes son el tamaño del problema, el análisis de los grados de libertad y la detección de sistemas no ideales, debido a la necesidad del cálculo.

La principal utilidad de los simuladores de proceso en estado estacionario es la de probar diferentes condiciones de operación y auxiliar en el diseño de los equipos.

### **1.3.2 Estructura del simulador en estado estacionario.**

La simulación en estado estacionario se caracteriza fuertemente con los programas o paquetes de computador que se realizan de éste. En consecuencia, un simulador refleja a través de su estructura y organización el tipo de simulación que realiza y determina el modo de su utilización. Un simulador con enfoque modular secuencial como lo es el PRO II es un conjunto de módulos interconectado, cada uno con categoría e identidad particular y fines específicos, donde se establecen claramente las entradas y salidas de información.

En la figura 1.1 se ilustra una estructura genérica de este tipo de simuladores, con módulos de mando, validación, preparación de la información de entrada, unidades de proceso, estimación de propiedades fisicoquímicas, métodos numéricos y aceleradores de convergencia y banco de constantes.

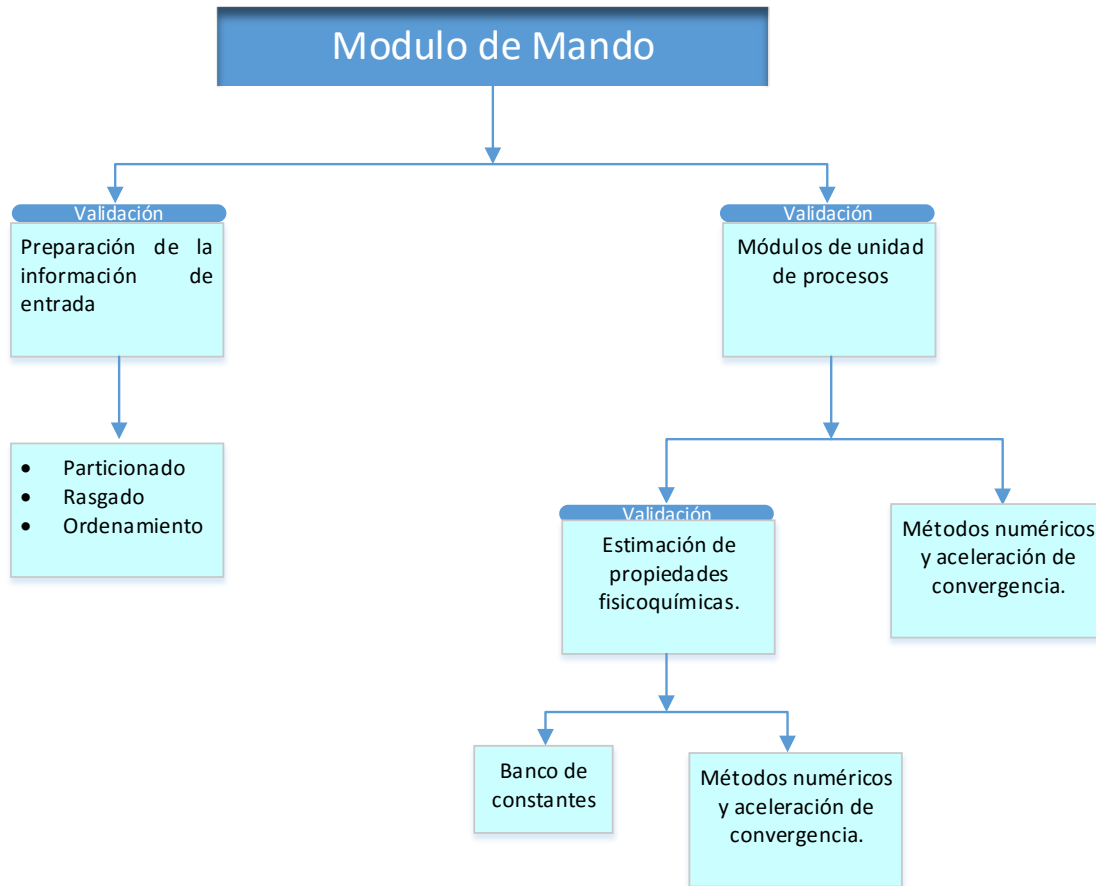


Fig. 1.1 Estructura del simulador en estado estacionario. <sup>[22]</sup>

**Módulo de mando:** Este programa se conforma para organizar y supervisar las transferencia de control y los flujos de información, a lo largo de una simulación, de acuerdo con el diagrama de flujo del segmento de proceso simulado. Da una distribución ordenada y control del trabajo de cálculo que deben realizar otros módulos; así como por su función de seguimiento riguroso a cada cálculo, conociendo en cada momento el estado de la simulación.

**Módulos de preparación de la información de entrada:** La información relacionada con un segmento del proceso se transforma en un diagrama de flujo de información y se entrega a un simulador en forma de matrices y vectores, donde se sintetizan las variables de proceso para su configuración, por medio de cantidades discretas. Con esta información, el simulador invoca la ejecución de los módulos de preparación, para realizar las llamadas etapas de particionado, rasgado y ordenado. Estos módulos de preparación se ejecutan por invocación solamente del módulo de mando y también solamente a él entrega respuestas. Las etapas referidas conducen fundamentalmente a:

- **Particionado:** Detectar los ciclos del diagrama de flujo de información, los cuales corresponden a las recirculaciones del segmento de proceso considerado.
- **Rasgado:** Definir las corrientes de corte o rasgado, mediante las cuales se abre o lineariza cada ciclo.
- **Ordenamiento:** Establecer un orden de solución, donde se garantice paso a paso, que se dispone de la información para ejecutar cada módulo.

**Módulos de unidades de proceso:** Estos módulos corresponden a un modelo y un algoritmo de cálculo que permite resolver la unidad de proceso que representan, siempre en la dirección aplicada a las corrientes de salida. Los módulos contemplados suelen construirse con modelos y métodos muy diversos, desde muy sencillos hasta muy sofisticados y complejos.

Estos modelos se invocan solamente desde el módulo de mando y también solamente a él entregan respuestas, y durante la ejecución suelen invocar los módulos de estimación de propiedades fisicoquímicas y los de métodos numéricos y aceleración de convergencia.

Dentro de los módulos que representan unidades de procesos se encuentran convencionalmente los que se ilustran en la Tabla 1.1, donde se clasifican de acuerdo con la naturaleza de la transformación que se lleva a cabo.

Tabla 1.1 Módulos de simulación de unidades de proceso.<sup>[4]</sup>

Mezcla o suma de corrientes.	Reacción química.
Para solución ideal o no ideal Adiabática o con alguna carga térmica.	Reactores estequiométricos o de equilibrio De tanque agitado o mezcla perfecta o tubular De lecho fijo o fluidizado
Equilibrio.	Modificaciones de presión
Vaporización instantánea, adiabática o isotérmica.	Bombas o compresores Expansores o turbinas.
Separación física.	Modificación de temperatura
Columnas de destilación, absorción o extracción.	Intercambiadores de calor Calentadores o enfriadores Condensadores o evaporadores Hornos

**Módulos de estimación de propiedades fisicoquímicas:** Estas propiedades pueden suministrarse de dos maneras: externamente, para cada condición; o internamente, ejecutando algún modelo con el cual se resuelva algún modelo, cada vez que sea el caso. La posibilidad de evaluación interna de propiedades aumenta la capacidad del simulador y evita accesos y validaciones al exterior; corresponde ilustrar aquí el procedimiento interno. Esta estimación se hace en dos grandes niveles: primero, para componentes puros, interactuando con algún modelo de unidades de proceso y el banco de constantes; y segundo, para mezclas, interactuando con algún modelo de unidades de proceso y el de estimación de propiedades de compuestos puros.

Los modelos de esta categoría estiman o simulan propiedades fisicoquímicas, con base en múltiples modelos (desde sencillos hasta complejos y desde particulares hasta generales), para estados determinados o con cero grados de libertad. La determinación se establece desde el módulo de la unidad de proceso que invoca la propiedad, otorgando los valores pertinentes.

**Banco de constantes de compuestos puros:** De lo anterior se desprende que la solución de un determinado módulo de unidad de proceso, paso a paso, necesita las propiedades de los componentes y las mezclas que allí intervienen, sujetas a condiciones diferentes, según el estado simulado. Igualmente, estas propiedades se estiman desde los módulos pertinentes invocando las constantes características que se encuentran en un banco de datos. Este banco permite su lectura solamente desde el módulo de estimación de propiedades de compuestos puros. El tamaño del banco depende del número de compuestos y del número de constantes por compuesto que se tenga; y en términos de este tamaño pueden aumentar la capacidad y versatilidad de uso del simulador, para trabajar con más compuestos y mezclas. Este tamaño también puede conducir a alguna organización, para facilitar el acceso, con base en sub-bancos que contienen parte de la información.

**Módulo de métodos numéricos y aceleración de convergencia:** Este módulo presta un apoyo importante para los cálculos que se realizan en los modelos de las unidades de proceso y de estimación de propiedades fisicoquímicas. En efecto, la solución de cada ecuación o de grupos de ecuaciones puede ser más rápida y segura con la utilización de los métodos numéricos. Los módulos de métodos numéricos, para favorecer los cálculos en la solución de un modelo o ecuación que tienen como función primordial:

- Calcular la raíz de cualquier ecuación, escrita en la forma  $f(x)=0$ .
- Diferenciar numéricamente.
- Integrar numéricamente.
- Resolver sistemas de ecuaciones lineales, y no lineales, siempre y cuando obedezcan a alguna estructura típica.

Los métodos que se emplean son variados: sustitución directa, regla- falsa, Newton, Bisección y otros. En otros casos tenemos sistemas de ecuaciones los cuales se resuelven simultáneamente como lo son: Método Newton multivariable, Broyden, LU, Jacobiano. Por otra parte, para favorecer los cálculos en la solución iterativa de una serie de modelos, como en el caso de segmentos de proceso con recirculaciones, los modelos de aceleración de convergencia prestan un gran apoyo.

### 1.3.3 Simuladores de proceso en estado dinámico.

Los simuladores de proceso en estado dinámico son más complejos matemáticamente, ya que estos primero deben resolver el modelo en estado estacionario a lo largo del tiempo, lo que implica la aparición de un gran número de ecuaciones diferenciales. Por esta razón normalmente se utilizan valores pequeños de integración ya que esto favorece la convergencia del sistema y a su vez el tiempo de resolución.

La aplicación de las simulaciones dinámicas es más amplia, ya que en procesos discontinuos se utiliza para evaluar la eficacia y estabilidad de un proceso frente a las perturbaciones que se pueden tener durante la operación y en procesos continuos su principal función es mejorar la operación durante la puesta en marcha y parada.

### 1.4 Pasos para la modelación y simulación de procesos.

Para simular una operación o proceso unitario se deben tomar en cuenta los siguientes puntos para la simulación:

- El diseño de la modelación y simulación que se va ejecutar. En esta etapa se debe plantear las siguientes preguntas: ¿Cuál es el objetivo de la simulación?, ¿Cuáles son las entradas y las salidas?, ¿Cuáles son las restricciones de la simulación?, ¿Qué características son importantes dentro de la simulación?
- Obtención, análisis y validación de datos. Esto es que a los datos obtenidos en la simulación se les verifique de acuerdo al objetivo.
- Construcción de un modelo apropiado para simular. Para realizar el modelo necesario se debe considerar la siguiente información:
  - Compuestos químicos presentes en el sistema para calcular sus propiedades químicas y las de sus mezclas.
  - Modelo termodinámico adecuado.
  - Datos para especificar en el equipo.
  - Operaciones unitarias presentes.
  - Conexión entre las operaciones unitarias.



El desarrollo de la modelación debe realizarse de manera que esté permita visualizar la simulación en situación actual y posibles modificaciones que se le puedan realizar para mejorar la simulación.

- Ejecución de la simulación. Una vez realizada la simulación, analizar la simulación de forma que se puedan observar varios aspectos que son:
  - Características de las entradas y salidas
  - Características del algoritmo de la simulación.
  - Posibles errores que pueden existir
  - Utilizar y aprovechar las diversas situaciones que se pueden presentar dentro de la simulación
  - Beneficio que nos proporciona las diferentes situaciones (ganancia o pérdidas de energía, ahorro de servicios, costos de operación, etc.)
  - Recomendaciones o posibles modificaciones respecto a la simulación en su “situación actual”, puede cambiar si es necesario realizar alguna modificación.

Documentación y presentación de los resultados de la simulación. Los resultados nos sirven para justificar si nuestros objetivos se cumplieron y si es necesario realizar alguna modificación ver (Fig. 1.2).

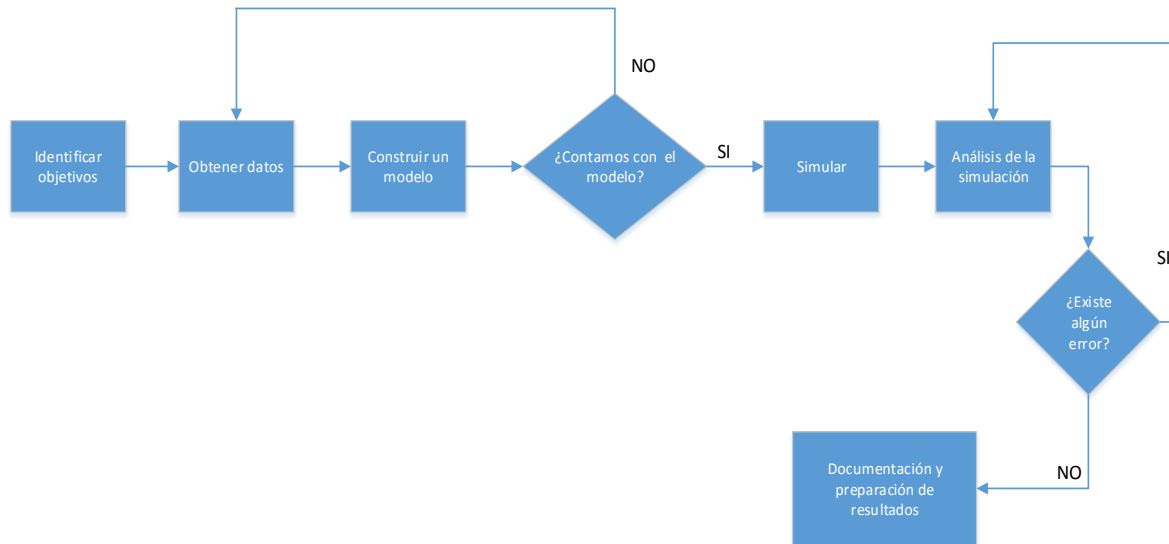


Figura 1.2 Diagrama de flujo para una simulación general. [22]

### 1.5 Otros simuladores de Procesos.

Actualmente existe una gran variedad de simuladores de procesos comerciales en estado estacionario y dinámico; los cuales contienen interfaz similar ya que tienen una extensa base de datos termodinámicos, curvas de destilación características de crudos, un gran número de modelos de estimación de propiedades físicas y muchos modelos de operaciones unitarias. Estos son creados por empresas dedicadas a desarrollar software que permitan simular diferentes procesos dentro de la industria química que abarcan diferentes sectores industriales como son ingeniería, construcción, exploración y producción, refinación, productos químicos, polímeros, productos farmacéuticos, industria de la energía principalmente la industria petroquímica, entre otros.

Los simuladores comerciales se clasifican en específicos o generales.

- Simuladores específicos: Son elaborados para una sola operación unitaria o procesos específico.
- Simuladores generales: Contienen en su estructura varias operaciones unitarias las cuales pueden interrelacionarse entre sí para simular un proceso.

En la tabla 1.2 se presentan los principales simuladores de uso comercial así como sus proveedores:

**Tabla 1.2 Simuladores Comerciales.** <sup>[13]</sup>

Simuladores Comerciales.	Proveedor.
PRO II	Simcsci-Esscor
Aspen Plus	Aspen Tech
CHEMCAD	Chemstations
Aspen HYSYS	Aspen Tech
PROMax	Bryan Research e Engineering
PROSimPlus	Prosim
PD-PLUS	Deerhaven Technical

Los simuladores de procesos presentan ventajas y desventajas, estas se citan en la tabla 1.3.

**Tabla 1.3 Ventajas y desventajas de los Simuladores de Proceso.** <sup>[13]</sup>

Ventajas.	Desventajas.
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Es un proceso relativamente eficiente y flexible.</li> <li>• Facilitan el aprendizaje de los alumnos y sus tareas.</li> <li>• Permite estudiar el efecto de cambios de variables como la temperatura, presión, composición, entre otros; internos al realizar cambios al sistema y observando los efectos de estos en el comportamiento del sistema.</li> <li>• Se puede llegar a un mejor entendimiento del sistema y por consiguiente a sugerir estrategias que mejoren la operación y eficiencia del sistema.</li> <li>• La simulación de sistemas complejos puede ayudar a entender mejor la operación del sistema, a detectar las variables más importantes que interactúan entre sí y entender mejor las interrelaciones entre estas variables.</li> <li>• Reduce tiempo de solución de problemas.</li> <li>• Puede ser utilizada para experimentar con nuevas situaciones, sobre las cuales tiene poca o ninguna información. A través de esta experimentación se puede anticipar mejor a posibles resultados no previstos.</li> <li>• Puede ser utilizada como un instrumento pedagógico para enseñar a estudiantes habilidades básicas en análisis.</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Errores de simulación: se debe tener conocimiento previo de las operaciones unitarias o procesos antes de realizar una simulación.</li> <li>• Fallas al optimizar: La simulación es usada para contestar preguntas del tipo ¿Qué pasa si?, pero no de ¿Qué es lo mejor? En este sentido, la simulación no es una técnica de optimización. La simulación no genera soluciones solo evalúa lo que ha sido propuesto.</li> <li>• Si no se realiza la simulación de manera correcta, se pueden obtener resultados falsos.</li> <li>• Estos proporcionan una enorme cantidad de valores al final de la simulación, por lo que el usuario puede tener dificultades para "digerir" tantos resultados. Debido a esta razón, el análisis de resultados para detectar posibles errores e incongruencias se suele realizar utilizando figuras (perfiles, tendencias, comportamientos...) más sencillas de interpretar que interminables cuadros con valores numéricos.</li> <li>• Aspectos relacionados con la convergencia, ya que en ocasiones un diagrama de flujo típicamente implica alrededor de 100 ecuaciones o más y muchas de ellas no son lineales.</li> </ul>

# **CAPÍTULO 2**

## **INTRODUCCIÓN AL SIMULADOR DE PROCESOS SIMSCI-PRO II**

Pro II es un simulador de procesos que trabaja en estado estacionario, es un software de gran utilidad para Ingenieros de Procesos ya que permite hacer la simulación de una amplia gama de operaciones unitarias, desde la operación de una válvula hasta sistemas más complejos que existen en la industria química.

### 2.1 Características del simulador de procesos PRO II.

PRO II está diseñado para principiantes como para expertos en la simulación de procesos. Permite el procesamiento de una amplia entrada de datos y la comprobación de errores. Realiza simulaciones completas, fiables y precisas. Es compatible con Windows, lo que permite exportar información a Word y Excel.

Los tipos de procesos químicos que permite simular son los siguientes:

#### **Petróleo /procesamiento de gas:**

- Endulzamiento de gas amargo.
- Operación de trenes de compresión.
- Deshidratación de gas.
- Formación de hidratos/inhibición.

#### **Refinación:**

- Procesamiento de petróleo pesado.
- Pre calentamiento de crudo.
- Destilación de petróleo crudo.
- FCC principal.
- Divisor y separador de nafta.
- Operación de columna desbutanizadora.
- Alquilarción de ácido sulfúrico.

#### **Aplicación a Polímeros:**

- Polimerización por radicales libres.
- Copolimerización.

#### **Petroquímica:**

- Fraccionamiento de Etileno.
- Separación de Propano-propileno.
- Separación de aromáticos.
- Recuperación de Naftalinas y Olefinas.
- Producción de compuestos oxigenados.
- Cloración de propileno.

#### **Aplicaciones químicas:**

- Síntesis de Amoniaco.
- Destilación azeotrópica.
- Biocombustibles.
- Extracción líquido- líquido
- Destilación de fenol.
- Deshidratación.

#### **Aplicaciones Farmacéuticas:**

- Destilación batch y reacción.

## 2.2 Sugerencias para la selección del modelo termodinámico.

Es importante tener claro qué modelo termodinámico se va a seleccionar ya que dicho modelo se utilizará para predecir absolutamente todas las propiedades, tanto de los compuestos puros como de sus mezclas, en cualquier condición de presión y temperatura.

En ocasiones puede resultar difícil decidir qué modelo termodinámico se debe seleccionar debido a la gran cantidad de compuestos presentes en un mismo proceso (polares, apolares, electrolitos, solidos). Los simuladores de procesos comerciales proporcionan criterios de selección generales.

Tabla 2.1 Modelos termodinámicos que maneja PRO II. <sup>[23]</sup>

CATEGORIAS	METODOS TERMODINAMICOS	APLICACIÓN
<i>Most Commonly Used</i>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Soave-Redlich-Kwong (SRK)</li> <li>• Peng-Robinson (PR)</li> <li>• Gray-Streed (GS)</li> <li>• Braun K-10 (BK10)</li> <li>• Ideal</li> <li>• NTRL</li> <li>• UNIQUAC</li> <li>• UNIFAC</li> </ul>	Para procesos de gas y refinación de petróleo.
<i>Equations of State</i>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Soave-Redlich-Kwong (SRK)</li> <li>• SRK-Kabadi-Danner (SRKKD)</li> <li>• SRK-Huron-Vidal (SRKH)</li> <li>• SRK-Panagiotopoulos-Red (SRKP)</li> <li>• SRK-Modified- Panagiotopoulos-Reid (SRKM)</li> <li>• SRK Hexamer</li> <li>• Peng-Robinson</li> <li>• PR-Huron-Vidal (PRH)</li> <li>• PR-Panagiotopoulos-Reid (PRP)</li> <li>• PR- Modified- Panagiotopoulos-Reid (PRM)</li> <li>• BWRS</li> <li>• Lee-Kesler-P16cker (LKP)</li> <li>• Uniwaals</li> </ul>	Aplicable a una amplia gama de rangos de temperatura y presión. Pueden ser utilizados para calcular todas las propiedades termodinámicas. Las ecuaciones cúbicas, particular, son capaces de predecir con exactitud las condiciones críticas y supercríticas.
<i>Liquid Activity</i>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• NRTL</li> <li>• UNIQUAC</li> <li>• Wilson</li> <li>• Van Laar</li> <li>• Margules</li> <li>• Regular Solution</li> <li>• Flory-Huggins</li> <li>• UNIFAC</li> <li>• UNIFAC TDep-1</li> <li>• UNIFAC TDep-2</li> <li>• UNIFAC TDep-3</li> <li>• UNIFAC Free Volume</li> <li>• Ideal</li> </ul>	Son aplicables para calcular el coeficiente de actividad en la fase líquida.
<i>Special Packages</i>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• ALCOHOL: Procesos relacionados con alcoholes.</li> <li>• GLYCOL: Procesos relacionados con Glycol</li> <li>• SOUR: Aguas amargas</li> <li>• GPS SOUR WATER: Aguas amargas</li> </ul>	Ecuaciones que están diseñadas para resolver un determinado proceso industrial.
<i>Generalized Correlations</i>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Correlaciones generalizadas para predecir valores de K con ecuaciones semi-rigurosas.</li> <li>• Grayson-Streed y Chao-Seader: Fugacidades en la fase vapor.</li> <li>• K Braun K10: Esta basado en el concepto de presión de convergencia.</li> </ul>	

El simulador de procesos PRO II proporciona ecuaciones de estado y ecuaciones empíricas que contienen un conjunto de métodos termodinámicos, las categorías son mencionadas en la tabla 2.1 anterior.

Algunos aspectos que pueden ayudar a realizar la selección del modelo son:

-Clasificar los compuestos en función de su importancia en el proceso para centrarse en los compuestos clave.

-Determinar cuáles son las propiedades a las que el modelo es más sensible. Por ejemplo, en el diseño de las columnas de destilación es importante predecir el equilibrio líquido-vapor, pero no es tan importante predecir la viscosidad en fase vapor.

-Comprobar si el rango de temperatura, presión o composición es el apropiado para aplicar el modelo.

-Comprobar que el modelo es el recomendable para predecir el comportamiento de esa familia de compuestos.

### **2.3 Manejo del simulador de procesos PRO II, paso a paso.**

De forma general cuando en el simulador muestra algún color es necesario describir qué significa ya que esto permite trabajar de una manera adecuada:

- El color rojo indica que el simulador necesita un dato o acción para que pueda correr la simulación. Cuando uno o varios equipos tienen este color, significa que está especificando de forma incorrecta algún dato.
- El color verde indica que son datos que el usuario puede dar al simulador o bien no darlos.
- El color azul indica que los datos proporcionados al simulador son correctos y permiten que trabaje. Cabe mencionar que cuando un equipo tenga este color significa que la simulación ya “corrió” y está bien lo que se ha hecho.

**NOTA:** No siempre que se ponga en azul significa que los datos obtenidos sean los correctos, ya que el simulador solo es una herramienta que permite solucionar problemas de una manera más sencilla, pero el usuario debe tener conocimiento de lo que está realizando así como de los posibles resultados que se pueden esperar.

- El color amarillo es poco común que aparezca, pero indica que se debe tener cuidado con los datos que se proporcionan ya que pueden estar fuera de los límites con los que comúnmente trabaja el simulador.

A continuación se describe como se usa el simulador de proceso PRO II. La primera pantalla ver (Fig.2.1), donde se indica lo antes mencionado:

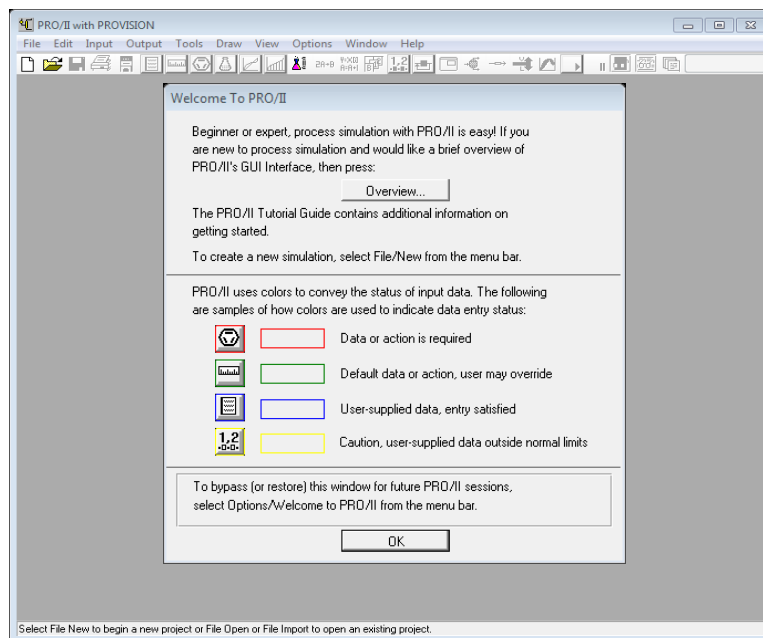


Fig. 2.1 Inicio del simulador.

Posteriormente se da "Clic" en "OK", por lo que la pantalla se pondrá de color gris oscuro, permitiendo trabajar con un nuevo archivo. Para comenzar con un nuevo archivo, se va a la barra de herramientas y dar "Clic" en el dibujo que aparece de una hoja blanca o bien en "File" seguido de "New". Una vez realizado lo anterior se tendrá una ventana ver (Fig.2.2).



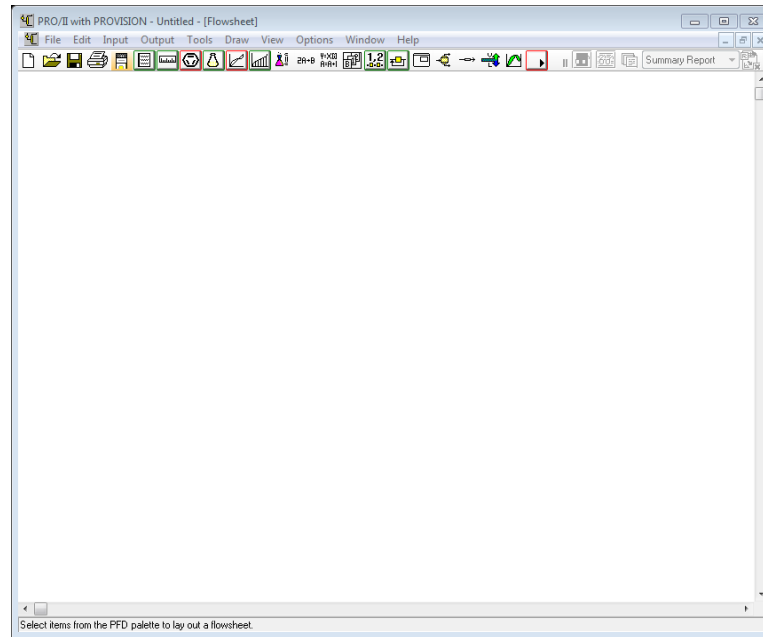


Fig. 2.2 Nuevo archivo

### 2.3.1 Descripción de la barra de herramientas.

Con una hoja nueva para simular, es importante identificar y conocer cada uno de los elementos con los que cuenta la barra de herramientas para un mejor manejo del simulador.

La barra de herramientas se divide en dos partes: primaria y secundaria.

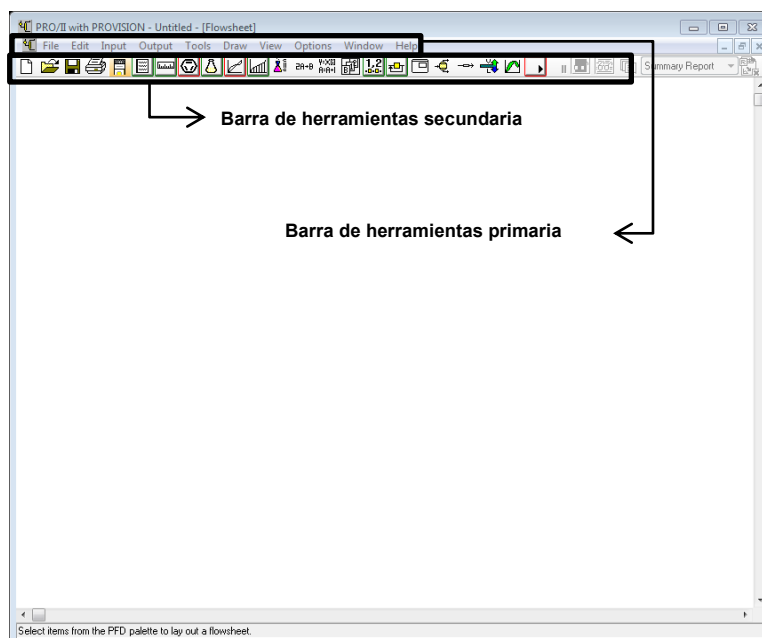


Fig.2.3 Barras de herramientas.

### *Barra de herramientas primaria:*

Al igual que los diferentes software que existen en el mercado para diversos usos, como son HYSYS, ChemCAD, entre otros; la barra de herramientas primaria es parecida en su estructura, ya que cuenta con diferentes opciones que permiten trabajar de una manera familiarizada al parecerse a otros software que son de uso común.

### *Barra de herramientas secundaria:*


Contiene iconos que son comandos los cuales son usados comúnmente. Estos iconos hacen más fácil el uso del simulador ya que con esta barra de herramientas es que se puede acceder de manera directa y rápida a diversas opciones que suelen ser las más utilizadas.

## **2.3.2 Selección de los elementos básicos de la simulación.**

Con una nueva hoja para realizar una simulación y para cualquier simulación lo primero que se recomienda es seleccionar lo que se denomina como los elementos básicos de una simulación, estos son: los modelos termodinámicos, el sistema de unidades y los componentes para así definir la línea de alimentación con los datos de entrada de ésta.

Esto se realiza de la siguiente forma:

### **2.3.2.1 Selección del modelo termodinámico.**

Para seleccionar el modelo termodinámico necesario para la simulación, se utiliza la barra de herramientas primaria, se selecciona “Input” seguido de “Thermodynamic Data” o bien se puede seleccionar el siguiente icono  que se encuentra en la barra de herramientas secundaria. Realizando cualquiera de las opciones aparecerá una ventana que contiene una gran variedad de opciones de modelos termodinámicos, ver (Fig.2.4).

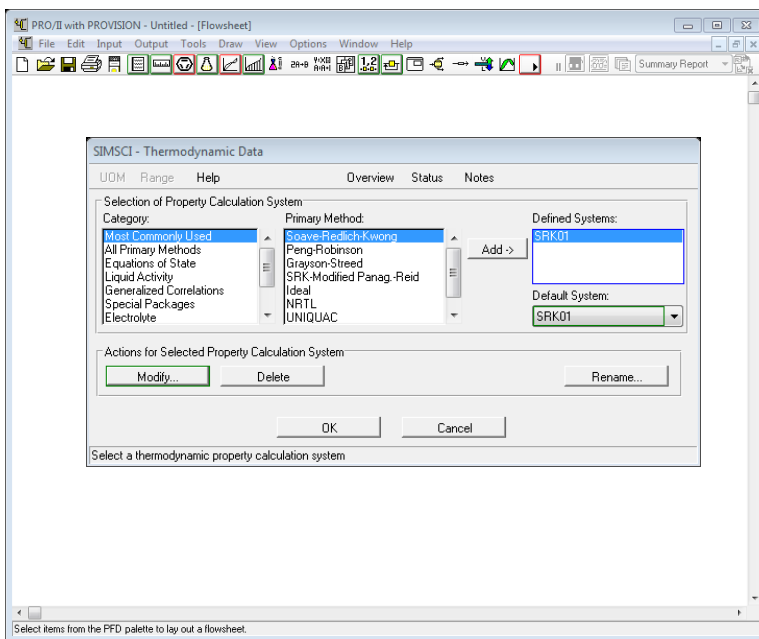



Fig. 2.4 Selección del sistema termodinámico.

De las diversas categorías descritas en la sección 2.2 se elige la categoría que contenga el modelo termodinámico seleccionado para la simulación, por ejemplo se selecciona la categoría “*Most Commonly Used*” seguido del método con el que se va a trabajar que puede ser “Soave –Redlich-Kwong” u otro, y dar “*Clic*” en “*Add*” y finalmente se termina dando “*Clic*” en “*OK*”.

### 2.3.2.2 Selección del sistema de unidades.

La selección del sistema de unidades con el que sea más cómodo trabajar durante toda la simulación o bien cambiarla cuando se desee, se puede realizar de la siguiente forma.

Una opción es ir a la barra de herramientas primaria y seleccionar “*Input*” seguido de “*Units of Measure*” o solo dando “*Clic*” en el icono que se encuentra en la barra de herramientas secundaria en forma de una regla  Realizando cualquiera de las opciones ver (Fig.2.5).

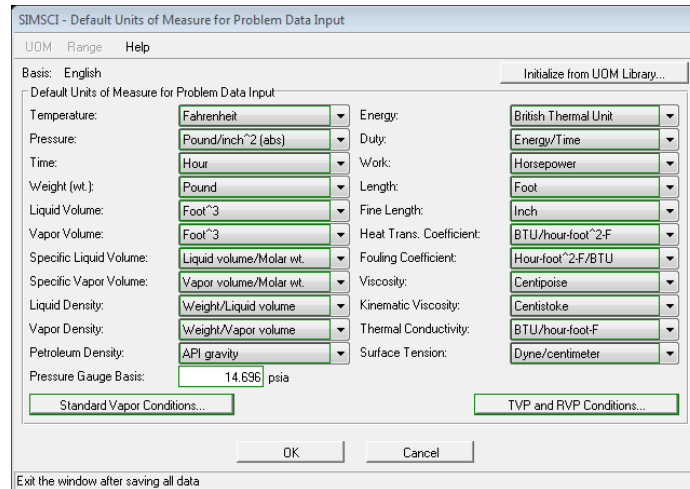


Fig. 2.5 Unidades de medida.

Para seleccionar el sistema de unidades para todas las variables, se da “Clic” en la parte superior derecha en “Initialize from UOM Library...”, con lo que se desplegará una nueva ventana donde se selecciona de manera general el sistema que se desee como se muestra en la figura 2.5. Seleccionado el sistema se da “OK” a ambas ventanas.

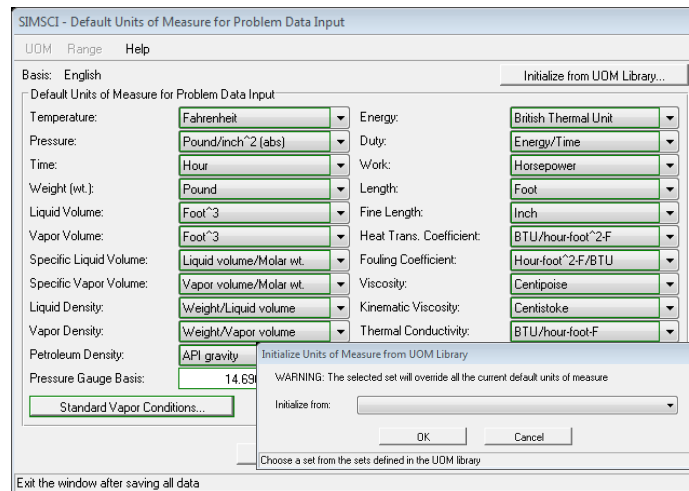


Fig. 2.5 Selección del sistema de unidades general.

O bien, si solo se desea cambiar las unidades de una variable en específico, se busca la variable a la cual se le desea cambiar las unidades dando “Clic” sobre de ella donde se desplegarán las opciones con las que se cuenta, por ejemplo cambiar la presión, ver (Fig.2.6).

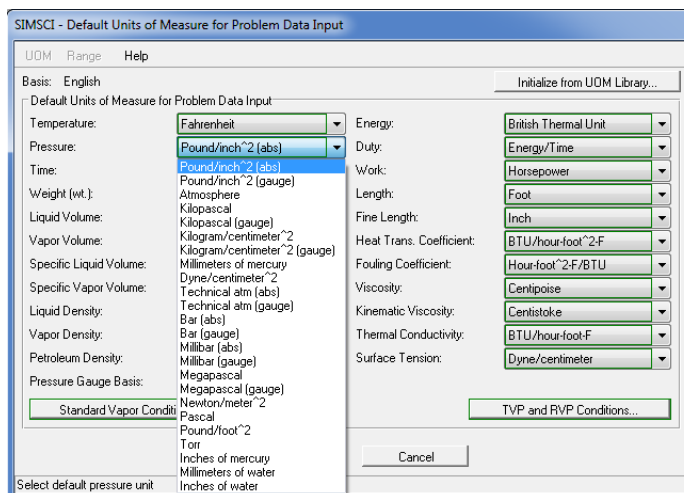



Fig. 2.6 Selección de las unidades de una variable

Como se puede observar en la figura 2.6 al dar “Clic”, se despliegan las diferentes opciones, es así que para todas las variables se proporcionan diferentes opciones de unidades.

Algo importante que se debe mencionar es que si se desea cambiar las unidades de algún valor en específico solo se debe colocar el cursor dentro del valor a cambiar unidades y en el menú de opciones en esta la opción “UOM” que aparece en todas las ventanas de la especificación de línea y equipos; se da “Clic” y se desplegará una ventana con una serie de opciones de unidades a elegir.

Se plantea el siguiente ejemplo para detallar lo antes mencionado, si el valor del flujo 2000 lb-mol/hr y se tiene en las unidades  $\text{ft}^3/\text{hr}$ , únicamente se buscan las unidades que sean necesarias para cambiar y se seleccionan; una vez seleccionadas las unidades se da “Clic” en “Change Units” y de esta manera se cambian específicamente las unidades.

### 2.3.2.3 Selección de componentes.

La selección de los componentes es de manera similar, en la barra de herramientas primaria se selecciona “Clic” en “Input” seguido de “Component Selection” o bien se da “Clic” en el icono  ubicado en la barra de herramientas secundaria, con cualquier de las opciones aparecerá la ventana que se muestra, ver (Fig. 2.7).

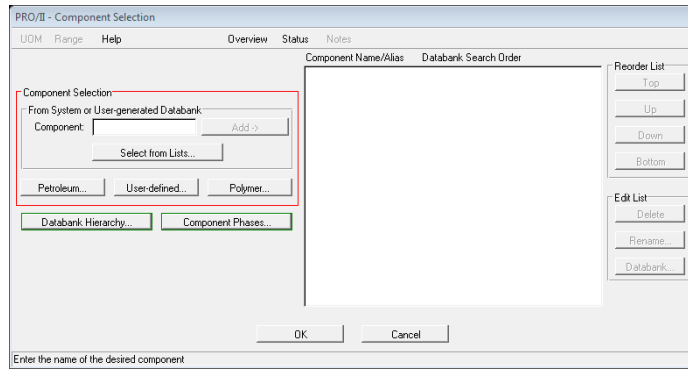


Fig. 2.7 Selección de componentes.

Se da “Clic” en “Select from List” y se desplegará una nueva ventana que contiene esta categoría con los diversos componentes.

En esta nueva ventana la opción de “Component Family” contiene una gama de diferentes componentes que se encuentran divididos en familias de componentes. Sí se selecciona alguna de ellas, en la parte inferior se despliega una lista de los componentes de esa familia, así se busca el componente ya sea por formula química o nombre químico seleccionando una de las opciones en “Sort/Search by” para buscar el componente y escribiendo en “Search String” ya sea la formula o nombre químico; encontrado el componente, se selecciona y se agrega dando “Clic” en “Add Components”. Se realiza lo mismo para todos los componentes que sean necesarios, ver (Fig.2.8). Seleccionados todos los componentes se da “Clic” en “OK” en ambas ventanas.

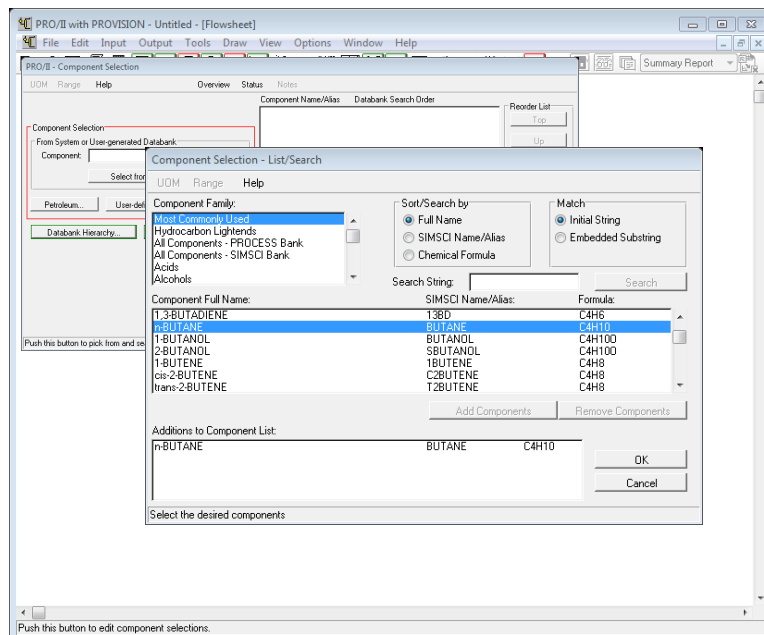


Fig. 2.8 Lista de componentes

Cuando uno de los compuestos a utilizar no se encuentra dentro de las listas de las diferentes categorías, se debe definir el componente de la siguiente forma:

Desplegada la ventana de selección de componente, ubicar y seleccionar la opción “*User-defined*” donde se desplegará una ventana en la cual se asignará el nombre del componente nuevo a definir, por ejemplo “azúcar”, posteriormente se da “*Clic*” en “*Add*” y se cierra la ventana dando “*Clic*” en “*OK*”, donde sale un mensaje el cual dice que debe ser definido el nuevo componente en “*Component Property Section*”, ver (Fig.2.9).

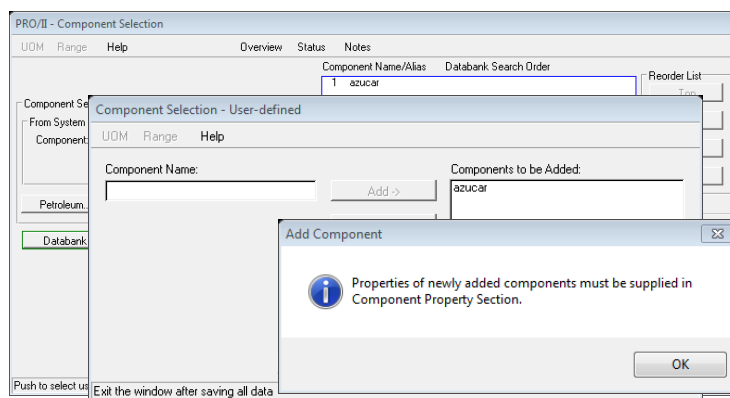



Fig. 2.9 Nuevo componente.

A continuación ubicarse en la barra de herramientas secundaria en la opción y se da “*Clic*” en “*Component Properties*”  se despliegan, ver (Fig.2.10) la cual se deben especificar ciertos parámetros del nuevo componente a definir. En el recuadro de “*Thermophysical Properties*” hay diversas opciones para definir el nuevo componente, como lo son valores de peso molecular, propiedades críticas, calor de reacción, definición de la estructura de la molécula a través del modelo de UNIFAC etc. Los parámetros a definir dependerán del tipo de componente. Se sugiere definir el mayor número de datos posibles.

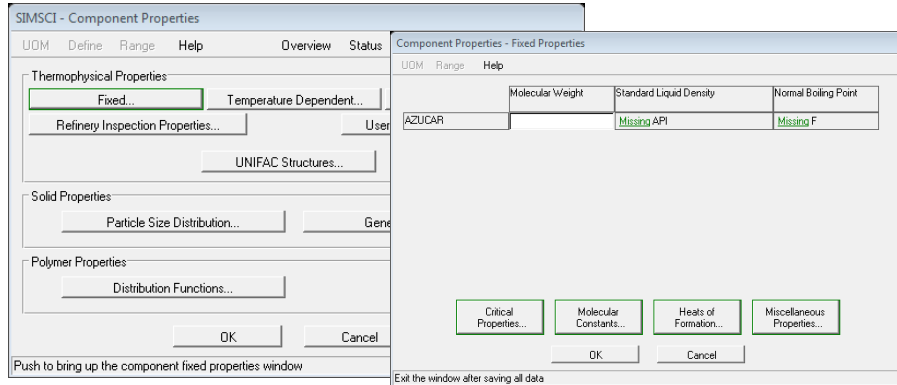



Fig. 2.10 Definición del nuevo componente.

### 2.3.2.4 Selección de equipos.

Habiendo seleccionado los elementos básicos de una simulación, se procede a realizar la selección de los equipos. Para seleccionarlos hay dos opciones, una es ir a la barra de herramientas primaria dar “Clic” en “View” seguido de “Palettes” y seleccionar la opción “PDF”, o la más sencilla de buscar el icono de “Show or Hide PDF Palette”  en la barra de herramientas secundaria. Con cualquiera de las dos opciones aparecerá una barra con el dibujo de los diferentes equipos en la parte derecha del simulador, ver (Fig.2.11).

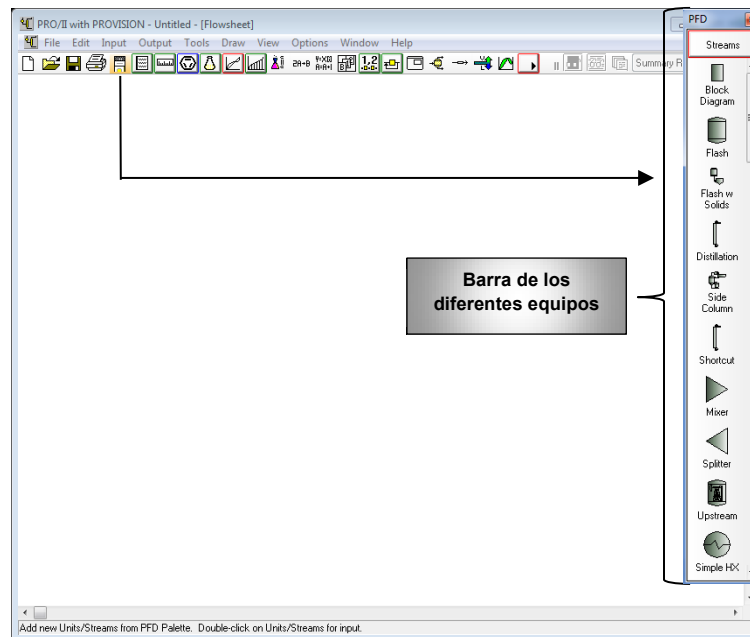


Fig. 2.11 Barra de equipos.



Desplegando la barra del recuadro de PDF se encuentra una variedad de equipos que se pueden simular. Encontrado el equipo se selecciona dando “Clic” sobre esté. Cuando ya está seleccionado el equipo en el cuadro del lado derecho, aparecerá la figura de un tanque con salidas en la parte superior e inferior. Se podría describir a esta acción como “copiar el equipo”. Para que aparezca la imagen del equipo en la hoja de trabajo solo se lleva el cursor a cualquier parte de la pantalla dando “Clic”, se puede describir a esta acción como “pegar el equipo”. Es así como se seleccionan todos los equipos que sean necesarios, dando doble “Clic” sobre el equipo y se desplegará una ventana propia del equipo. Todos los equipos deben ser especificados con ciertos datos para que pueda correr el programa.

### 2.3.2.5 Selección de líneas (corrientes).

La selección de líneas no es otra cosa más que las líneas que representan las corrientes de los procesos como son la alimentación y salida de cada equipo en la simulación, el número de líneas pueden variar de acuerdo a las líneas que se necesiten para cada equipo.

La selección de líneas es similar a la selección de un equipo, solo se da “Clic” en “Streams” en la misma barra donde aparecen los equipos, ver (Fig.2.12), una vez dado “Clic” en el cursor aparecerá una letra “S” dentro de un recuadro, esto indica que ya se seleccionó la línea.

Para marcar la línea en la pantalla se da “Clic” izquierdo en donde se quiera colocar la línea, marcándola y se suelta dependiendo de qué tan larga se requiera que sea la línea, y es así como se marcan todas las líneas que se deseen.

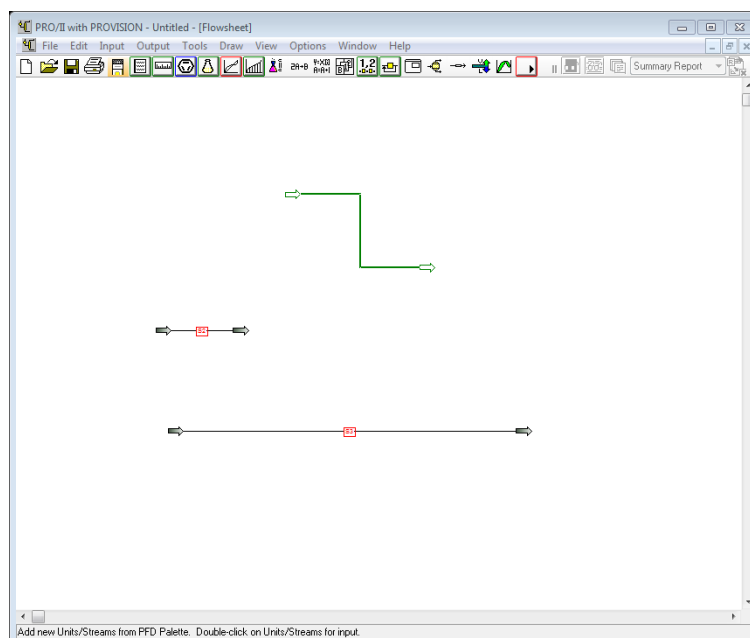


Fig. 2.12 Selección de la línea

En caso de que se sigan marcando líneas y ya no sean necesarias, en el teclado de la computadora se aprieta la tecla “Esc” y se libera de la selección.

Si se requiere en la simulación enumerar las líneas de acuerdo a un diagrama de flujo de procesos, solo debe de seleccionar la línea a numerar dar doble “Clic” sobre ella y ubicar “Stream” para asignar el número correspondiente de la línea, ver (Fig.2.13).

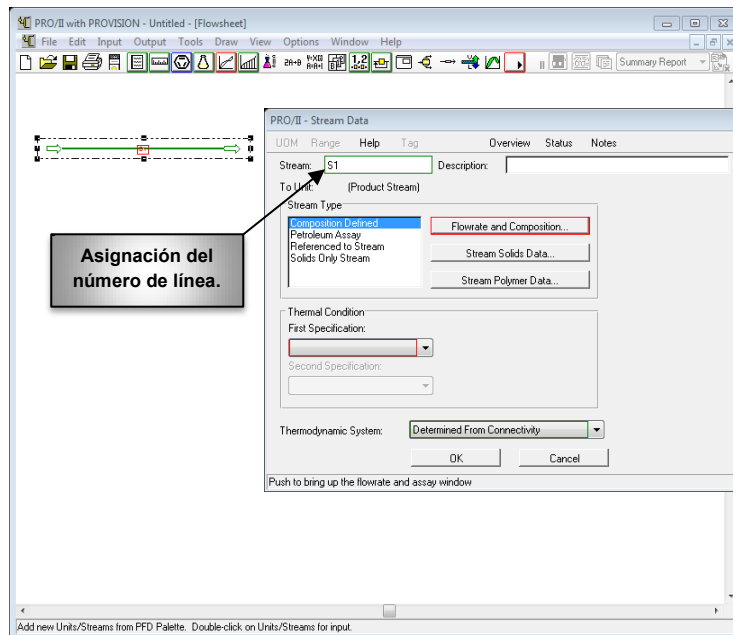
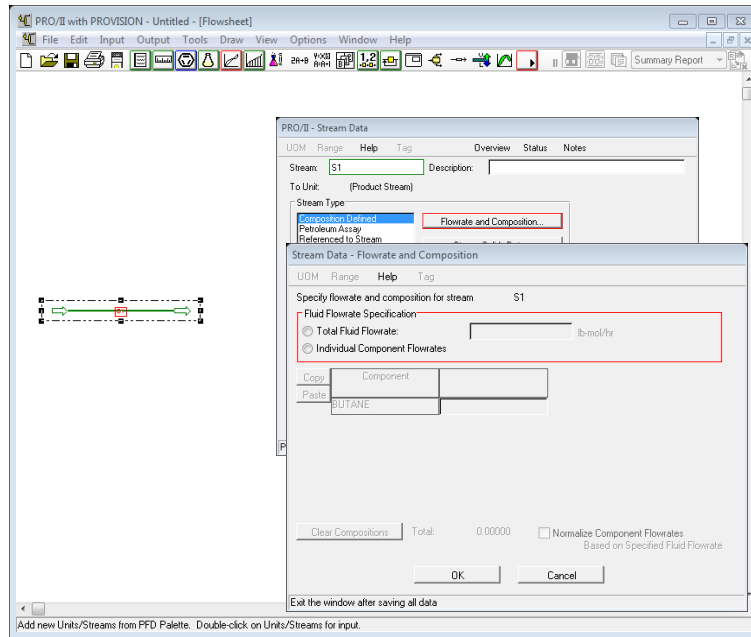


Fig. 2.13 Asignación del número de línea.

### 2.3.3 Datos de entrada para la línea de alimentación.

Marcada una línea y si esta es la que se va a designar como la línea de alimentación para posteriormente conectarla al equipo es necesaria especificar los datos de entrada, lo cual se realiza de la siguiente forma:

Sobre la línea ya marcada en la pantalla se da doble “Clic” izquierdo con lo cual aparecerá la ventana que se muestra, ver (Fig.2.14).



**Fig. 2.14 Datos de entrada**

Los datos de entrada que son necesarios dar al simulador y con los que se debe contar son: temperatura, presión y el flujo de alimentación; si es necesario se introduce la composición de cada componente en caso de que la alimentación sea una mezcla.

Se define la composición de la alimentación, seleccionando la opción “*Composition Defined*” seguido de “*Flowrate and Composition...*” la cual desplegará más opciones como se muestra, ver (Fig.2.15).

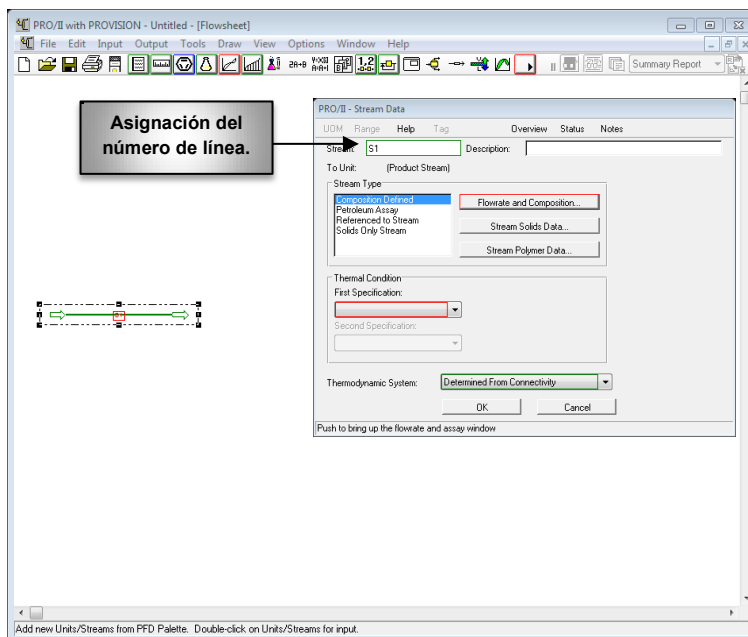


Fig. 2.15 Definición de la composición

Las dos diferentes formas de especificar la composición son las siguientes, esto va a depender de la forma en que se encuentren los datos:

1. Si se dispone del valor del flujo total de la simulación y la composición de la mezcla, la introducción de datos se realiza seleccionando la opción en “*Second Specification*” dando el valor del flujo total de la alimentación y dando la composición de cada componente.

Suponiendo que se tiene un flujo de alimentación de 2000 lb-mol/hr de una mezcla de 0.4 mol de agua, 0.2 mol de CO<sub>2</sub>, 0.2 mol de etano y 0.2 mol metano. Estos datos se especifican donde corresponda como se muestra en la (Fig.2.16).

2. O bien definiendo la composición del flujo por cada componente. Esto es seleccionando la opción “*Individual Components Flowrates*” (Fig.2.14) en esta opción se define el flujo individualmente por cada componente. Suponiendo que se tiene la misma mezcla pero ahora se conoce de manera individual el flujo de cada uno de los componentes, 800 lb-mol/hr de agua, 200 lb-mol/hr de CO<sub>2</sub>, 640 lb-mol/hr de etano y 360 lb-mol/hr de metano. Estos datos se especifican donde corresponda como se muestra en la (Fig.2.17).

En ambos casos se da “*Clic*” en “*OK*” y con esto queda definida la composición de la alimentación.

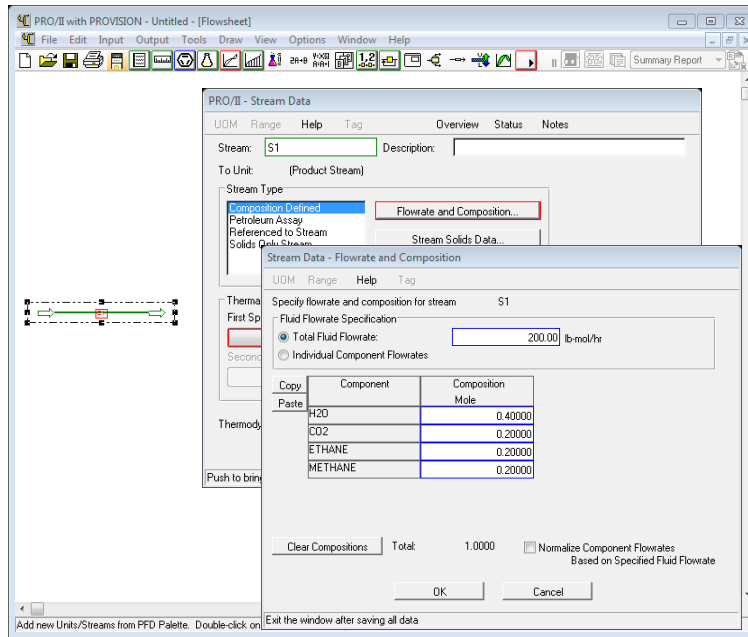


Fig. 2.16 Definición de la composición con el flujo total de la alimentación.

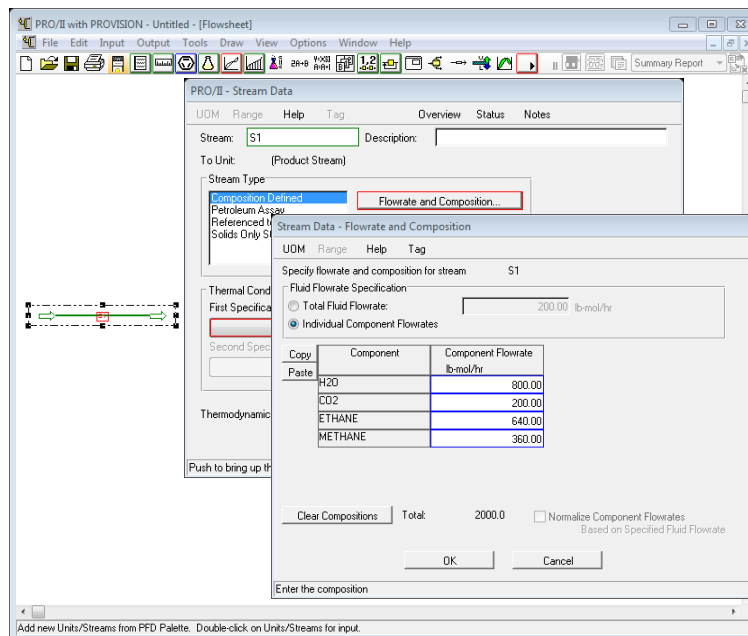
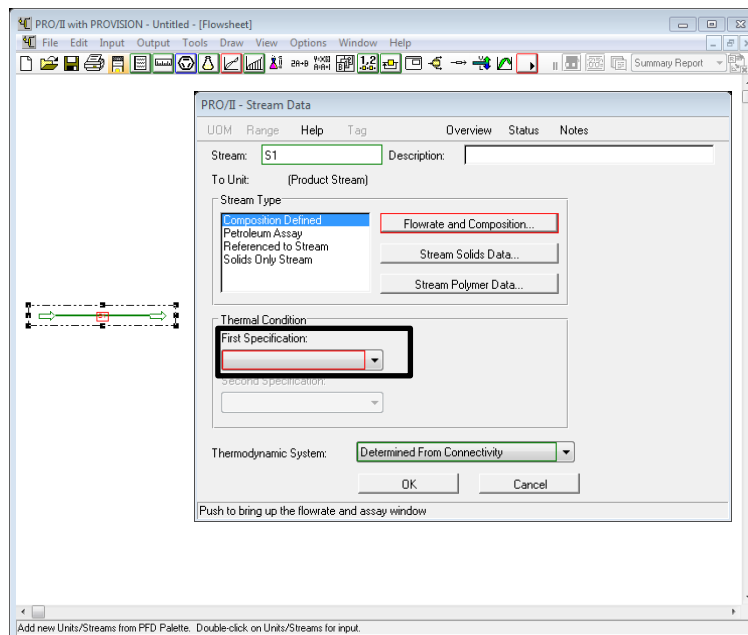


Fig. 2.17 Definición de la composición con el flujo individual de cada componente.

Posteriormente se ubica “*Thermal Condition*”, para especificar las condiciones térmicas. Dentro de esta opción se da la primera y segunda especificación ya sea primero temperatura y después presión o viceversa, esto se realiza desplegando la opción “*First Specification*”, ver (Fig.2.18).

Donde se da como primera especificación la temperatura, colocando el valor correspondiente de temperatura en el recuadro rojo, una vez colocado el valor en automático en lugar de tener el contorno color rojo será de color azul.



**Fig. 2.18 Primera especificación**

Para la segunda especificación se despliega la opción “*Second Specification*”. Cabe mencionar que la ventaja con la que cuenta esta opción es que si no se llega a contar con el valor de presión y se cuenta con otro valor se puede dar siempre y cuando este valor se encuentre dentro de las opciones que se desplegará, ver (Fig.2.19).

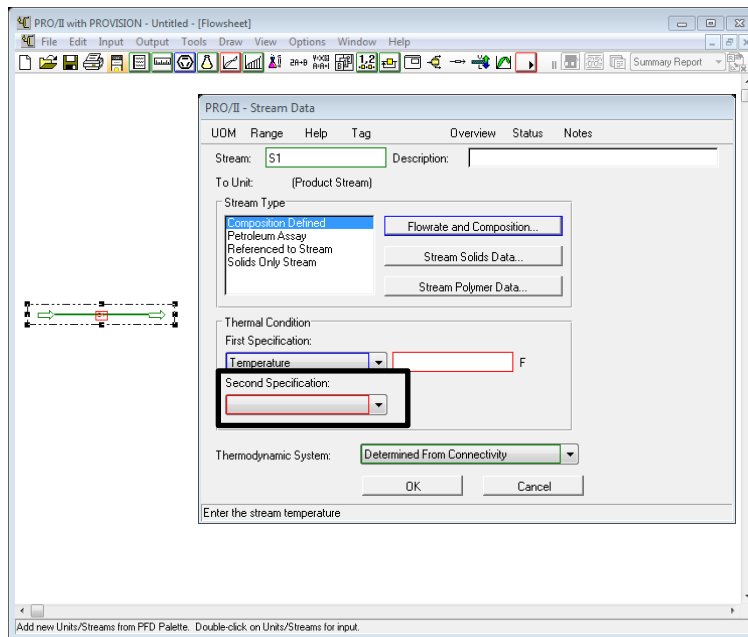


Fig. 2.19 Segunda especificación.

### 2.3.4 Ejecución de la simulación.

Para llevar a cabo una simulación es necesario lo siguiente:

1. Contar con todos los datos necesarios que solicite el programa como lo son: los elementos básicos de la simulación (modelos termodinámicos, sistema de unidades y los componentes) así como datos que se soliciten para la especificación de cada equipo.
2. Definir la línea de alimentación
3. Selección y especificación de los equipos con los que se trabaje dentro de la simulación, cada equipo deberá ser especificado.

Una vez realizado lo anterior viene la parte de ejecutar el programa. A la parte en la que se ejecuta el programa se le denomina “correr” la simulación y el resto es el proceso mediante el cual la computadora lleva a cabo las instrucciones del programa informático para realizar los cálculos de acuerdo a los datos de entrada que se otorgan y así llevar a cabo la simulación solicitada.

Para “correr” la simulación en la barra secundaria de herramientas hay un icono llamado “Run”, este icono en forma de triángulo que apunta hacia la derecha, al seleccionarlo lleva a cabo la ejecución del programa, lo cual permite que se realice la simulación. Este icono es importante correr el programa. En la (Fig.2.20) se puede ver la ubicación de este icono así como el auxiliar que permite detener la simulación.

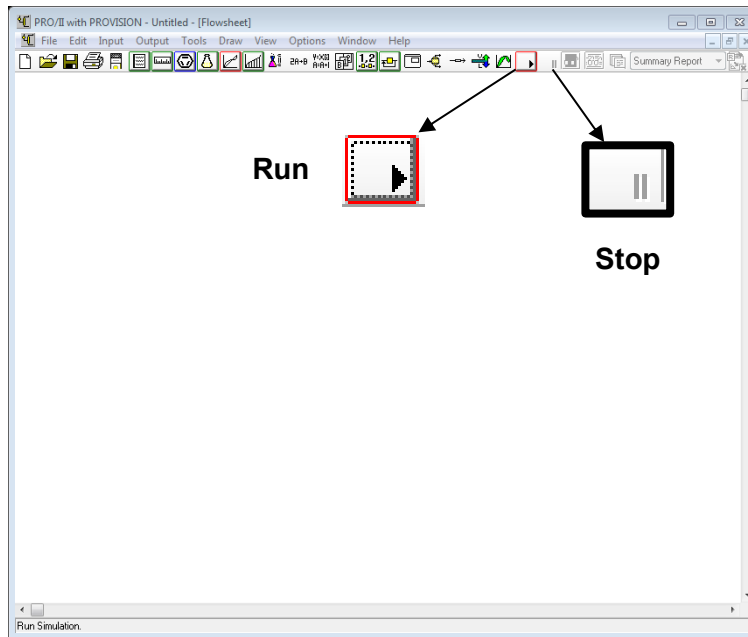


Fig. 2.17 Ejecución del programa.

#### 2.4 Planteamiento de los problemas prácticos y casos de estudio.

Anteriormente se describió, el tipo de procesos que se pueden simular utilizando el simulador de procesos Pro II. Una vez conocido que tipo de procesos se pueden simular es importante llevar a cabo un método para una mejor solución al problema planteado.

Para resolver un problema de forma rápida y sencilla es necesario contar con todos los datos necesarios para la resolución así como plantear un posible método para resolver el problema. Es así como se plantea el siguiente método para resolver problemas a través del simulador de procesos, la cual consta de los siguientes pasos:

1. Planteamiento del problema
2. Interpretación del problema mediante la elaboración de un esquema del flujo de proceso indicando datos de entrada y salida de cada equipo (FP).
3. Selección de datos de entrada y salida, así como datos específicos de cada equipo (Grados de libertad).



4. Revisar que no falten datos de algún modulo, de ser así completarlo.
5. Inicio de la simulación en el simulador de procesos: Una vez que se inicia la simulación se propone que se seleccione como primer paso lo que llamamos los elementos básicos de la simulación y estos son; el estado termodinámico, sistema de unidades y los componentes.
6. Selección y especificación de la línea de alimentación.
7. Revisar que no haya falta de datos, se sugiere revisar datos alimentados en todo sistema.
8. Correr la simulación.
9. Continuar con la elaboración de la simulación de acuerdo al FP que se ha planteado en el punto 2.
10. Análisis de la simulación para verificar si lo que el simulador está dando como resultados son correctos de acuerdo a lo esperado, checando equipo a equipo y balance global de masa y energía antes de imprimir resultados.

# **CAPÍTULO 3**

## **MODELADO DE SISTEMAS DE SEPARACIÓN LÍQUIDO - VAPOR**

### 3.1 Tanque separador flash.

Un equipo que más se usa y que es de gran utilidad dentro de los procesos es el tanque flash de almacenamiento. Este equipo lo podemos encontrar dentro del simulador de proceso PRO II llamado como flash, que además de utilizarlo dentro de una simulación como tanque de almacenamiento, también lo podemos simular de tal forma que nos proporcione información que puede ser de utilidad para conocer diferentes características de un sistema. Ya que al referirnos a simular un tanque flash, el principal funcionamiento de este equipo, además de almacenar, es el de calcular el estado termodinámico de un sistema.

Los tipos de flash más utilizados con los que el simulador PRO II trabaja son los siguientes:

**Tabla 3.1 Tipos Tanques Flash.** <sup>[23]</sup>

Tipo de flash.	Datos de Especificación.
Adiabático	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Temperatura y Presión estimada.</li> <li>• Presión y temperatura estimada.</li> <li>• Caída de Presión <math>\Delta P = 0</math> y Temperatura estimada.</li> </ul>
Isotérmico	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Temperatura y Presión o Caída de Presión <math>\Delta P = 0</math></li> </ul>
Isoentrópico	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Temperatura y Presión estimada.</li> <li>• Presión y temperatura estimada.</li> <li>• Caída de Presión <math>\Delta P = 0</math> y Temperatura estimada.</li> </ul>
Punto de Rocío.	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Temperatura y Presión estimada.</li> <li>• Presión y temperatura estimada.</li> <li>• Caída de Presión <math>\Delta P = 0</math> y Temperatura estimada.</li> </ul>
Punto de burbuja	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Temperatura y Presión estimada.</li> <li>• Presión y temperatura estimada.</li> <li>• Caída de Presión <math>\Delta P = 0</math> y Temperatura estimada.</li> </ul>

El tanque separador (flash) puede tener múltiples corrientes de alimentación, así como más de una corriente en los productos.

Las propiedades de cada corriente se ajustan automáticamente por el PRO II, extrayéndose los datos de respuesta colocando una corriente de salida para los diferentes productos del equipo.

Los productos que se pueden extraer de este equipo son: vapor, líquido, agua decantada y fases mixtas (vapor más líquido).

### 3.1.1 Especificación del tanque flash.

Cuando se da doble "Clic" sobre el equipo se despliega la ventana de especificación ver (Fig. 3.1). Para este equipo se tienen que dar 2 especificaciones para poder simular el equipo, las cuales se describen a continuación:

*First Specification:* Cuenta con tres opciones que son presión, temperatura o caída de presión. Los valores de temperatura corresponden a los valores de la línea de alimentación. Solo permite especificar uno de los tres datos, ver (Fig. 3.1).

Fig. 3.1 Primera especificación del equipo flash.

Second Specification: Esta especificación va de la mano con la primera especificación ya que define el tipo de equilibrio que requiere. Esta opción puede ser especificada por “*Unit Specification*” o “*Product Specification*”, ver (Fig. 3.2).

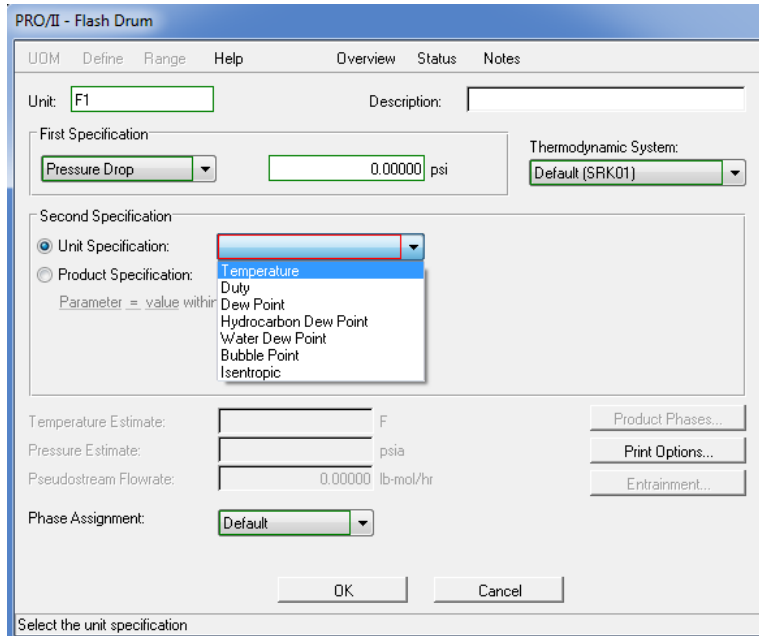


Fig. 3.2. Segunda especificación del equipo flash.

Estos dos tipos de especificación se discuten a continuación:

- *Unit Specification*: Esta especificación cuenta con una lista de diferentes opciones que se selecciona de acuerdo al tipo de flash que son las siguientes:
- *Temperature*: Se elige si en la primera especificación se eligió caída de presión o presión, correspondiendo a la temperatura de alimentación siendo un flash isotérmico.
- *Duty (Carga Térmica)*: Esta opción corresponde a un flash adiabático. El duty puede ser positivo (calentamiento), negativo (enfriamiento), o cero (cálculo de entalpia constante). Si se elige en la primera especificación la temperatura, la presión se calculará o viceversa cuando la caída de presión o la presión se elige en la primera especificación, la temperatura es calculada, cuando se da el valor de cero para duty.

En las siguientes opciones no se tienen que dar ningún valor si no al contrario, al seleccionar alguna de ellas dará un valor que puede ser de interés al final de la simulación:

- *Dew Point*: Calcula la presión del punto de rocío cuando se elige la temperatura en la primera especificación, o calcula la temperatura del punto de rocío cuando la caída de presión o la presión se elige en la primera especificación.
- *Bubble Point*: Calcula la presión del punto de burbuja cuando la temperatura se elige en la primera especificación o calcula la temperatura del punto de burbuja cuando la caída de presión o la presión se elige en la primera especificación.
- *Hydrocarbon Dew Point*: Calcula la presión del punto de rocío de hidrocarburos cuando la temperatura se elige en la primera especificación, o calcula la temperatura del punto de rocío cuando la caída de presión o la presión se elige en la primera especificación. Esta opción solo es aplicable para sistemas termodinámicos que son libres de agua.
- *Water Dew Point*: Calcula la presión del punto de rocío de la porción de agua que hay en la corriente cuando la temperatura se elige en la primera especificación, o calcula la temperatura del punto de rocío cuando la caída de presión o la presión se elige en la primera especificación.
- *Isentropic*: Calcula la entropía constante en el flash a partir de las condiciones de alimentación. También calcula la presión del producto cuando la temperatura se elige en la primera especificación, o calcula la temperatura del producto cuando la caída de presión o la presión se elige en la primera especificación.
- *Product Specification*: Esta opción se selecciona cuando se conoce algún valor específico de los diferentes parámetros (flujo, composición, presión de vapor, peso molecular, entalpía, entre otros) con los que cuenta esta opción.

La especificación de algún parámetro de las diferentes corrientes de los productos se realiza como se muestra a continuación:

La opción “*Second Specification*” y se selecciona “*Product Specification*”, seguido de “*Parameter*” el cual desplegará una nueva ventana, donde se selecciona la línea de la cual se van a definir algunos de los parámetros dando “*Clic*” en “*Stream Name*”, ver (Fig. 3.3).

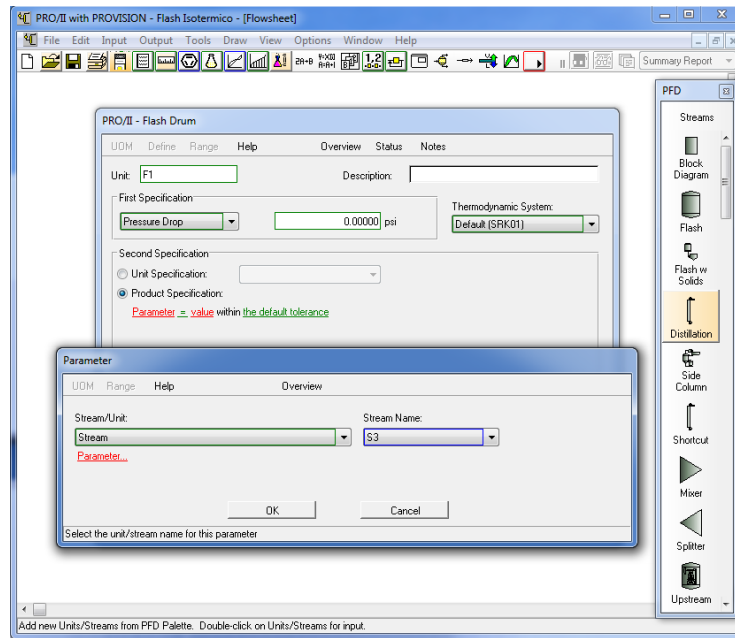


Fig. 3.3. Especificación por parámetros.

Seleccionada la línea dar "Clic" en "Parameter" que desplegará una nueva ventana la cual contiene los diferentes parámetros, y es así como se selecciona cada parámetro que se va definir con sus propias características, ver (Fig.3.4).

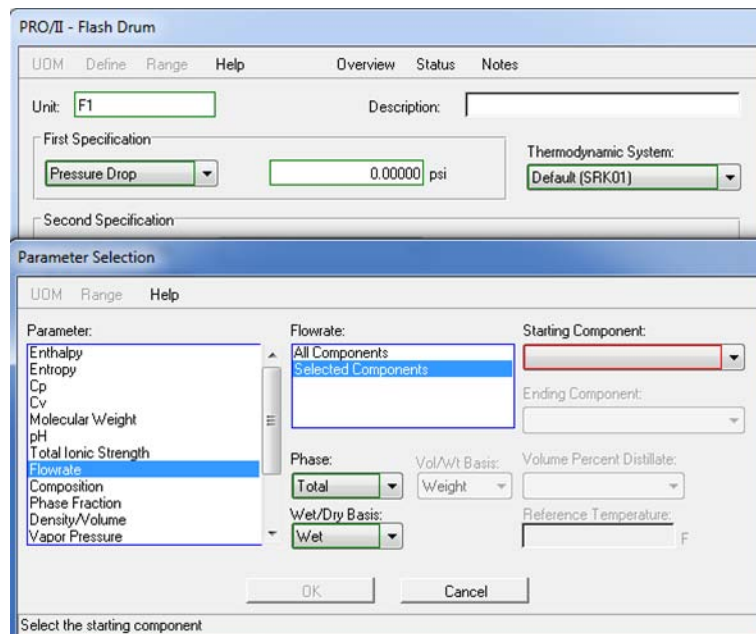


Fig. 3.4 Selección de los diferentes parámetros.

### 3.1.2 Descripción del equipo.

El equipo cuenta con tres salidas como productos, es importante conocer cada una de ellas para realizar una buena simulación. Se selecciona la opción “Streams” ubicada en la barra “PDF” y en automático en el equipo marcará cuales son las salidas.

Las salidas con las que cuenta el equipo son tres, la salida de vapor, líquido y agua, para ver qué salida le corresponde a cada uno se coloca el cursor sobre cada recuadro rojo y mostrará el nombre de cada salida, esto se muestra en la Fig. 3.5.

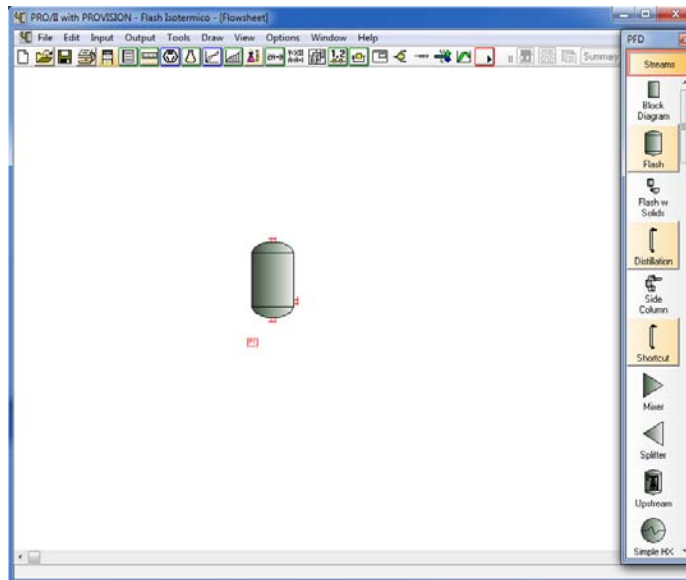


Fig. 3.5 Salidas del equipo flash.

Identificadas las salidas con las que cuenta el equipo se conecta la línea de alimentación y las líneas de los productos que sean necesarias, dependiendo del tipo de simulación que se realice.

La simulación de este equipo es sencilla, se simularán los diferentes tipos de flash de la tabla 3.1, y se analizarán los datos que se obtienen como resultado.

### 3.1.3 Punto de rocío.

Se tiene una corriente de 2204 lb/hr formada por 4 hidrocarburos cuyas composiciones se indican en la tabla 3.2, Se desea conocer; su temperatura de punto de rocío. La presión de operación del tanque flash es de 100 psi.



Tabla. 3.2 Composición de corrientes –punto de rocío.

Componente.	Fracción mol.
Propano	0.1
n-Butano	0.2
n-Pentano	0.3
n-hexano	0.4

Para iniciar la simulación, seleccionar los elementos básicos de una simulación.

- Modelo termodinámico: Recuerde que se debe seleccionar uno, bajo el cual se modelará el proceso, para este ejemplo se selecciona “Soave-Redlich-Knowng”, ver (Fig. 3.6).

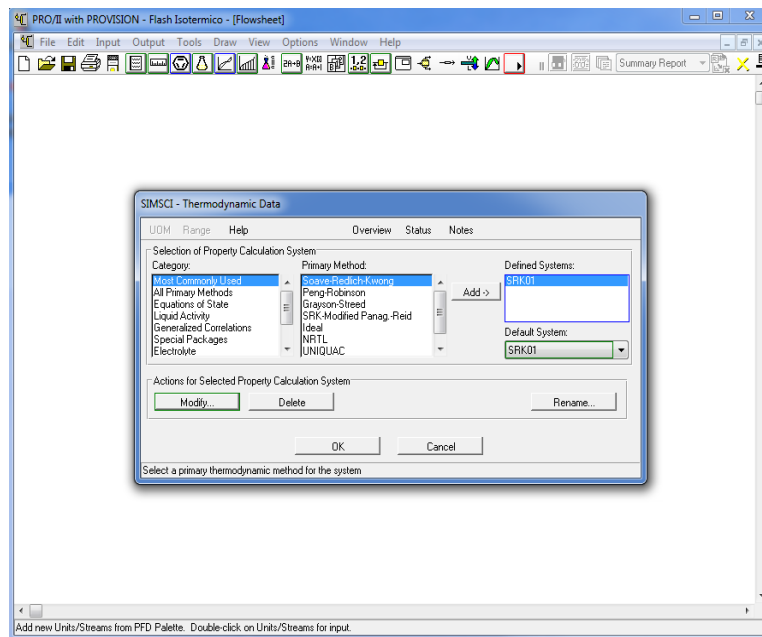


Fig. 3.6 Sistema termodinámico.

- Selección de unidades: para este ejemplo se define el Sistema Inglés, ver (Fig. 3.7).

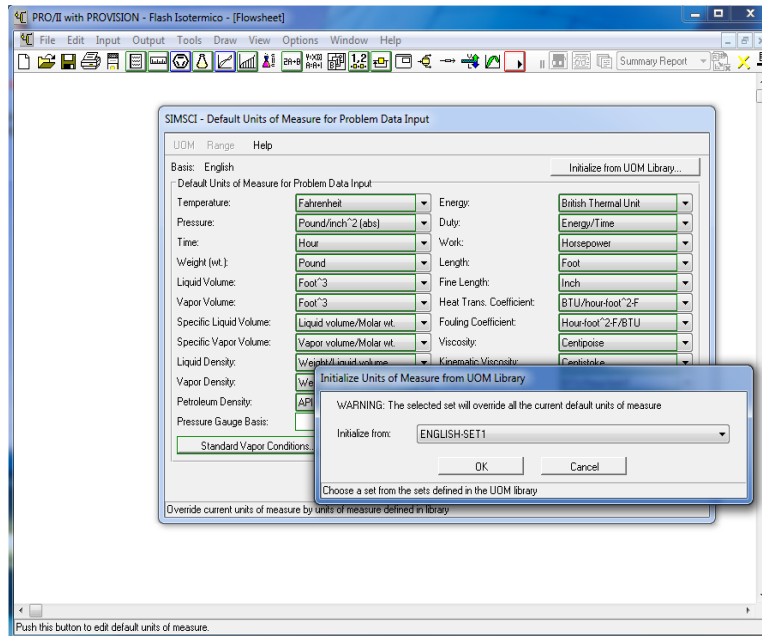


Fig. 3.7 Selección del sistema de unidades.

- Selección de los componentes a partir de la librería del simulador: Propano, n-Butano, n-Pentano y n-Hexano, ver (Fig. 3.8.)

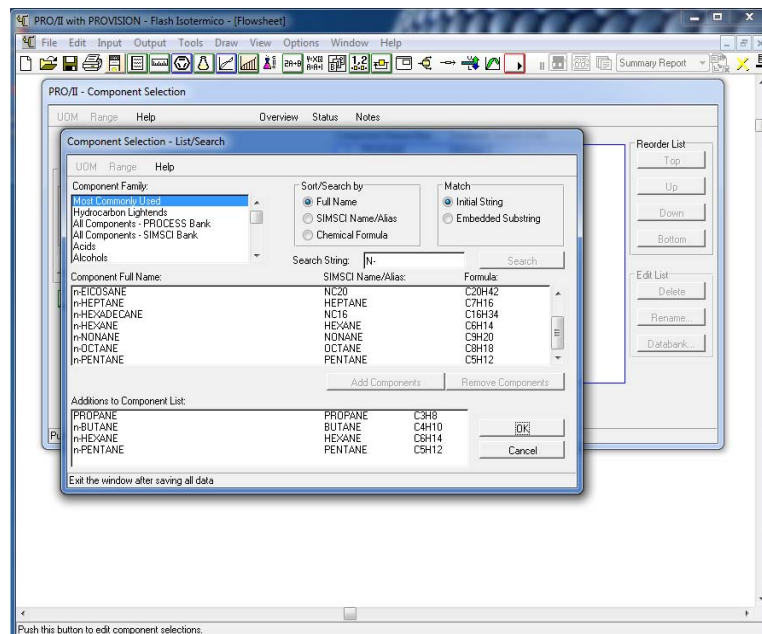
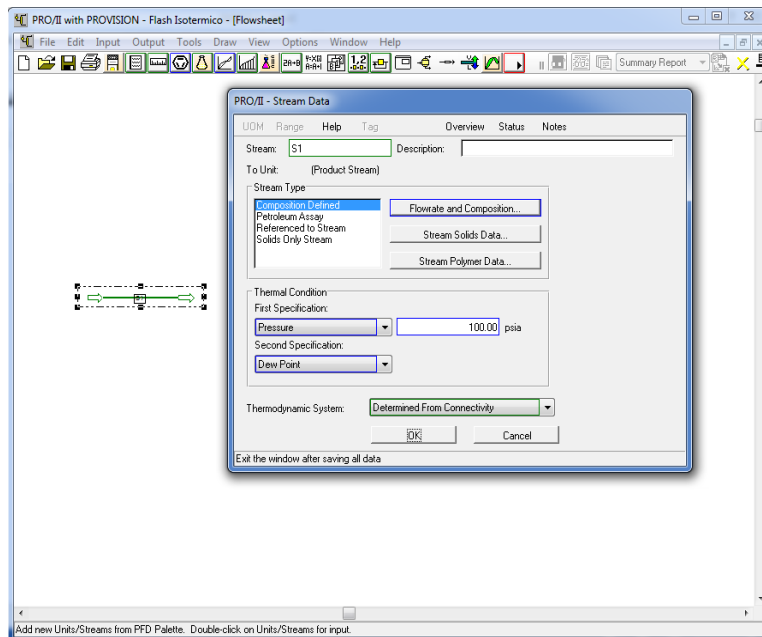


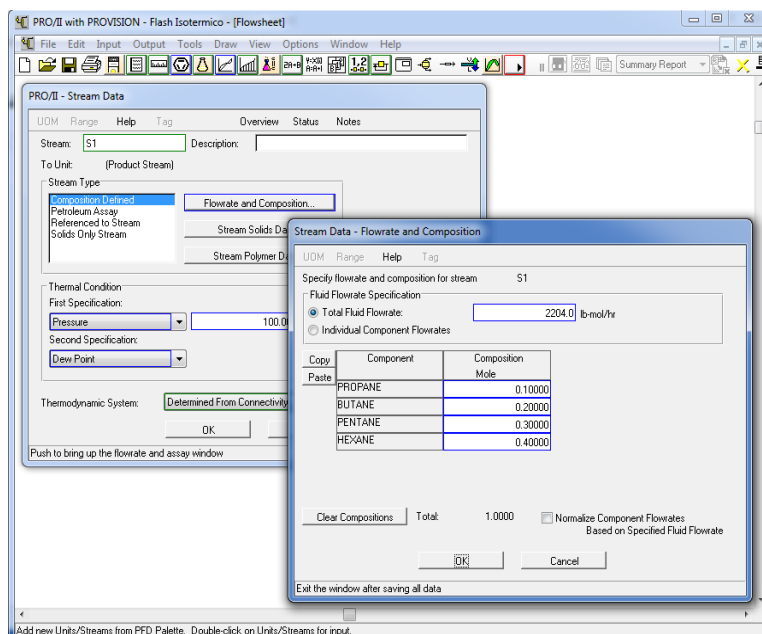
Fig. 3.8 Selección de componente.

*Definición de la línea de alimentación (selección y especificación de la línea de alimentación).*

En la línea de alimentación seleccionada se debe especificar las condiciones térmicas. La primera especificación es la presión de 100 psia y la segunda especificación corresponde a “Dew Point”, ver (Fig. 3.9). Para el flujo total de alimentación, dar “Clic” en “Flowrate and Composition”, ver (Fig. 3.10).



**Fig. 3.9** Especificación de las condiciones térmicas.



**Fig. 3.10** Definición del flujo de alimentación.

Para este ejemplo se modificarán las unidades, esto se realiza colocando el cursor en el recuadro donde se coloca el valor para posteriormente ubicar y seleccionar UOM, ver (Fig. 3.11.).

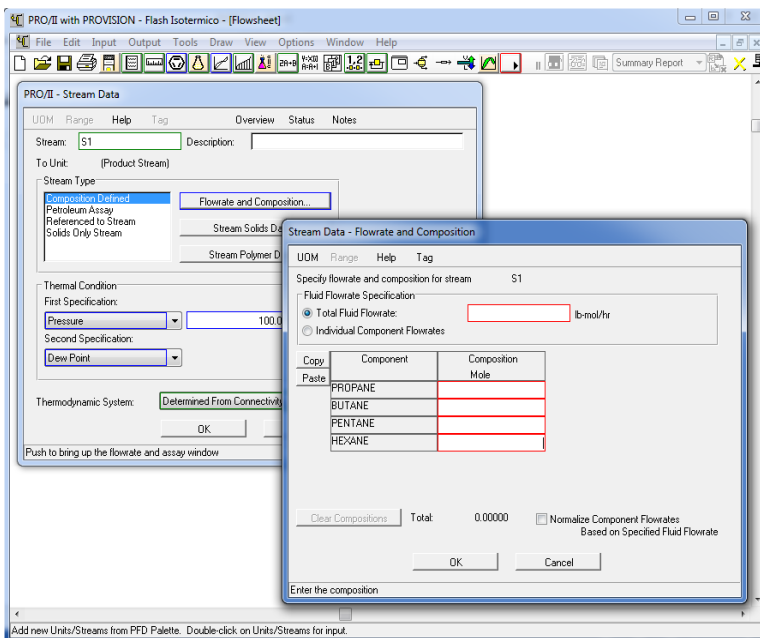


Fig. 3.11 Modificación de unidades.

Al dar "Clic" en UOM se desplegará una nueva ventana la cual contiene diferentes unidades. Se seleccionan las que se deseen, este caso son masa (lb/hr), ver (Fig. 3.12).

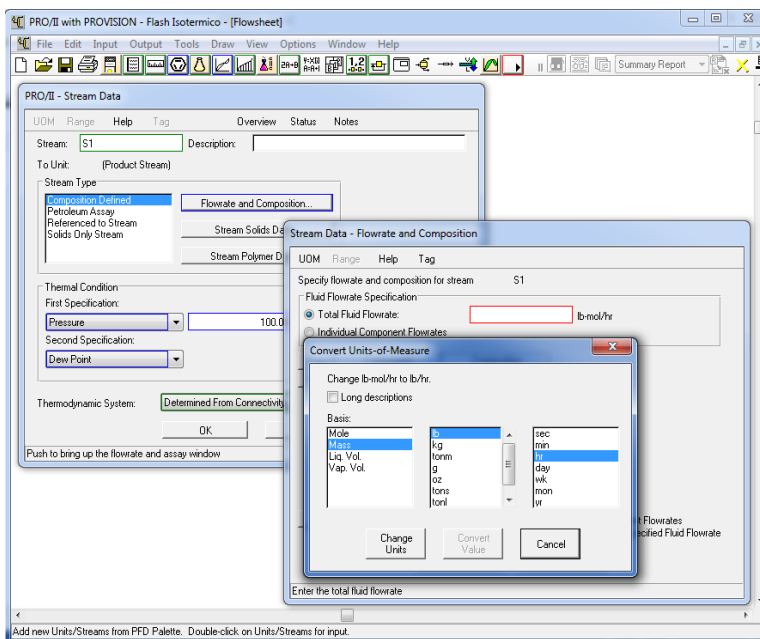


Fig. 3.12 Cambio de unidades.

Seleccionadas las unidades correspondientes, se cambiarán automáticamente al dar “Clic” en “Change Units”, ver (Fig. 3.12). Cambiadas las unidades, colocar el valor del flujo en las unidades correspondientes, ver (Fig. 3.13.).

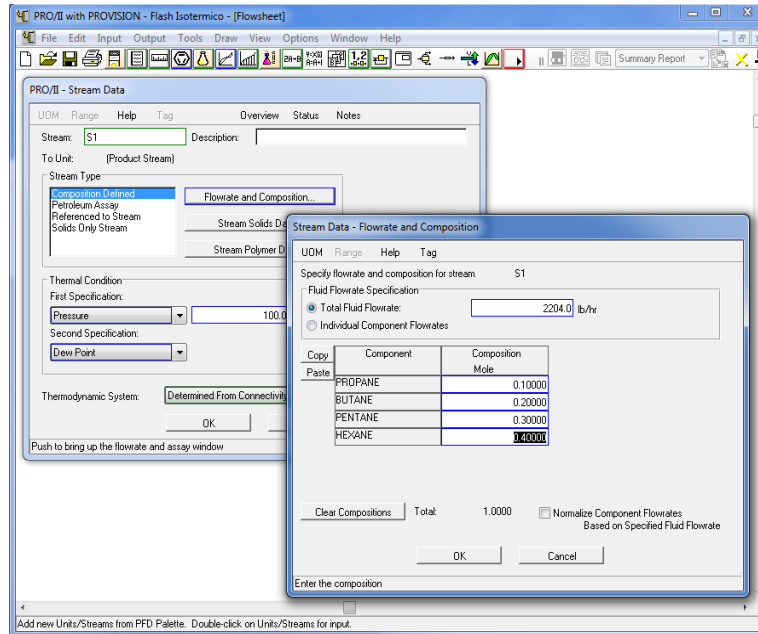


Fig. 3.13 Unidades modificadas.

### Conexión de la línea de alimentación y productos con el equipo

- Equipo: el equipo se localiza en la barra “PDF” con el nombre de “Flash”. Para esta simulación se conecta la línea de salida de vapor y líquido, ver (Fig. 3.14).

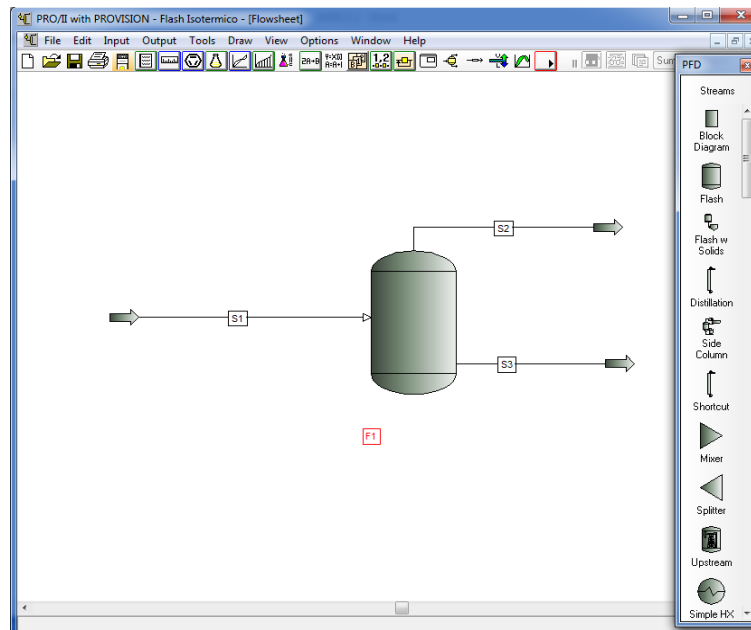


Fig. 3.14 Conexión de la línea de alimentación y productos.

### Especificación del equipo

Dar doble “Clic” sobre el equipo para desplegar la ventana que permite especificarlo.

La primera especificación corresponde a la caída de presión de 0 psi suponiendo que no hay caída de presión al llegar el flujo de alimentación al tanque. La segunda especificación corresponde a “Dew Point”, ver (Fig. 3.15).

*Especificado el equipo ejecutar el programa y obtener los resultados:*

Especificado el equipo dar doble “Clic” en “OK” en la ventana de especificación del equipo y ejecutar el programa con el icono “Run” que aparece en la barra secundaria, ver (Fig. 3.15). Para ver los resultados de una simulación existen diversas formas. Una de ellas es la que se explica a continuación:

Una vez que se corrió el programa y el equipo se pintó de color azul, ir a la barra de herramientas primaria y ubicar la ventana “Output”, ahí seleccionar la opción “Stream Property Table”, ver (Fig. 3.16)

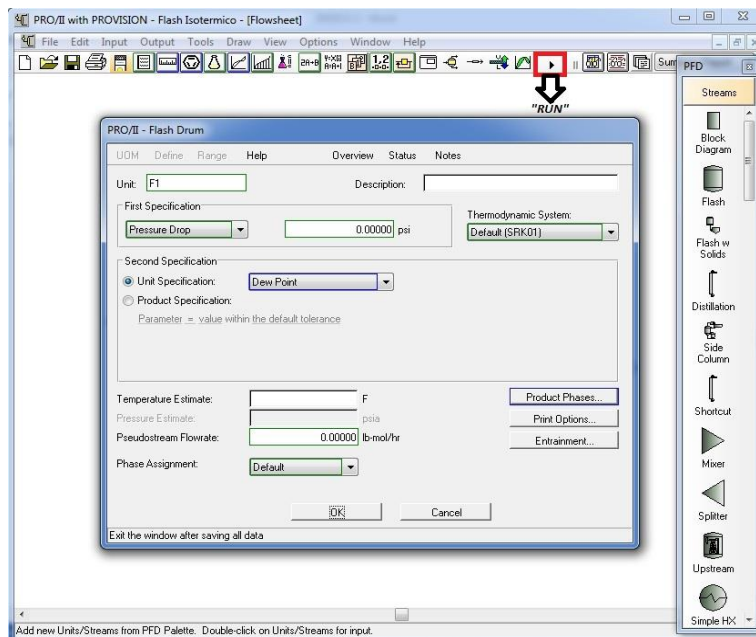


Fig. 3.15 Especificación del equipo flash.

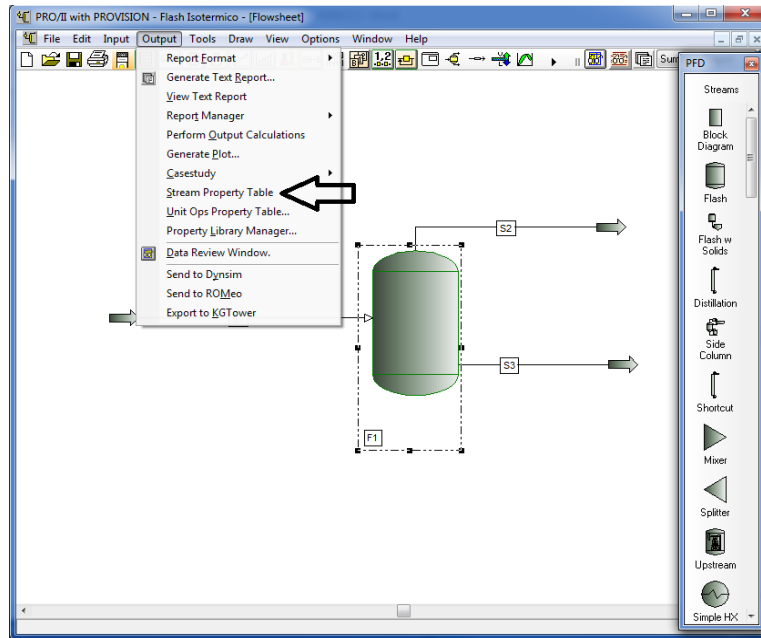


Fig. 3.16 Obtención de resultados.

Al seleccionar la opción “*Stream Property Tabla*”, un recuadro sobre el cursor, ver (Fig. 3.17).

El recuadro será una tabla la cual permitirá mostrar los resultados. Dicho recuadro se insertará dando “*Clic*” donde se desee colocar.

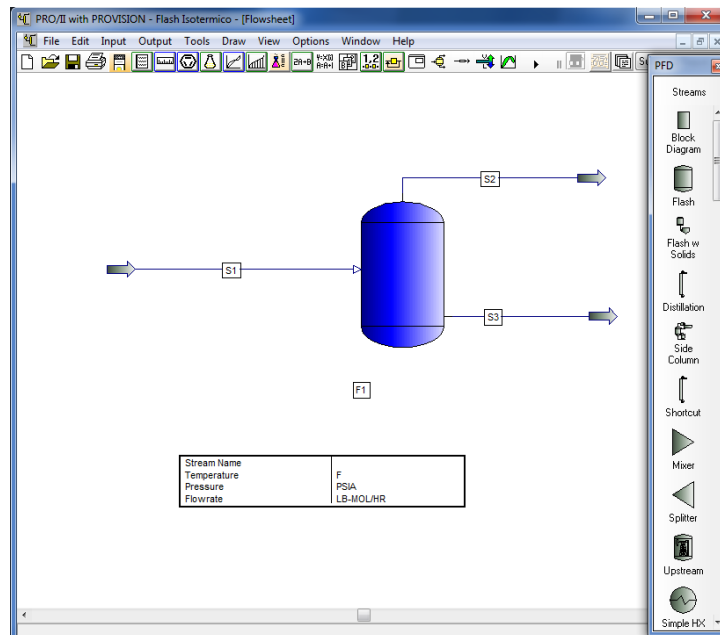
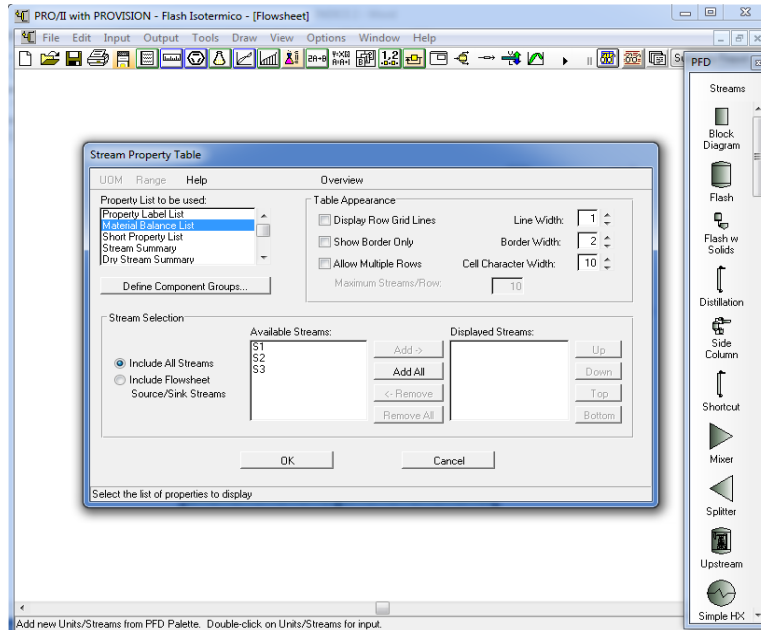


Fig. 3.17 Tabla de resultados.

Insertando el recuadro se da doble “Clic” sobre él, esto despliega una nueva ventana que contiene diferentes opciones de presentar los resultados, estas opciones son las que contiene “*Property List to be used*”.



**Fig. 3.18 Presentación de resultados.**

Seleccionar “*Material Balance List*”, el cual mostrará el balance de materia de la simulación realizada. Para ver los resultados de las líneas de interés ubicar la opción “*Available Streams*” en la cual se observa la lista con todas las líneas.

Se seleccionan las líneas que se requieren y se da “Clic” en “Add” o si se desea seleccionar todas únicamente se da “Clic” en “Add All”, ver (Fig. 3.18), las cuales se agregarán a “*Displayed Stream*”, ver (Fig. 3.19).



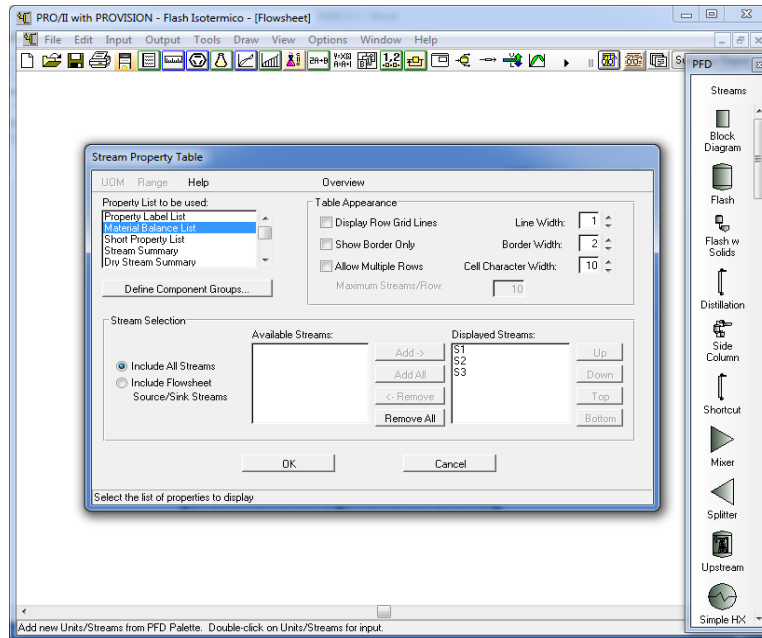


Fig. 3.19 Selección de las líneas.

Las líneas que están en la lista que contiene el recuadro “*Displayed Stream*” serán las mismas que aparecerán en el recuadro que contiene la tabla de resultados. Seleccionar la línea S1, S2 y S3 y dar “Clic” en “OK”. Es así como se muestra sobre la hoja de trabajo de la tabla que contiene los resultados de las diferentes líneas, ver (Fig. 3.20).

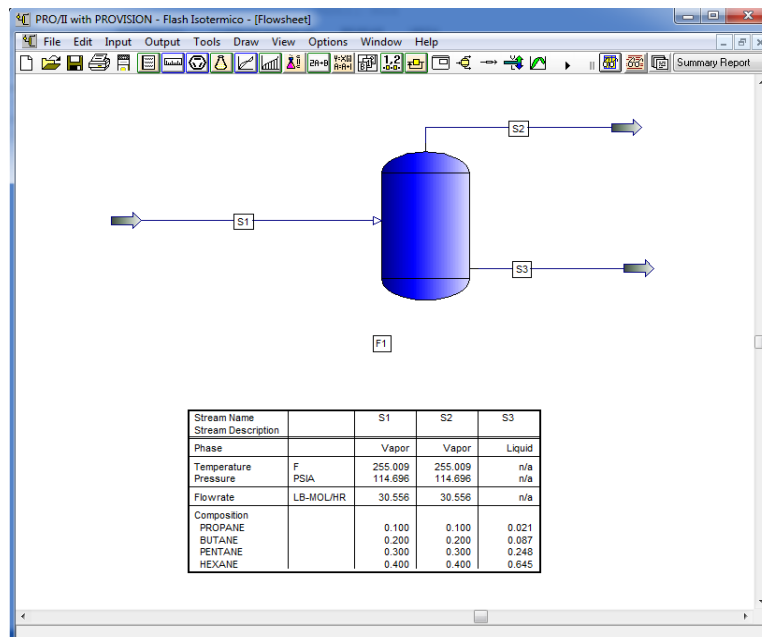


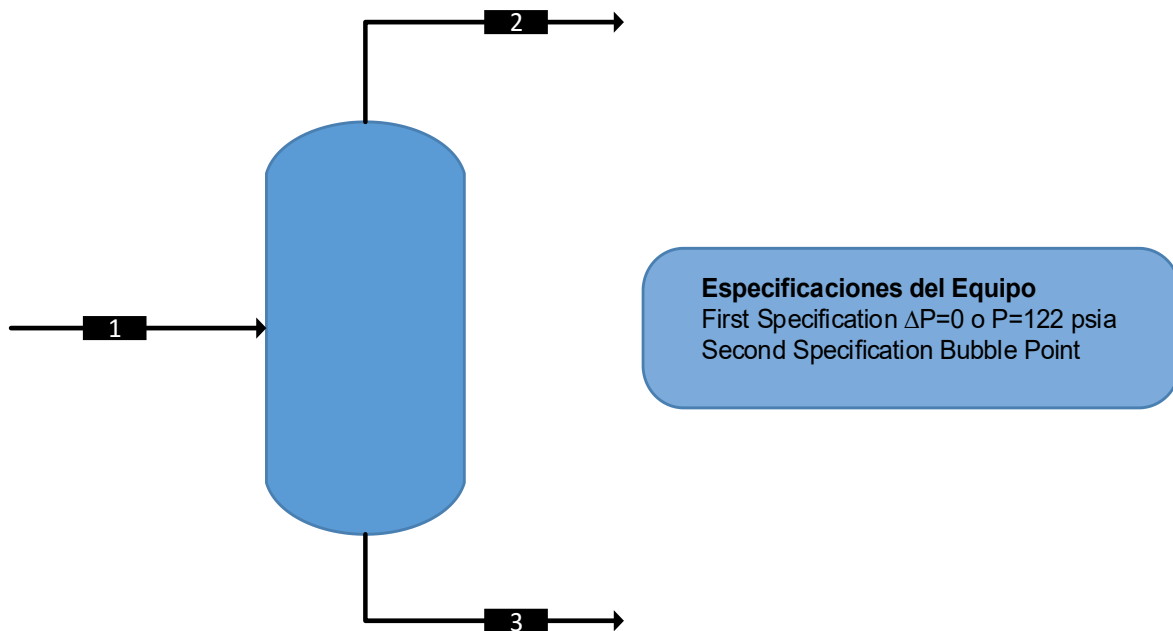
Fig. 3.20 Tabla de resultados.

La tabla nos permite ver los resultados y así conocer la temperatura de del punto de rocío de la mezcla de estos componentes, que es de 255.009 °F

### 3.1.4 Punto de burbuja.

#### *Planteamiento del problema*

Se desea conocer la temperatura del punto de burbuja de una corriente de 250 lbmol/h de n-Butano, las condiciones de operación del flash es de 122 psia. [24]



#### *Selección de los elementos básicos*

Se inicia la simulación seleccionando los elementos básicos de una simulación.

- Modelo termodinámico: se debe seleccionar uno, bajo el cual se modelará el proceso, para este ejemplo se selecciona "Soave-Redlich-Kwong", ver (Fig. 3.21).

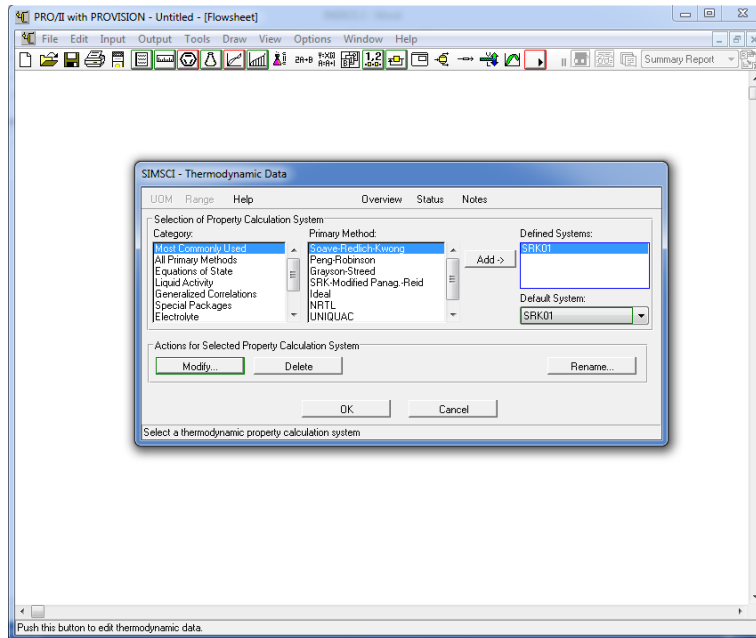


Fig. 3.21 Sistema termodinámico.

- Selección de sistema de unidades: para este ejemplo se define el sistema inglés, ver (Fig. 3.22).

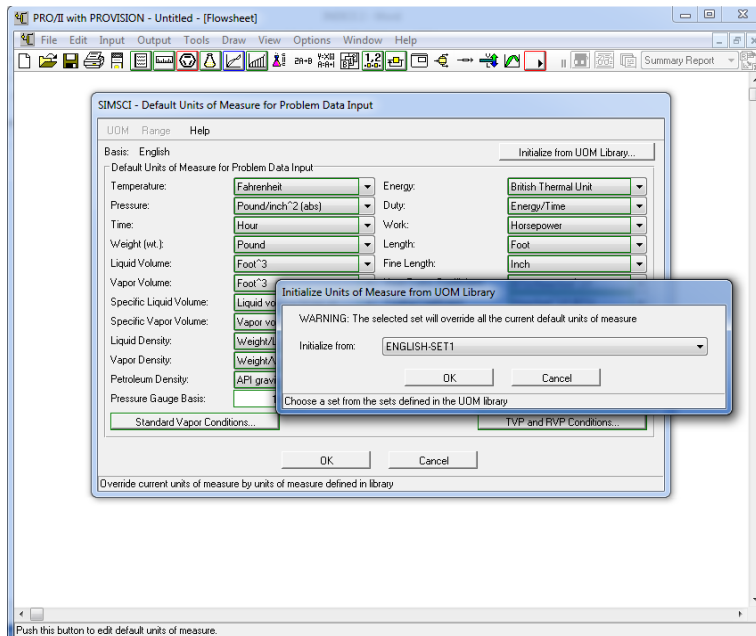


Fig. 3.22 Sistema de unidades.

- Selección de los componentes a partir de librería del simulador: n-Butano, ver (Fig. 3.23).

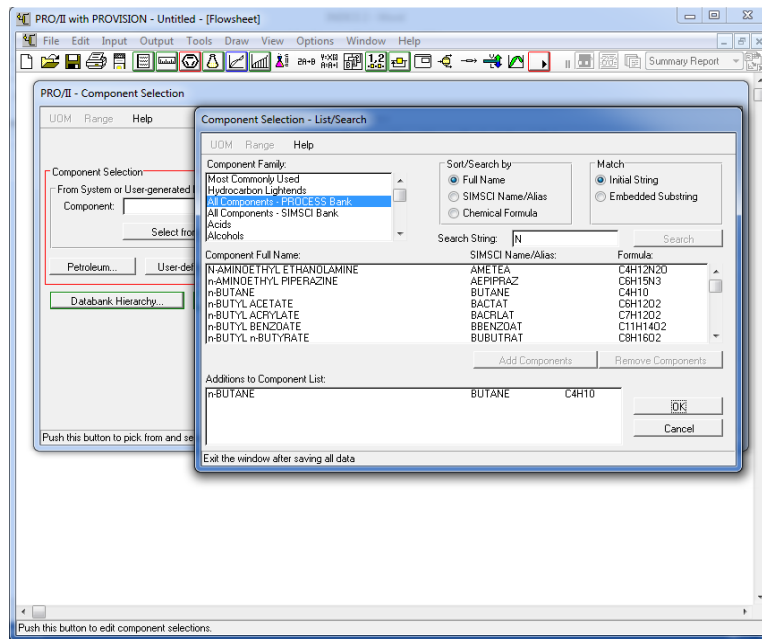


Fig. 3.23 Selección de componente n-Butano.

*Definición de la línea de alimentación (selección y especificación de la línea de alimentación)*

Especificar las condiciones térmicas de la línea de alimentación, la primera especificación corresponde a la presión de 122 psia y la segunda especificación a “Bubble Point”, ver (Fig. 3.24). De acuerdo al planteamiento del problema se especifica el flujo total de la alimentación, para esto dar “Clic” en “Flowrate and Composition”, ver (Fig. 3.25).

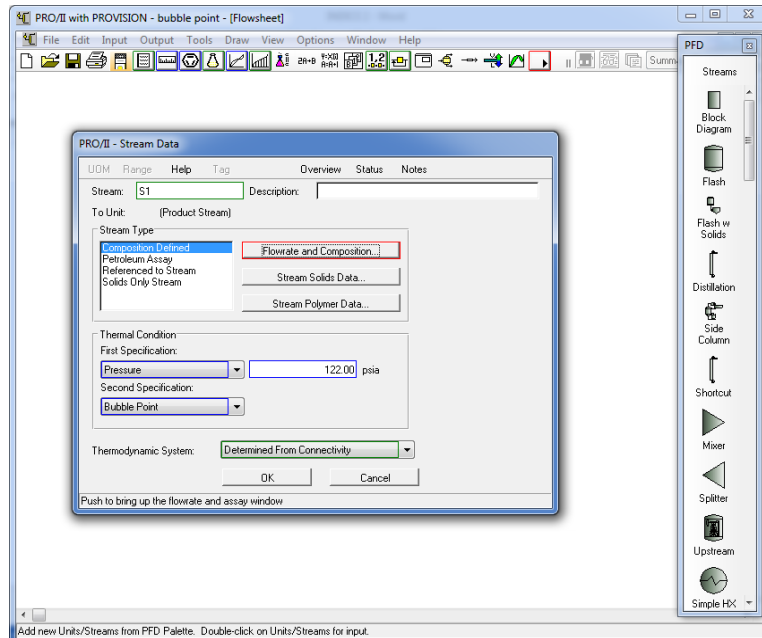


Fig. 3.24 Condiciones térmicas.

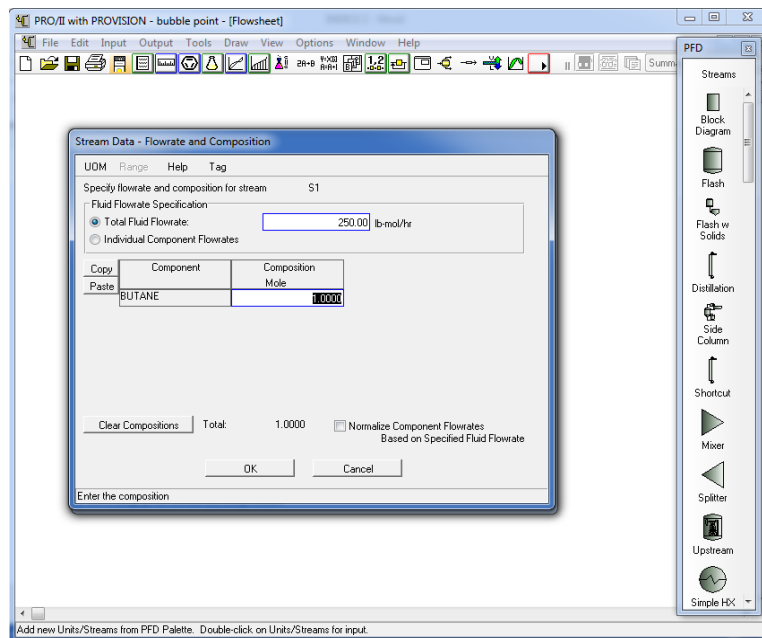


Fig. 3.25 Flujo de alimentación.

*Selección del equipo, conexión de la línea de alimentación y productos con el equipo.*

- Equipo: el equipo de localiza en la barra "PDF" con el nombre de "Flash". Se conecta la línea de salida de vapor y líquido, como productos.

### Especificación del equipo

- Dar doble “Clic” sobre el equipo para desplegar la ventana que permite especificar el equipo. La primera especificación corresponde a la presión de 122 psia. La segunda especificación a “Bubble Point”, ver (Fig.3.26).

### Ejecución del programa “run” y análisis de los resultados

- Especificando el equipo dar “Clic” en “OK” en la ventana y correr el programa con el icono “Run” que aparece en la barra secundaria.

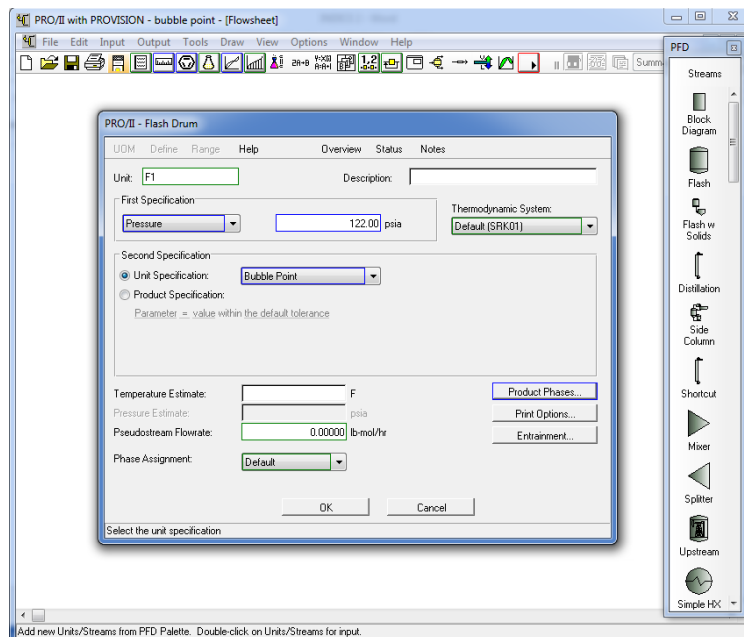


Fig. 3.26 Especificación del equipo.

Al correr el programa el equipo se pinta de color azul, por lo tanto no hay error en la simulación. La tabla de resultados permite ver los resultados y así conocer la temperatura del punto de burbuja del butano en esas condiciones que es de 159.97°F, ver (Fig.3.27).

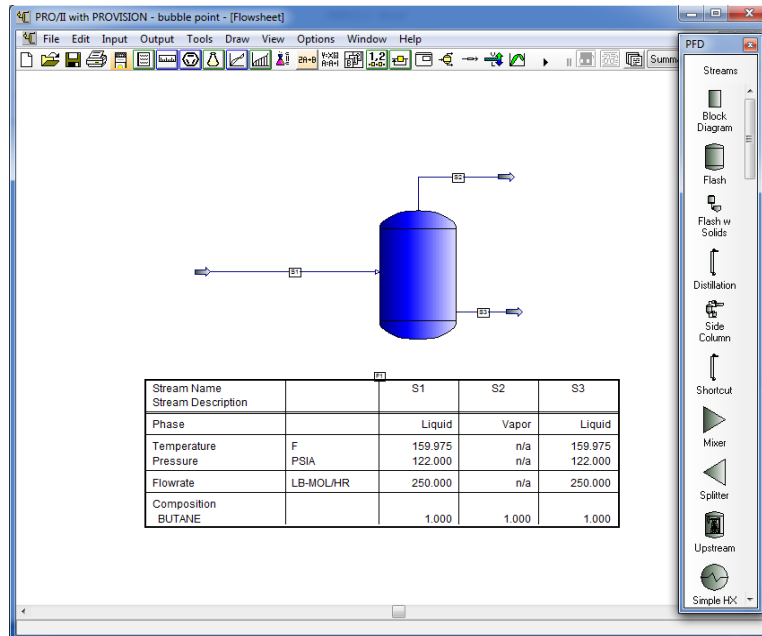


Fig. 3.27 Simulación y tabla de resultados.

De manera general, para todas las líneas se puede ver de manera puntual los resultados de cada una de ellas seleccionando la línea, dando “Clic” izquierdo y seleccionando la opción “View Results”. O bien si requiere ver los resultados de toda la simulación, es decir el balance de materia y energía de las líneas y los equipos, se tiene que generar un reporte y se realiza de la siguiente forma: se ubica en la barra de herramientas primaria la opción “Output” seleccionar y dar “Clic” a la opción “Generate Text Report...” la cual genera un reporte completo de la simulación, ver (Fig.3.28).

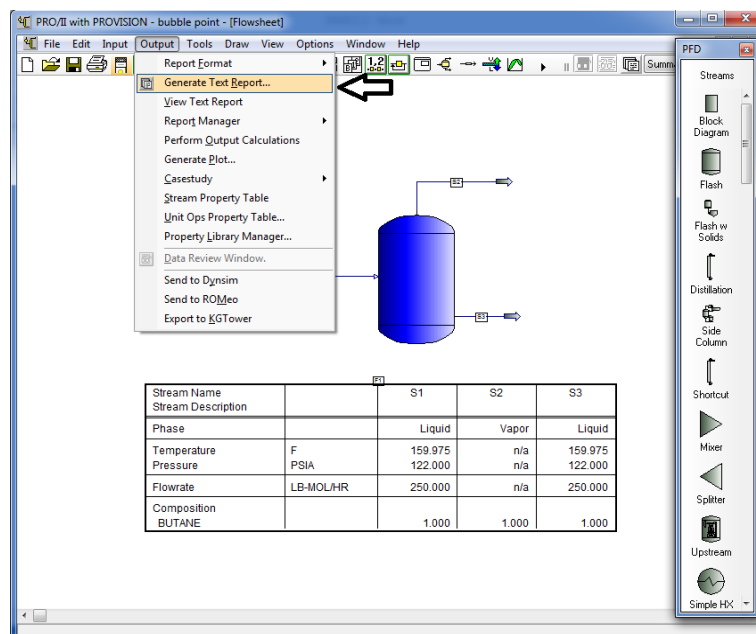


Fig. 3.28 Generación de reporte.

### 3.1.5 Flash Isotérmico.

Una corriente de 2204 lb/hr formada por los 4 hidrocarburos que se indican en la tabla 3.3, se somete a un flash isotérmico. Las condiciones de operación del flash son de 100 psig (114.7 psia).<sup>[24]</sup>

*Planteamiento del Problema.*

**Tabla 3.3 Composición de corrientes-Flash isotérmico**

Componente.	Fracción mol.
Propano	0.1
n-Butano	0.2
n-Pentano	0.3
n-Hexano	0.4

$P = 122 \text{ psia}$

$T = 200 \text{ }^\circ\text{F}$

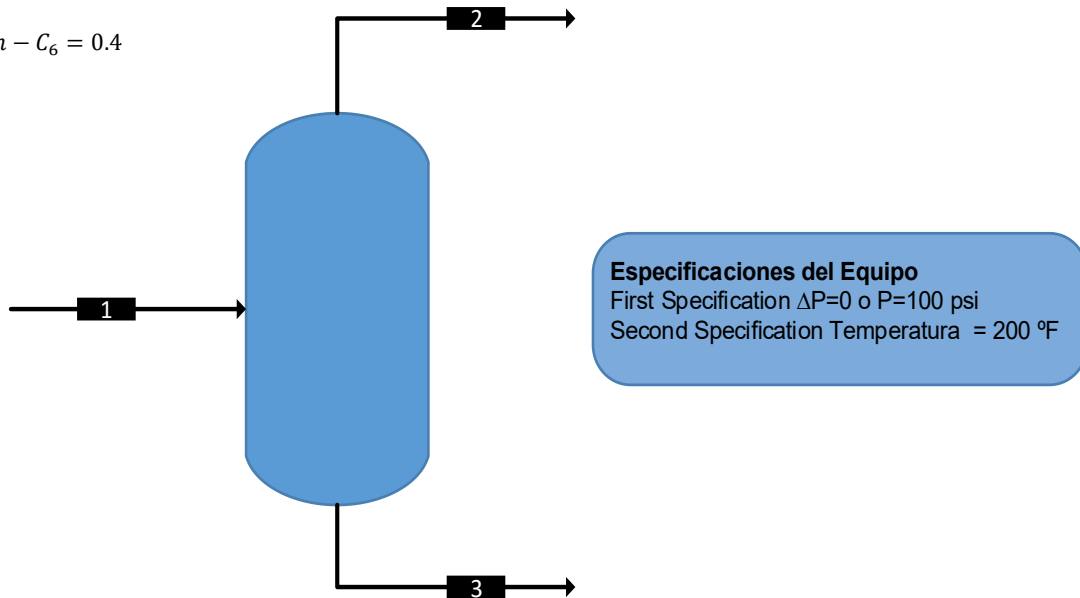
$F = 2204 \text{ lb/h}$

$C_3 = 0.1$

$n - C_4 = 0.2$

$n - C_5 = 0.3$

$n - C_6 = 0.4$



*Selección de elementos básicos*

- Modelo termodinámico: se debe seleccionar uno, bajo el cual se modelara el proceso, para este ejemplo se selecciona "Soave Redlich-Kwong", ver (Fig. 3.29).



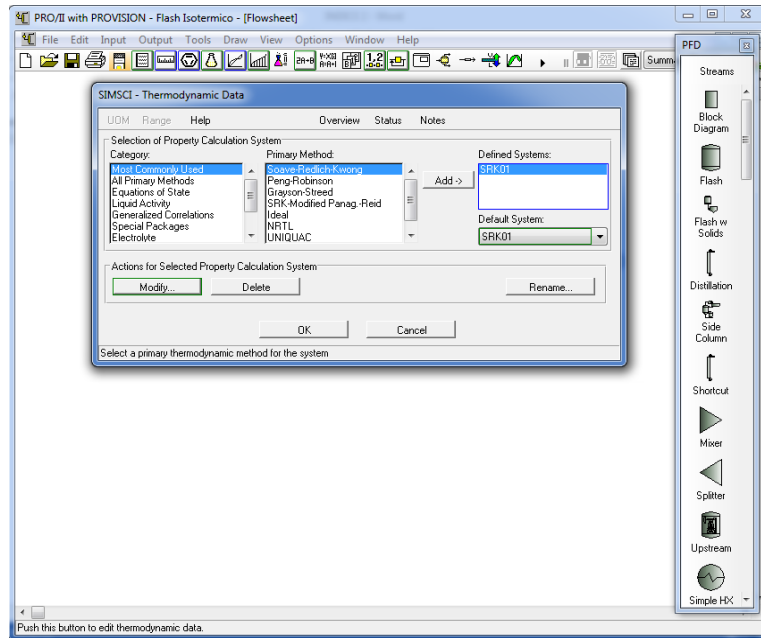


Fig. 3.29 Sistema termodinámico.

- Selección de sistema de unidades: para este ejemplo se define el sistema inglés, ver (Fig. 3.30).

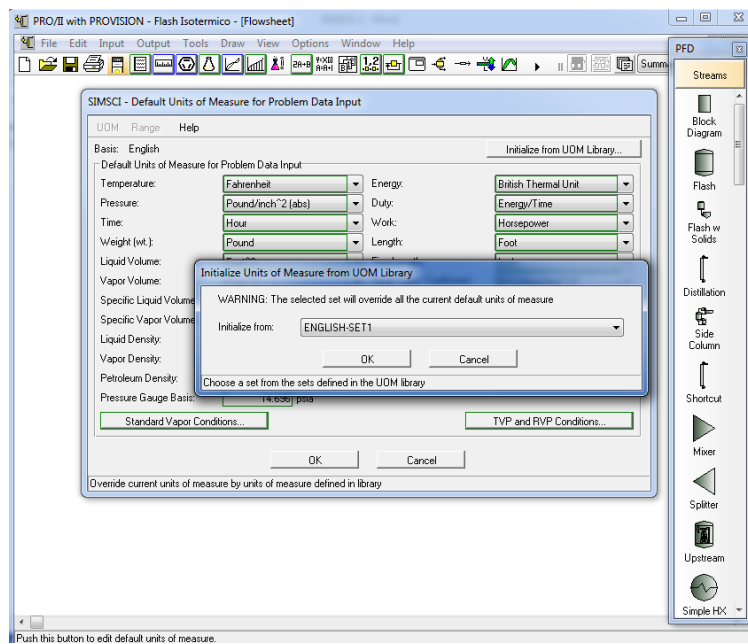


Fig.3.30 Sistema de unidades.

- Selección de componentes a partir de la librería del simulador: Propano, n-Butano, n-Pentano y n-Hexano, ver (Fig. 3.31).

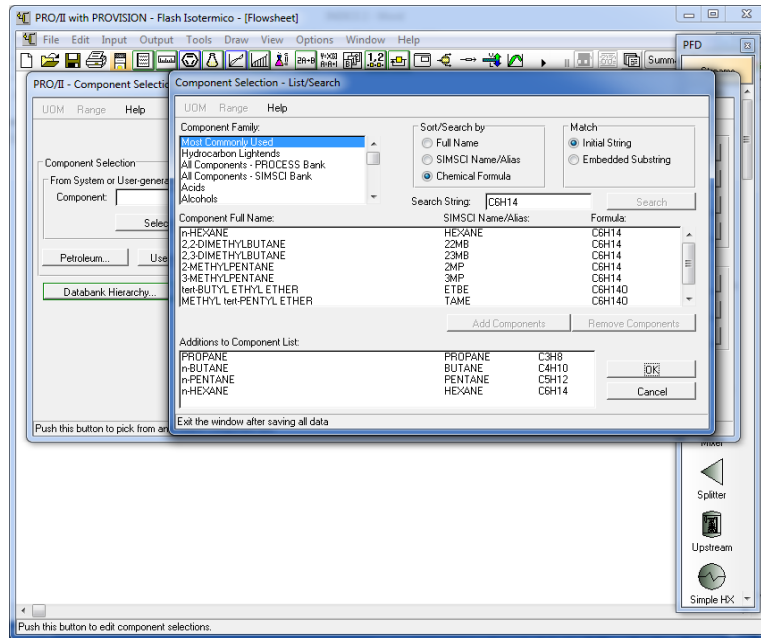


Fig.3.31 Selección de componentes.

*Definición de la línea de alimentación (selección y especificación de la línea de alimentación)*

Se especifican las condiciones térmicas de la línea de alimentación. Primera especificación con una temperatura de 200 °F y la segunda especificación con una presión de 100 psi (114.7psia). Para el flujo total de alimentación, dar “Clic” en “Flowrate and Composition...”, ver (Fig. 3.32).

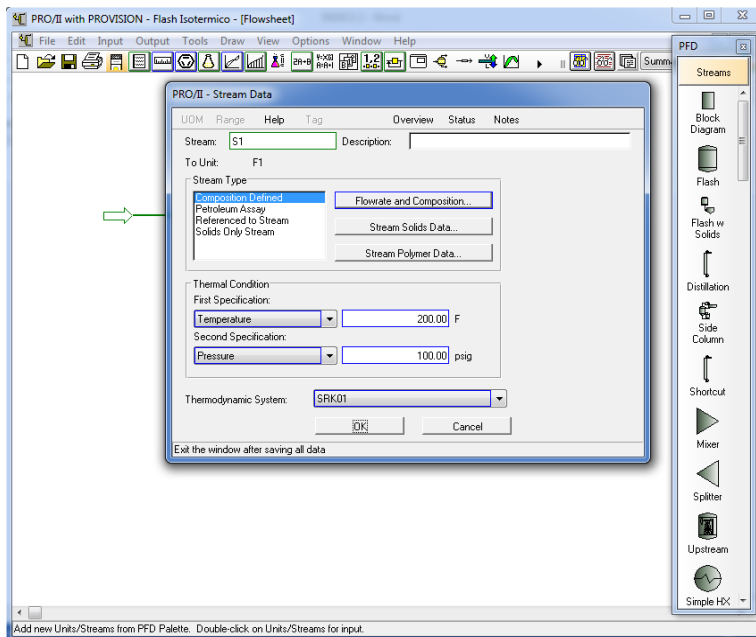


Fig.3.32 Condiciones Térmicas.

Definir el flujo de alimentación y composiciones de los componentes, ver (Fig.3.33).

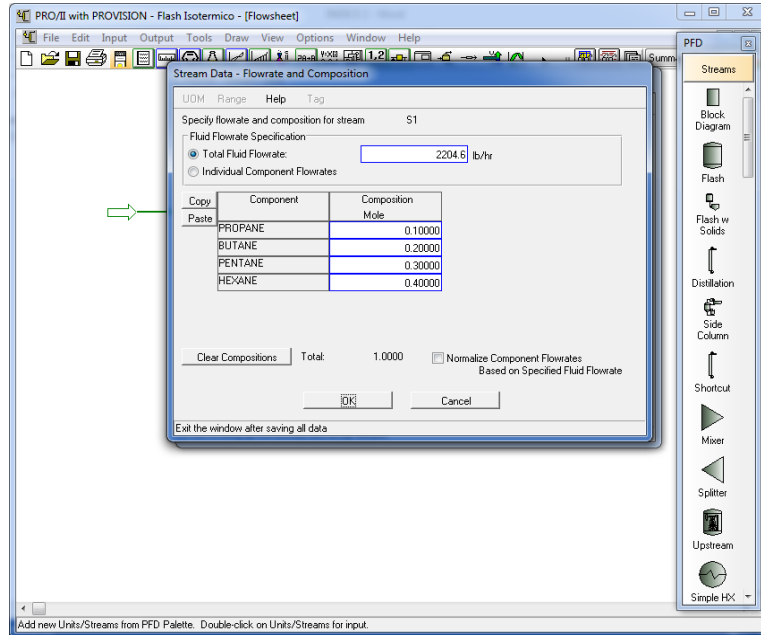


Fig. 3.33 Definición del flujo de alimentación.

Selección del equipo, conexión de la línea de alimentación y productos con el equipo.

- Equipo: El equipo se localiza en la barra "PDF" con el nombre "Flash". Se conecta la línea de salida de vapor y líquido como productos, ver (Fig.3.34).

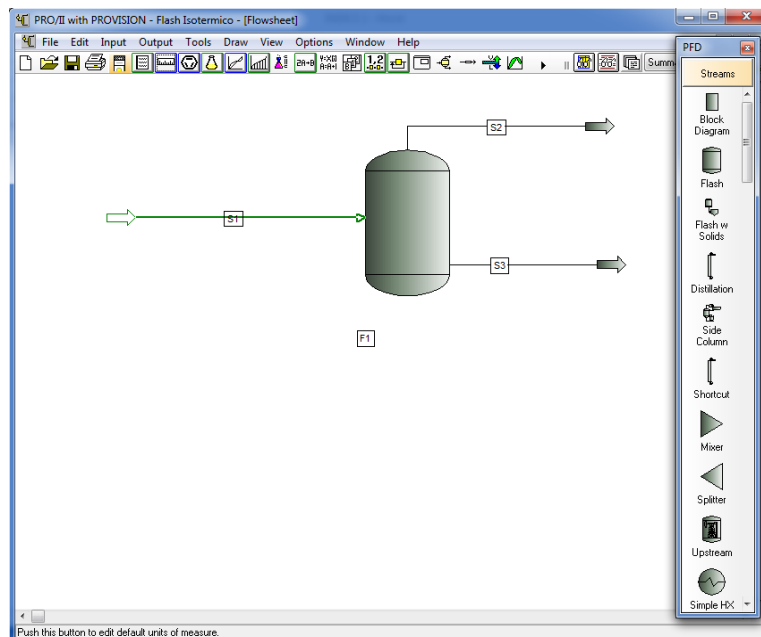


Fig. 3.34 Conexión de línea de alimentación y productos.

### Especificación del equipo

- Dar doble “Clic” sobre el equipo para desplegar la ventana que permite especificarlo. La primera especificación corresponde a la presión de 100 psi que corresponde a la presión de alimentación. La segunda especificación corresponde a la temperatura de alimentación de 200 °F, ver (Fig.3.35).

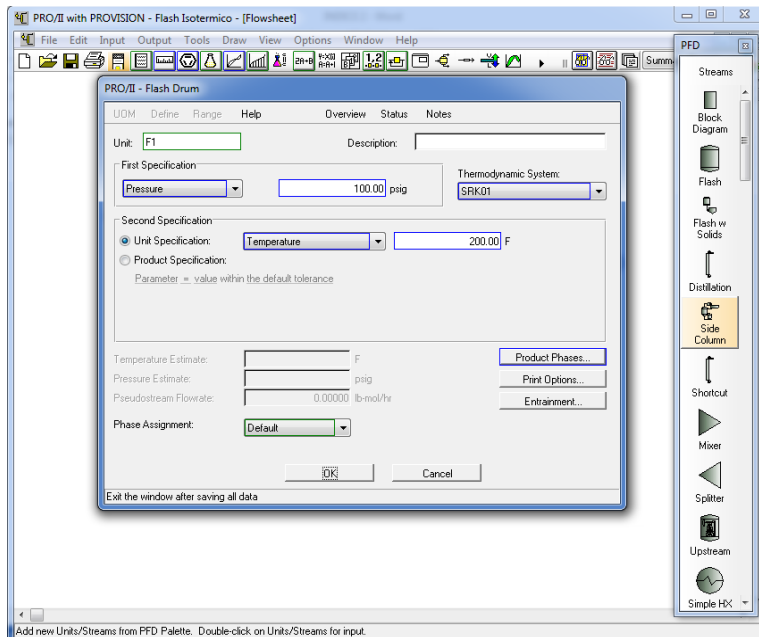


Fig. 3.35 Especificación del equipo flash.

### Ejecución del programa “Run” y análisis de los resultados

- Especificado el equipo dar “Clic” en “OK” en la ventana del equipo y correr el programa con el icono “Run” que aparece en la barra secundaria.

Al correr el programa el equipo se cambia a azul, por lo tanto no hay error en la simulación. Posteriormente ir a la barra de herramientas primaria y ubicar la ventana “Output”, seleccionar la opción “Stream Property Tabla” para generar la tabla y observar los resultados, ver (Fig. 3.36).

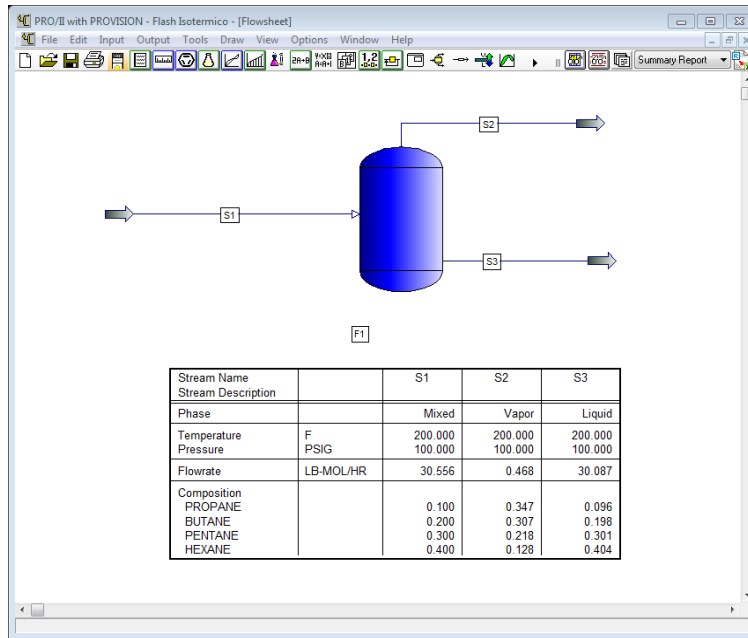


Fig. 3.36 Tabla de resultados.

En la tabla de resultados se puede ver que la presión y temperatura (equilibrio entre fases) de las corrientes de salida son iguales a las especificadas para el equipo.

### 3.1.6 Flash Adiabático.

Una corriente de 1000 Kg/hr formada de los 4 hidrocarburos que se presentan en la tabla 3.4, se somete a un flash adiabático. La fracción vaporizada es de 0.3 y la presión del flash es de 689.5 kPa. Se desea conocer la temperatura de operación del flash adiabático, así como la fracciones de cada componente en la fase líquida y vapor. [24]

#### Planteamiento del Problema

$$P = 689.5 \text{ kPa}$$

$$F = 1000 \text{ Kg/hr}$$

$$\% \text{ Vapor} = 30$$

$$C_3 = 0.1$$

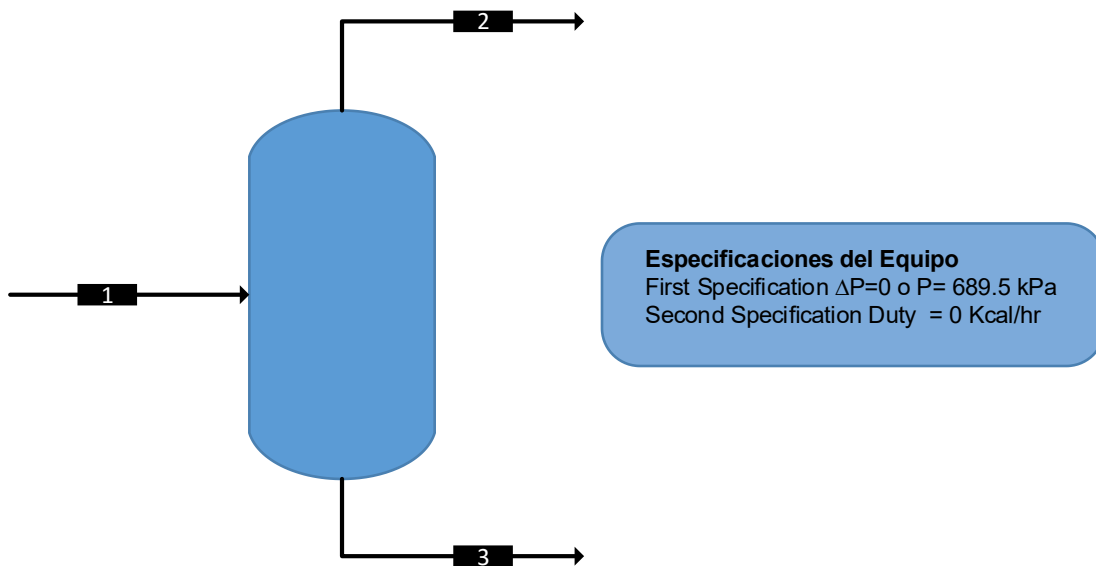
$$n - C_4 = 0.2$$

$$n - C_5 = 0.3$$

$$n - C_6 = 0.4$$

Tabla 3.4 Composición de corrientes –Flash adiabático.

Componente.	Fracción mol.
Propano	0.1
n-Butano	0.2
n-Pentano	0.3
n-Hexano	0.4



#### Selección de los elementos básicos

- Modelo termodinámico: se debe seleccionar uno, bajo el cual se modelará el proceso, para este caso se selecciona “Soave-Redlich-Kwong”, ver (Fig. 3.37).

- Selección del sistema de unidades: para este ejemplo se selecciona el Sistema métrico, ver (Fig. 3.38).
- Selección de los componentes a partir de la librería del simulador: Propano, n-Butano, n-Pentano y n-Hexano, ver (Fig. 3.39).

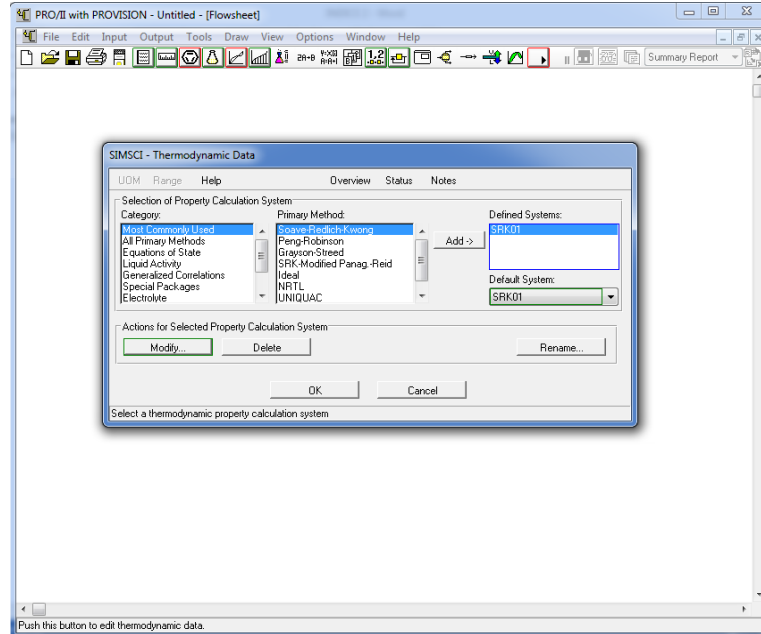


Fig. 3.37 Modelo termodinámico.

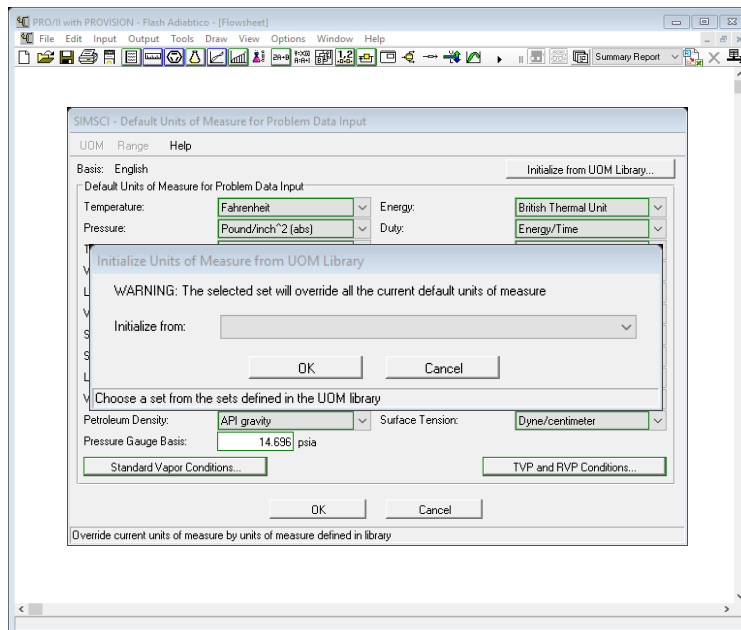


Fig. 3.38 Sistema de unidades.

### Definición de la línea de alimentación (selección y especificación de la línea de alimentación)

Especificar las condiciones térmicas de la línea de alimentación, la primera especificación es la presión que es de 689.5 kPa y la segunda especificación es la fracción de vapor del 30 %, ver (Fig. 3.40). Para el flujo total de alimentación, dar “Clic” en “Flowrate and Composition...”, ver (Fig. 3.41).

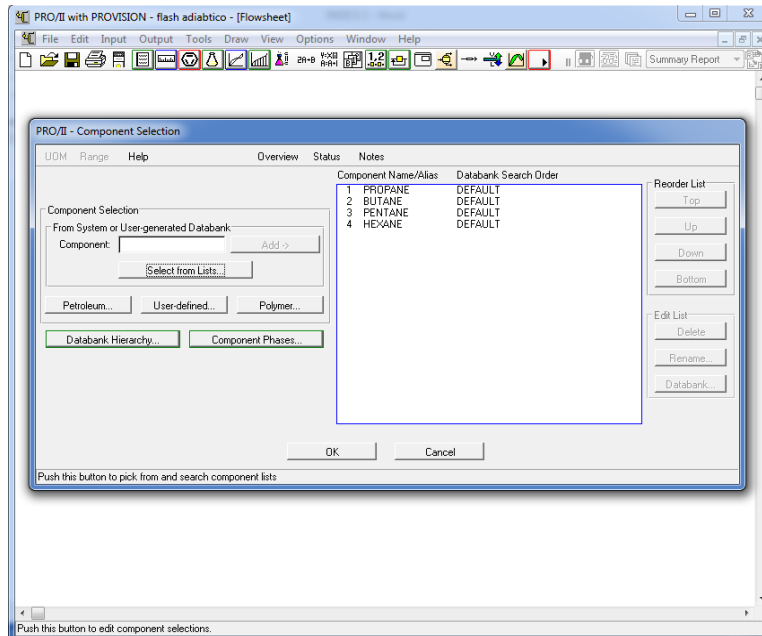


Fig. 3.39 Selección de componentes.

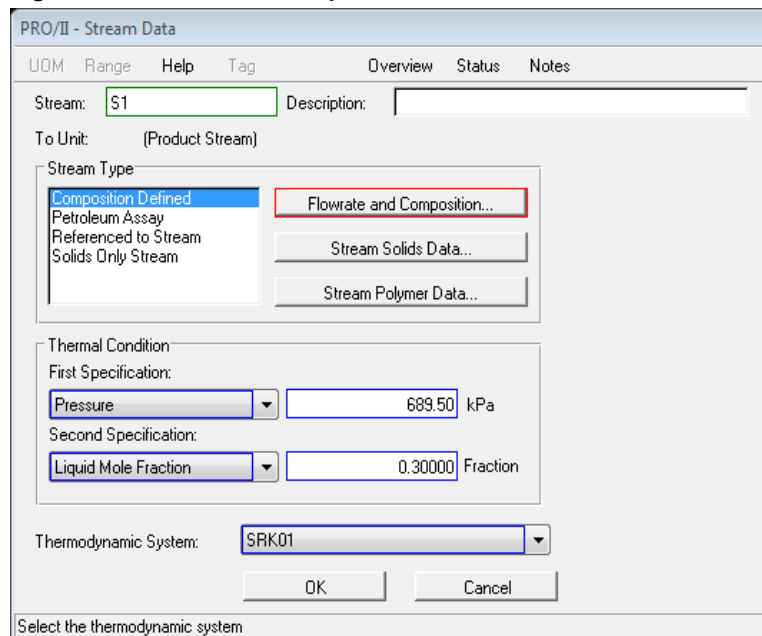
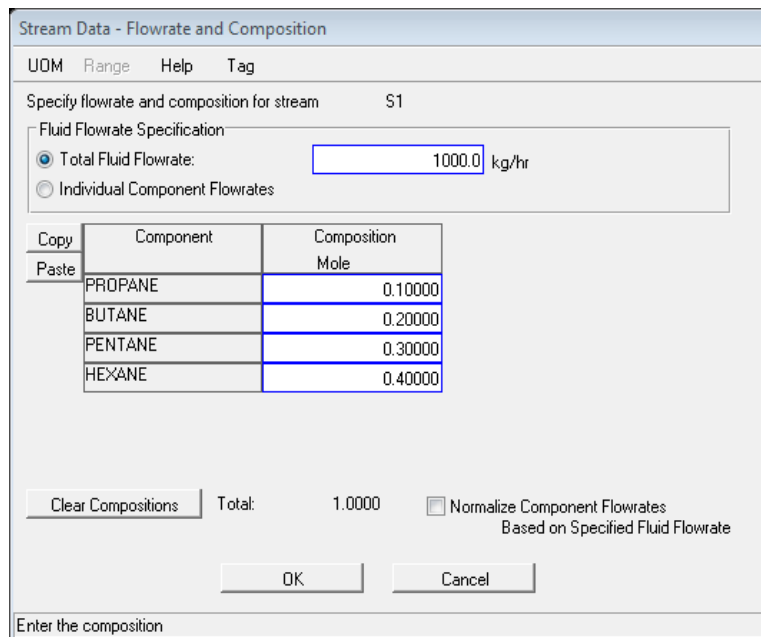


Fig. 3.40 Condiciones térmicas.



*Selección del equipo, conexión de la línea de alimentación y productos con el equipo.*

- Equipo: se localiza en la barra “PFD” con el nombre de “Flash”. Identificadas las salidas del equipo se conecta la línea de alimentación y se adicionan las líneas de los productos. Para esta simulación se conecta la línea de salida de vapor y líquido, ver (Fig. 3.42).



Stream Data - Flowrate and Composition

UOM Range Help Tag

Specify flowrate and composition for stream S1

Fluid Flowrate Specification

Total Fluid Flowrate: 1000.0 kg/hr

Individual Component Flowrates

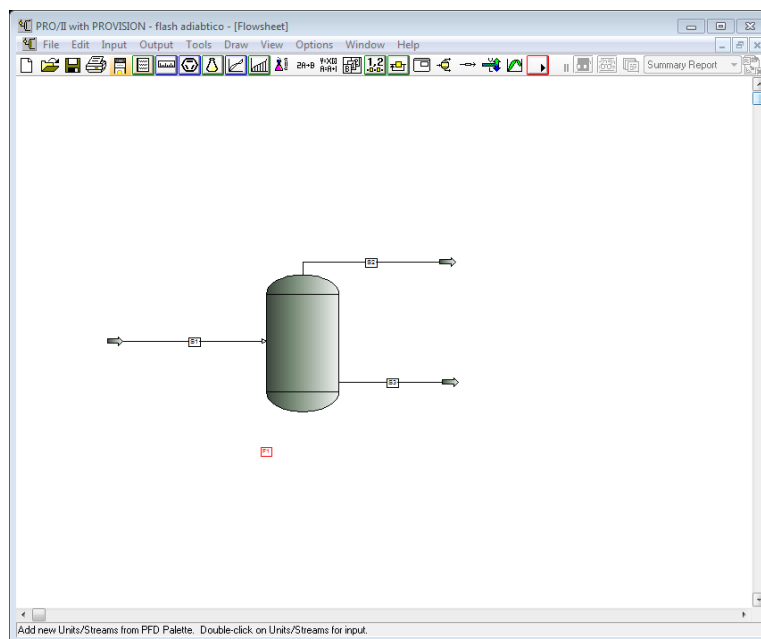
Copy	Component	Composition
Paste	PROPANE	0.10000
	BUTANE	0.20000
	PENTANE	0.30000
	HEXANE	0.40000

Clear Compositions Total: 1.0000  Normalize Component Flowrates Based on Specified Fluid Flowrate

OK Cancel

Enter the composition

**Fig. 3.41 Especificación del flujo de alimentación.**



**Fig. 3.42 Conexión de líneas al equipo.**

### Especificación del equipo

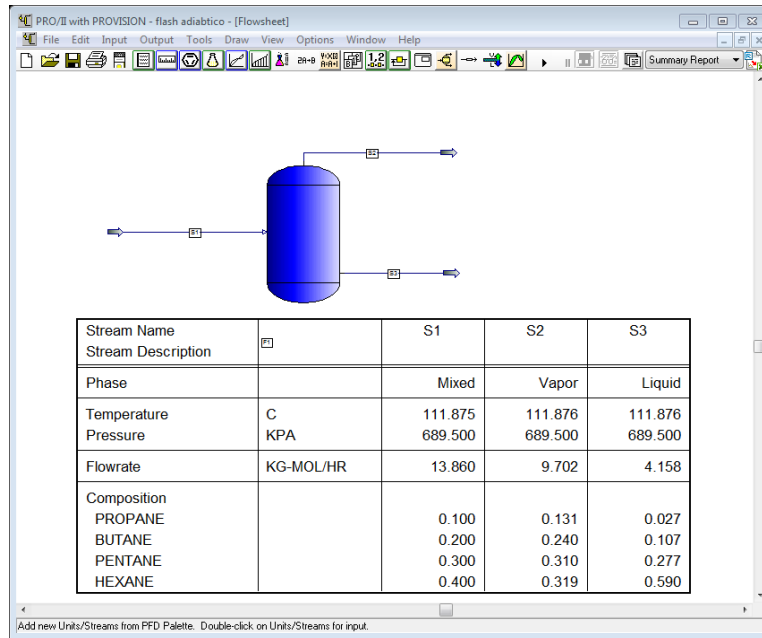
Dar doble “Clic” sobre el equipo para desplegar la ventana que permite especificarlo. La primera especificación corresponde a la caída de presión de 0 kPa que corresponde a la presión de alimentación. La segunda especificación corresponde a “Duty” 0 Kcal/hr debido a que el flash es adiabático, ver (Fig.3.43).

### Ejecución del programa “Run” y análisis de los resultados

- Especificado el equipo dar “Clic” en “OK” en la ventana del equipo y correr el programa con el icono “Run” que aparece en la barra secundaria.

Al correr el programa el equipo se cambia a e color azul, por lo tanto no hay error en la simulación. Posteriormente ir a la barra de herramientas primaria y ubicar la ventana “Output”, seleccionar la opción “Stream Property Tabla” para generar la tabla y observar los resultados, ver (Fig. 3.44).

Fig. 3. 43 Especificación del equipo.



**Fig. 3. 44** Tabla de resultados.

En la tabla de resultados se puede ver que la presión y temperatura (equilibrio entre fases) de las corrientes de salida con iguales a las especificadas para el equipo. Es así como se realizan los balances de materia y energía en un tanque flash adiabático.

### 3.2 Torres de destilación.

El diseño de las columnas de destilación es interesante debido a su importancia en un alto número de procesos químicos.

Los métodos de diseño de columnas de destilación se pueden clasificar en tres tipos: métodos gráficos, métodos aproximados y métodos rigurosos.

Los métodos gráficos y aproximados solo son válidos para el estudio de casos sencillos, tales como la destilación binaria y para el estudio de diseños preliminares. El diseño final del equipo requiere una determinación rigurosa de temperaturas, presiones, flujos de corriente, composiciones y rapidez de transferencia de calor para cada etapa. Esta determinación se realiza resolviendo los balances de materia y energía, y las relaciones de equilibrio para cada etapa. Estas relaciones son ecuaciones algebraicas no lineales que interactúan entre sí por lo que en ocasiones los métodos resultan ser muy laboriosos y complicados.

El simulador de procesos PRO II cuenta con un método aproximado (corto) y un método riguroso, que conjuntamente permiten realizar el diseño de columnas de destilación multicomponente. A continuación se describen estos métodos.

#### 3.2.1 Método corto.

Este método corto en el simulador de procesos PRO II es llamado “*Shortcut*”, y permite predecir con rapidez el número de platos y las características para la separación en la columna. Utiliza el método aproximado de Fenske el cual es útil para el diseño de columnas que permite predecir la distribución de los productos a lo largo de la torre.

En este caso, el simulador de procesos PRO II determina el número de platos teóricos y el reflujo real; utiliza el método de Kirkbride para determinar la ubicación del plato de alimentación óptimo para cada operación.

##### 3.2.1.1 Descripción del equipo.

El equipo se puede localizar en la barra de “PFD” con el nombre de “*Shortcut*”, al seleccionar el equipo de esta barra y arrastrarlo a el área de trabajo, se desplegará una ventana en la cual es posible seleccionar si se requiere que el equipo tenga condensador y/o reboiler, ver (Fig. 3.45).

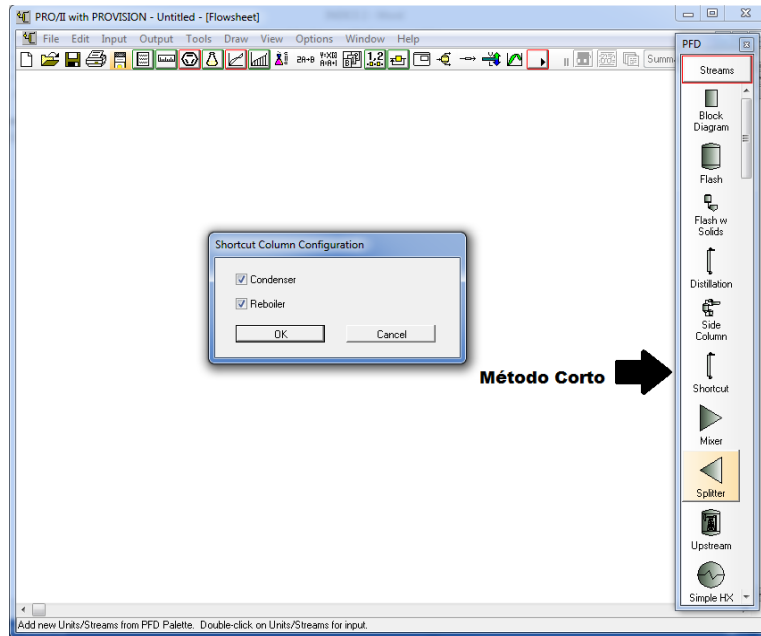


Fig. 3. 45 Selección de Condensador y Reboiler.

Al seleccionar la opción de condensador y/o reboiler en el "Shortcut", dar "Clic" en "OK" y aparecerá la torre seleccionada, ver (Fig. 3.46).

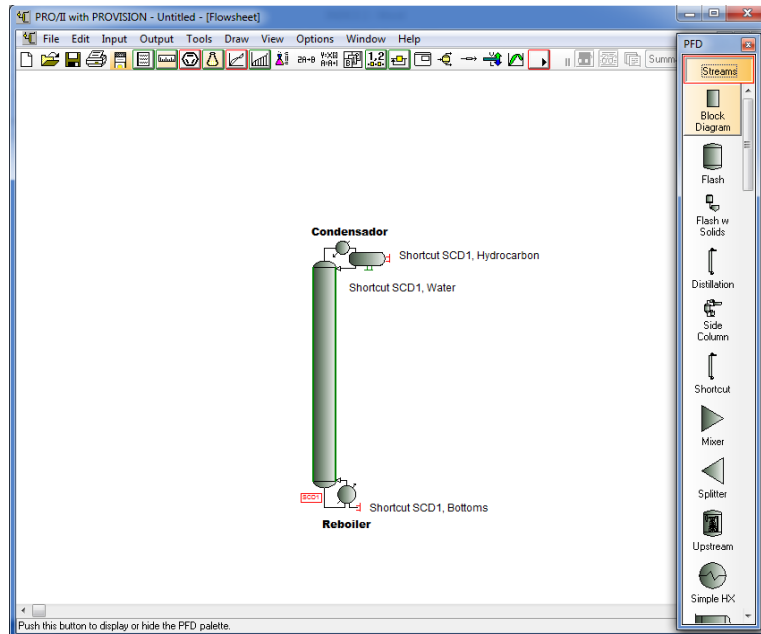


Fig. 3. 46 Selección de Condensador y Reboiler.

En la figura 3.46 se pueden ver las tres salidas con las que cuenta el equipo que son:

- “Hydrocarbon”: Salida de destilado.
- “Bottoms”: Salida de fondos.
- “Water”: Salida para la extracción de agua, en caso que se requiera.

### 3.2.1.1 Descripción de la ventana de especificación del método corto

Seleccionado el equipo, dar doble “Clic” sobre él para desplegar la ventana de especificación, ver (Fig. 3.47).

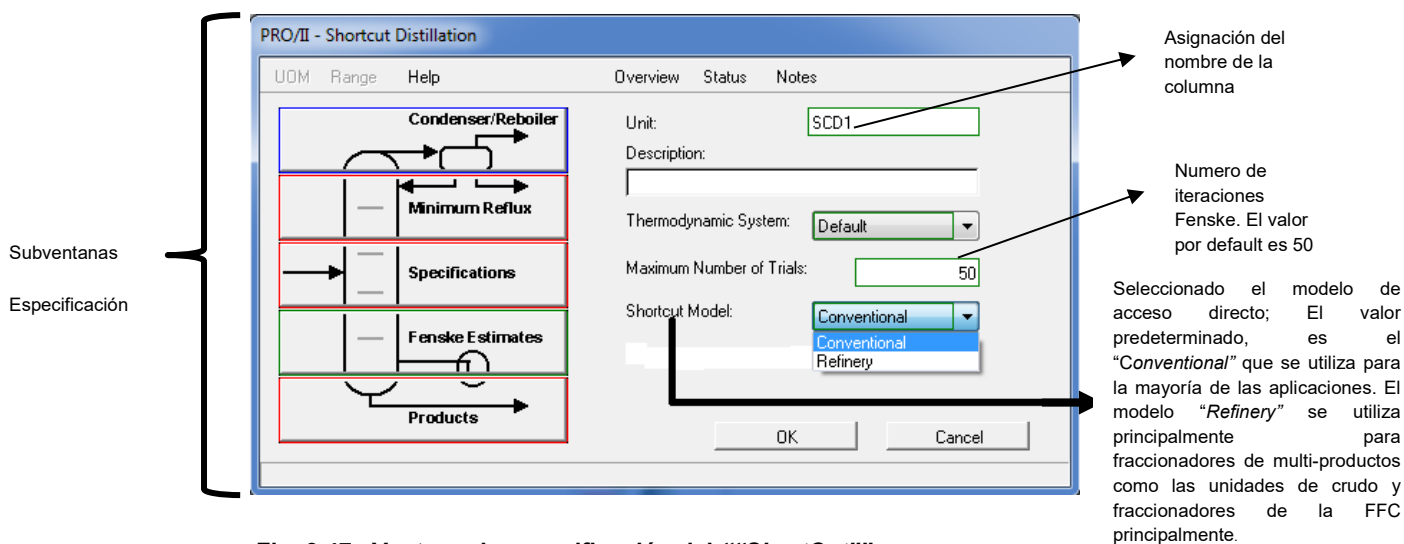


Fig. 3.47 Ventana de especificación del ““Shortcut””.

Para la especificación del “Shortcut”, las especificaciones están divididas en subventanas, las cuales permiten ir especificando la columna por partes para una mejor aproximación del método, ver (Fig. 3.48).

### 3.2.1.3 Subventanas de especificación.

La ventana de especificación principal del “Shortcut”, a su vez contiene subventanas de especificación las cuales deben ser especificadas.

#### 3.2.1.3.1 Condensador/Reboiler.

Si se seleccionó la opción de que la columna tenga condensador y/o reboiler, esta opción permite especificar el tipo de condensador.

El simulador de procesos PRO II contiene 5 diferentes tipos de condensadores, ver (Fig. 3.48). Al dar “Clic” sobre esta opción se desplegará la ventana que contiene los 5 diferentes tipos de condensadores, ver (Fig. 3.49).

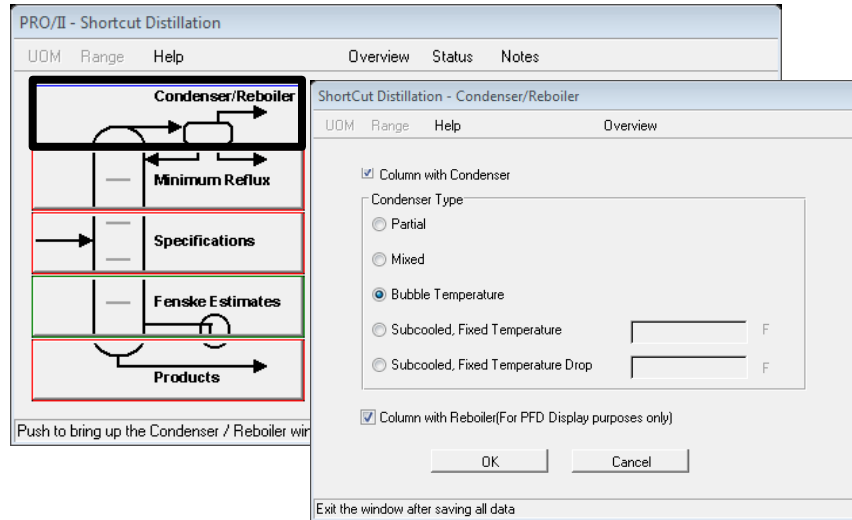


Fig.3.49 Selección del condensador.

- “Mixed”: Define la temperatura de condensación de los productos.
- “Subcooled, Fixed Temperature”: Define la temperatura del condensador.
- “Subcooled, Fixed Temperature Drop”: Define la temperatura de condensación, donde la temperatura resultante estará por debajo de la temperatura del punto de burbuja.

En caso de no tener condensador y/o reboiler solo se omite la opción.

### 3.2.1.3.2 Reflujo Mínimo.

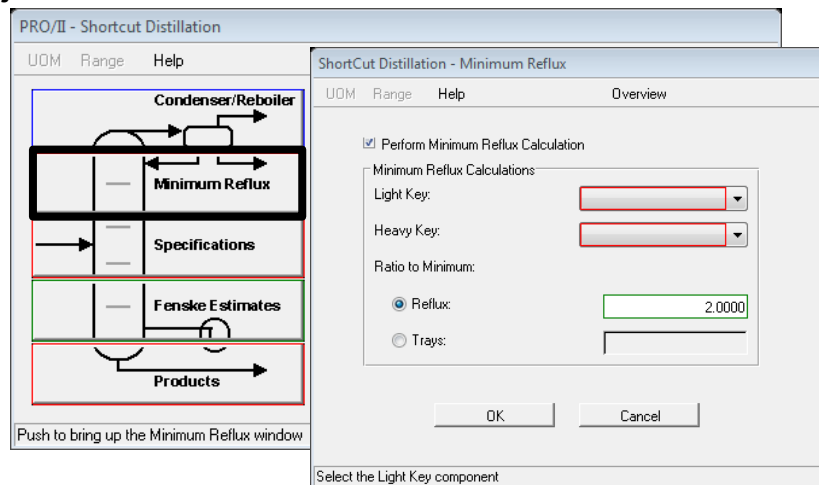


Fig.3.50 Especificación de Minimum Reflux.

Al seleccionar y dar “Clic” en esta opción se despliega una ventana, ver (Fig. 3.50), en la cual se deben especificar los componentes claves ligero y pesado.

Lo más frecuente es dar dos especificaciones de composición: la de un componente en el destilado y la de otro en el fondo. Los componentes a separar se denominan componentes.

El componente clave ligero (Light Key) es el más volátil de ambos y el otro componente será el clave pesado (Heavy Key).

Los demás componentes se clasifican en ligeros y pesados según su relación con los componentes clave los que tienen un grado medio de volatilidad.

### 3.2.1.3.3 Especificaciones.

Al dar “Clic” en esta opción se despliega una ventana, ver (Fig. 3.51). Esta ventana contiene dos especificaciones que van en función con los componentes claves ligero y pesados, en la cual se especifican dos parámetros uno que corresponde a los domos y el otro a los fondos de la columna.

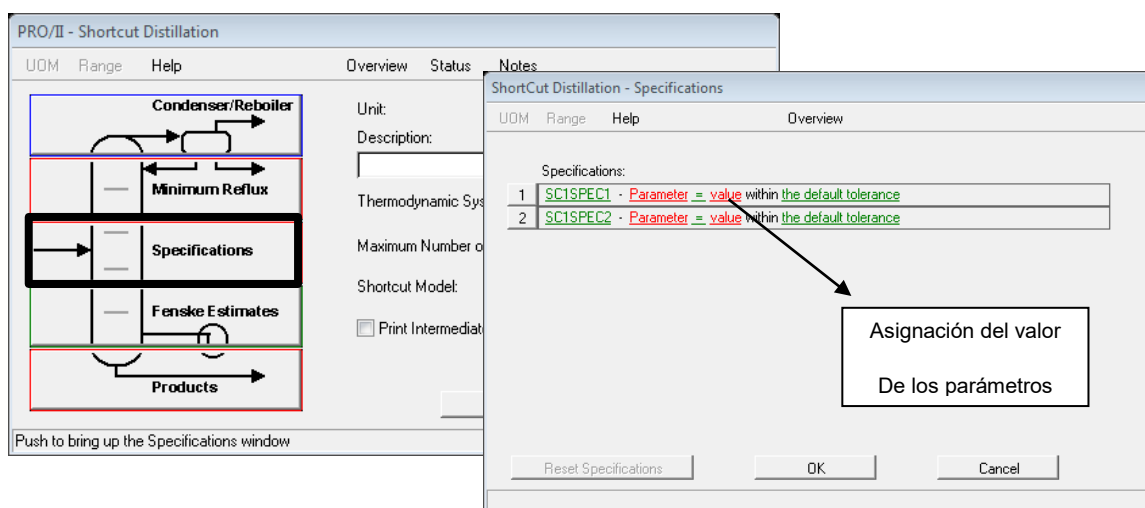


Fig. 3.51 Especificaciones.

Es necesario completar las dos especificaciones y realizar el siguiente para cada una:

Seleccionar “Parameter” donde se desplegará una ventana que contiene la opción de seleccionar si se quiere dar el valor del parámetro de la torre o de alguna de las líneas de los productos, ver (Fig. 3.52). Lo más recomendable es seleccionar la opción de “Stream” ya que es muy común conocer alguno de los parámetros de las líneas de los productos.



Seleccionada la opción “Stream”, del lado derecho se encuentra la opción que contiene la línea que se va especificar, elegir una de ellas.

Elegida la línea, dar “Clic” en “Parameter...” para desplegar la ventana que contiene los diferentes parámetros. Las diferentes opciones de parámetros que se pueden especificar, ver (Fig. 3.53).

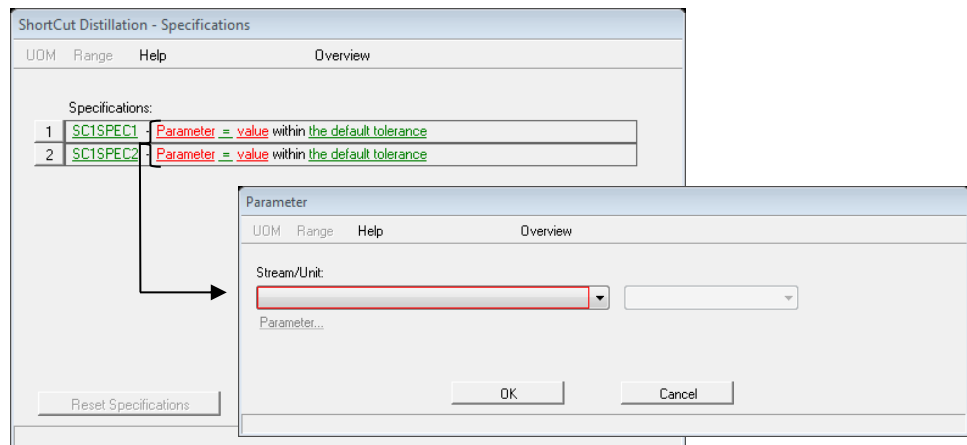


Fig. 3.52 Selección de Stream/Unit.

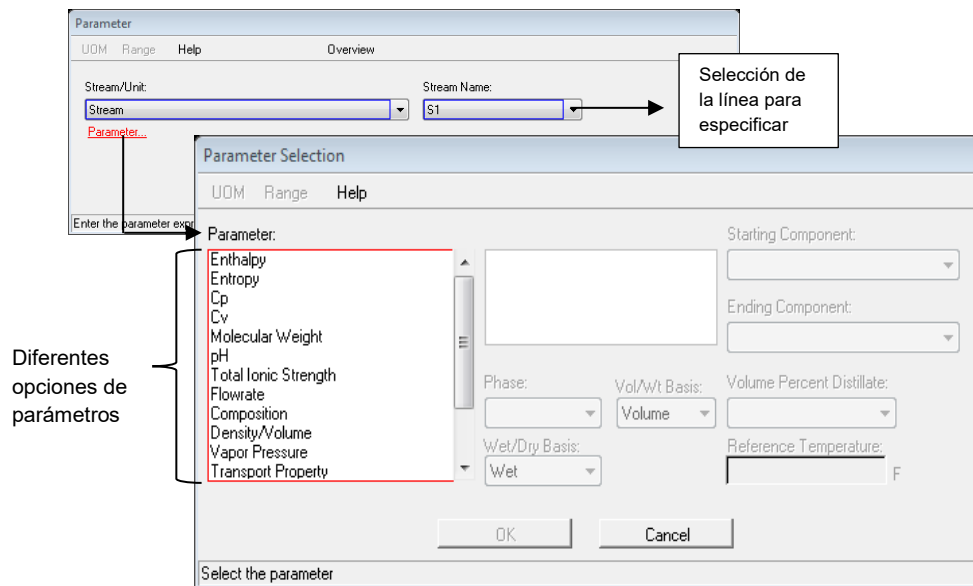


Fig. 3.53 Selección del parámetro.

Seleccionar el parámetro y dar “Clic” en todas las ventanas hasta llegar a la ventana, ver (Fig. 3.51), donde se asignará el valor del parámetro en “value”.

En el caso de seleccionar la opción “*ShortCut*”, al dar “*Clic*” en “*Parameter...*” se desplegará una ventana que contiene el parámetro del índice de Fenske, ver (Fig. 3.54). Y este valor para N productos, donde para la sección de Fenske son n-1 secciones. Puesto que hay grados de libertad asociados a cada sección, el módulo de “*ShortCut*” requiere  $(N-1)*2$ .

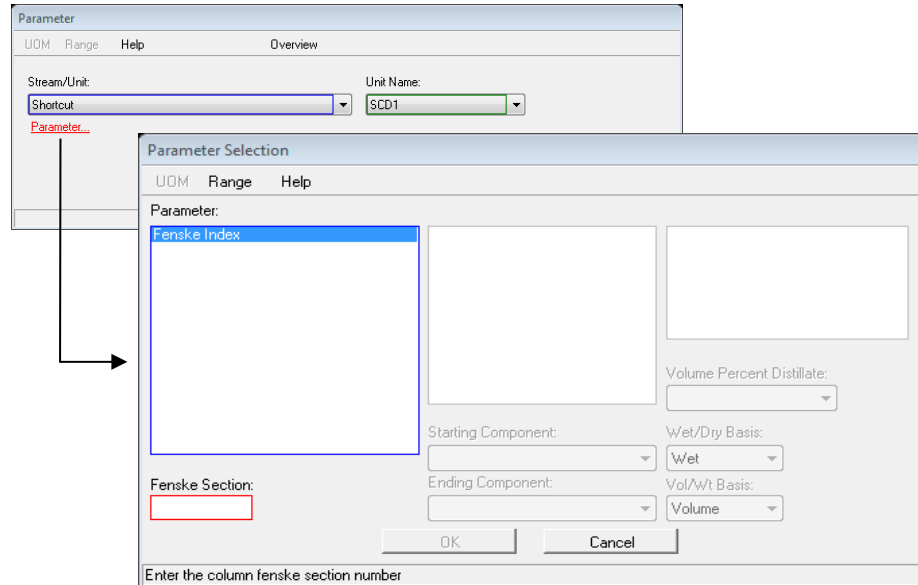


Fig. 3.54 Selección de ShortCut.

### 3.2.1.3.4 Estimación Fenske.

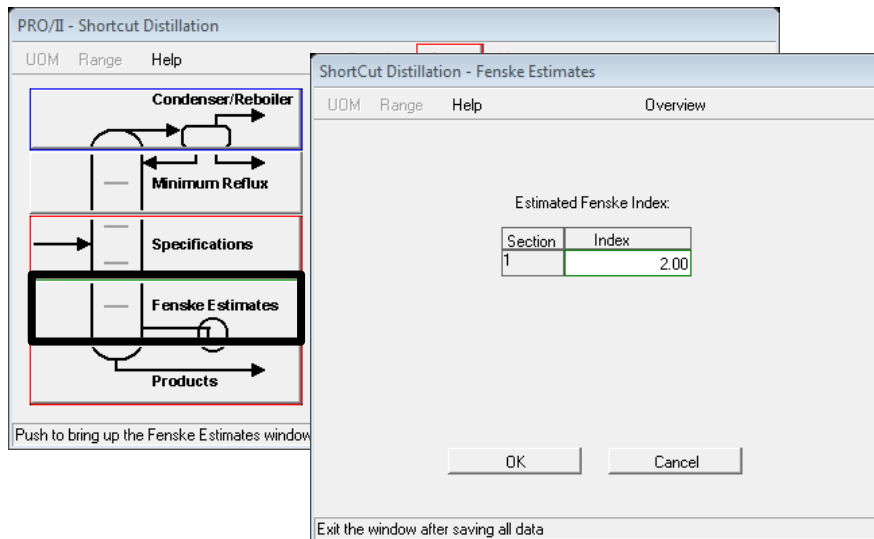


Fig. 3.55 Selección de ShortCut.

Esta opción permite calcular el índice de Fenske (número mínimo de platos) para cada sección. El valor por default es de 2.0 por cada sección, por lo que no se modifica este valor, ver (Fig. 3.55).

### 3.2.1.3.5 Productos.

En esta ventana se debe especificar un valor estimado en la salida de los productos, ver (Fig. 3.56).

Se tienen 4 diferentes elecciones que se pueden estimar en la salida de alguno de los productos:

- Rate: Estimación del flujo de salida en fondos o domos.
- Percent: Estimación del porcentaje total en moles en salida de fondos o domos.
- Cutpoint-Temp: Estimación de la temperatura en la salida de fondos o domos.
- Cutpoint-PCT: Estimación del porcentaje total en masa a la salida de fondos o domos.

Especificadas las opciones anteriores se corre el programa para generar un reporte el cual contiene las propuestas posibles de diseño de la columna. Para obtener este reporte dar "Clic" en el icono "Generate Report" que está ubicado en la barra de herramientas secundaria; o bien en la barra primaria en la opción "Output".

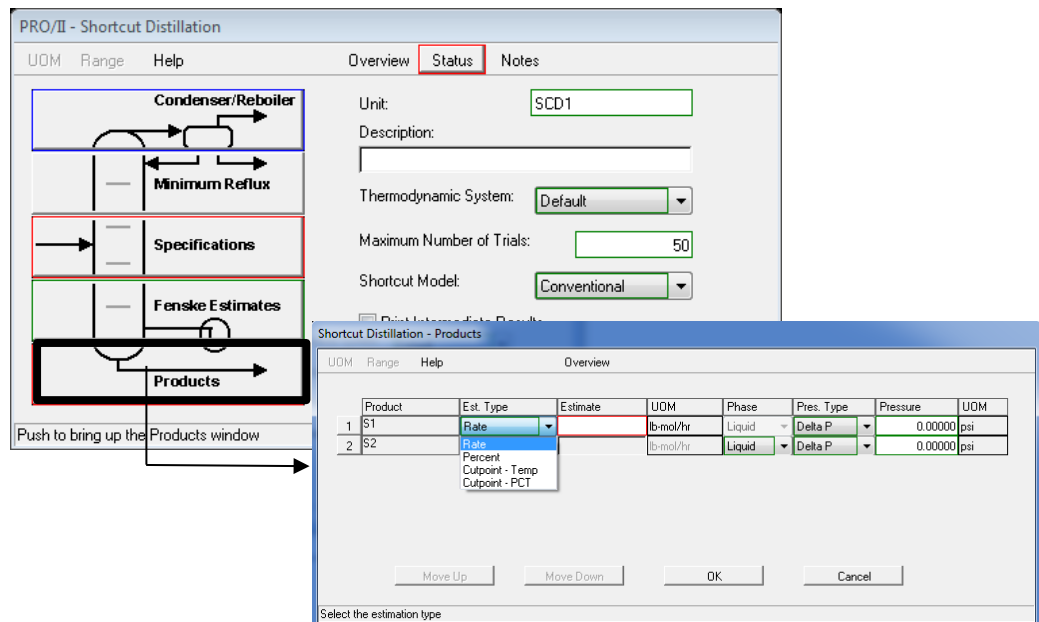


Fig. 3.56 Productos.

### 3.2.2 Método Riguroso.

El método riguroso o largo, es el método a seguir después de haber realizado el método corto. Con este método se realiza el diseño de una columna de destilación de etapa múltiple para la separación de mezclas multicomponente y realiza determinaciones rigurosas de las temperaturas, presiones, flujos de las corrientes, composiciones y rapidez de transferencia de calor para cada etapa.

El método riguroso se realiza resolviendo los balances de materia y energía, y relaciones de equilibrio para cada etapa.

El método riguroso se encuentra en el simulador de procesos PRO II con el nombre "*Distillation*", se puede utilizar para simular cualquier destilación o una extracción líquido-líquido.

La columna debe tener al menos una etapa de equilibrio o plato teórico. El término "*plato*" se utiliza para denotar las etapas de equilibrio.

Los platos se encuentran vinculados con el vapor de cada plato de entrada del plato inmediatamente superior y el líquido de cada plato de alimentación del siguiente plato inferior. En la columna no hay un límite en el número de platos.

Las columnas de destilación se pueden simular: vapor / líquido, agua o vapor / líquido / procesos de equilibrio líquido.

#### 3.2.2.1 Descripción del proceso

El equipo se puede localizar en la barra "*PFD*" con el nombre "*Distillation*", al seleccionar el equipo de esta barra y antes de desplegarlo en el espacio de trabajo, se desplegará una ventana que es similar a la del método corto, donde también se tiene la opción de que la columna tenga condensador y/o reboiler, cualquiera que se requiera se debe seleccionar.

El simulador reconocerá al condensador y reboiler como platos, si se selecciona que la columna tenga condensador y/o reboiler se deben sumar 1 o 2 platos a los teóricos.

Otro dato necesario en la ventana desplegada es indicar el número de platos reales. La eficiencia de un plato de destilación es del 70% por lo que el número de platos teóricos obtenido del método corto se divide entre 0.7 para obtener el número de platos reales y se

debe sumar un plato si solo se seleccionó el condensador y/o reboiler o dos platos si se seleccionaron ambos. Ver (Fig. 3.57).

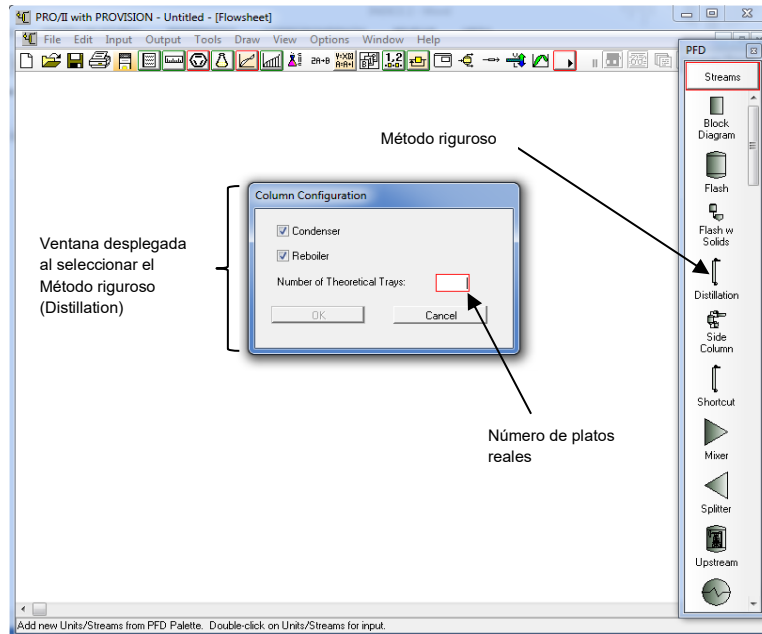


Fig. 3.57 Opciones para el método riguroso.

Seleccionado el condensador y/o reboiler y asignado el número de platos reales dar “Clic” en “OK”, donde posteriormente quedara pegada la columna de destilación que contiene el número de platos teóricos indicados en la hoja de trabajo. Al referirse al primer plato de la columna se debe tomar precaución ya que no siempre corresponde al número uno o bien para el ultimo plato el n-plato, ya que el simulador reconoce al condensador y reboiler como platos. Ver (Fig. 3.58), se visualiza el número que corresponde al primer y último plato de la torre.

El equipo cuenta con cuatro salidas, una de ellas en la parte inferior de los fondos (Bottoms) y tres que corresponden a la parte del condensador y son:

- Vapor: Salida de vapor
- Liquid: Salida del destilado
- Water: Salida del agua

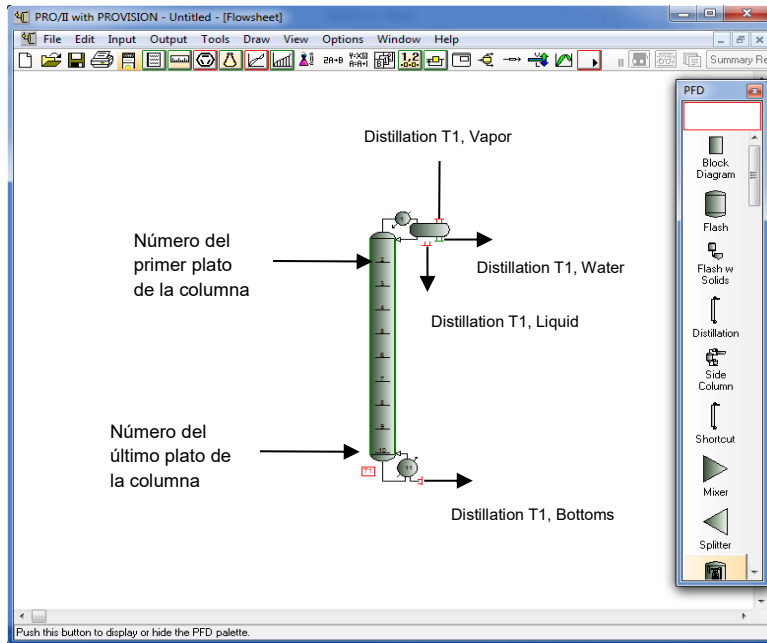


Fig. 3.58 Equipo del Método riguroso.

### 3.2.2.2 Descripción de la ventana de especificación del método riguroso (Distillation)

Al dar doble "Clic" seguido sobre el equipo se desplegará la ventana de especificación, ver (Fig. 3.59). Esta ventana cuenta con tres bloques diferentes de especificación, que algunos son obligatorios especificarlos para diseñar la columna y otras opciones son alternativas.

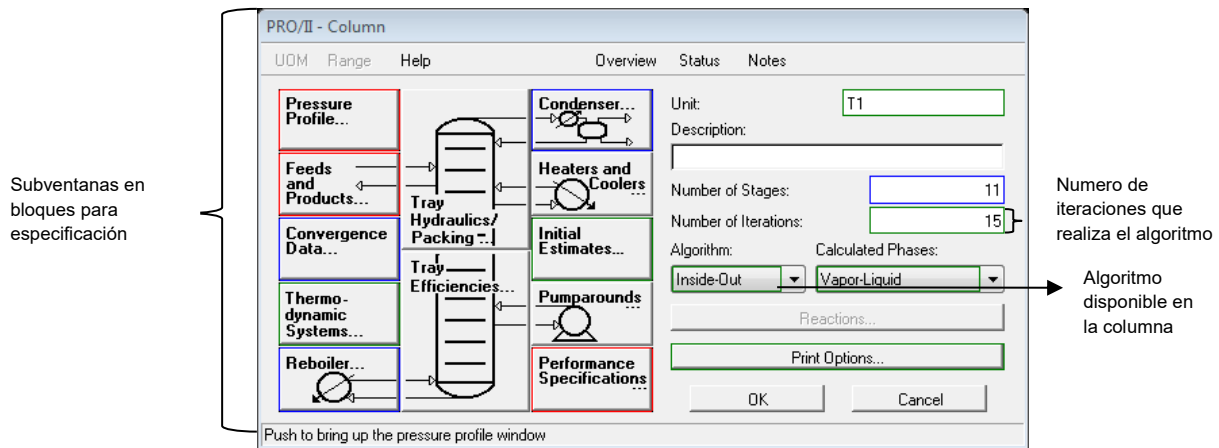


Fig. 3.59 Ventana de especificación método riguroso.

**Algoritmo:**

Se debe seleccionar algunos de los algoritmos de solución de la lista desplegable que se encuentre en la venta de especificación según sea el caso que se tenga. Los algoritmos disponibles son:

- **Inside-Out (por default):** Este algoritmo es la opción preferida para la mayoría de problemas de la destilación, en especial en los sistemas de hidrocarburos, debido a su rapidez para la solución de problemas de este tipo.
- **Sure:** Puede ser utilizado para resolver problemas de dos fases, donde una de las fases líquidas puede o no puede ser agua.
- **Chemdist:** El algoritmo se adapta bien a sistemas altamente no ideales y procesos donde existen equilibrios líquido-líquido-vapor (VLLE).
- **Liquid-Liquid:** El algoritmo de líquido-líquido se utiliza para modelar extracciones líquido-líquido.
- **Electrolytic:** El método se utiliza para modelar sistemas acuosos no ideales para columnas de destilación de electrolíticos.

**Numero de Iteraciones.**

Proporcionar el número de iteraciones en el campo de entrada de los datos proporcionados en la columna de la ventana principal de entrada de datos. El número de iteraciones corresponde al número de ensayos y pruebas de solución dependiendo del algoritmo utilizado. Los valores por default son 15 para “*Inside-Out*”, 10 para “*Sure*” y 20 para “*Chemdist*”.

**3.2.2.3 Subventanas de especificación.**

El método riguroso cuenta con diversas subventanas de especificación, ver (Fig. 3.59), a continuación de describirán algunas de las subventanas para el interés de esta tesis.

**3.2.2.3.1 Alimentación y Productos.**

Al dar “*Clic*” en esta opción se despliega una ventana, ver (Fig. 3.60) que contiene la línea de los productos, el tipo de producto, la fase, el número de bandeja y una estimación del flujo de salida en alguna de las líneas de los productos, así como una opción donde se debe indicar el número de plato de alimentación a la torre (se obtiene del método corto).

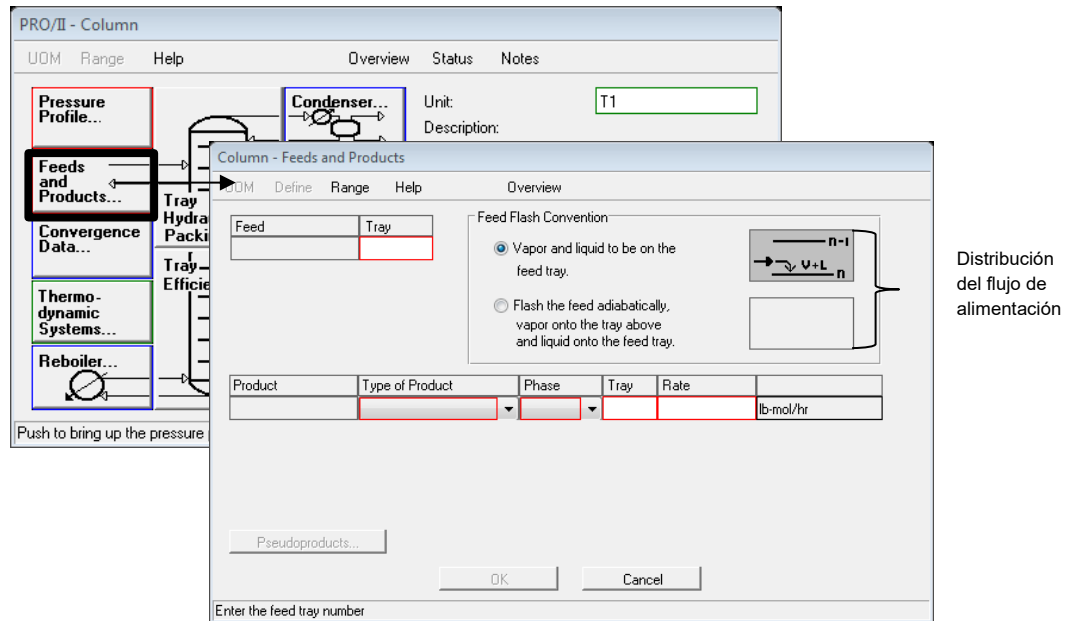


Fig. 3.60 Especificación de Feeds and Products.

Se tiene dos opciones de la distribución del flujo de alimentación a lo largo de la torre:

- *Vapor and Liquid to be on the feed tray.*
- Flash the feed adiabatically.

Los tipos de productos que incluyen son los siguientes:

- Overhead: Corresponde a la salida del condensador en el plato 1.
- Bottoms: Corresponde a la salida de los fondos del ultimo plato de la torre.
- Pseudoproduct: Esta opción se utiliza para crear corrientes que corresponde a la extracción de alguno de los productos en cualquier plato a lo largo de la columna, agregando una línea extra a la corriente.

Para los productos se debe estimar un valor aproximado ya sea para los domos o fondos. Este valor estimado debe ser lo más preciso posible, para aumentar la convergencia en el simulador.



### 3.2.2.3.2 Perfil de Presión.

Esta opción es una especificación que se debe realizar ya que define la presión en la columna y los cálculos que se realicen posteriormente serán en base a está.

Son dos opciones en las que se puede definir la presión, una corresponde a la opción “Overall” que define la presión del plato superior de la columna, especificando a la vez la pérdida de presión en los platos en toda la columna, ver (Fig. 3.61).

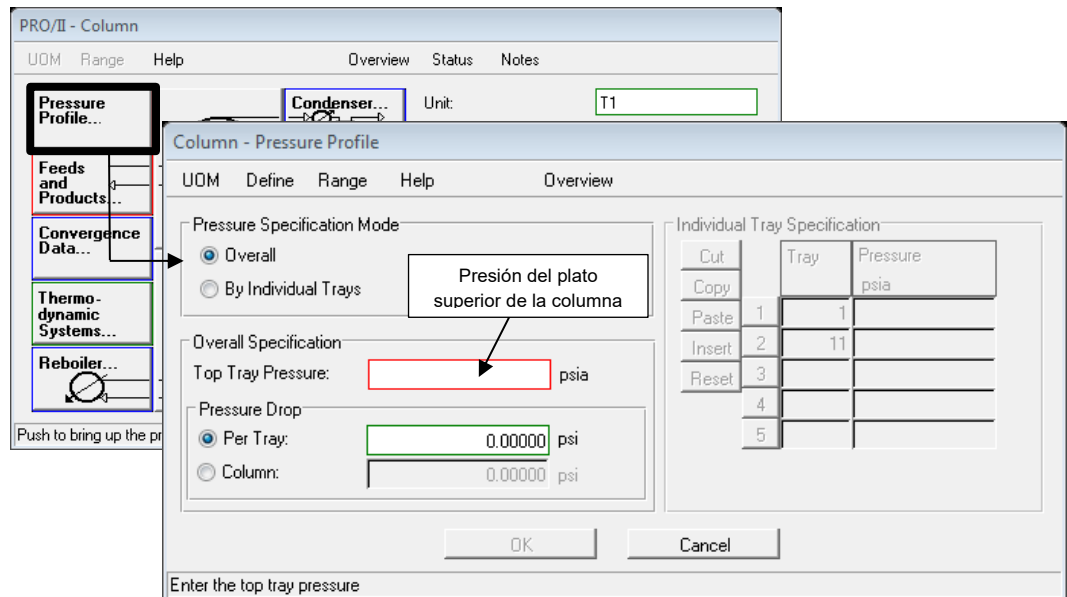


Fig. 3.61 Especificación de la presión Overall.

La otra opción corresponde a “By Individual Trays” y son las presiones individuales de los platos, donde se puede especificar la presión del primer plato o bien la presión plato por plato. Se puede interpolar valores de presión de los platos, ver (Fig. 3.62).

Este método es útil para definir el perfil de presión de las columnas con presión irregular, tales como unidades de vacío.

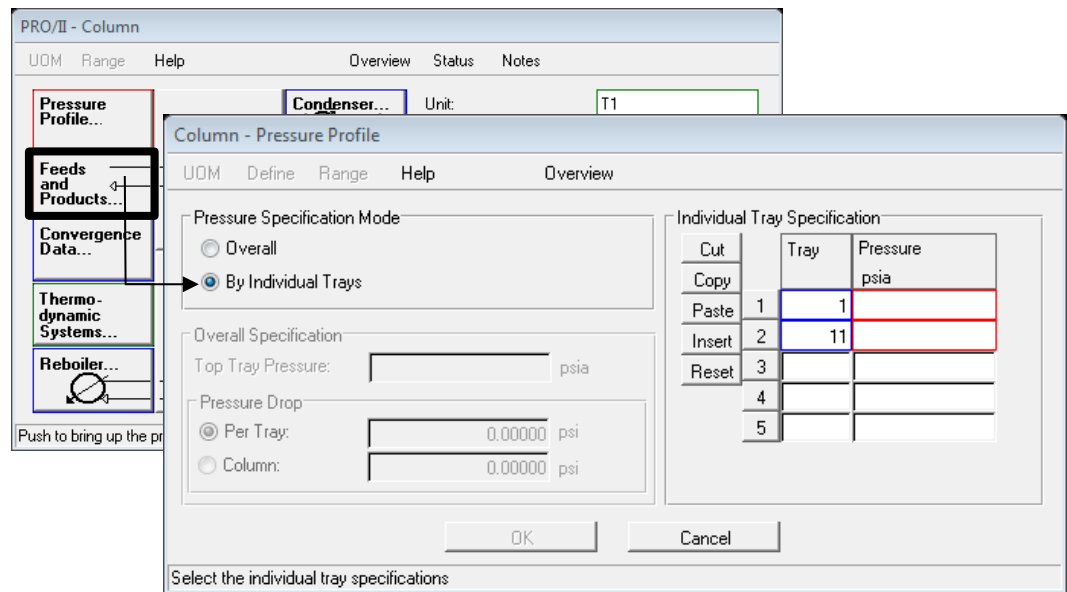


Fig. 3.62 Especificación de la presión *By Individual Trays*.

### 3.2.2.3.3 Condensador.

El simulador de procesos reconoce al condensador como un plato, por lo cual es importante tener presente esto.

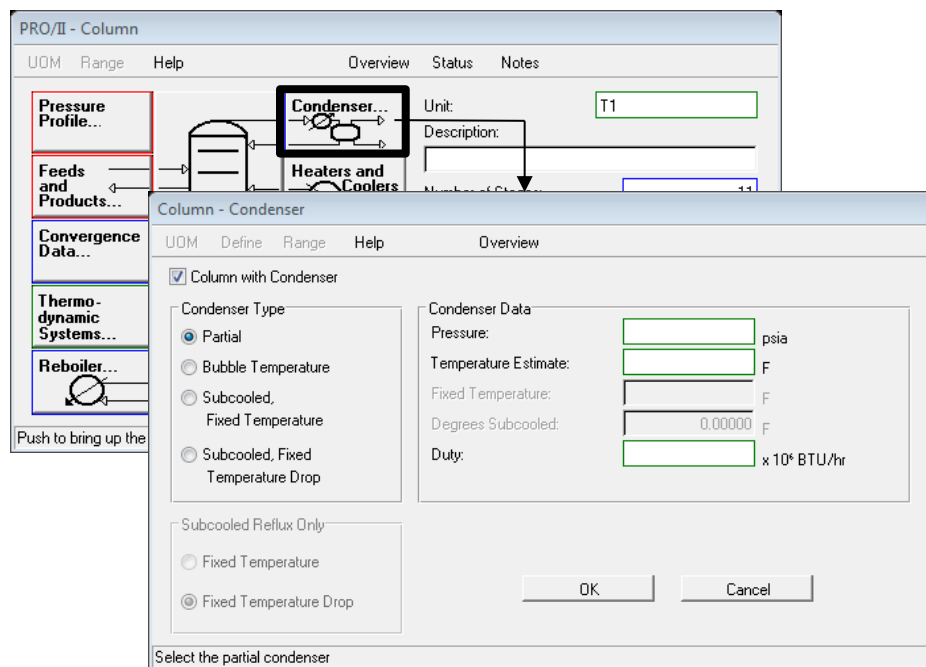


Fig. 3.63 Especificación *Condenser*.

Al dar “Clic” en la opción “Condenser...”, ver (Fig. 3.63) se despliega una ventana que contiene los diferentes tipos de condensadores y uno de ellos debe ser seleccionado.

Los tipos de condensadores son las siguientes opciones:

- **Partial:** La fase que se extrae como producto es el vapor, ver (Fig. 3.64) correspondiendo a la temperatura del punto de rocío del condensador.

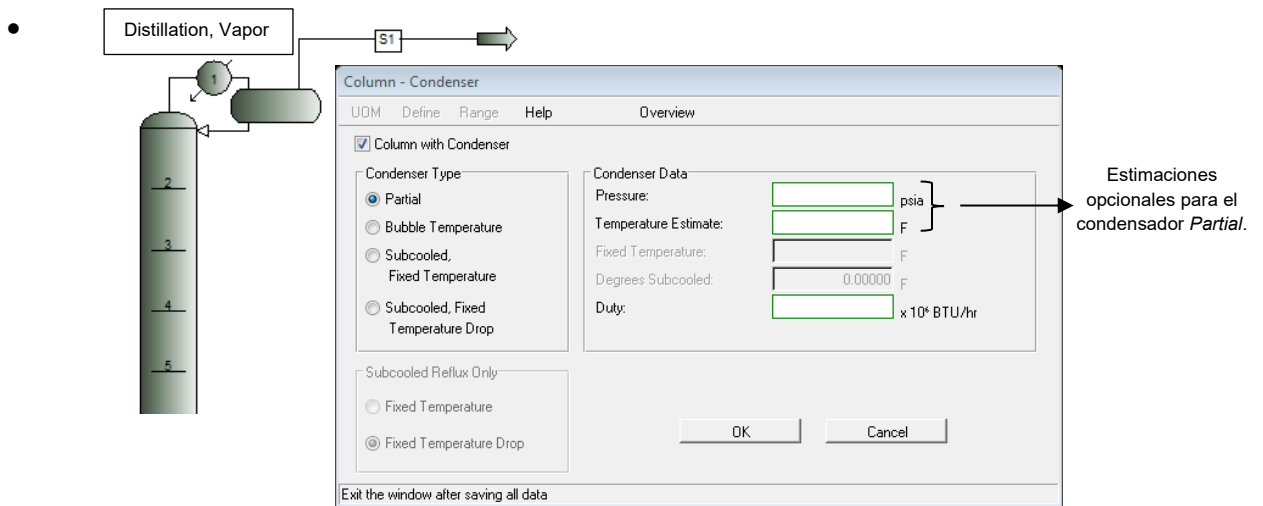


Fig. 3.64 Especificación para condensador *Partial*.

Una estimación opcional es la temperatura de condensación y presión del condensador que puede ser suministrado en la ventana del condensador.

Si la fase líquida se presenta como fase líquida, se puede extraer como tal, en la especificación *Feeds and Products...* como “Fixed rate Liquid draw” del primer plato, ver (Fig. 3.65).

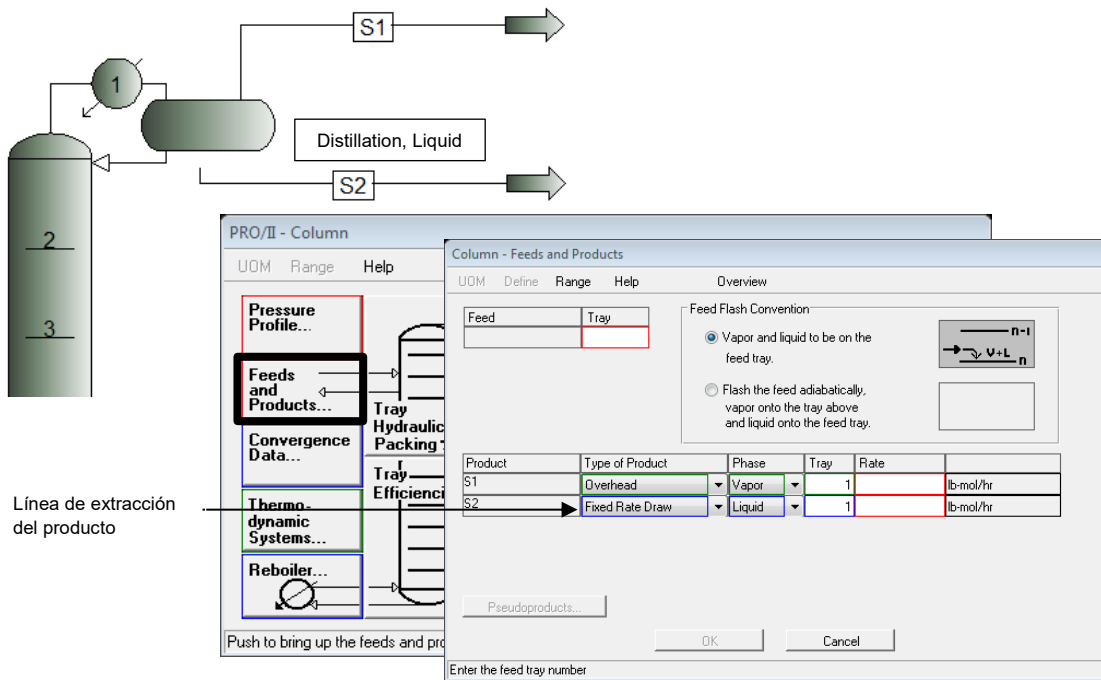


Fig. 3.65 Extracción de producto líquido del condensador *Partial*.

**Bubble Temperature:** El flujo que viene del plato 2 es enfriado hasta la temperatura de burbuja. Una porción de este flujo se devuelve como reflujo al plato 2 y otra es retirada como producto líquido, ver (Fig. 3.66).

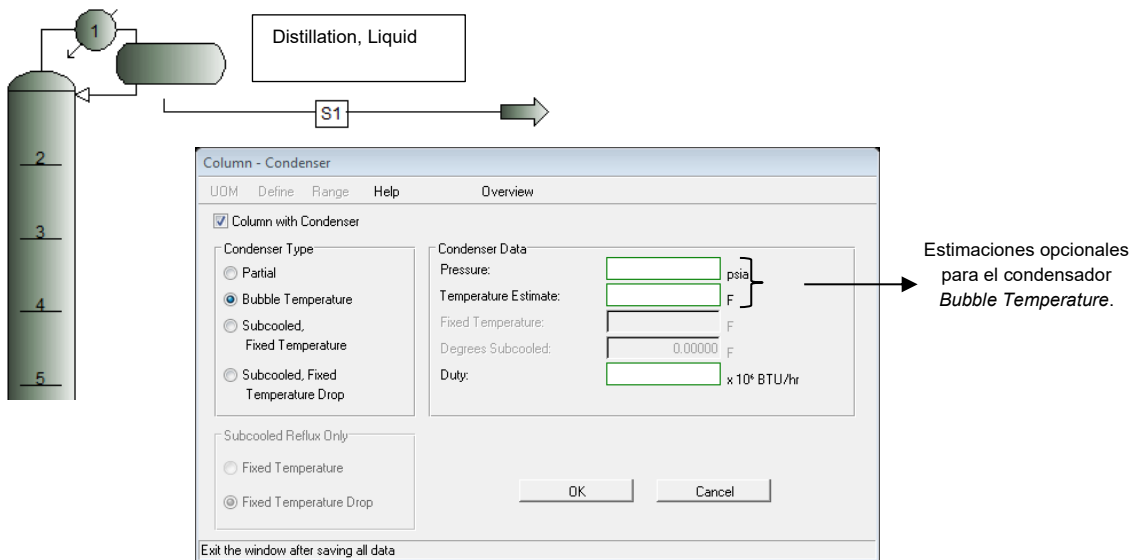


Fig. 3.66 Condensador *Bubble Temperature*.

- Subcooled, Fixed Temperature:** El flujo que viene del plato 2 de la columna como vapor se enfría por debajo del punto de burbuja a una temperatura de subenfriado, la cual debe ser definida en la ventana de especificación del condensador, ver (Fig. 3.67). la presión del condensador puede ser estimado. El simulador de procesos PRO II comprueba que la temperatura indicada del producto líquido este subenfriado, de lo contrario marca un error de convergencia en el programa.

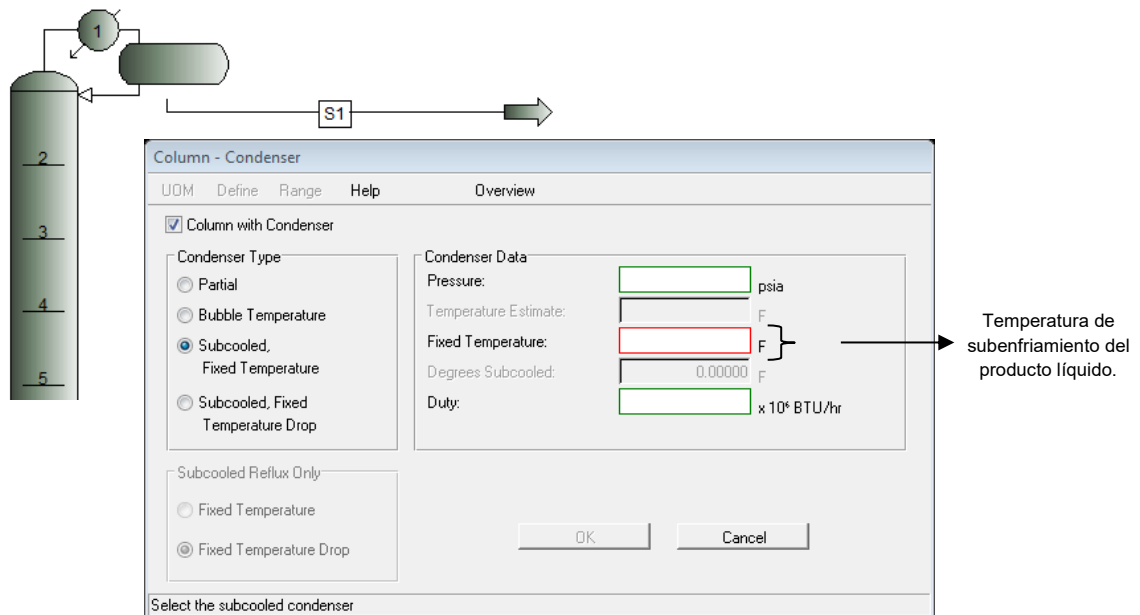


Fig. 3.67 Condensador *Subcooled, Fixed Temperature*.

**Subcooled, Fixed Temperature Drop:** Este condensador es el mismo descrito anteriormente, excepto que se indican los grados de subenfriamiento que están por debajo del punto de burbuja, ver (Fig. 3.68). La presión del condensador puede ser un valor aproximado.

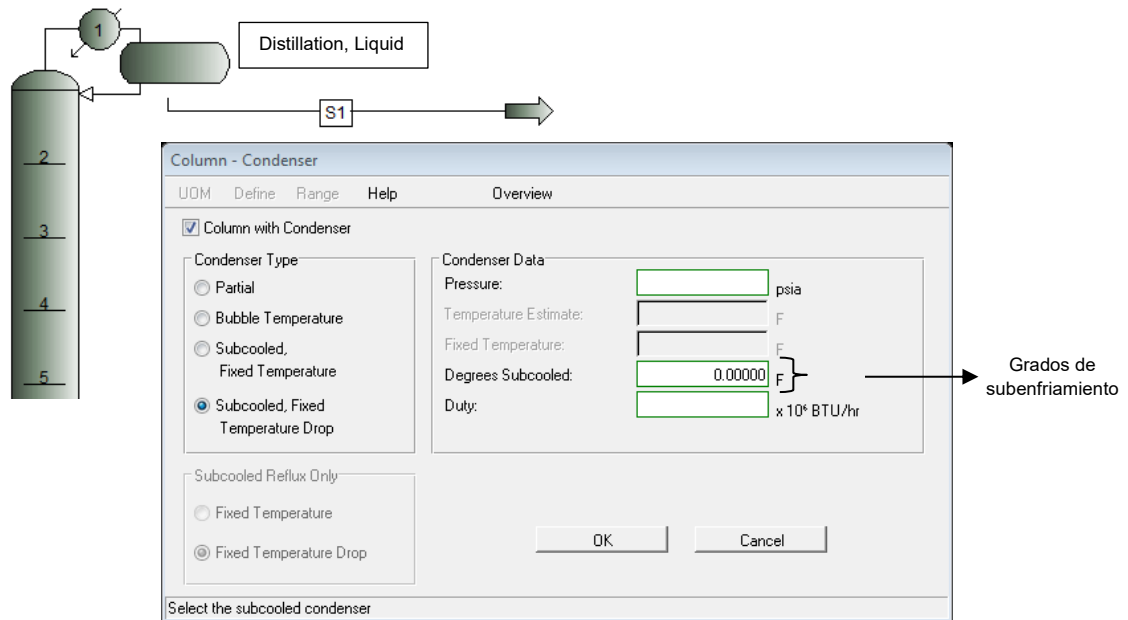


Fig. 3.68 Condensador *Subcooled Fixed Temperature Drop*.

En cualquier tipo de condensador se puede estimar un valor de la carga térmica.

#### 3.2.2.3.4 Reboiler.

El tipo de caldera, reboiler o rehervidor son usados en columnas de destilación para vaporizar una fracción de los productos del fondo.

El simulador cuenta con esta opción y se selecciona al dar "Clic" en "Reboiler", donde desplegará una ventana que contiene los diferentes tipos de reboiler, ver gh'+ (Fig. 3.69).

El simulador reconoce al reboiler como el último plato de la columna, correspondiendo a la salida de los fondos del producto líquido. El tipo de caldera predeterminado en el simulador PRO II es el *Kettle (Conventional)*.

Para el algoritmo *Inside-Out* que es el más utilizado, solamente tienen dos tipos de *reboilers*:

- *Thermosiphon without Baffles*
- *Thermosiphon with Baffles*

Si se selecciona alguno de estos dos reboilers se debe seleccionar alguna de las siguientes opciones:

- *Return Liquid*: Fracción del líquido que retorna.
- *Return Vapor*: Fracción del vapor que retorna.
- *Temperature*: Temperatura de retorno.
- *Temperature Change*: Cambio de temperatura a través de la caldera
- *Rate*: Flujo de circulación de retorno.

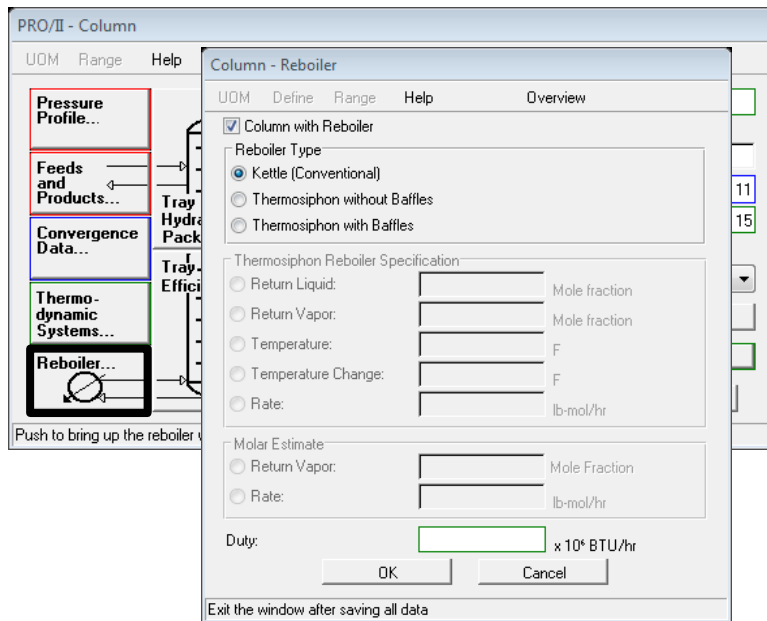


Fig. 3.69 Reboiler tipo *Kettle (Conventional)*.

En cualquiera de los dos termosifones y al elegir alguna de las opciones de Temperature, “Temperature Change” y “Rate”, se sugiere dar una estimación del retorno de la fracción líquida o el flujo, para mejorar la convergencia, ver (Fig. 3.70).

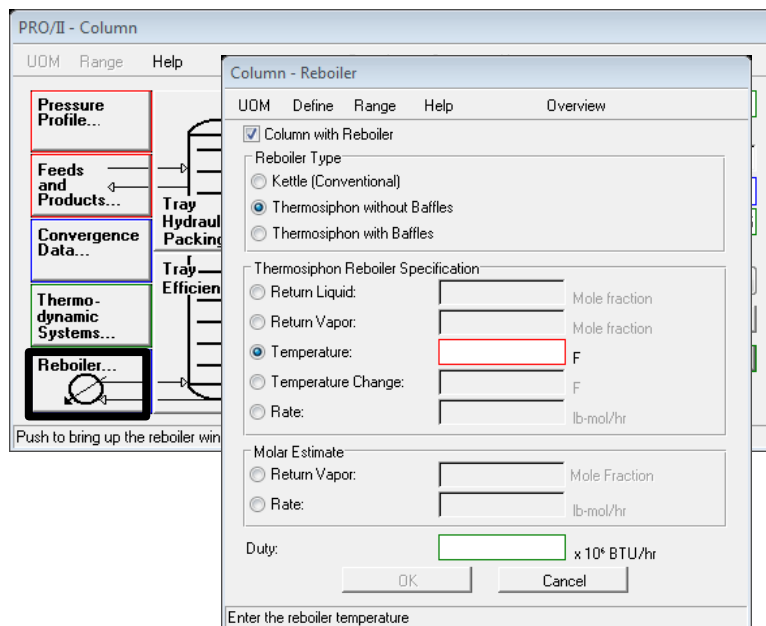


Fig. 3.70 Especificación de rehedidores y otros tipos de reboiler.

Se puede suministrar la carga térmica “*Duty*” como una estimación de los 3 diferentes tipos de *reboilers*.

### 3.2.2.3.5 Pumparounds.

Esta opción es un tipo de bomba interna que permite retornar el flujo de un plato a otro. Al seleccionar esta opción se despliega la ventana, ver (Fig. 3.71) que permite especificar las condiciones de esta opción.

Se debe agregar la opción una bomba interna, seleccionando “*Add Pumparounds*”, posteriormente la fase que se quiere retornar líquido o vapor, nombre de la bomba, número del plato del que se extraerá el flujo al número de plato que se retorna, presión a la que llega el flujo retornado y la especificación.

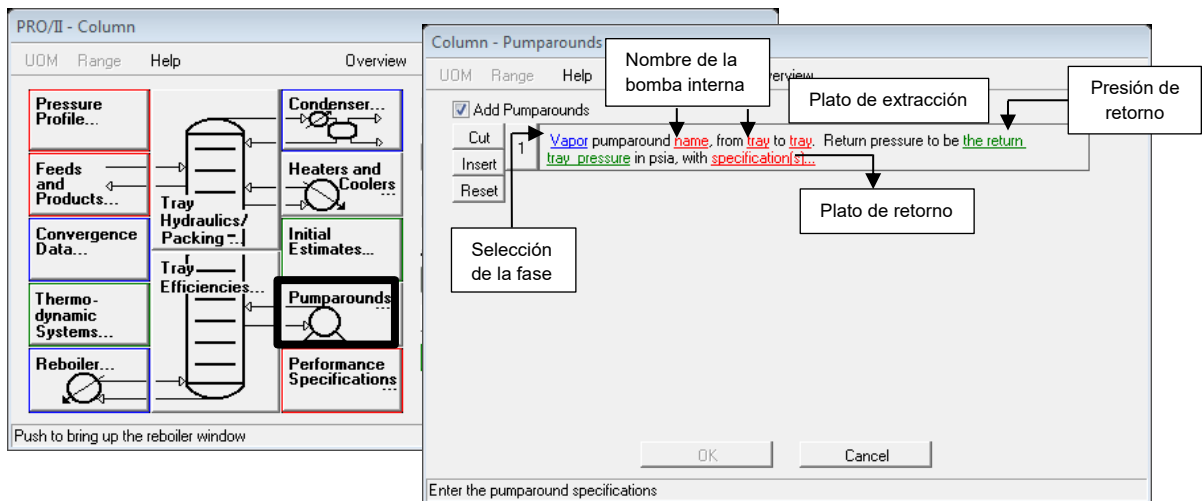


Fig. 3.71 Especificación de *Pumparounds*.

Al dar “*Clic*” en “*Specification(s)*”... se despliega una ventana que contiene las diferentes opciones de especificación, ver (Fig. 3.72).



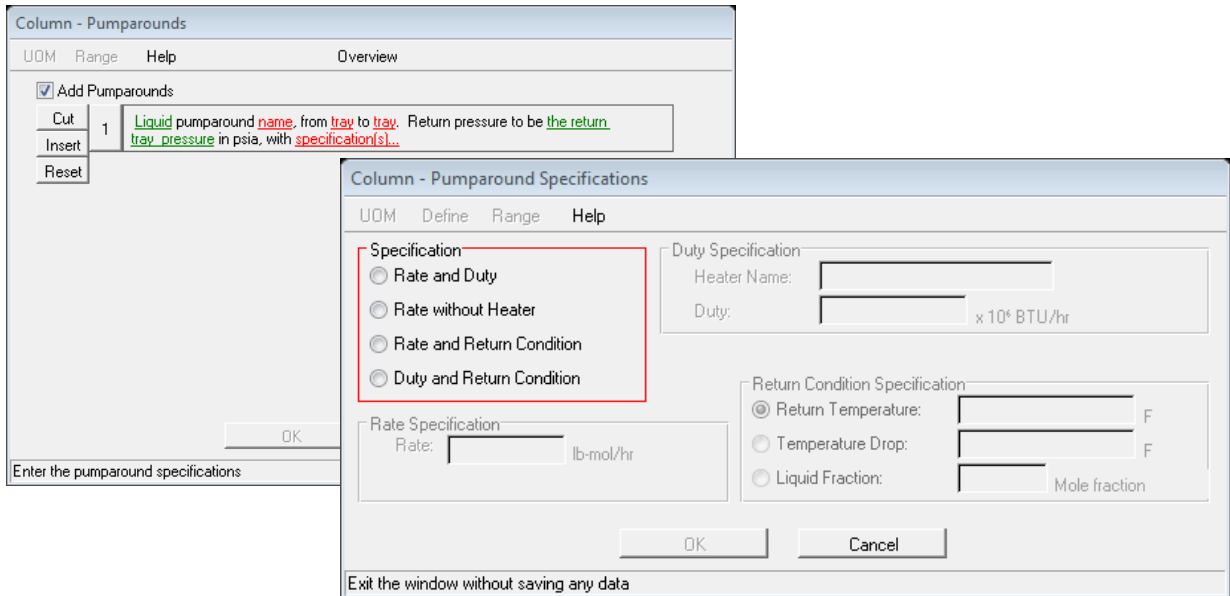


Fig. 3.72 Especificación de *Pumparounds*.

Al utilizar esta opción en la columna aparecerá una línea que indica de que plato se extrae el flujo y a cual plato se retorna, ver (Fig. 3.73).

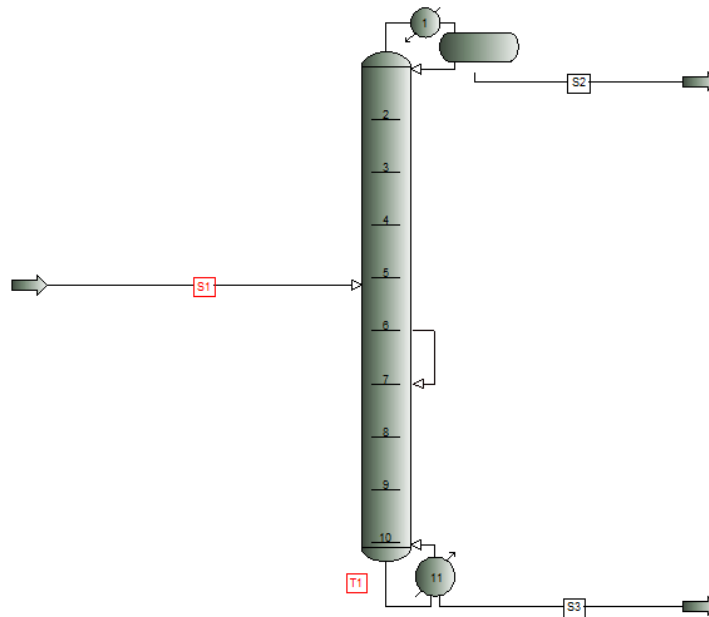


Fig. 3.73 Uso de *Pumparounds*.

### 3.2.2.3.5 Especificación de rendimiento.

En esta especificación dar “Clic” en “*Performance Specifications*” de la ventana principal del método riguroso, para desplegar la ventana que contiene las opciones a definir, ver (Fig. 3.74).

Esta especificación es una de las más importantes ya que las opciones que se definen en esta ventana nos ayudan a mejorar el diseño de la columna.

Son diversos los parámetros que se pueden utilizar para definir las condiciones de la columna entre ellos se encuentran los flujos de las corrientes de los productos, alguna propiedad como la temperatura o pesos moleculares de los productos, también se puede dar un parámetro de la columna como el reflujo; entre otros parámetros tanto para la columna y como las corrientes de salida.

Los valores de estos parámetros son los que permiten la solución de un buen diseño de la columna.

Se requieren como mínimo dos especificaciones en este método. El uso de las especificaciones que se quieran dar es a criterio del usuario, pero se sugiere dar una especificación que vaya referida a los productos y la otra a la columna. Como se había mencionado anteriormente esta, ventana es similar a la del método corto, por lo cual se utiliza de la misma forma. Solo se describirá la lista de parámetros que contiene.

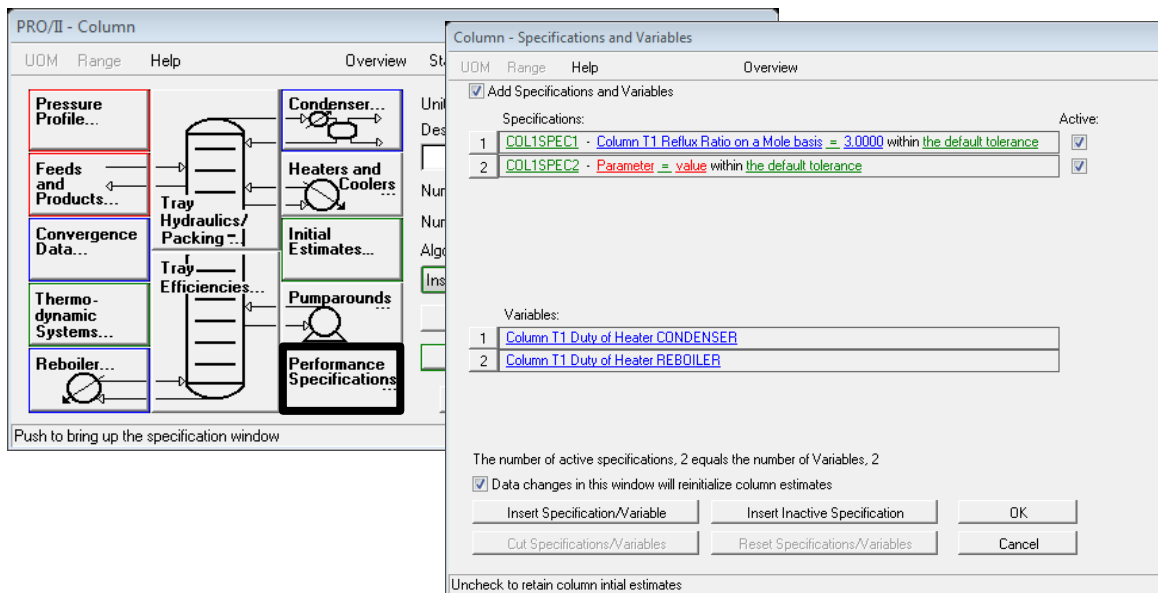


Fig. 3.74 Especificación *Performance Specifications*.

Los parámetros que contiene la opción de la columna ver (Fig. 3.75).

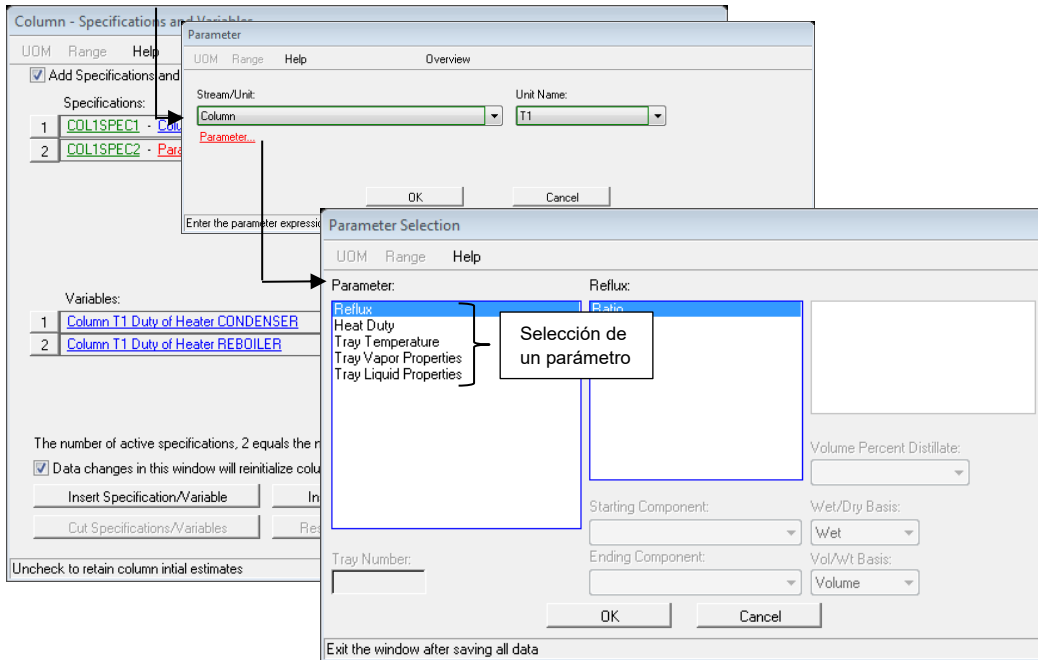


Fig. 3.75 Parámetros para la columna.

Y los parámetros que se pueden especificar para las corrientes de los productos, ver (Fig. 3.76).

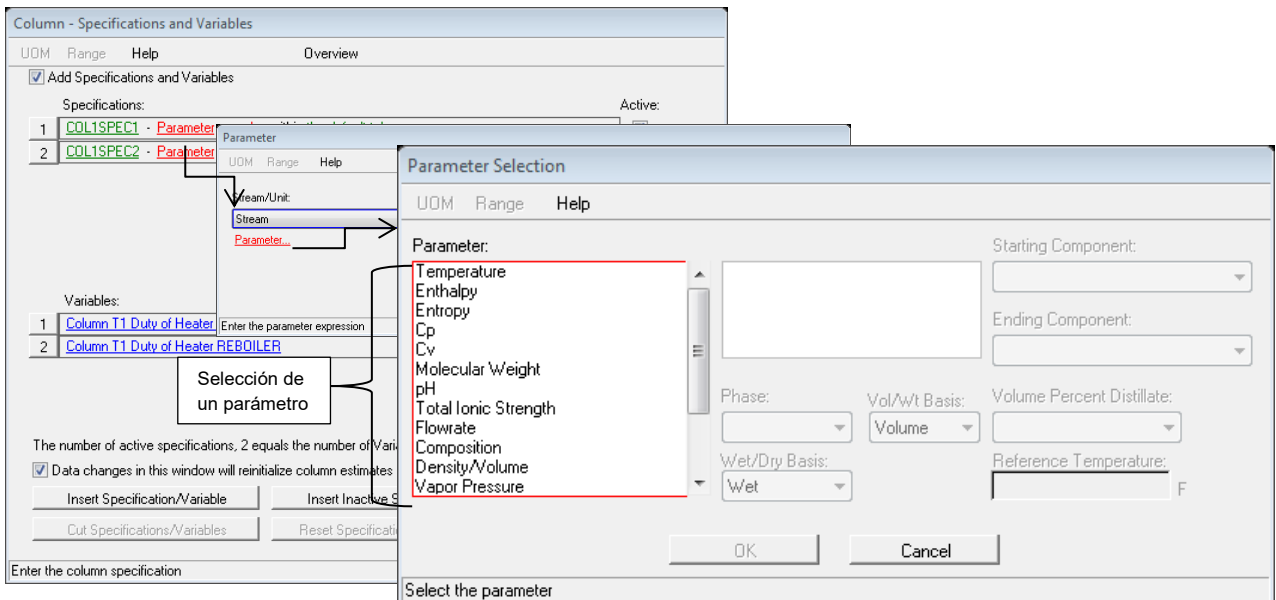


Fig. 3.76 Parámetros para las corrientes de los productos.

En el capítulo 4 se realizará el diseño de una columna donde se visualizará de forma sencilla como se realiza el diseño de una columna utilizando los dos métodos descritos anteriormente.

# **CAPÍTULO 4**

## **RESOLUCIÓN DE PROBLEMAS DE TANQUES FLASH Y TORRES DE DESTILACIÓN MULTICOMPONENTE**

### **Destilación Multicomponente.**

Los métodos de diseño y/o análisis de columnas de destilación para separar mezclas multicomponente (con más de dos componentes) se pueden clasificar en dos grupos:

- Métodos aproximados.
- Métodos rigurosos.

Los métodos aproximados están comprendidos por las siguientes ecuaciones:

- Ecuación de Fenske: Número mínimo de etapas a reflujo total.
- Ecuación de Underwood: Reflujo mínimo.
- Correlación de Gilliland: Número de etapas  $R > R_{\min.}$ .
- Ecuación de Winn: Número mínimo de etapas a reflujo total.
- Ecuación de Erbar-Maddox: Numero de etapas a  $R > R_{\min.}$ .

Los métodos rigurosos están comprendidos por los siguientes métodos:

- Método de Lewis-Matheson.
- Método de Thiele-Geddes.
- Método de Holland-Thiele-Geddes.

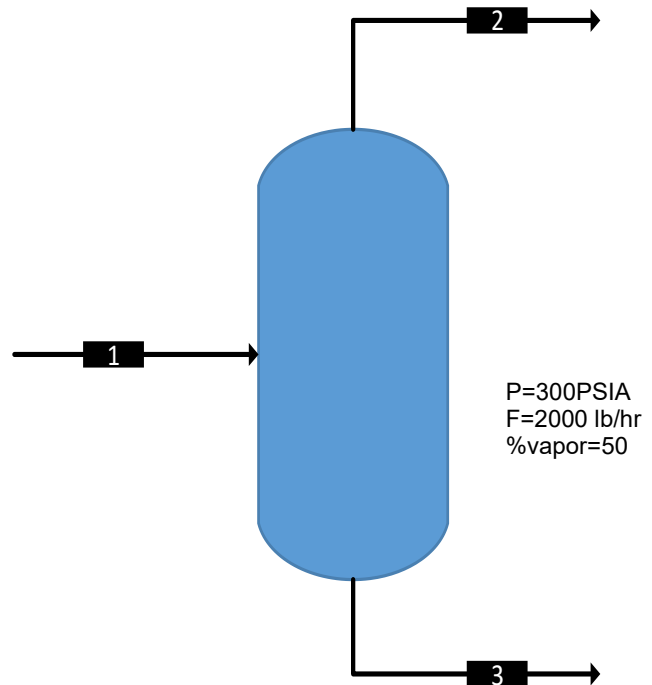
#### 4.1 Flash adiabático.

Una corriente de 2000 lb/hr formada por los seis hidrocarburos que se indican en la tabla 4.1, se somete a un flash adiabático. Donde la fracción de vapor es de 0.5 y la presión de operación del flash es de 300 psia. Calcule: <sup>[24]</sup>

- La temperatura de operación del flash adiabático.
- La composición del líquido, del vapor y del flujo.

Tabla 4.1. Composiciones Flash adiabático.

COMPONENTE	FRACCIÓN MOL
Etileno	0.02
Etano	0.03
Propileno	0.05
Propano	0.10
Butano	0.60
isobutano	0.20



Especificaciones  
First Specification  
Second Specification

#### 4.1.2 Especificación del Flash adiabático.

Para iniciar la simulación, seleccionar los elementos básicos de una simulación.

- Modelo termodinámico: Se debe seleccionar uno, bajo el cual se modelara el proceso, para este ejemplo se selecciona "Soave-Redlich-Kwong", ver (Fig.4.1).

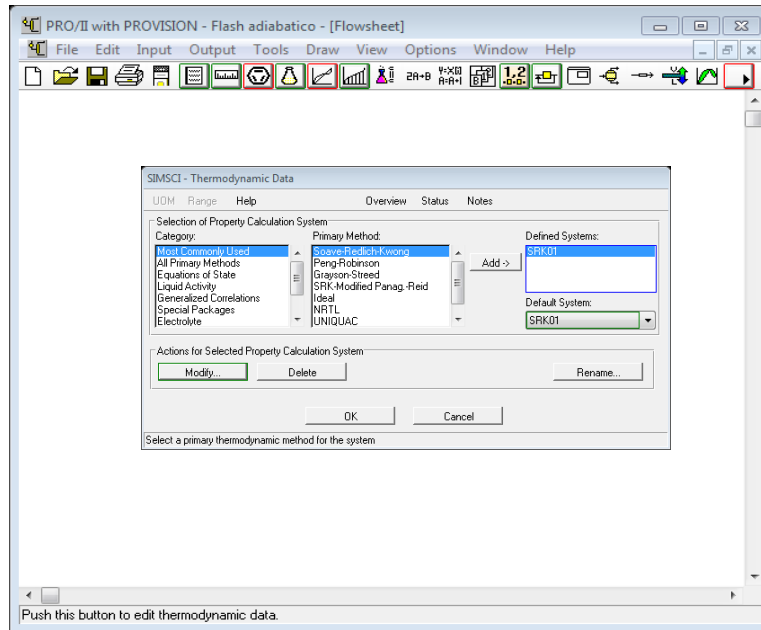


Fig. 4.1 Modelo termodinámico.

- Selección del sistema de unidades: para este caso se define el sistema inglés, ver (Fig.4.2).

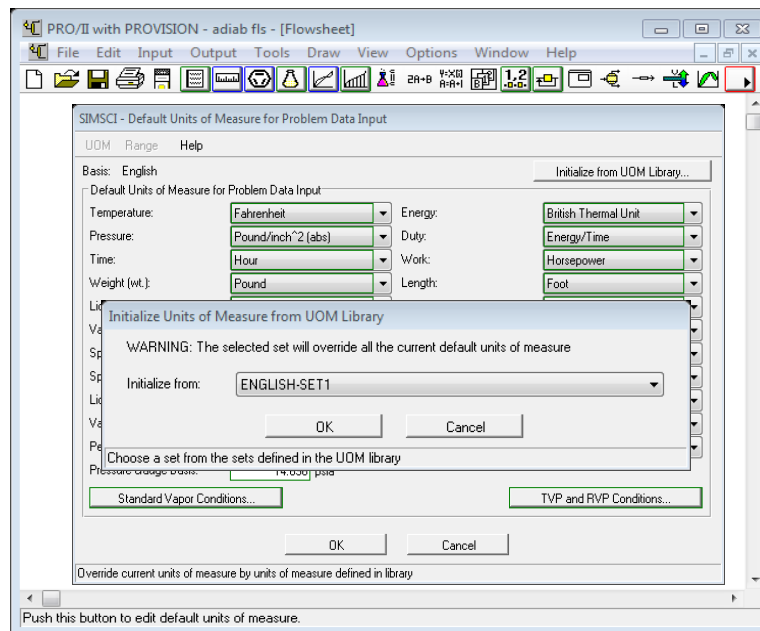


Fig. 4.2 Sistema de unidades.

- Selección de los componentes a partir de la librería del simulador, ver (Fig.4.3).



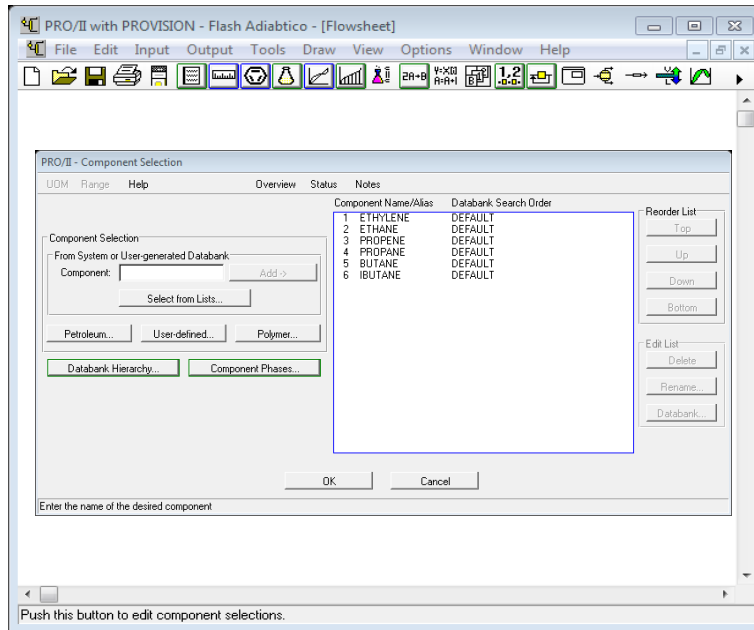


Fig.4.3 Selección de componentes.

#### 4.1.3 Definición de la línea de alimentación.

Especificar las condiciones térmicas de la línea de alimentación, la primera especificación será la presión 300 psia y como segunda especificación la fracción de vaporización del 50%, ver (Fig.4.4).

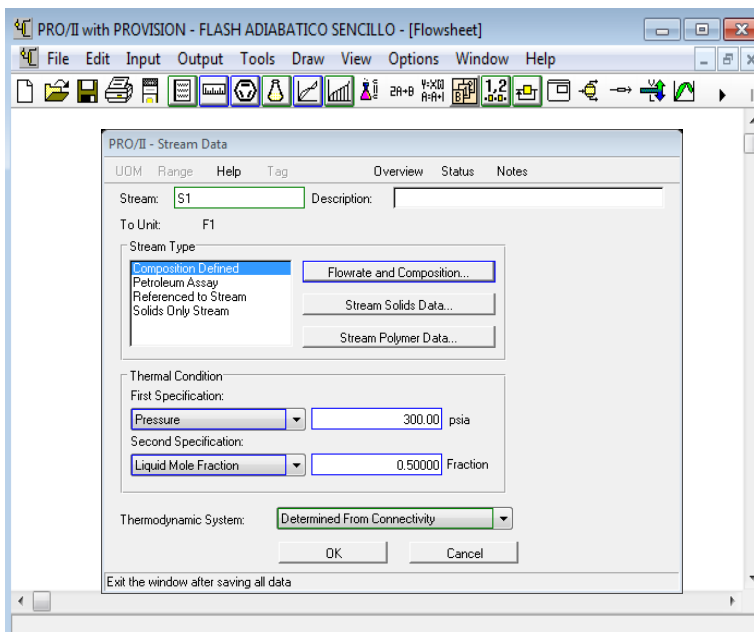


Fig. 4.4 Condiciones térmicas.

- Para indicar el flujo total de la alimentación dar “Clic” en “Flowrate and Composition...” en este ejercicio es de 2000 lbmol/hr, ver (Fig.4.5).

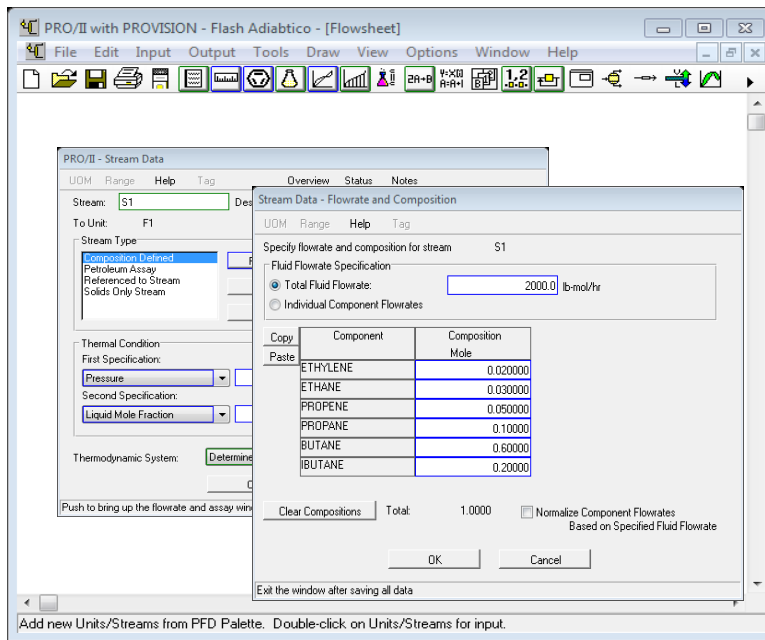


Fig. 4.5 Especificación del flujo de alimentación.

#### 4.1.4 Selección del equipo.

- Equipo: El equipo se localiza en la barra “PFD” con el nombre de “Flash”. Identificadas las salidas del equipo se conecta la línea de alimentación, adicionando y conectando las líneas de los productos que sean necesarias. Para esta simulación se conectarán la línea de salida de vapor y líquido respectivamente, ver (Fig.4.6).

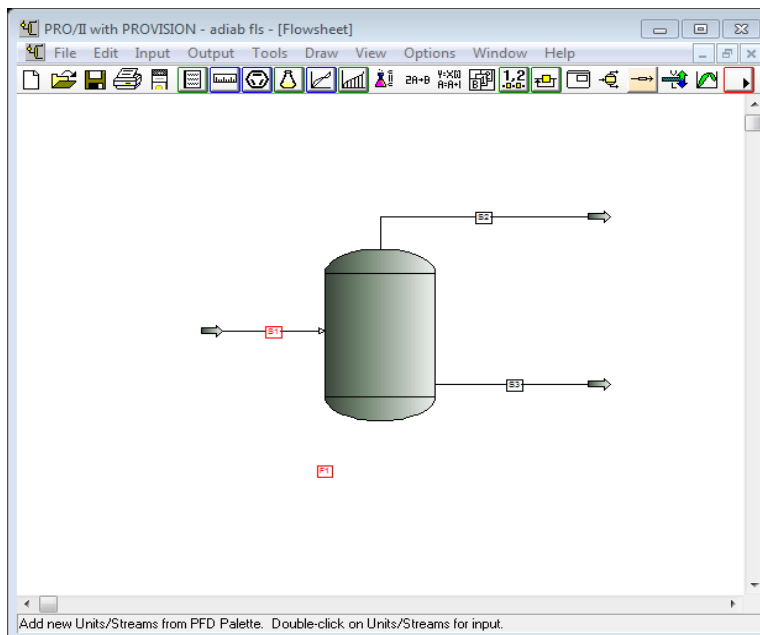


Fig. 4.6 Conexión de líneas al equipo.

#### 4.1.5 Especificación del equipo.

Dar doble “Clic” sobre el equipo para desplegar la ventana que permite especificarlo.

La primera especificación es la presión de 300 psia que corresponde a la presión de alimentación. La segunda especificación corresponde a la carga térmica en la alimentación la cual puede ser llamada *Duty* = 0 Kcal/hr, ver (Fig.4.7).

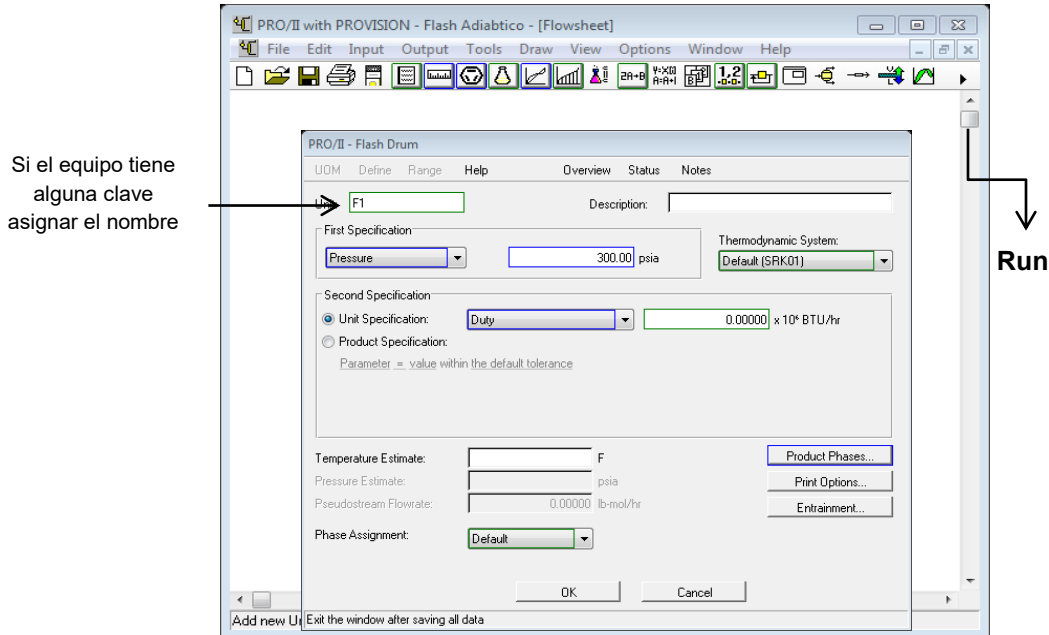


Fig.4.7 Especificación del equipo flash.

#### 4.1.6 Ejecución del programa y obtención de resultados.

Especificado el equipo dar “Clic” en “OK” en la ventana de especificación del equipo y correr el programa con el icono “Run” que aparece en la barra secundaria. Para ver los resultados de una simulación existen diversas formas. Una de ellas es la que se explica a continuación:

Una vez que se ha ejecutado el programa y el equipo ha cambiado a color azul, ir a la barra de herramientas primaria y ubicar la ventana “Output”, ahí seleccionar “Stream Property Table”, ver (Fig. 4.8).

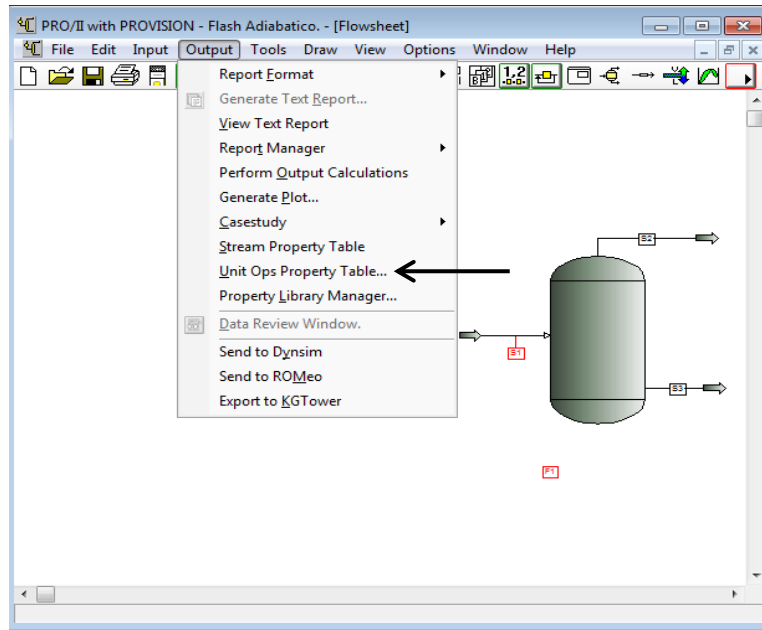


Fig. 4.8 Obtención de resultados.

Esta tabla permitirá mostrar los resultados de las diferentes líneas. Dicho recuadro se insertará dando “Clic” donde se desee colocar, ver (Fig.4.9).

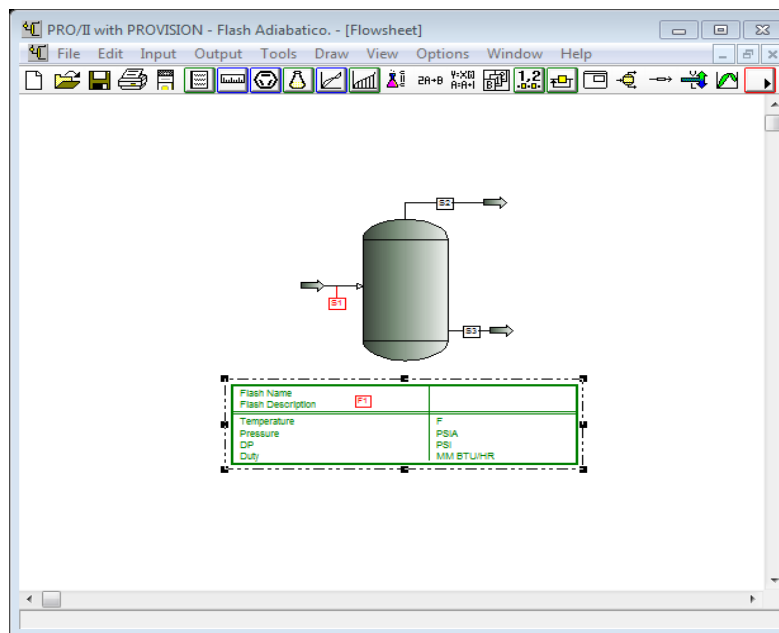


Fig. 4.9 Generación de tabla de resultados.

Insertado el recuadro se da doble “Clic” sobre él, esto despliega una nueva ventana que contiene diferentes opciones de presentar los resultados, estas opciones son las que contiene “Property List to be Used”.

Seleccionar “*Material Balance List*”, icono que mostrará el balance de materia de la simulación realizada. Para ver los resultados de las líneas de interés ubicamos la opción “*Available Streams*” la cual contiene una lista con todas las líneas de la simulación. Se seleccionan las líneas que se requieran y se da “*Clic*” en “*Add*” o si se desea deseleccionar todas únicamente se dará “*Clic*” en “*Add All*”, ver (Fig. 4.10). Las cuales se agregaran a “*Displayed Stream*”, ver (Fig.4.11).

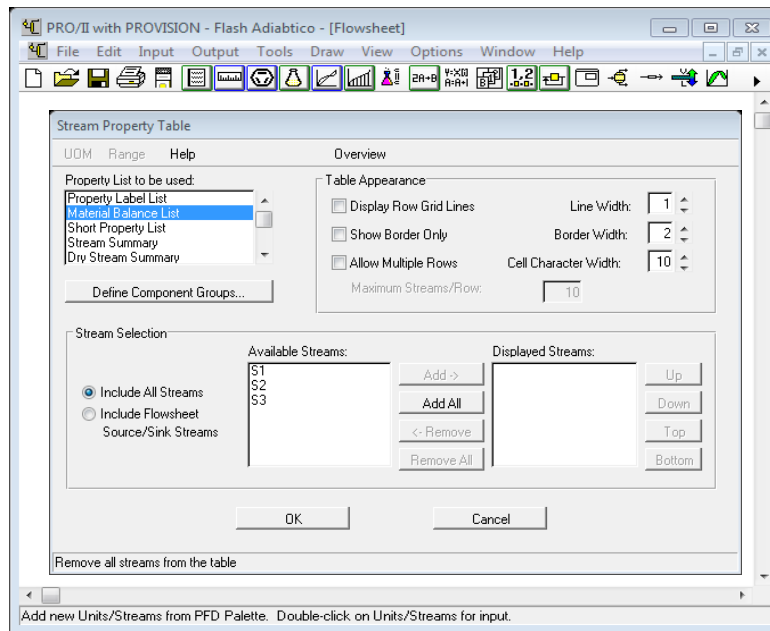


Fig. 4.10 Corrientes disponibles.

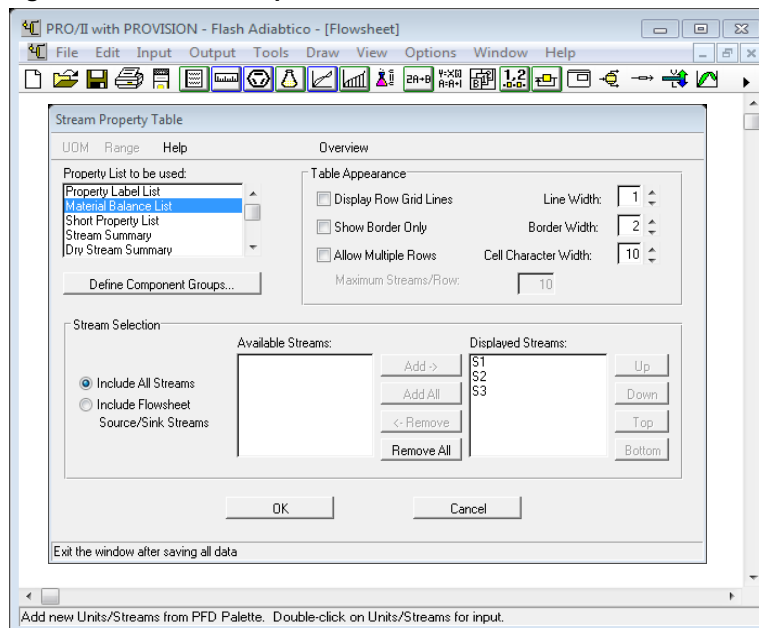


Fig. 4.11 Selección de líneas.

La lista de líneas que contiene el recuadro “*Displayed Stream*” serán las mismas que aparecerán en el recuadro que contiene la tabla de resultados. Seleccionar la línea S1, S2 y S3 y dar “*Clic*” en “*OK*”. Es así como se muestra en la hoja de trabajo la tabla que contiene los resultados de las líneas, ver (Fig. 4.12).

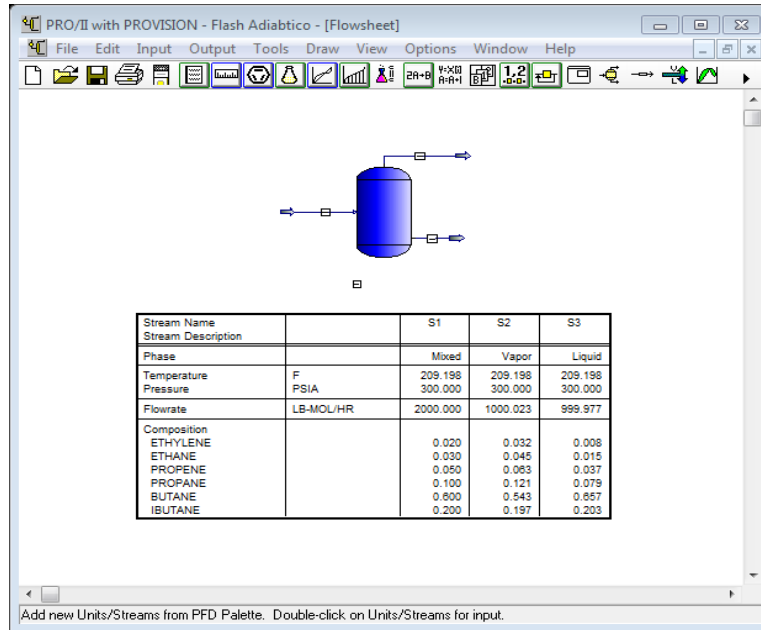


Fig. 4.12 Tabla de resultados.

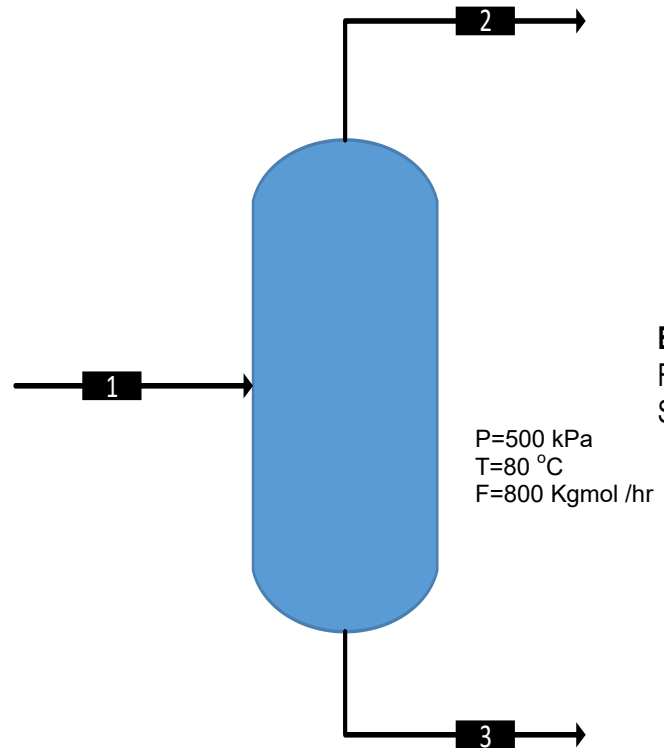
De acuerdo a los datos arrojados por el simulador se obtiene que; La temperatura es 209.2 °F y las composiciones de equilibrio en cada fase, ver (Fig. 4.12).

## 4.2 Flash isotérmico.

Un tanque flash opera a  $80\text{ }^{\circ}\text{C}$  y  $500\text{ kPa}$  para separar una mezcla de  $800\text{ Kgmol/hr}$  con las composiciones en fracción mol., que se indican en la tabla 4.2. Calcule las fracciones de cada componente en fase líquida y vapor. [24]

Tabla 4.2. Composiciones Flash isotérmico.

COMPONENTE	FRACCIÓN MOL
Etano	10%
Propano	5%
n-butano	15%
n-pentano	10%
isopentano	12%
n-hexano	8%
Heptano	30%
Nonano	10%



**Especificaciones**  
 First Specification  
 Second Specifica

### 4.2.1 Selección de los elementos básicos.

Para iniciar la simulación, seleccionar los elementos básicos de una simulación.

- Modelo termodinámico: Se debe seleccionar cuando menos uno, bajo el cual se modelará el proceso, para este caso se selecciona “*Peng-Robinson*”, ver (Fig.4.13).

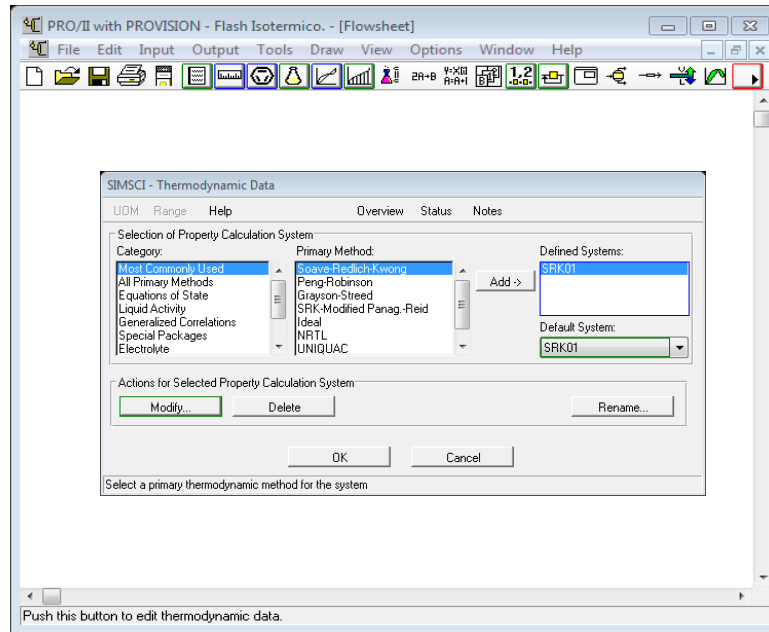


Fig. 4.13 Modelo termodinámico.

- Selección del sistema de unidades: para este caso se define el sistema métrico, ver (Fig.4.14).

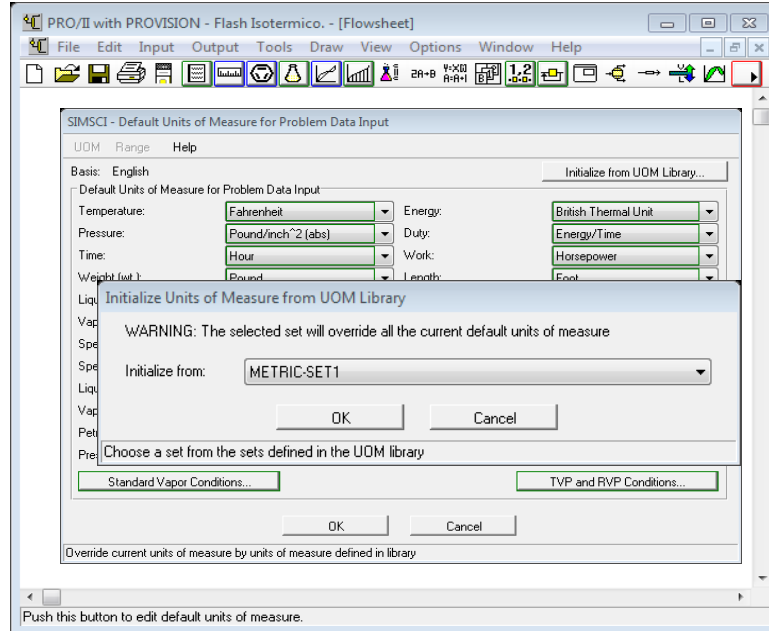


Fig. 4.14 Sistema de unidades.



- Selección de los componentes a partir de la librería del simulador, ver (Fig.4.15).

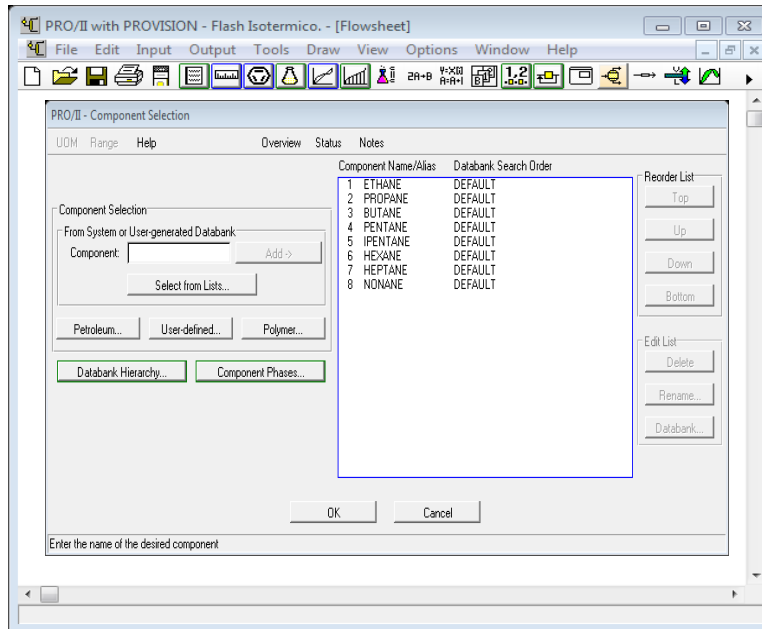


Fig. 4.15 Selección de componentes.

#### 4.2.2 Definición de la línea de alimentación.

Especificar las condiciones térmicas de la línea de alimentación, la primera especificación será la presión 500 kPa, y como segunda especificación la temperatura de 80 °C, ver (Fig.4.16).

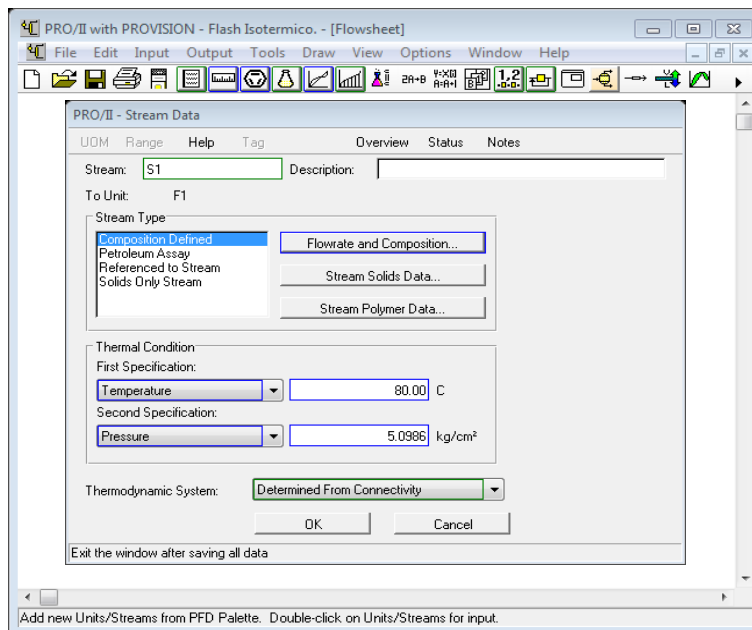


Fig. 4.16 Condiciones térmicas.

- Para indicar el flujo total de la alimentación dar “Clic” en “Flowrate and Composición...” en este ejercicio es de 800 Kgmol /hr, ver (Fig.4.17).

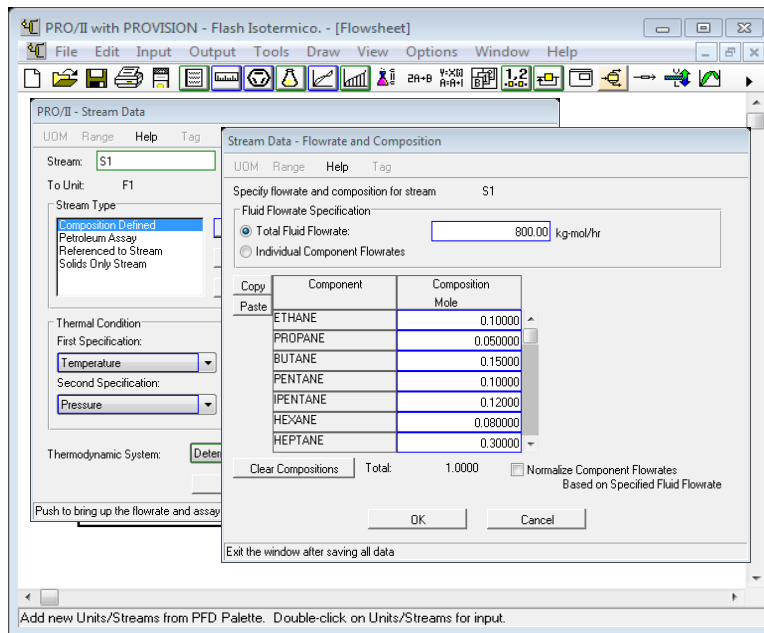


Fig. 4.17 Especificación del flujo de alimentación.

#### 4.2.3 Especificación del equipo.

Dar doble “Clic” sobre el equipo para desplegar la ventana que permite especificarlo. La primera especificación es la presión de 500 kPa que corresponde a la presión de alimentación. La segunda especificación corresponde a la temperatura de alimentación que es de 80 °C, ver (Fig.4.18).

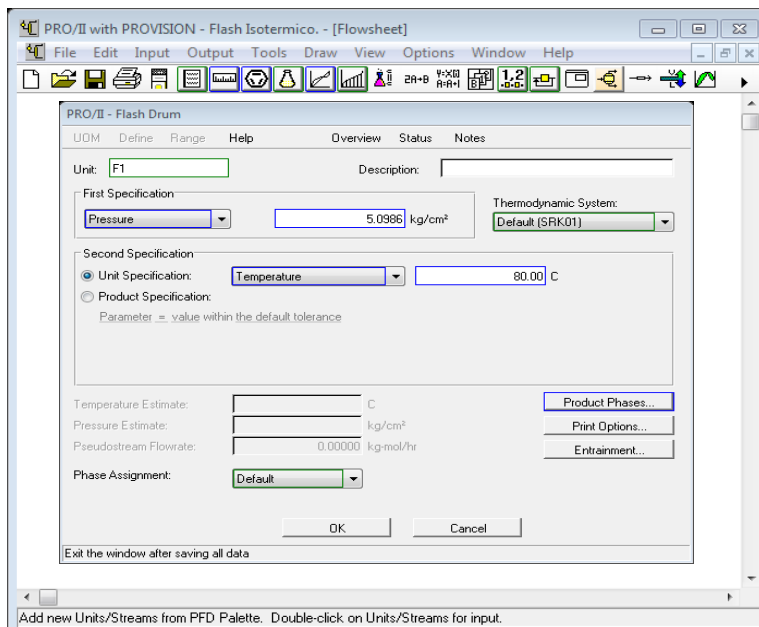


Fig. 4.18 Especificación del tanque flash.

#### 4.2.4 Ejecución del programa y obtención de resultados.

Especificado el equipo dar “Clic” en “OK” en la ventana de especificación del equipo y correr el programa con el icono “Run” que aparece en la barra secundaria.

Para ver los resultados de una simulación existen diversas formas. Una de ellas es la que se explica a continuación:

Una vez que se corrió el programa y el equipo se cambia a color azul, ir a la barra de herramientas primaria y ubicar la ventana “Output”, ahí seleccionar, “Stream Property Table”. Una vez seleccionada la opción de tabla, se selecciona la cantidad de corrientes que se quieren mostrar en la tabla, obteniendo así un informe completo del sistema flash, ver (Fig. 4.19).

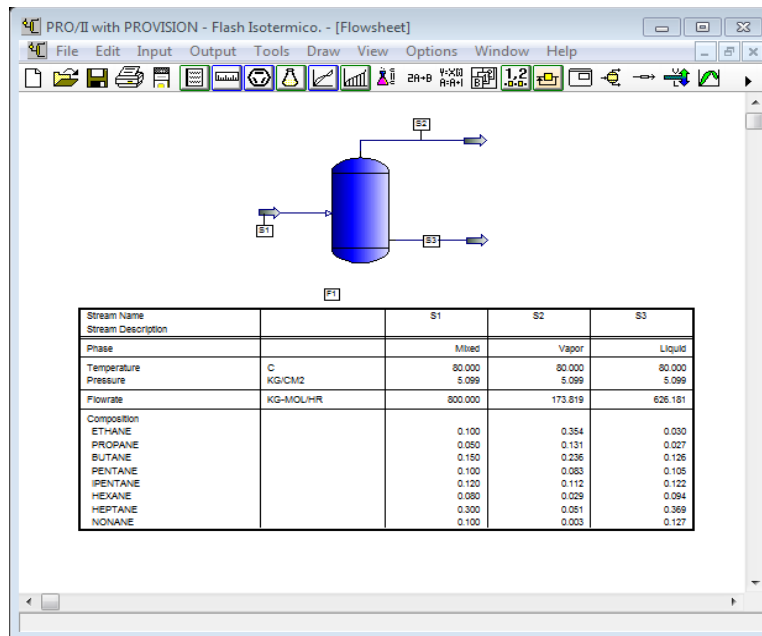


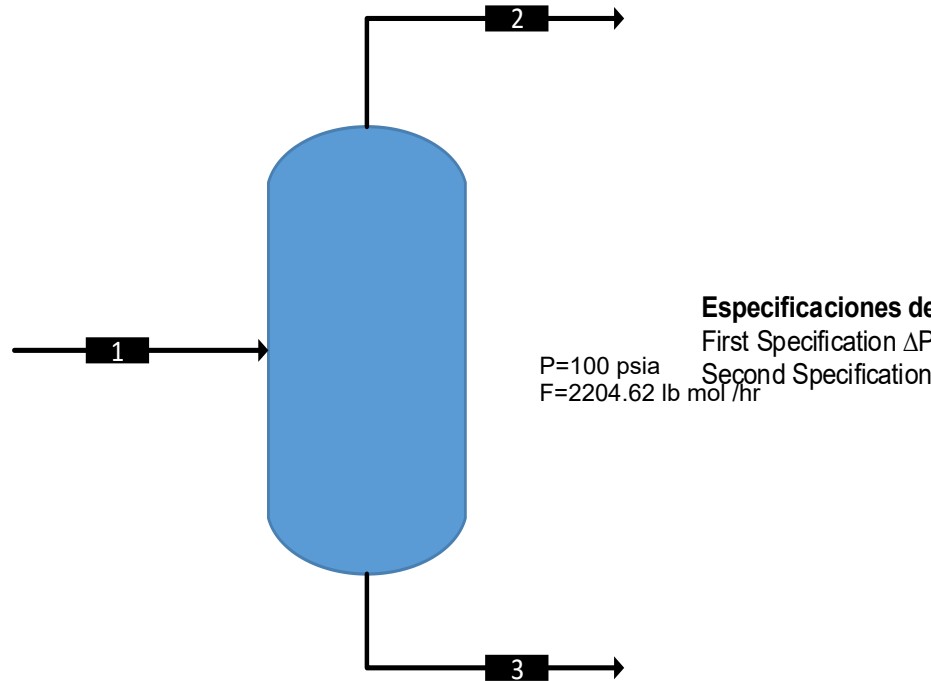
Fig. 4.19 Tabla de resultados.

### 4.3 Punto de rocío.

Se desea conocer la temperatura del punto de rocío de una corriente de 2204.62 lb/hr formada por los 5 hidrocarburos que se indican en la Tabla 4.3. La condición de operación del flash es de 100 psia. [24]

Tabla 4.3. Composiciones Punto de rocío.

COMPONENTE	FRACCION MOL
etano	0.05
propano	0.15
n-butano	0.25
n-pentano	0.2
n-hexano	0.35



#### 4.3.1 Selección de los elementos básicos.

Para iniciar la simulación, seleccionar los elementos básicos de una simulación.

- Modelo termodinámico: Se debe seleccionar cuando menos uno, bajo el cual se modelara el proceso, para este caso se selecciona "Soave-Redlich-Kwong", ver (Fig.4.20).

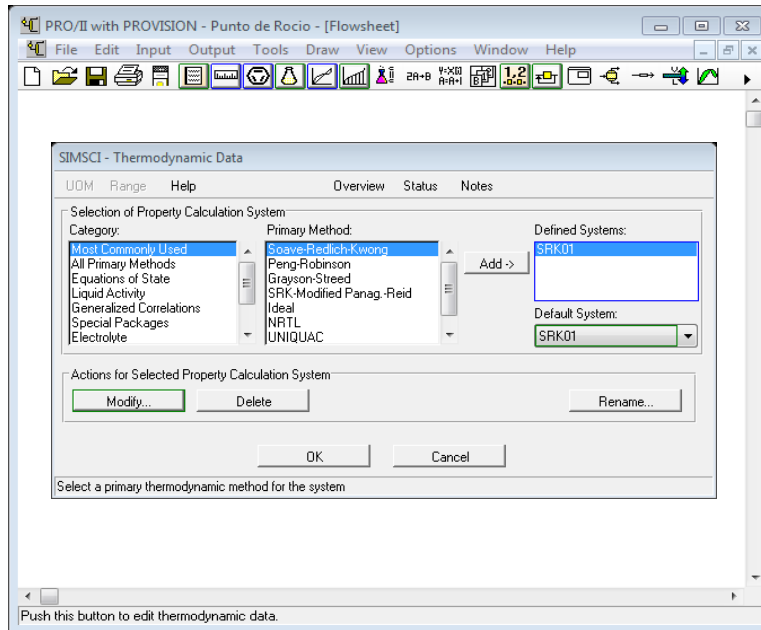


Fig. 4.20 Modelo termodinámico.

- Selección del sistema de unidades: para este caso se define el sistema inglés, ver (Fig.4.21).

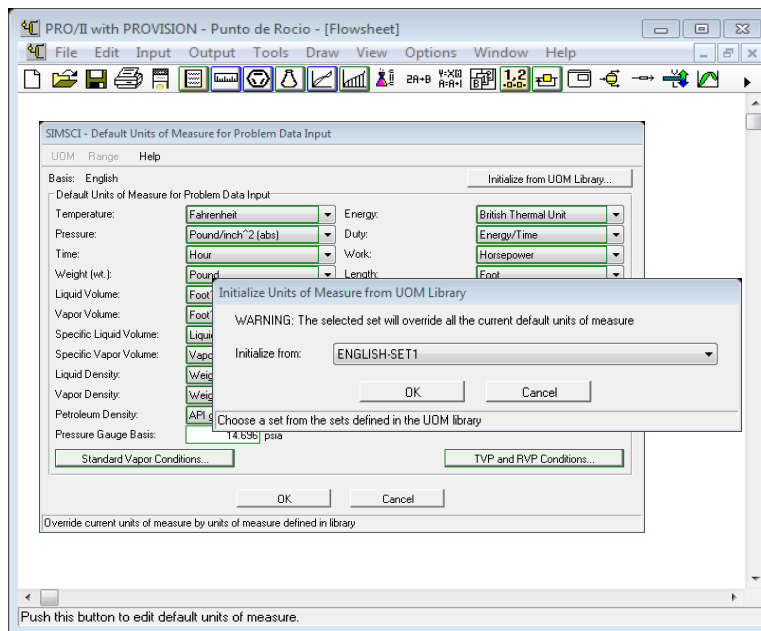


Fig. 4.21 Sistema de unidades.

- Selección de los componentes a partir de la librería del simulador, ver (Fig.4.22).

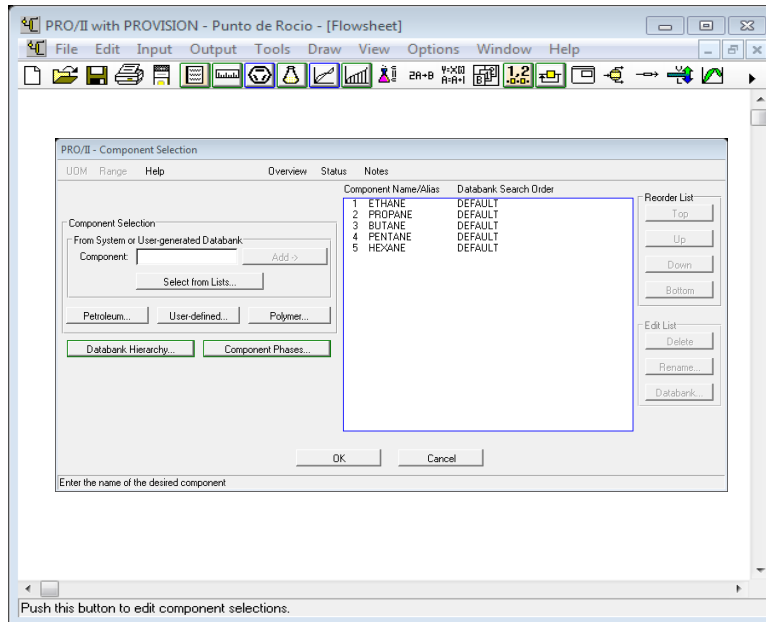


Fig. 4.22 Selección de componentes.

#### 4.3.2 Definición de la línea de alimentación.

Especificar las condiciones térmicas de la línea de alimentación, la primera especificación será la presión 100 psia, y como segunda especificación se elegirá la opción del Punto de Rocío, el cual es el punto a calcular, ver (Fig.4.23).

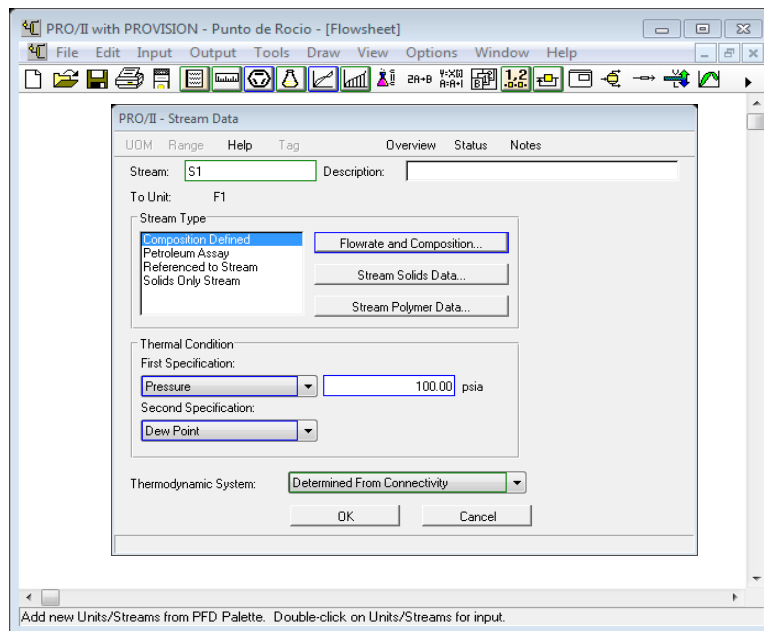


Fig. 4.23 Condiciones térmicas.

- Para indicar el flujo total de la alimentación dar “Clic” en “Flowrate and Composition...” en este ejercicio es de 2204.62 lbmol /hr, ver (Fig.4.24).

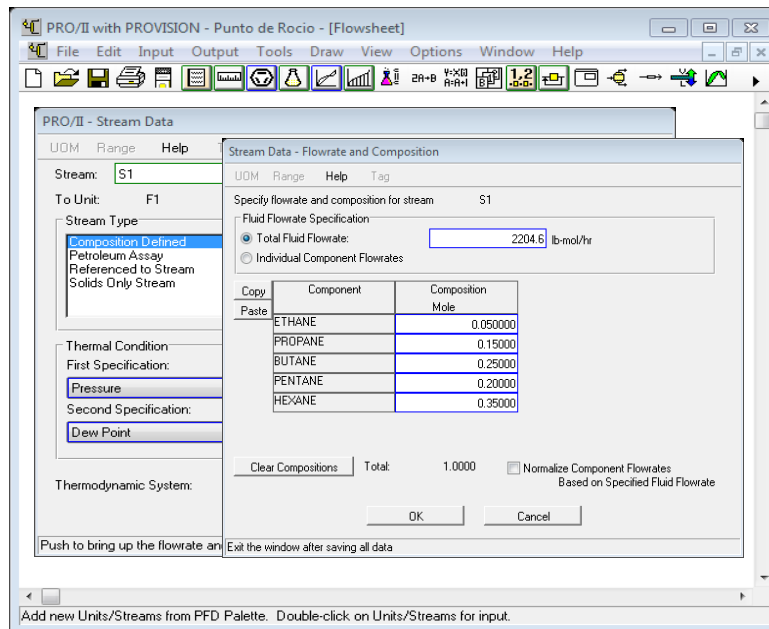


Fig. 4.24 Especificación del flujo de alimentación.

#### 4.3.4 Especificación del equipo.

Dar doble “Clic” sobre el equipo para desplegar la ventana que permite especificarlo.

La primera especificación es la presión de 100 psia que corresponde a la presión de alimentación. Y como segunda especificación se elegirá la opción del Punto de rocío, el cual es el punto a calcular, ver (Fig.4.25).

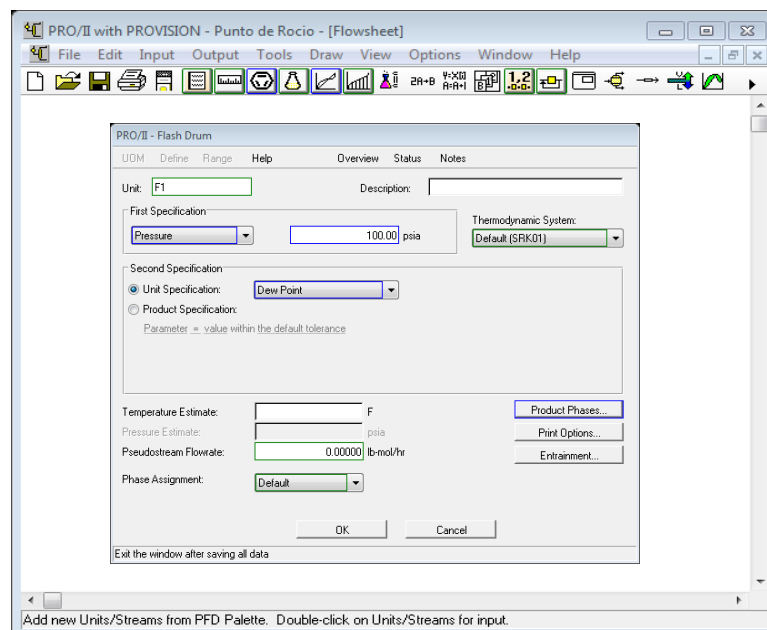


Fig. 4.25 Especificación del tanque flash.

#### 4.3.5 Ejecución del programa y obtención de resultados.

Especificado el equipo dar “Clic” en “OK” en la ventana de especificación del equipo y correr el programa con el icono “Run” que aparece en la barra secundaria.

Para ver los resultados de una simulación existen diversas formas. Una de ellas es la que se explica a continuación:

Una vez que se corrió el programa y el equipo se cambia a color azul, ir a la barra de herramientas primaria y ubicar la ventana “Output”, ahí seleccionar “Stream Property Table”. Una vez seleccionada la opción de tabla, se selecciona la cantidad de corrientes que se quieren mostrar en la tabla, obteniendo así un informe completo del sistema flash, ver (Fig. 4.26).

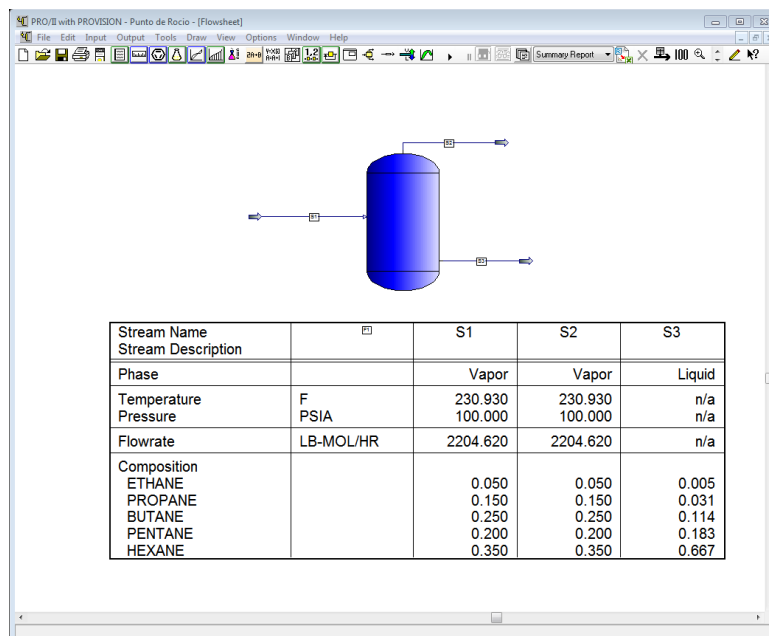


Fig. 4.26 Tabla de resultados.

De acuerdo a los datos arrojados por el simulador se obtiene que; la temperatura o punto de rocío es de: 231 °F.

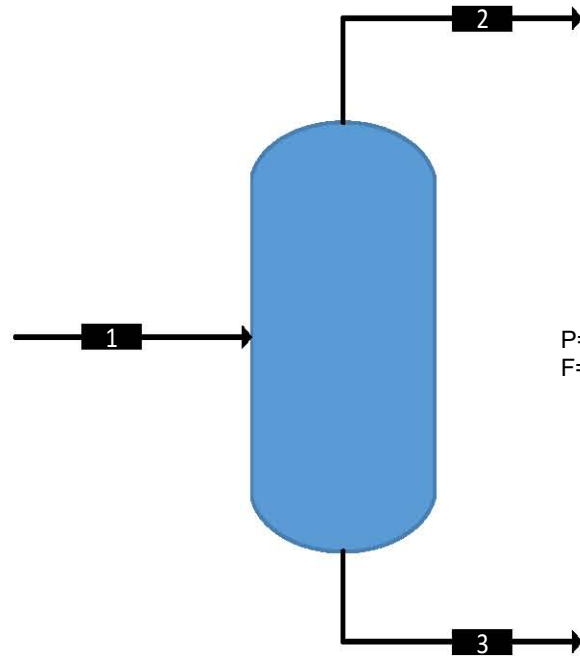


#### 4.4 Punto de burbuja.

Se tiene el siguiente sistema del cual se desea conocer la temperatura del punto de burbuja. Se tiene un flujo de 2500 lb/hr teniendo como condición de operación flash 522 psia de presión. [24]

Tabla 4.4. Composiciones Punto de burbuja

COMPONENTE	FRACCION MOL
n-Butano	0.25
isobutano	0.05
n-Pentano	0.1
n-Decano	0.5
n-Hexano	0.05
Ciclohexano	0.05



Especificaciones d  
First Specification Δ  
P=522 psia  
Second Specification  
F=2500 lb/hr

##### 4.4.1 Selección de los elementos básicos.

Para iniciar la simulación, seleccionar los elementos básicos de una simulación.

- Modelo termodinámico: Se debe seleccionar cuando menos uno, bajo el cual se modelará el proceso, para este caso se selecciona “Soave-Redlich-Kwong”, ver (Fig.4.27).

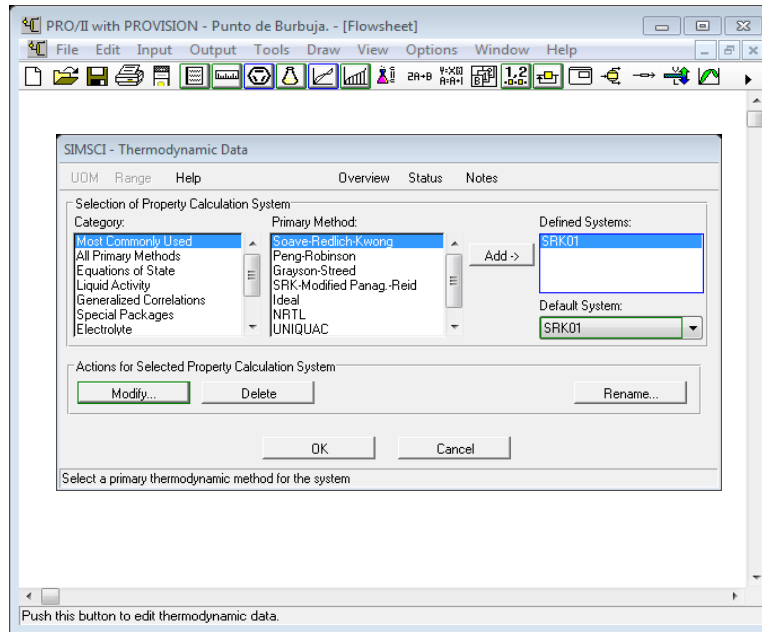


Fig. 4.27 Modelo termodinámico.

- Selección del sistema de unidades: para este caso se define el sistema inglés, ver (Fig.4.28).

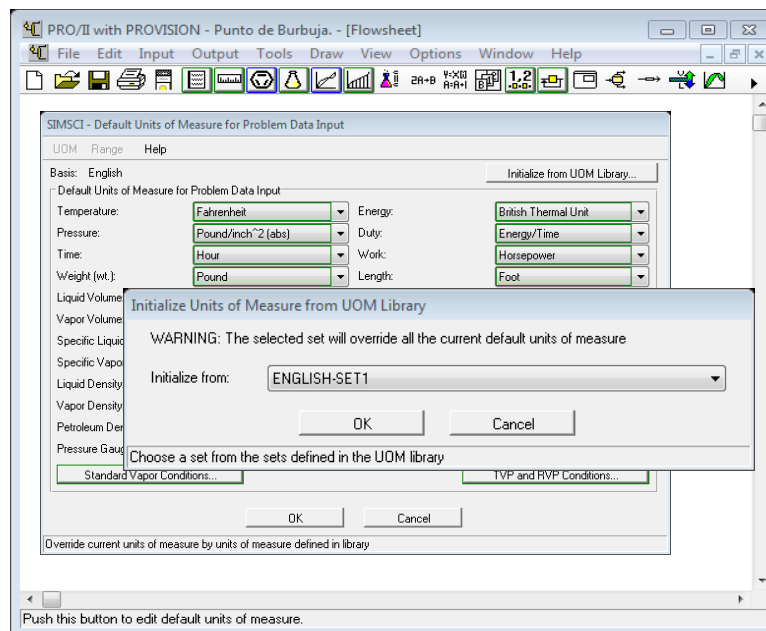


Fig. 4.28 Sistema de unidades.

- Selección de los componentes a partir de la librería del simulador, ver (Fig.4.29).

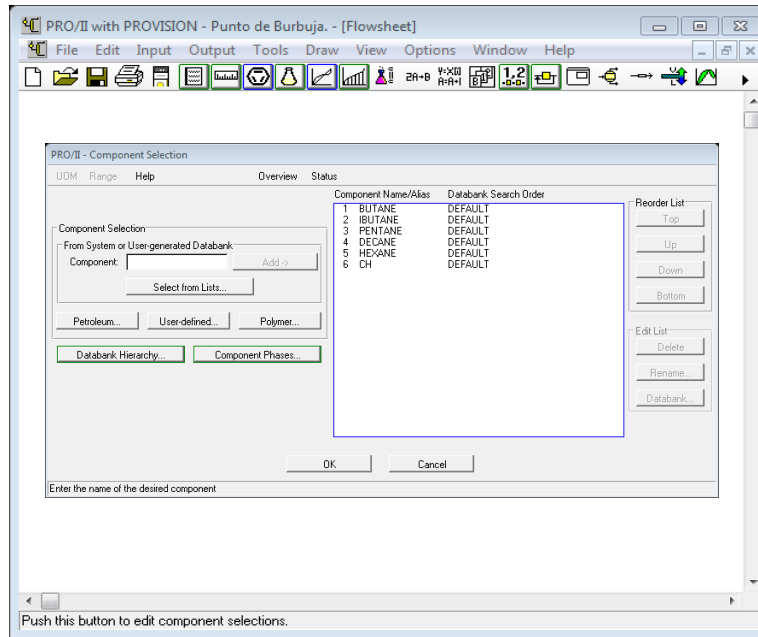


Fig. 4.29 Selección de componentes.

#### 4.4.2 Definición de la línea de alimentación.

Especificar las condiciones térmicas de la línea de alimentación, la primera especificación será la presión 522 psia, y como segunda especificación se elegirá la opción del punto de burbuja, el cual es el punto a calcular, ver (Fig.4.30).

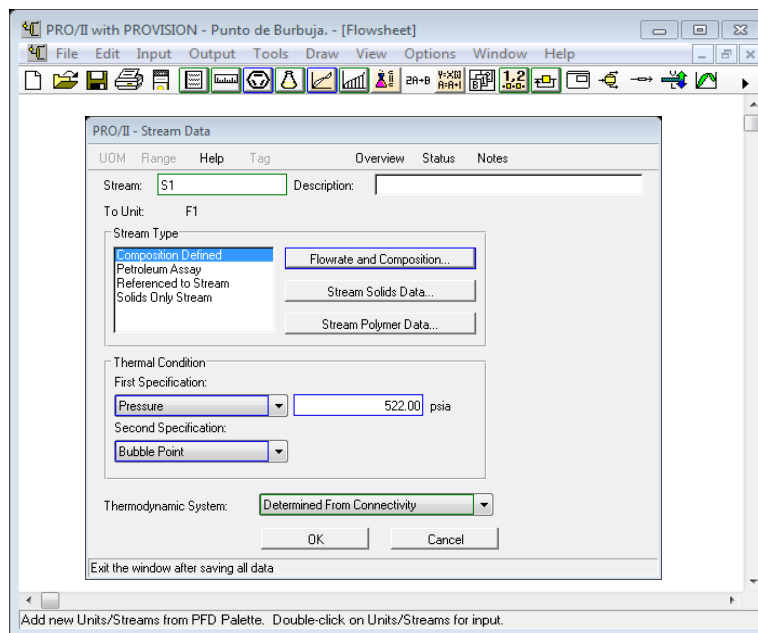


Fig. 4.30 Condiciones térmicas.

- Para indicar el flujo total de la alimentación dar “Clic” en “Flowrate and Composition...” en este ejercicio es de 2500 lbmol /hr, ver (Fig.4.31).

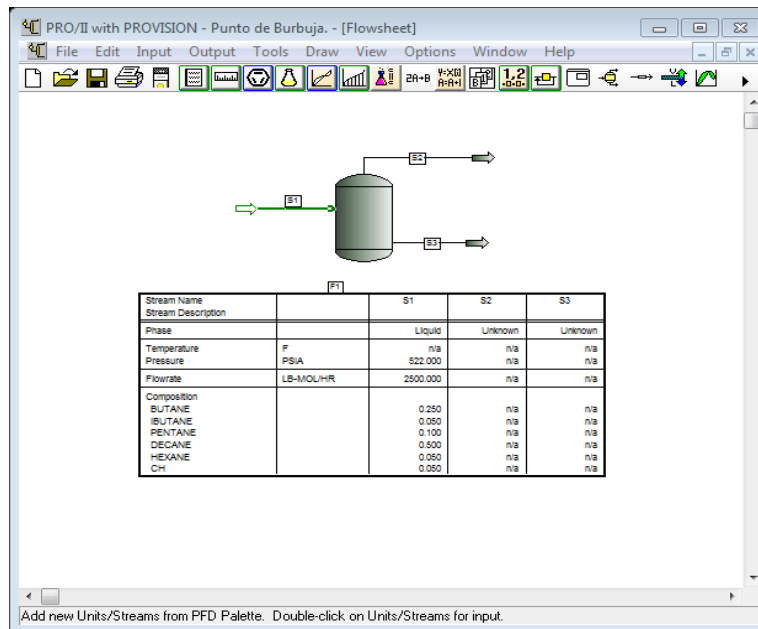


Fig. 4.31 Especificación del flujo de alimentación.

#### 4.4.3 Especificación del equipo.

Dar doble “Clic” sobre el equipo para desplegar la ventana que permite especificarlo. La primera especificación es la presión de 522 psia que corresponde a la presión de alimentación. Y como segunda especificación se elegirá la opción del punto de burbuja, el cual es el punto a calcular, ver (Fig.4.32).

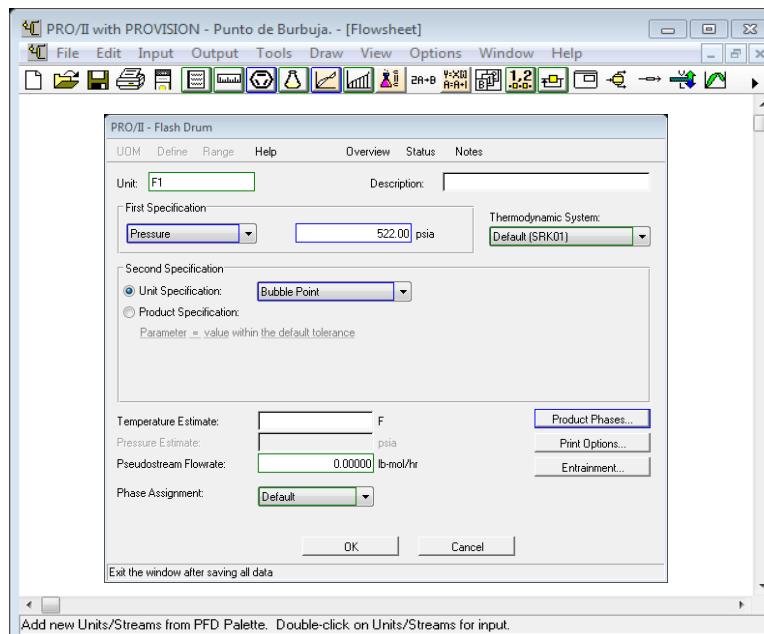


Fig. 4.32 Especificación del tanque flash

#### 4.4.4 Ejecución del programa y obtención de resultados.

Especificado el equipo dar “Clic” en “OK” en la ventana de especificación del equipo y correr el programa con el icono “Run” que aparece en la barra secundaria.

Para ver los resultados de una simulación existen diversas formas. Una de ellas es la que se explica a continuación:

Una vez que se corrió el programa y el equipo se cambia a color azul, ir a la barra de herramientas primaria y ubicar la ventana “Output”, ahí seleccionar “Stream Property Table”. Una vez seleccionada la opción de tabla, se selecciona la cantidad de corrientes que se quieren mostrar en la tabla, obteniendo así un informe completo del sistema flash, ver (Fig. 4.33).

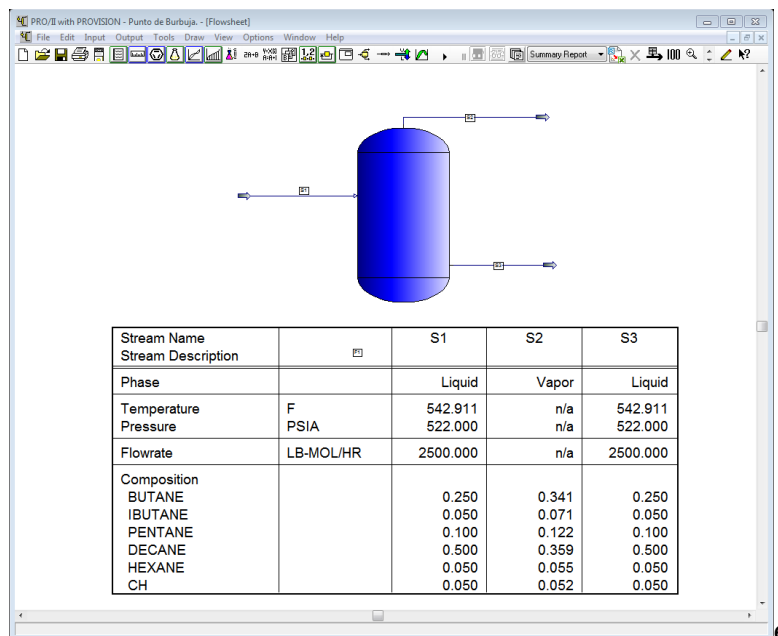


Fig. 4.33 Tabla de resultados.

De acuerdo a los datos arrojados por el simulador se obtiene que la temperatura o punto de burbuja es de: 543 °F.

#### 4.5 Caso de estudio Splitter (Propano-Propileno).

El petróleo crudo es una mezcla muy compleja de productos químicos. Está formado por un 83-87% de carbono, un 11-15% de hidrógeno y cantidades menores de azufre, nitrógeno y metales. La combinación de estos elementos da lugar a un número elevado y variado de compuestos, que van desde muy ligeros (butano) a los muy pesados (los que forman parte de los asfaltos).

El crudo como tal, carece de aplicación práctica, por ello se hace necesario separarlo en diferentes fracciones que si sean de utilidad. Ello se consigue mediante los procesos de destilación. En una primera destilación atmosférica, se calienta el crudo hasta los 370 °C a fin de separarlo en varias fracciones. Los productos ligeros (butano, propano, propileno, etc.) y la nafta, ascienden hasta la parte superior de la torre. A medida que se desciende se encontrarán los productos más pesados, como el queroseno, gasóleo ligero y pesado, quedando en el fondo el fuel atmosférico.

Aun así, el consumo de cada uno de los productos obtenidos no corresponde a la proporción en que se encuentran en el crudo, por lo que es necesario someterlo a otros procesos que se denominan conversión y permiten adecuar a los que demanda el mercado. Todos estos procesos, además de otros tratamientos, se llevan a cabo en las refinerías. La gama de productos que se obtiene incluye, entre otros: gases, propano, butano, naftas, gasolinas, querosenos, gasóleos, fuelóleos, lubricantes, entre otros. Así como productos base para la industria petroquímica.

Como se ha dicho anteriormente, el primer paso a todo este proceso es la separación en fracciones de distintas propiedades en una columna de destilación atmosférica. Una de las fracciones obtenidas en este paso es Gasóleo pesado, que irá a una unidad de reacción catalítica en fase fluida (FCC, Fluid Catalitic Cracking). En la unidad FCC además de Gasóleo pesado, se tratará Gasóleo de vacío y en algunos casos residuo atmosférico. El producto obtenido ira a una unidad de concentración. La carga de la unidad de concentración de FCC tiene una característica especial, se trata de productos olefínicos, es decir, tienen una menor relación hidrogeno/carbono, por lo que en lugar de servir como combustibles se usan como materia para otros procesos. Así la mezcla propano-propileno que se obtiene en esta unidad pasará a la unidad de recuperación del propileno, que consiste en un splitter, donde tiene lugar una separación fraccionada para obtener propileno con una pureza elevada que posteriormente se utilizará como materia prima en otras plantas petroquímicas.

#### 4.5.1 Descripción del proceso.

La corriente de entrada al splitter proviene de otra unidad de tratamiento de la refinería que es una mezcla propano-propileno. Esta corriente de alimentación se encuentra almacenada en un tanque esférico a alta presión y a temperatura ambiente.

Antes de que la corriente de alimentación entre en el splitter, pasará por una válvula de expansión para disminuir su presión y por un intercambiador de calor que dará la temperatura necesaria para el splitter.

La alimentación entra en el splitter como líquido saturado y una vez dentro se establece el equilibrio líquido-vapor a través del cual tiene lugar la transferencia de masa. En la parte superior del splitter se encuentra el condensador, que condensará el destilado del que parte volverá al splitter estableciéndose una relación de reflujo y parte saldrá de la columna. La corriente de destilado irá a un tanque de almacenamiento.

En la parte inferior del splitter se encuentra el calderín que vaporizará la corriente de los fondos, de la que parte vuelve al splitter y parte sale de la columna. Esta corriente de fondos, una vez que sale del splitter, pasará por un intercambio de calor que la condensa y enfría para ir a su correspondiente tanque de almacenamiento.

#### 4.5.2 Planteamiento de problema.

Una corriente de alimentación entra a un tanque de almacenamiento a temperatura ambiente (20 °C). La alimentación tiene una composición del 79.13% de propileno, 19.32 % en propano, que entrará en el splitter con una razón de flujo de 707.7559 Kgmol/h. cuando la alimentación sale del tanque, pasa por una bomba que incrementa la presión hasta 22.126 kg/cm<sup>2</sup> requeridas por el splitter.

Una vez que la corriente adquiere la presión necesaria, pasa por un intercambiador de calor para alcanzar una temperatura de 38.64 °C y entrar en el splitter como líquido saturado. <sup>[25]</sup>

La línea de alimentación tiene la siguiente composición:

**Tabla 4.5 Composiciones del Splitter Propano-Propileno.**

<b>Componente</b>	<b>Flujo de componente (kg-mol/h)</b>
<b>H<sub>2</sub>O</b>	1.3067
<b>H<sub>2</sub></b>	1.1390x10 <sup>-8</sup>
<b>N<sub>2</sub></b>	1.3670x10 <sup>-7</sup>
<b>O<sub>2</sub></b>	1.0286x10 <sup>-7</sup>
<b>CH<sub>4</sub></b>	6.9886x10 <sup>-4</sup>
<b>Etileno</b>	1.2860
<b>Etano</b>	5.8892
<b>Propileno</b>	560.112
<b>Propano</b>	136.7893
<b>i-C<sub>4</sub></b>	1.4101
<b>n-C<sub>4</sub></b>	0.0275
<b>1-Buteno</b>	1.2045
<b>Pentano</b>	8.9974x10 <sup>-7</sup>

Se desea diseñar una columna y el proceso que permita obtener los productos con las siguientes especificaciones:

- Por la parte superior se obtiene la corriente de destilado rica en propileno con un flujo de 539.6 Kgmol/h la cual se irá a un tanque de almacenamiento que llegará una presión de 17.03 Kg/cm<sup>2</sup> y una temperatura de 37 °C.
- Por la parte inferior se obtiene la corriente de fondos con propano con un flujo de 117.6 Kgmol/h, la cual se almacena a las mismas condiciones que el propileno.
- Proponer el número de platos que podría tener la columna para realizar la separación.



## 4.6 Método corto.

### 4.6.1 Selección de los elementos básicos

Seleccionar los elementos básicos de la simulación:

- Modelo termodinámico: Soave-Readlich-Kwong
- Sistema de unidades: métrico
- Componentes: Agua, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, Etileno, Etano, Propileno, Propano, i-C<sub>4</sub>, n-C<sub>4</sub>, Butileno y Pentano.

### 4.6.2 Selección y especificación de la línea de alimentación.

Dibujar una línea sobre la hoja de trabajo la cual será la línea de alimentación a la columna, posteriormente dar doble “Clic” sobre la línea para desplegar la ventana de especificación. Especificar las condiciones térmicas con una temperatura de 38.64 °C y la presión de 22.126 kg/cm<sup>2</sup> abs, ver (Fig. 4.34).

The image shows a software dialog box titled "PRO/II - Stream Data". It has a menu bar with "UOM", "Range", "Help", "Tag", "Overview", "Status", and "Notes". The "Stream" field contains "S1" and the "Description" field is empty. Below this, "To Unit:" is set to "(Product Stream)". The "Stream Type" section has a list with "Composition Defined" selected, and a "Flowrate and Composition..." button highlighted in red. Other buttons in this section are "Stream Solids Data..." and "Stream Polymer Data...". The "Thermal Condition" section has "First Specification:" set to "Temperature" with a value of "38.64" and unit "C". "Second Specification:" is set to "Pressure" with a value of "22.120" and unit "kg/cm²". The "Thermodynamic System:" is set to "SRK01". At the bottom are "OK" and "Cancel" buttons. A footer note says "Select the thermodynamic system".

Fig. 4.34 Definición de las condiciones térmicas.

Especificar el flujo de alimentación de acuerdo a lo planteado en el problema, dar “Clic” en “Flowrate and Composition...” y definir el flujo de alimentación para cada componente, ver (Fig. 4.35).

Stream Data - Flowrate and Composition

UOM Range Help Tag

Specify flowrate and composition for stream S1

Fluid Flowrate Specification

Total Fluid Flowrate:  kg-mol/hr

Individual Component Flowrates

Copy	Component	Component Flowrate
Paste	H2O	1.0370
	H2	1.6427e-008
	N2	1.3900e-007
	O2	1.0286e-007
	METHANE	0.00069886
	ETHYLENE	1.2860
	ETHANE	5.8892

Clear Compositions Total: 707.76  Normalize Component Flowrates  
Based on Specified Fluid Flowrate

OK Cancel

Exit the window after saving all data

Fig. 4.35 Definición del flujo de alimentación.

#### 4.6.4 Selección del equipo.

- Equipo: seleccionar el equipo para realizar el método corto, que se encuentra ubicado en la barra de lista de equipos con el nombre “ShortCut”. copiar el equipo y seleccionarlo con condensadores y reboiler, ver (Fig. 4.36).

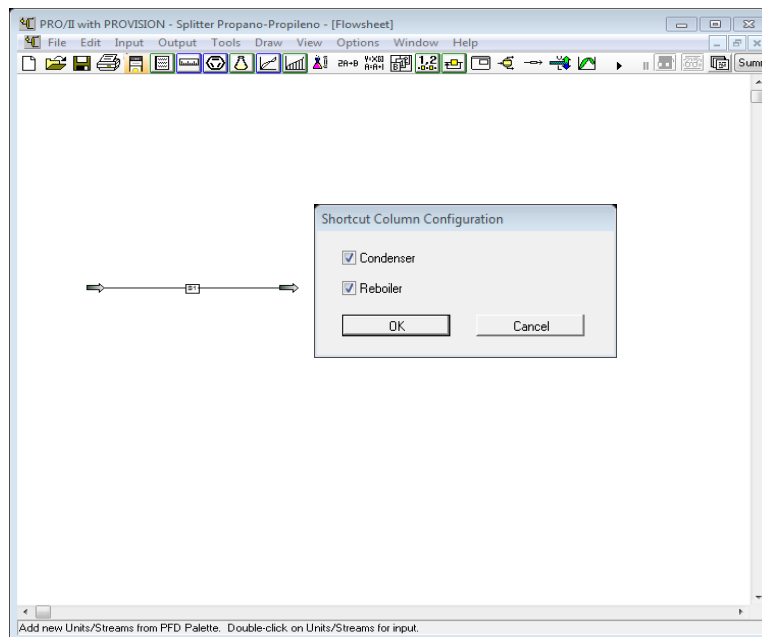


Fig.4.36 Selección del ShortCut.

#### 4.6.5 Conexión de la línea de alimentación y productos al equipo.

- Pegado el equipo, conectar la línea de alimentación y salida de los productos; la salida del destilado de los domos conectarla por el lado de “Hydrocarbon”, ver (Fig.4.37).

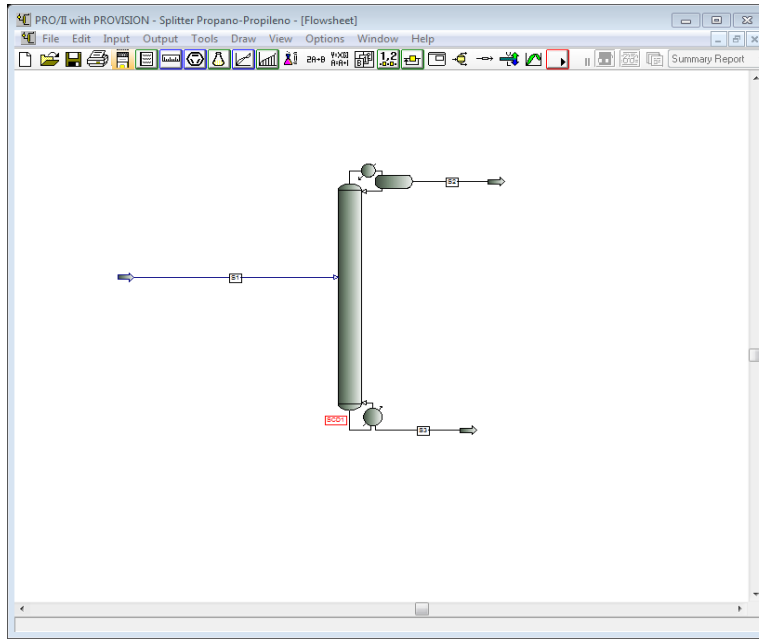


Fig. 4.37 Conexión de líneas.

#### 4.6.6 Especificación del equipo.

- Seleccionar el equipo y dar doble “Clic” para desplegar la ventana de especificación, ir especificando el equipo por cada subventana:
- Condensador/Reboiler: Elegir el tipo de condensador, para este caso seleccionamos “Partial”, ver (Fig. 4.38).

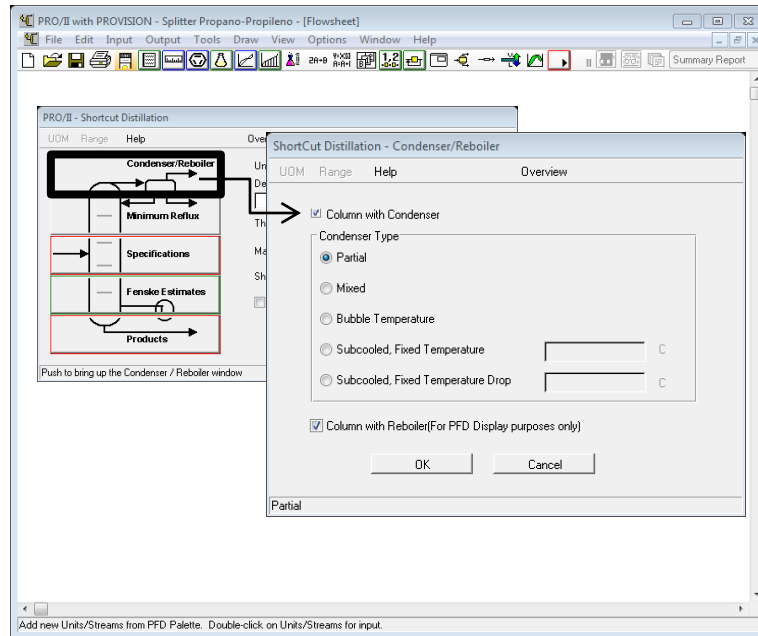


Fig. 4.38 Selección de condensador

- Mínimum Reflux: Definir los componentes clave ligero y pesado:
  - Componente clave ligero “*Light Key*”: Propileno
  - Componente clave pesado “*Heavy Key*”: Propano

El valor de Reflux por default es de 2.0, ver (Fig. 4.39).

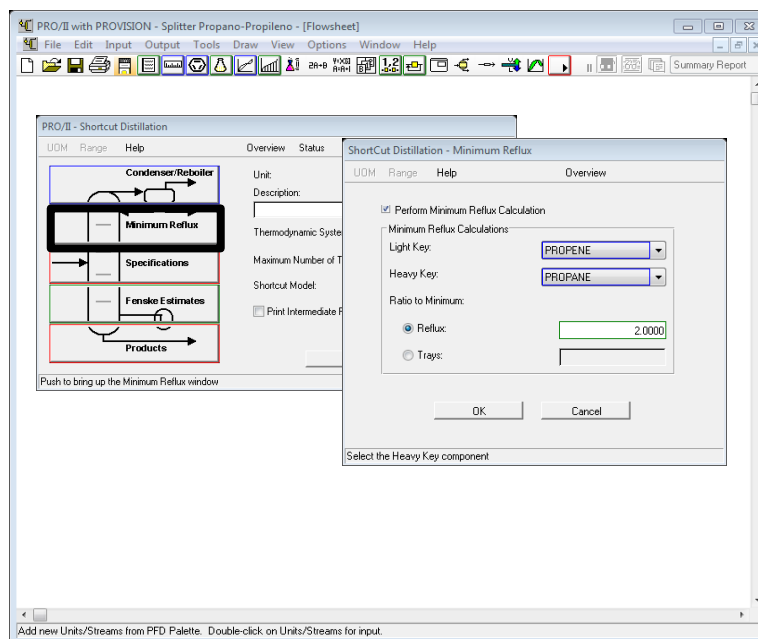


Fig. 4.39 Definición del componente clave ligero y pesado.

- Specifications: Definir 2 parámetros, uno correspondiente a la salida del domo y la otra a fondos.
1. Domos: Dar “Clic” a “Parameter”, se desplegará una ventana donde se debe seleccionar de la opción *Stream* número 2, que corresponde a la línea de salida de los domos, ver (Fig. 4.40).

Dar “Clic” en *Parameter* para seleccionar el parámetro a definir, seleccionar el parámetro “*Flowrate*” seguido de “*Selected Components*” que define el flujo de salida de uno o más componentes, seleccionando de la opción “*Starting y Ending Component*” el componente propileno, ver (Fig. 4.41). Definir el flujo en Kgmol/h. Dar “Clic” a todas las ventanas desplegadas.

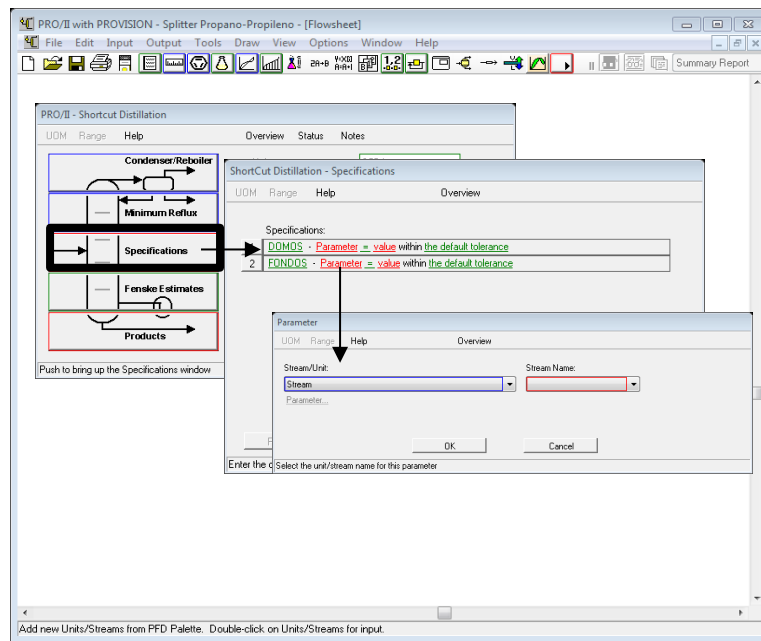


Fig. 4.40 Selección de *Stream 2*.

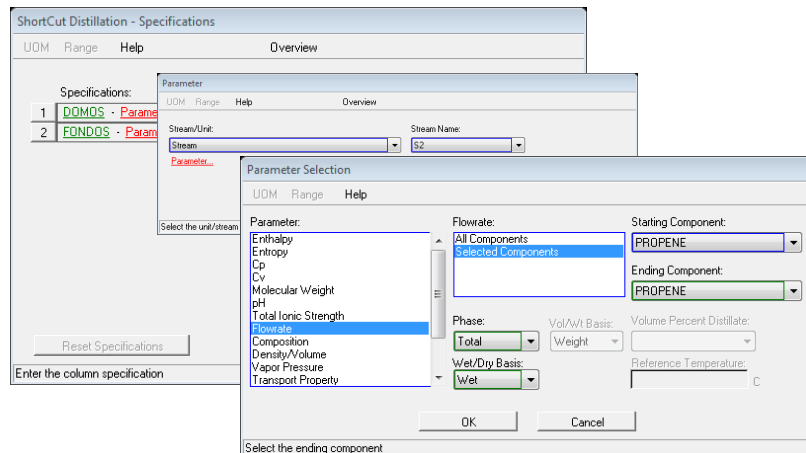


Fig. 4.41 Selección del parámetro.

Colocar el valor del flujo en Value de 539.69 Kgmol/h, ver (Fig. 4.42)

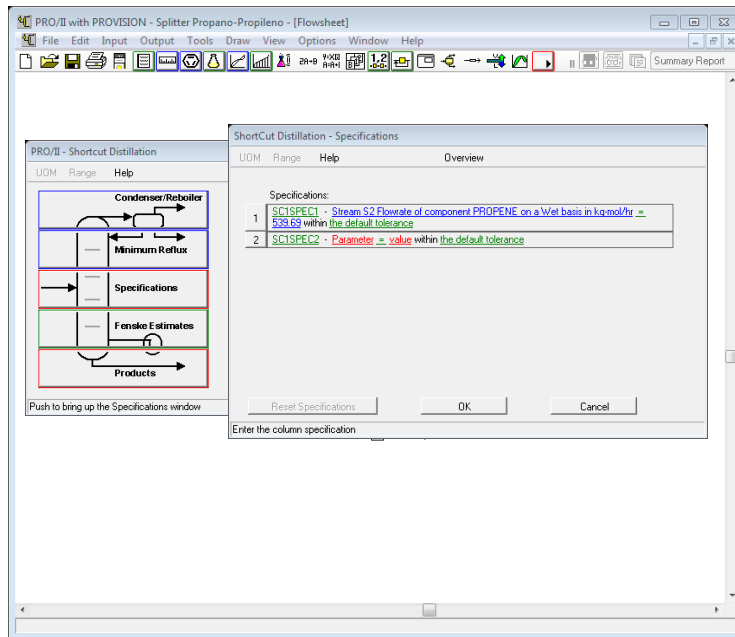


Fig. 4.42 Definición de la salida de domos.

2. Fondos: para la definición de la salida de los fondos se realiza lo mismo que para la parte de domos; Dar "Clic" a "Parameter", se desplegará una ventana donde se debe seleccionar de la opción "Stream" número S3, que corresponde a la línea de salida de los fondos. Dar "Clic" en "Parameter" para seleccionar el parámetro a definir; seleccionar el parámetro "Flowrate" seguido de "Selected Components", seleccionando de la opción "Starting y Ending Component" el componente Propano con un valor del flujo de 117.61 Kgmol/h, ver (Fig. 4.43). dar "Clic" a todas las ventanas desplegadas.

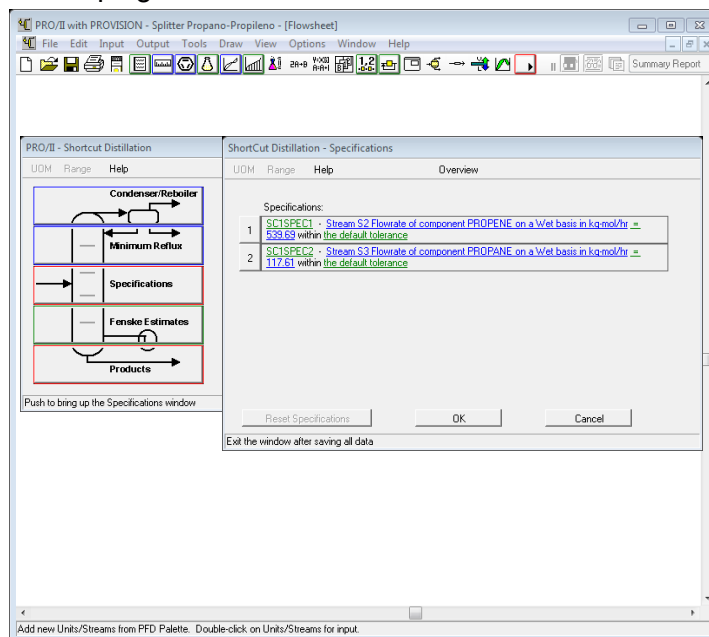


Fig. 4.43 Definición de salida de Fondos.

- *Fenske Estimates*: Dejar por default el valor de 2 para “*Index*”, ver (Fig. 4.44).

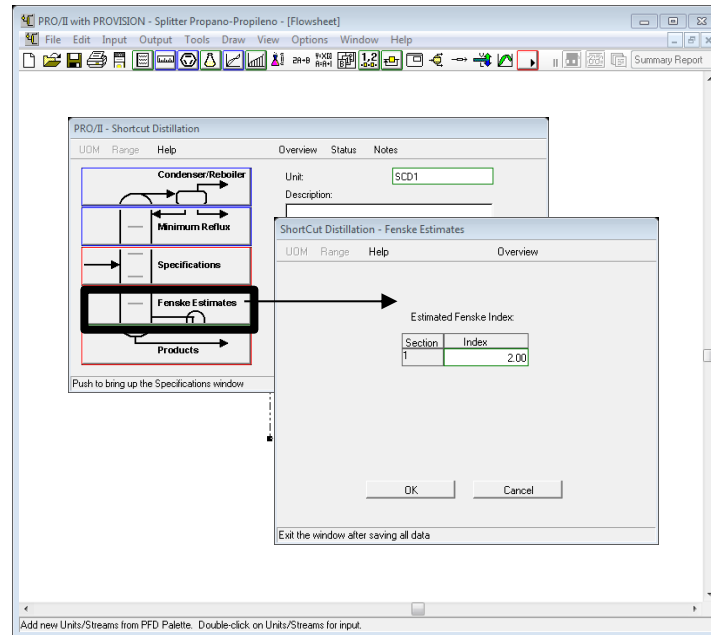


Fig. 4.44 Especificación *Fenske Estimates*.

- *Products*: Estimar un flujo de 100 Kgmol/h ya es valor aproximado de la salida de los producto, ver (Fig. 4.45).

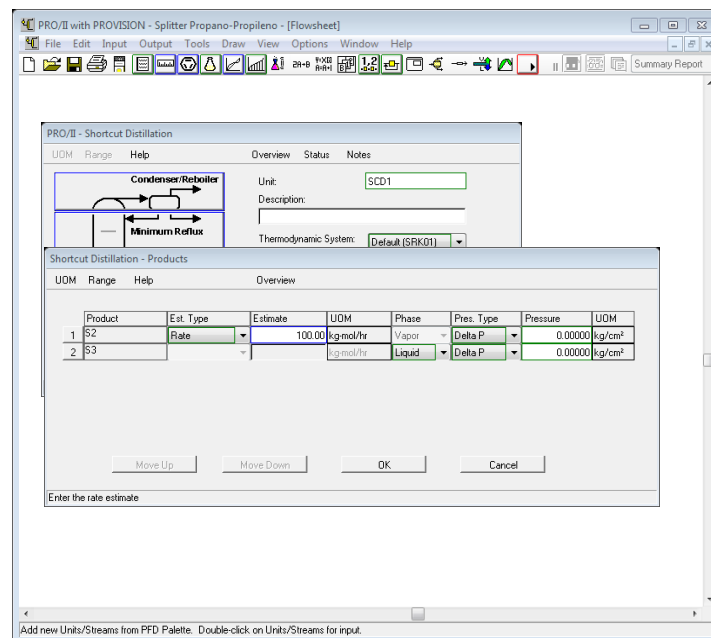


Fig. 4.45 Definición de la especificación *Products*.

Ya que se han especificado todos los parámetros del método corto, correr el programa y ver el resultado obtenido en domos y fondos para verificar que se cumple con lo solicitado. Salida de domos, ver (Fig. 4.46).

	TOTAL	VAPOR
RATE, KG-HOL/HR	567.0019	567.0019
TEMPERATURE, C	51.89	51.89
PRESSURE, KG/CM2	22.12	22.12
MOLECULAR WEIGHT	81.0903	81.0903
FRACTION		1.0000
ENTHALPY, KCAL/KG-HOL	4211.6934	4211.6934
CP, KCAL/KG-C	0.5949	0.5949
MOLAR FLOWRATES, KG-HOL/HR		
1 - H2O	1.0370	1.0370
2 - H2	1.6427E-08	1.6427E-08
3 - N2	1.3906E-07	1.3906E-07
4 - O2	1.0286E-07	1.0286E-07
5 - METHANE	6.9386E-06	6.9386E-06
6 - ETHYLENE	1.2860	1.2860
7 - ETHANE	5.8892	5.8892
8 - PROPENE	539.6730	539.6730
9 - PROPANE	19.1960	19.1960
10 - BUTANE	1.2765E-23	1.2765E-23
11 - ISOBUTANE	1.4536E-18	1.4536E-18
12 - ISOTENE	2.5486E-19	2.5486E-19
13 - PENTANE	0.0000	0.0000

Fig. 4.46 Resultados del Domo.

Salida de fondos, ver (Fig. 4.47).

	TOTAL	LIQUID
RATE, KG-HOL/HR	148.6736	148.6736
TEMPERATURE, C	59.58	59.58
PRESSURE, KG/CM2	22.12	22.12
MOLECULAR WEIGHT	84.0090	84.0090
FRACTION		1.0000
ENTHALPY, KCAL/KG-HOL	1861.4486	1861.4486
CP, KCAL/KG-C	0.9847	0.9847
MOLAR FLOWRATES, KG-HOL/HR		
1 - H2O	1.0046E-21	1.0046E-21
2 - H2	1.2619E-04	1.2619E-04
3 - N2	1.4905E-03	1.4905E-03
4 - O2	1.1801E-03	1.1801E-03
5 - METHANE	7.4938E-03	7.4938E-03
6 - ETHYLENE	4.1879E-25	4.1879E-25
7 - ETHANE	2.0512E-18	2.0512E-18
8 - PROPENE	28.4393	28.4393
9 - PROPANE	117.5922	117.5922
10 - BUTANE	0.0270	0.0270
11 - ISOBUTANE	1.4101	1.4101

Fig. 4.47 Resultados del Fondo.



De acuerdo al resultado en la salida de los productos se cumple con las especificaciones que solicita el problema.

Ahora es necesario ver el número de platos que propone el método corto para realizar esta separación, esto se realiza seleccionando el equipo, dar "Clic" derecho y seleccionar "View Results" para ver los resultados, ver (Fig. 4.48).

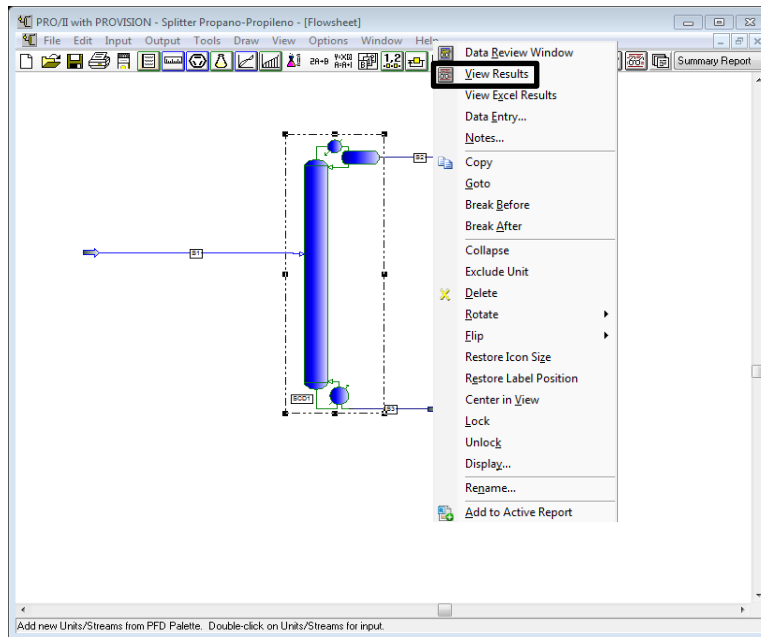


Fig. 4.48 Búsqueda de resultados del método corto.

Se observan los resultados del número de platos posibles desplazando la barra del lado derecho de la ventana, ver (Fig. 4.49).

The screenshot shows the 'View Results' window in PRO II, displaying a detailed table of stream data and specifications. The table includes columns for Stream, Phase, Holes, Weight, Liquid, Vapor, and Section Trays. It also includes a section for specifications and a summary of underhood calculations.

STREAM	PHASE	HOLES	WEIGHT	LIQUID	VAPOR	SECTION TRAYS
TRAY		KG-HOL/H	KG/HR	KG/HR	KG/HR	
S1	LIQUID					
S2	U	567.00	23787.72	46.13	12718.57	1
S3	L	748.67	6194.22	12.16	3153.47	
<b>TOTALS</b>		<b>787.76</b>	<b>29981.94</b>	<b>58.29</b>	<b>15872.04</b>	<b>56.28</b>
<b>SPECIFICATIONS</b>						
PARAMETER TYPE	COMP.	SPECIFICATION TYPE	SPECIFIED VALUE	CALCULATED VALUE		
STRM S2	8	HOL RATE	5.397E+02	5.399E+02		
STRM S3	9	HOL RATE	1.176E+02	1.178E+02		
<b>SUMMARY OF UNDERHOOD CALCULATIONS</b>						
MINIMUM REFLUX RATIO		9.42626				
FEED CONDITION Q		1.16286				
FENSKE MINIMUM TRAYS		56.27878				
OPERATING REFLUX RATIO		2.00 = R-MINIMUM				
TOTAL TRAYS	FEED	R/R-MIN	N/N-MIN	REFLUX RATIO	DUTY, M-KCAL/HR	CONDENSER REBOLLER
82	15.50	1.500	1.500	13.530	-2.120E+01	2.011E+01
78	39.79	2.000	1.380	18.850	-2.837E+01	3.028E+01
74	38.12	2.250	1.322	28.389	-3.192E+01	3.382E+01
72	36.87	2.500	1.278	22.566	-3.547E+01	3.737E+01

Fig. 4.49 Resultado del método corto.

Se selecciona el número de platos de 89, que corresponden al número de platos teóricos.

#### 4.7 Método riguroso.

Con lo realizado en el método corto y seleccionado el número de platos se obtiene los siguientes datos:

Tabla 4.6 Datos obtenidos del método riguroso.

Total Trays	Feed Tray	R/R-Min	M/M-Mn	Reflux Ratio	DUTY, M*Kcal/h	
					Condenser	Reboiler
89	45	1.5	1.586	13.539	-2.128E+01	2.318E+1

El número de platos fue de 89 que corresponde al número de platos teóricos, la eficiencia de cada plato es de 70%, por lo que el número de platos aumenta a 128 que corresponde al número platos reales.

Se inicia la simulación del proceso, se abre una nueva hoja de trabajo y se seleccionan los elementos básicos de una simulación.

- Modelo termodinámico: Soave-Readlich-Kwong

Sistema de unidades: Métrico

- Componentes: agua, N<sub>2</sub>, H<sub>2</sub>, O<sub>2</sub>, CH<sub>4</sub>, etileno, etano, propileno, propano, i-c<sub>4</sub>, n-c<sub>4</sub>, butileno y pentano.

##### 4.7.1 Selección y especificación de la línea de alimentación.

Seleccionar y especificar la línea de alimentación como se realizó en el método corto.

##### 4.7.3 Selección de equipo.

- Equipo: Seleccionar el equipo para realizar el método riguroso. El equipo se llama "*Distillation*" que se encuentra en la barra "*PFD*".

Copiar el equipo y especificar con 130 platos reales, seleccionar con condensador y reboiler, ver (Fig. 4.50).

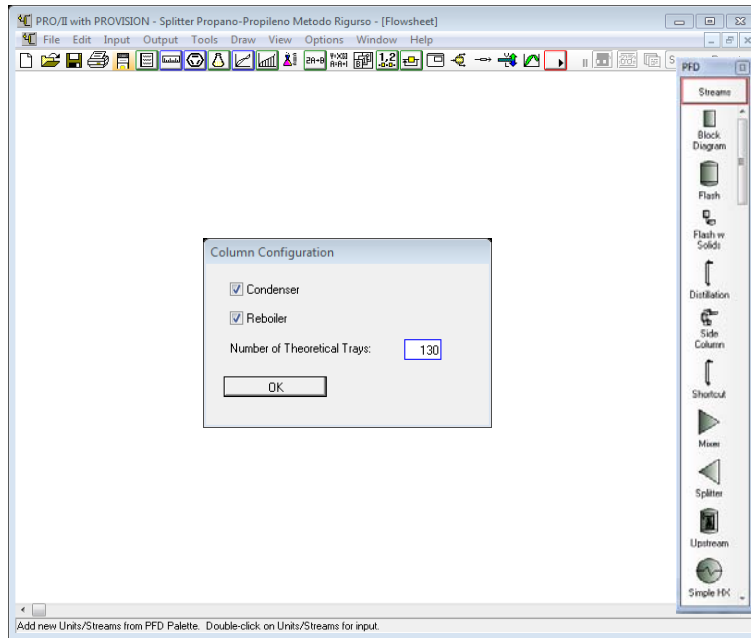


Fig. 4.50 Selección de *Distillation*.

#### 4.7.4 Conexión de la línea de alimentación y productos al equipo.

Conectar la línea de alimentación y la salida de los productos a la columna de destilación, ver (Fig. 4.51).

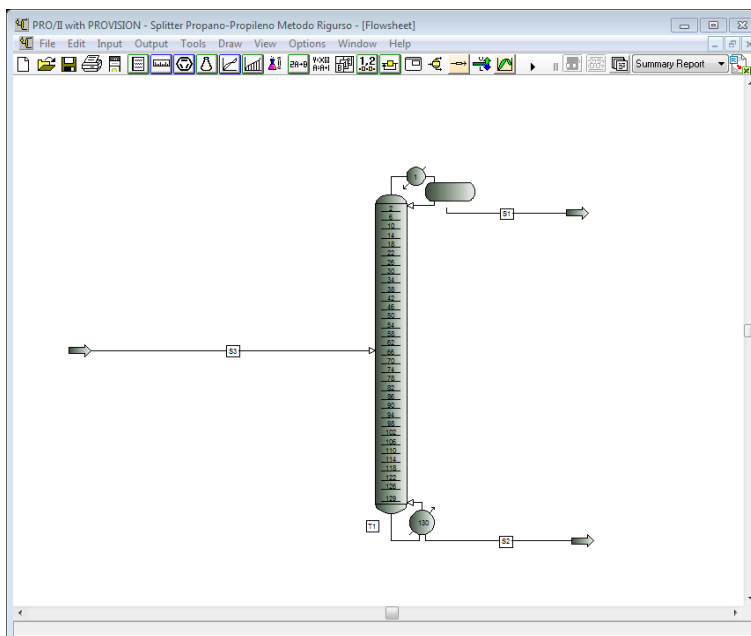


Fig. 4.51 conexión de líneas.

#### 4.7.5 Especificación de equipo.

Seleccionar el equipo y dar doble “Clic” sobre él para desplegar la ventana de especificación. Especificar las subventanas del equipo como se muestra a continuación:

- *Pressure Profile*: Especificar la presión de operación de la columna con una presión de 22.12 Kg/cm<sup>2</sup> y una caída de presión en la columna de 0.35 Kg/cm<sup>2</sup>. ver (Fig. 4.52).
- *Feeds and Products*: Con los resultados obtenidos del método corto se sabe que el plato de alimentación teórico es el plato 4, tomando la eficiencia de los platos del 70% el plato de alimentación cambia al 64.

Seleccionar la distribución del fluido “*Flash the feed adiabatically*”, estimar un flujo de salida en los domos “*Overhead*”, en fase líquida y en el plato 1 con un flujo de 530 Kgmol/h y uno de 110 Kgmol/h en fondos “*Bottoms*”, ver (Fig. 4.53).

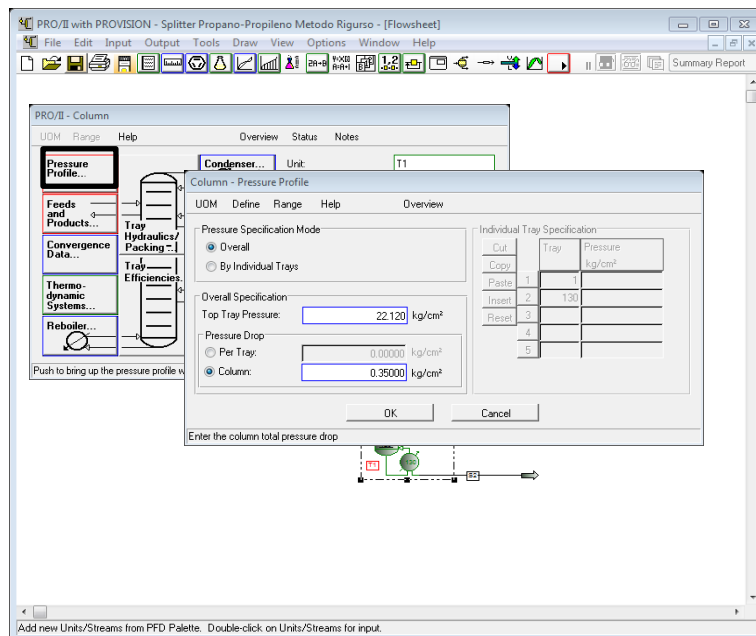


Fig. 4.52 Especificación *Pressure Profile*.

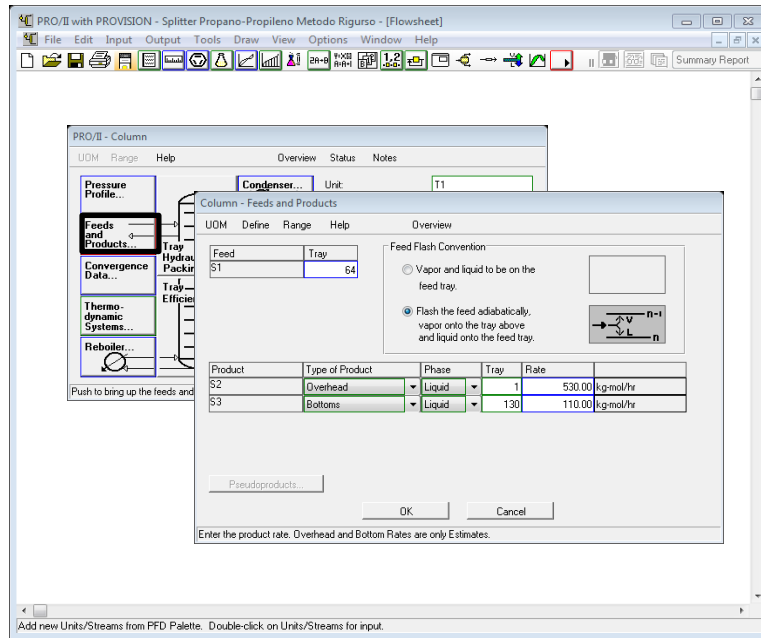


Fig 4.53 Especificación *Feeds and Products*.

- *Condenser*: Seleccionar el condensador tipo “*Bubble Temperature*” con un valor de -21.3 Kcal/h en “*Duty*”, ver (Fig. 4.54).

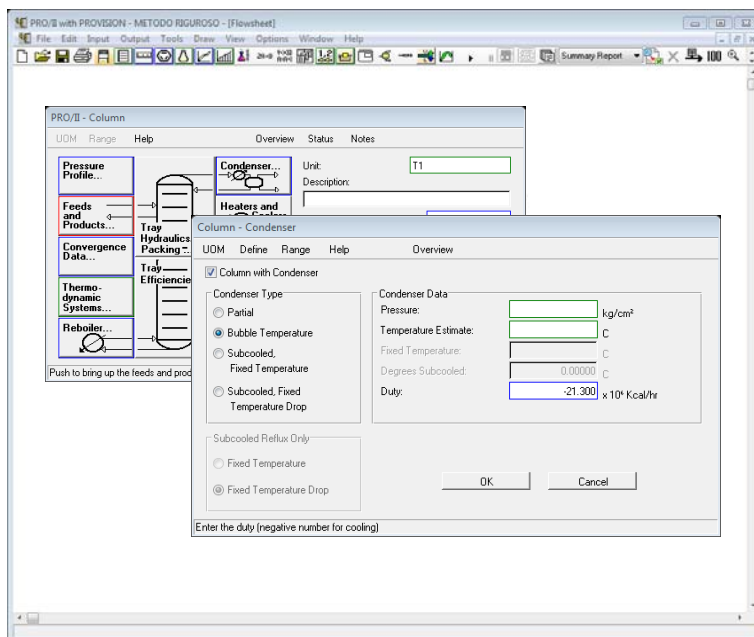


Fig. 4.54 Selección del tipo de condensador.

- *Performance Specifications*: Seleccionar y especificar los parámetros que se van a definir, para esta simulación se selecciona definir un parámetro de la corriente del flujo de salida del propileno por el lado del domo y el otro corresponde a un parámetro de la columna que es el “*Reflux Ratio*” obtenido del método corto.

A continuación se describe la especificación de los parámetros:

1. **DOMOS**: Seleccionar el parámetro para stream S2, ver (Fig. 4.55).

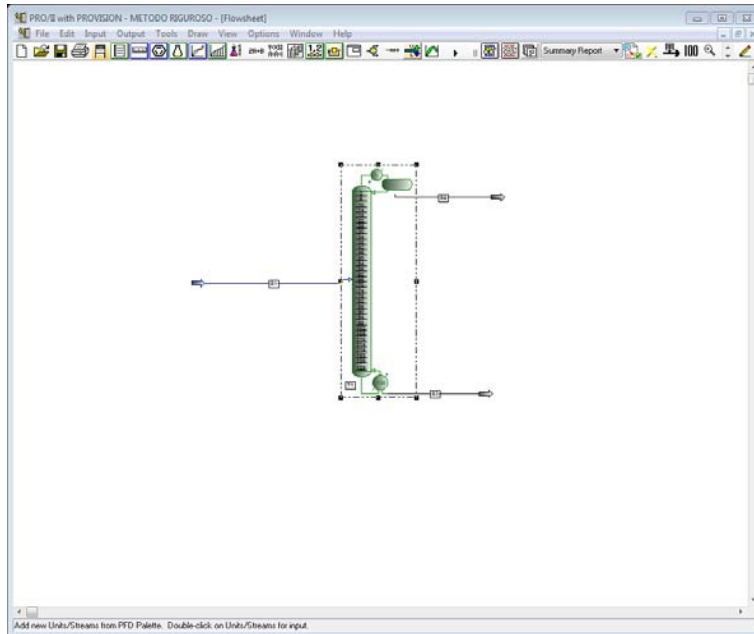


Fig. 4.55 Especificación *Performance Specification*.

Dar “*Clic*” en “*Parameter*” para desplegar la ventana que contiene los diferentes parámetros, seleccionar “*Flowrate*” seguido de “*Selected Components*” para seleccionar de manera individual el componente Propileno (*Propene*) de las ventanas “*Starting Component* y *Ending Component*”, ver (Fig. 4.56).

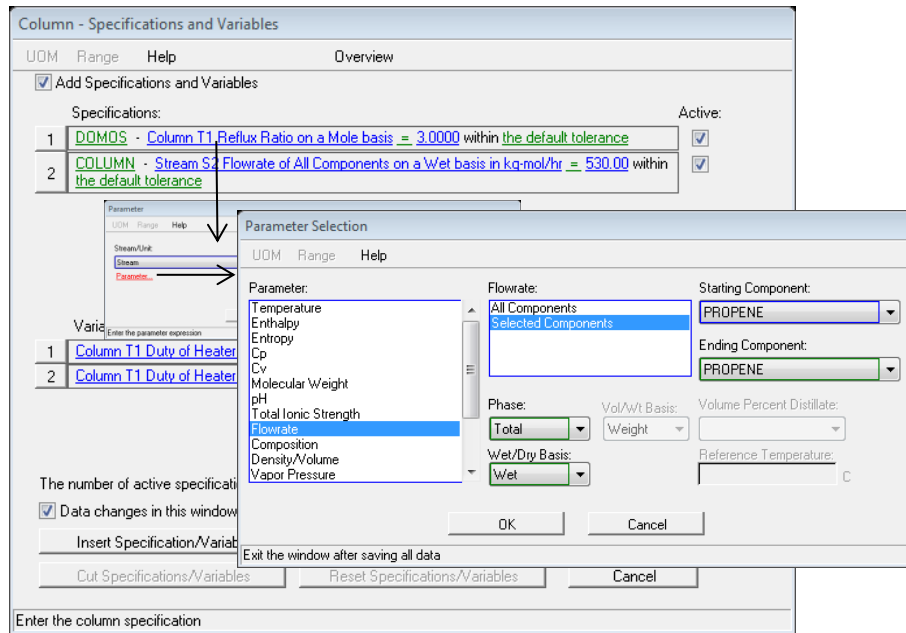
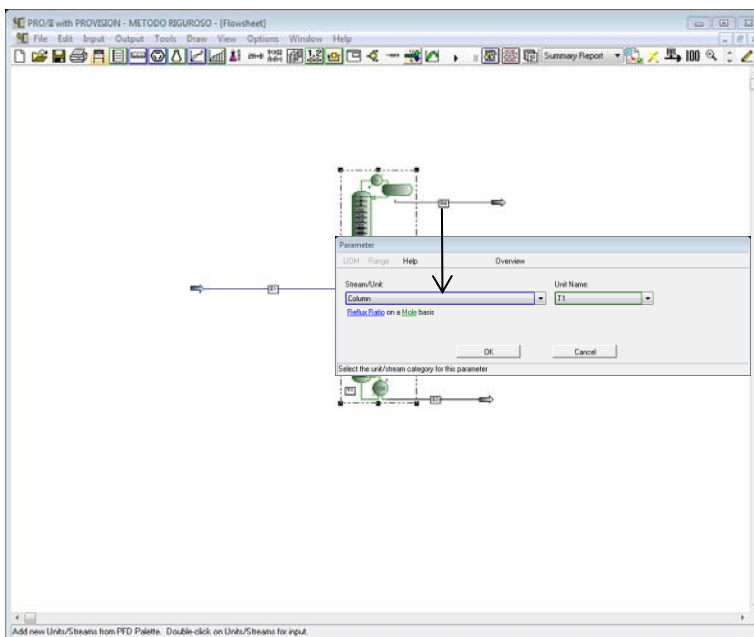


Fig. 4.56 Selección de parámetro.

Especificar el valor del flujo de 539.69 Kg/mol/hr.

1. **COLUMN:** Seleccionar el parámetro para la opción “Column”, ver (Fig. 4.57). Dar el valor de “Reflux Ratio” de 13. 539.

Fig. 4.57 Selección de *Column*.

Es así como se tiene definidas las dos especificaciones con los parámetros y valores antes definidos, ver (Fig. 4.58).

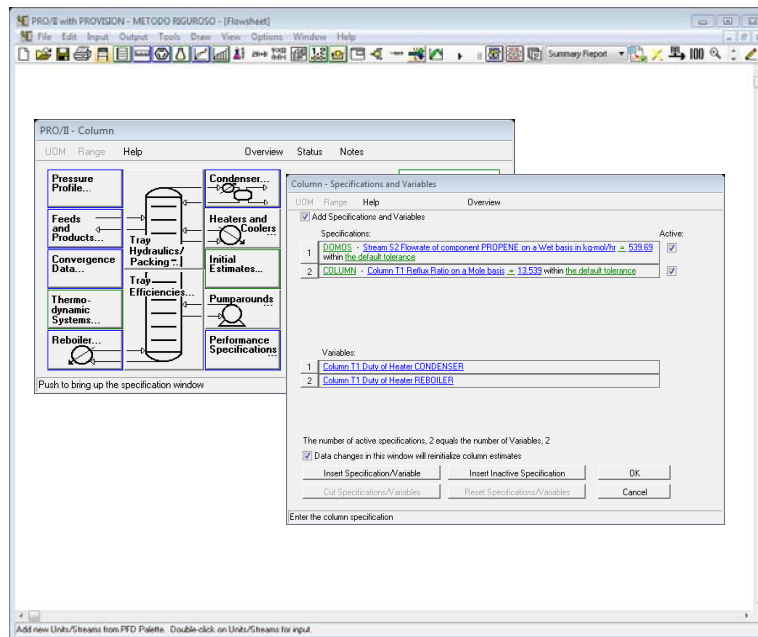


Fig. 4.58 Especificación de los parámetros.

Especificando las subventas anteriores del equipo ejecutar el programa para verificar si no existe algún problema, para este caso la torre se pinta de color azul, por lo cual no hay ningún error pero es necesario analizar los resultados obtenidos para ver si estos corresponden a los solicitados.

Resultados obtenidos:

- **Salida por Domos:** El resultado obtenido del flujo de salida del propileno es de 539.7 Kg/mol/h (Fig. 4.59). Este valor corresponde a lo solicitado.



THERMODYNAMIC SYSTEM SRK  
 STREAM 'S2'

	TOTAL	LIQUID
RATE, KG-MOL/HR	562.7752	562.7752
TEMPERATURE, C	50.81	50.81
PRESSURE, KG/CM2	22.12	22.12
MOLECULAR WEIGHT	41.9317	41.9317
FRACTION		1.0000
ENTHALPY, KCAL/KG-MOL	1421.0132	1421.0132
CP, KCAL/KG-C	0.8411	0.8411
MOLAR FLOWRATES, KG-MOL/HR		
1 - H2O	1.0370	1.0370
2 - N2	1.3670E-07	1.3670E-07
3 - H2	1.1390E-07	1.1390E-07
4 - O2	1.6427E-07	1.6427E-07
5 - METHANE	6.9886E-04	6.9886E-04
6 - ETHYLENE	1.2860	1.2860
7 - ETHANE	5.8892	5.8892
8 - PROPENE	530.7041	530.7041
9 - PROPANE	14.8561	14.8561
10 - IBUTENE	5.6286E-21	5.6286E-21
11 - BUTANE	1.4954E-26	1.4954E-26
12 - 1BUTENE	5.5396E-22	5.5396E-22
13 - PENTANE	0.0000	0.0000
MOLAR COMPOSITIONS		
1 - H2O	1.8427E-03	1.8427E-03
2 - N2	2.4290E-10	2.4290E-10
3 - H2	2.0239E-10	2.0239E-10
4 - O2	2.9189E-10	2.9189E-10
5 - METHANE	1.2418E-06	1.2418E-06
6 - ETHYLENE	2.2851E-03	2.2851E-03
7 - ETHANE	0.0105	0.0105
8 - PROPENE	0.9590	0.9590
9 - PROPANE	0.0264	0.0264
10 - IBUTENE	1.0002E-23	1.0002E-23
11 - BUTANE	2.6572E-29	2.6572E-29
12 - 1BUTENE	9.8433E-25	9.8433E-25
13 - PENTANE	0.0000	0.0000

4.59 Resultados de salida de los Domos.

- **Salida de Fondos:** Para el flujo de la salida del propano de 121.92 Kgmol/h varía con lo solicitado (Fig. 4.60).

Para acercarse al valor requerido se sugiere modificar alguna de las 2 especificaciones de la subventana *Performance Specifications*; se modificara el valor de *Reflux Ratio* disminuyéndolo y se verá cómo se comportan los resultados. Modificando el valor de *Reflux Ratio* hasta 12.152 se obtienen los resultados en domos y en fondos (Fig. 4.61).

THERMODYNAMIC SYSTEM SRK  
 STREAM 'S3'

	TOTAL	LIQUID
RATE, KG-MOL/HR	144.8872	144.8872
TEMPERATURE, C	60.30	60.30
PRESSURE, KG/CM2	22.47	22.47
MOLECULAR WEIGHT	44.0332	44.0332
FRACTION		1.0000
ENTHALPY, KCAL/KG-MOL	1891.7200	1891.7200
CP, KCAL/KG-C	0.9133	0.9133
MOLAR FLOWRATES, KG-MOL/HR		
1 - H2O	1.1999E-28	1.1999E-28
2 - N2	0.0000	0.0000
3 - H2	0.0000	0.0000
4 - O2	0.0000	0.0000
5 - METHANE	0.0000	0.0000
6 - ETHYLENE	2.8415E-29	2.8415E-29
7 - ETHANE	1.6135E-21	1.6135E-21
8 - PROPENE	20.3236	20.3236
9 - PROPANE	121.9215	121.9215
10 - IBUTENE	1.4101	1.4101
11 - BUTANE	0.0275	0.0275
12 - 1BUTENE	1.2045	1.2045
13 - PENTANE	8.9974E-07	8.9974E-07
MOLAR COMPOSITIONS		
1 - H2O	8.2818E-31	8.2818E-31
2 - N2	0.0000	0.0000
3 - H2	0.0000	0.0000
4 - O2	0.0000	0.0000
5 - METHANE	0.0000	0.0000
6 - ETHYLENE	1.9612E-31	1.9612E-31
7 - ETHANE	1.1136E-23	1.1136E-23
8 - PROPENE	0.1403	0.1403
9 - PROPANE	0.8415	0.8415
10 - IBUTENE	9.7324E-03	9.7324E-03
11 - BUTANE	1.8980E-04	1.8980E-04
12 - 1BUTENE	8.3134E-03	8.3134E-03
13 - PENTANE	6.2099E-09	6.2099E-09

Fig. 4. 60 Resultados de salida de los fondos

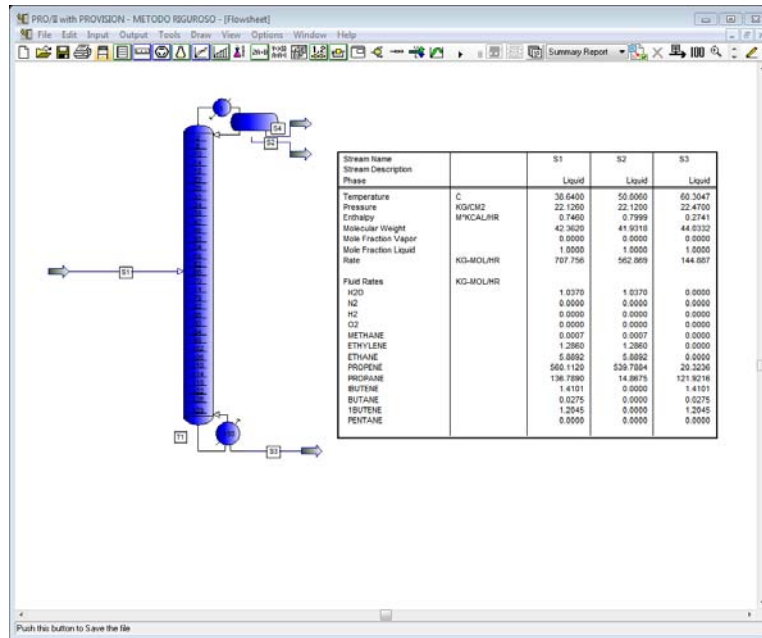


Fig. 4.61 Resultados finales.

Terminando con el método riguroso se puede simular el proceso Splitter Propano-Propileno. Se sugiere que la línea de alimentación de la columna sea la línea de inicio del proceso, por lo que se desconecta la línea de la torre seleccionando la flecha que se conecta a la columna (Fig. 4.62) y moverla hacia otra parte de la otra parte de la hoja de trabajo.

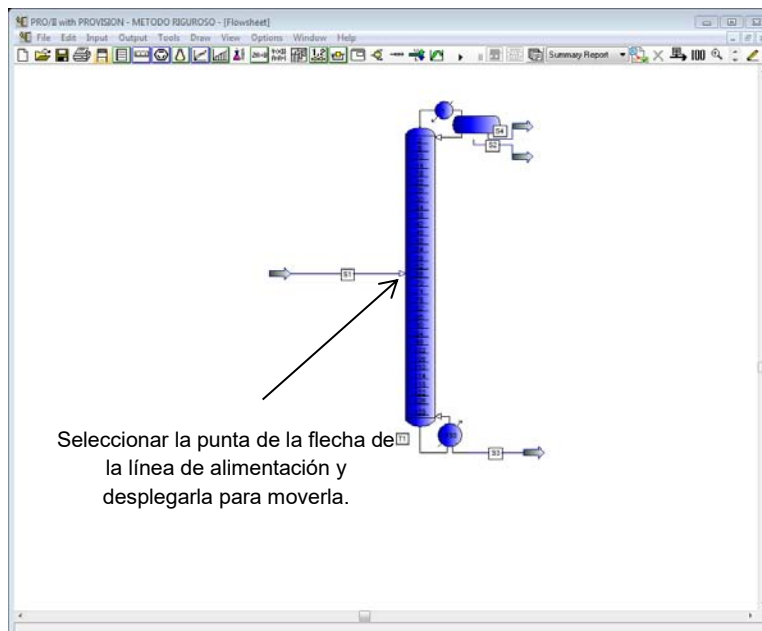
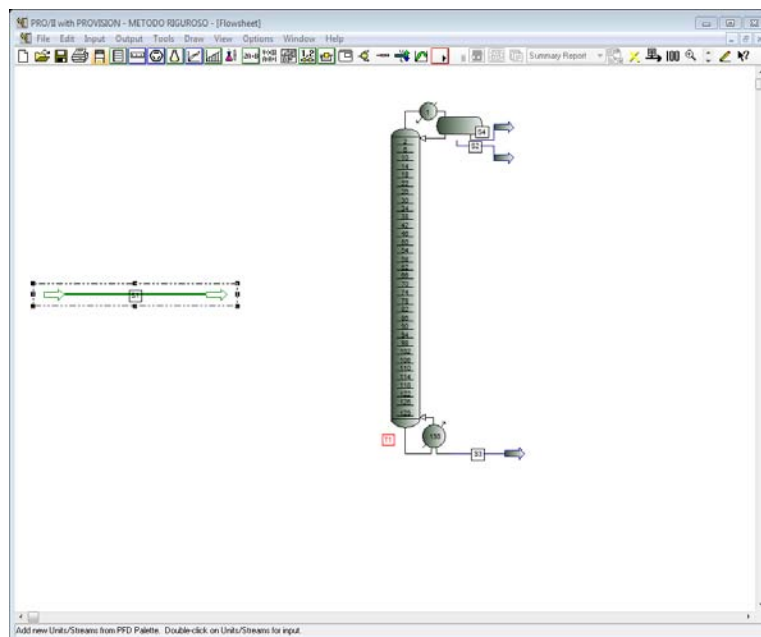


Fig. 4.62 Selección de la línea de alimentación.

Esta línea ahora se debe de cambiar las condiciones térmicas con una temperatura de 20 °C, (Fig. 4.63).



**Fig. 4.63** cambio de condiciones térmicas para la línea de alimentación.

Seleccionar un válvula, girarla 270° con la opción *Rotate* y conectar con la línea de alimentación.

El planteamiento del problema indica que la corriente se encuentre almacenada en un tanque a 20 °C, por lo que se selecciona un tanque, se desea que el tanque (*flash*) tenga una posición horizontal esto se realiza seleccionando el equipo, dar “*Clic*” derecho y seleccionar la opción “*Display*” donde se desplegará una ventana que contiene diferentes posiciones del tanque (Fig. 4.64). Seleccionar el tanque en posición horizontal.

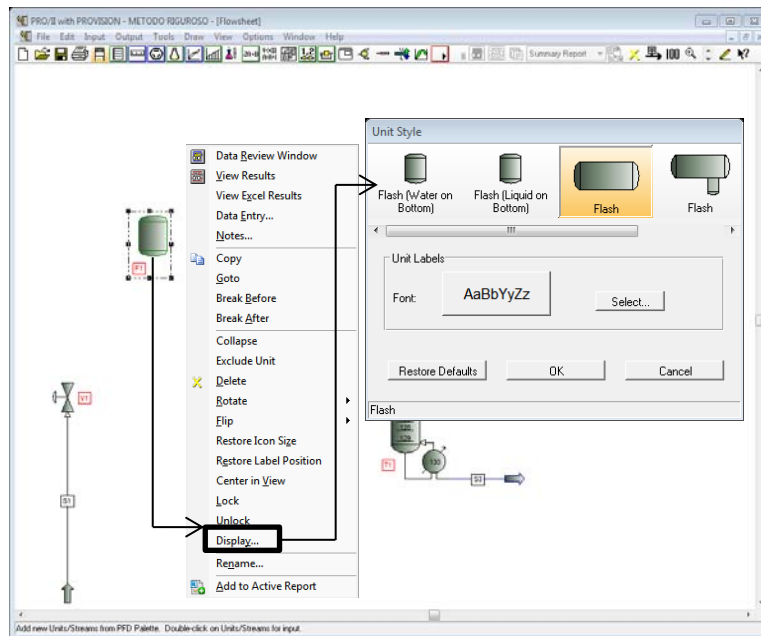


Fig. 4.64 Selección de la posición del tanque Flash.

Especificar la válvula con una caída de presión de  $1.5 \text{ Kg/cm}^2$  y conectar la línea de salida de la válvula a la entrada del tanque flash (Fig. 4.65).

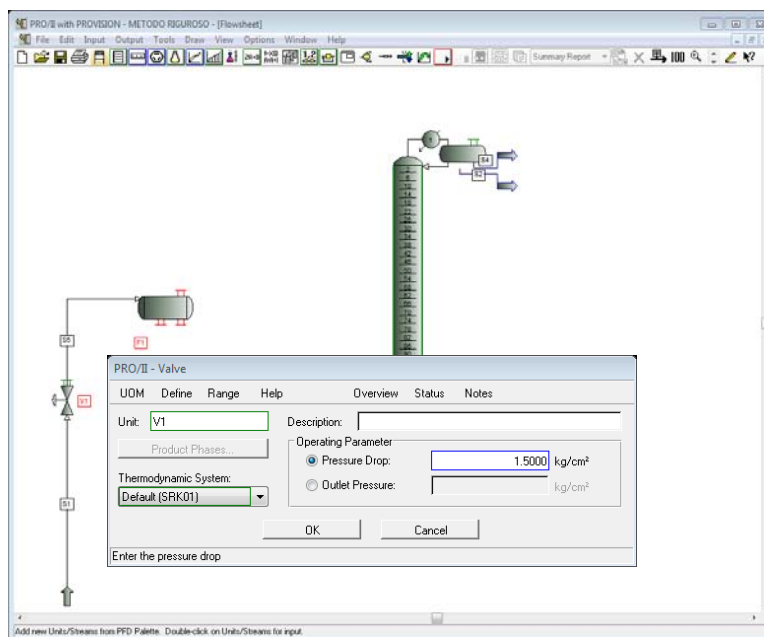


Fig. 4.65 Especificación de la válvula.

Conectar la línea de salida del tanque y especificar el equipo a  $20 \text{ }^\circ\text{C}$  y Duty  $0.0 \text{ Kcal/h}$  (Fig. 4.66).

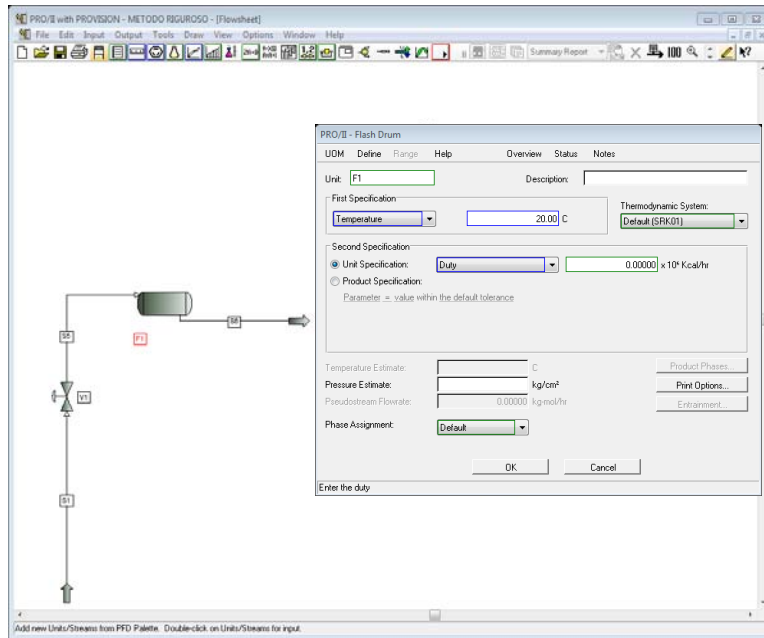


Fig. 4.66 Especificación del tanque flash.

Se requiere conectar una bomba, seguido de una válvula y un intercambiador que aumentara la temperatura para entrar al Splitter, pero no se conoce la presión de salida de la bomba, para conocerla se realiza lo siguiente:

Se sabe que la presión requerida a la alimentación de la columna es de  $22.12 \text{ Kg/cm}^2$ , la caída de presión que tiene un intercambiador de calor es de  $0.7 \text{ Kg/cm}^2$  y la válvula de  $1.5 \text{ Kg/cm}^2$ . Por lo tanto la presión de descarga de la bomba es la suma de entrada a la columna más la caída de presión que sufre el intercambiador y la válvula, es así como la presión de descarga de la bomba es de  $24.32 \text{ Kg/cm}^2$ .

Seleccionar una bomba, conectar la línea de salida del tanque a la alimentación de la bomba y la línea de salida de estas, así como especificar la bomba con la presión de  $24.32 \text{ Kg/cm}^2$  y una eficiencia del 80 % (Fig. 4.67).

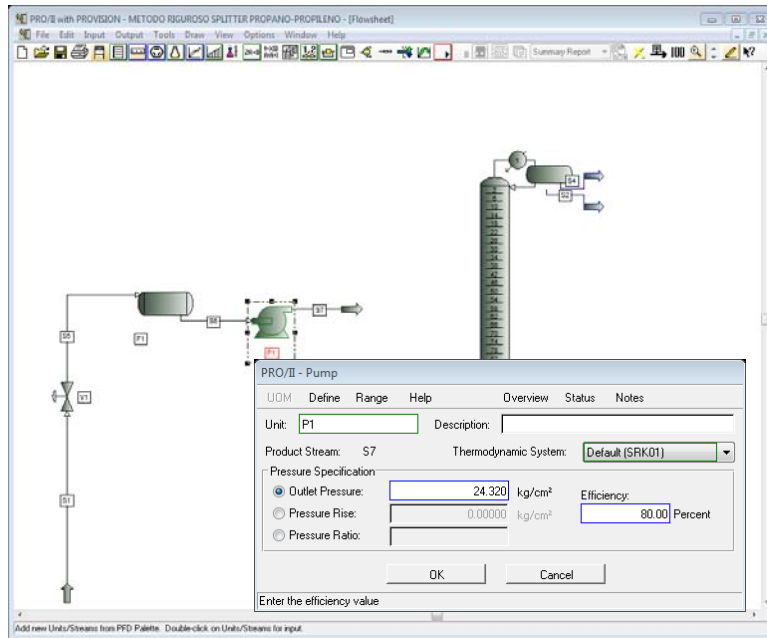


Fig. 4.67 Especificación de la bomba.

El equipo siguiente es la válvula, seleccionarla, conectarla la línea de alimentación que es la salida de la bomba una nueva que sea la salida de la válvula y especificar el equipo con la caída de presión que sufre la válvula de  $1.5 \text{ Kg/cm}^2$  (Fig. 4.68).

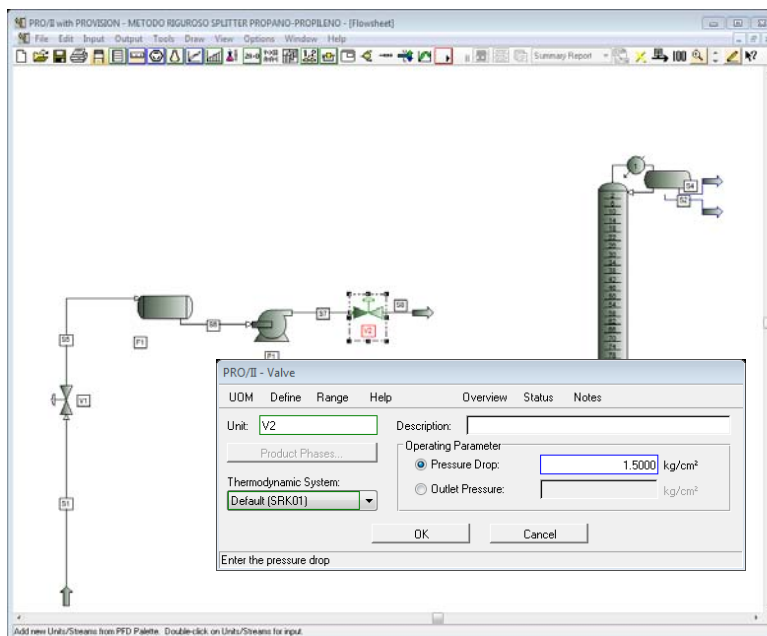
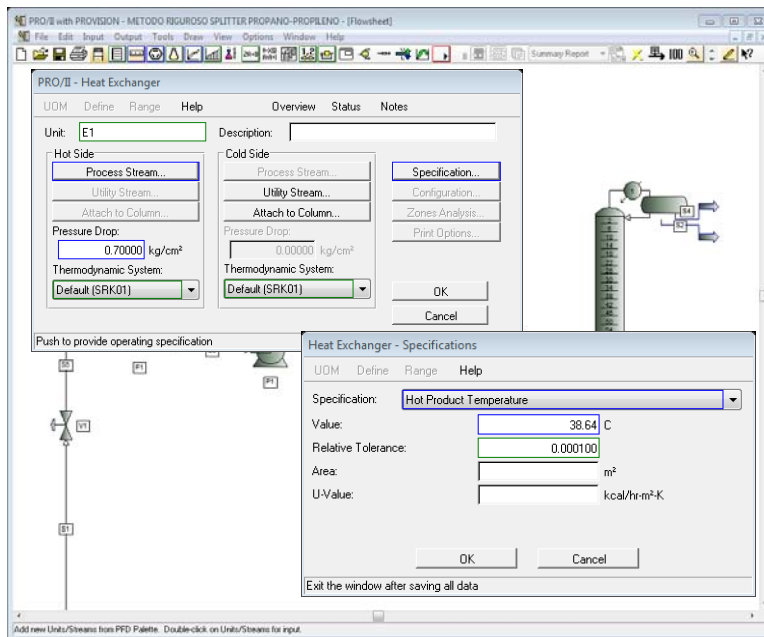


Fig. 4.68 Especificación de la válvula.

Y finalmente el equipo antes de llegar al Splitter es el intercambiador de calor para calentar la carga a  $38.64\text{ }^{\circ}\text{C}$ . Seleccionar un intercambiador (*Simplex HX*), para conectar la línea de salida de la válvula a la alimentación del intercambiador de calor a la línea de salida; especificar el equipo del lado “*Hot Side*” especificar la caída de presión de  $0.7\text{ Kg/cm}^2$ , la especificación de *Hot Product Temperature* con un valor de  $38.64\text{ }^{\circ}\text{C}$  (Fig. 4.69).



**Fig. 4.69** Especificación del intercambiador de calor.

Conectar la línea de salida del intercambiador de calor a la entrada de la columna y especificar nuevamente en la subventana *Feeds and Products* el plato de alimentación 64 para que quede especificada la columna (Fig. 4.70).

Correr el programa con todos los equipos y verificar si se cumple con lo solicitado, como se puede ver en la Fig. 4.71 se corre el programa sin ningún error y se obtienen los resultados solicitados.

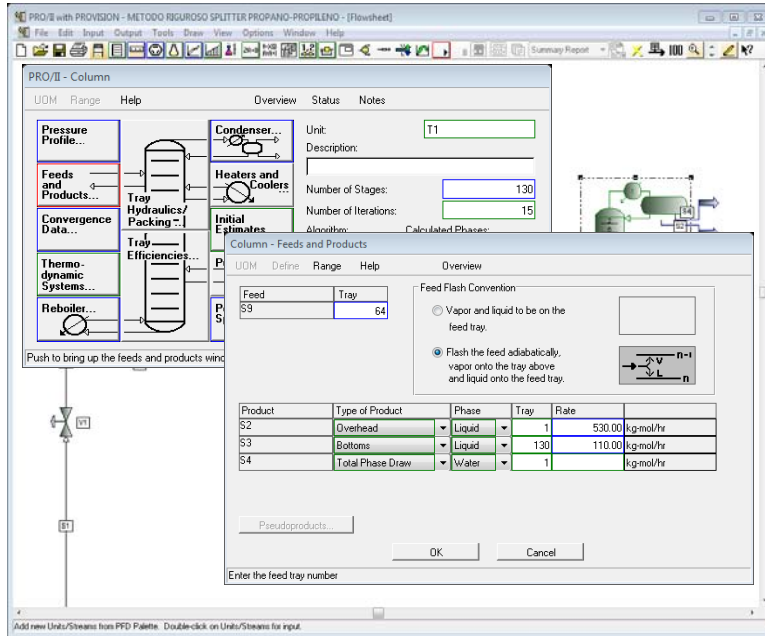


Fig. 4.70 Especificación del plato de alimentación.

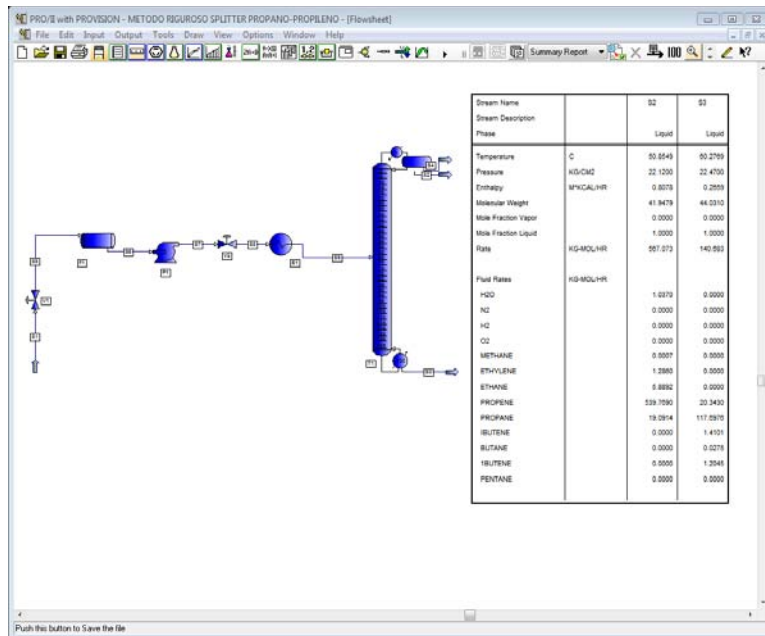


Fig. 4.71 Diagrama del Splitter Propano-Propileno.

Y finalmente se simula las condiciones a las que se requieren los productos, recordando que por la parte superior se obtiene la corriente de destilado rica en Propileno con un flujo de 539.76 Kgmol/h la cual se va a ir a un tanque de almacenamiento que llegara a una presión de 17.03 Kg/cm<sup>2</sup> y una temperatura de 37 °C y por la parte superior se obtiene la



corriente de fondos con Propano con un flujo de 117.69 Kgmol/h, la cual se almacenara a las mismas condiciones que el Propileno.

Viendo los resultados de presión y temperatura de la salida de los productos se tiene los siguientes resultados:

- Domos: Temperatura 50.85 °C y Presión 22.12 Kg/cm<sup>2</sup>
- Fondos: Temperatura 60.27 °C y Presión 22.47 Kg/cm<sup>2</sup>

Para lograr las condiciones solicitadas es necesario enfriar las corrientes a través de un intercambiador de calor y disminuir la presión con una válvula; por lo tanto serán los equipos que se añadirán a la simulación en ambas corrientes.

Por la parte de domos seleccionar un intercambiador de calor (*Simplex HX*), conectar la línea de salida del condensador a la alimentación del intercambiador así como una línea de salida y especificar el equipo con una caída de presión de 0.7 Kg/cm<sup>2</sup> por el lado de *Hot Side* y una temperatura de salida de 37 °C (Fig. 4.72).

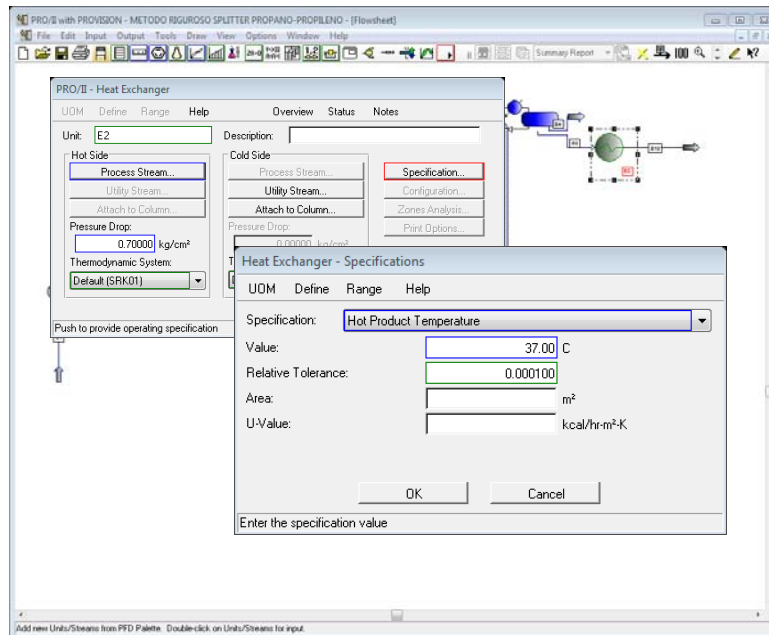


Fig. 4.72 Especificación del intercambiador de calor.

Colocar una válvula para tener la presión requerida de 17 Kg/cm<sup>2</sup> conectado la línea de salida del intercambiador de calor a la alimentación de la válvula así como conectar una línea de salida de esta y especificar el equipo con la presión requerida (Fig. 4.73).

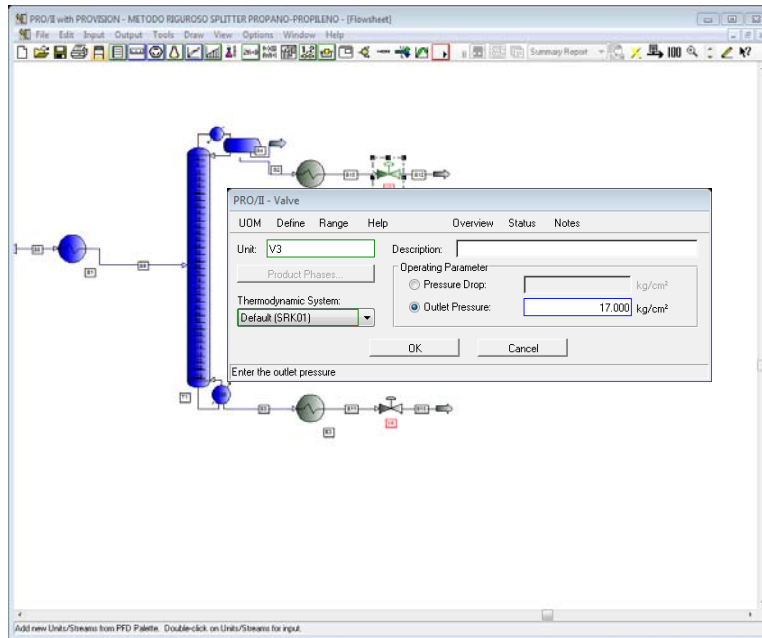


Fig. 4.73 Especificación de la válvula.

Es así como se ejecutó la simulación y no existiendo ningún error se pueden ver los resultados que se obtienen y son los requeridos. Los resultados se pueden ver en la Fig. 4.74, donde la presión es de  $17 \text{ Kg/cm}^2$ , el flujo del Propileno es de  $539.69 \text{ Kgmol/h}$  y la temperatura de  $36.76 \text{ }^\circ\text{C}$ .

Cabe mencionar que aunque la temperatura se especificó en el intercambiador de calor con una temperatura de salida de  $37 \text{ }^\circ\text{C}$ , este cambio al salir de la válvula de expansión la disminución se debe al efecto Joule-Thompson que sufre.

Se realiza lo mismo para la salida de los fondos para obtener las condiciones requeridas para el producto del propano. Los resultados de esta salida se muestran en la Fig. 4.75.

En la Fig. 4.76 se puede ver la simulación completa del proceso del Splitter Propano-Propileno, donde se logra la separación de estos dos componentes que tienen puntos de ebullición cercana por lo que la separación resulta difícil. Pero a través del simulador de procesos PRO II se resuelve de manera rápida a diferencia de que si se realizarán los cálculos manualmente.

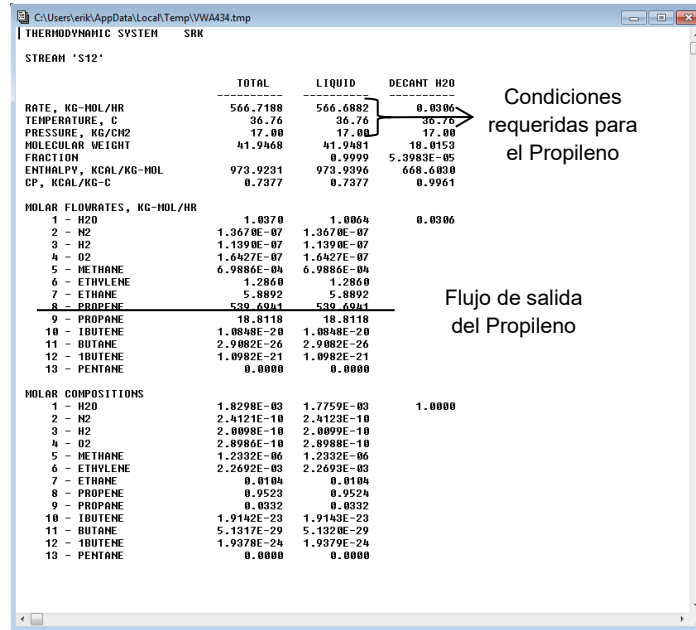


Fig. 4.74 Resultados finales en la salida del Propileno.

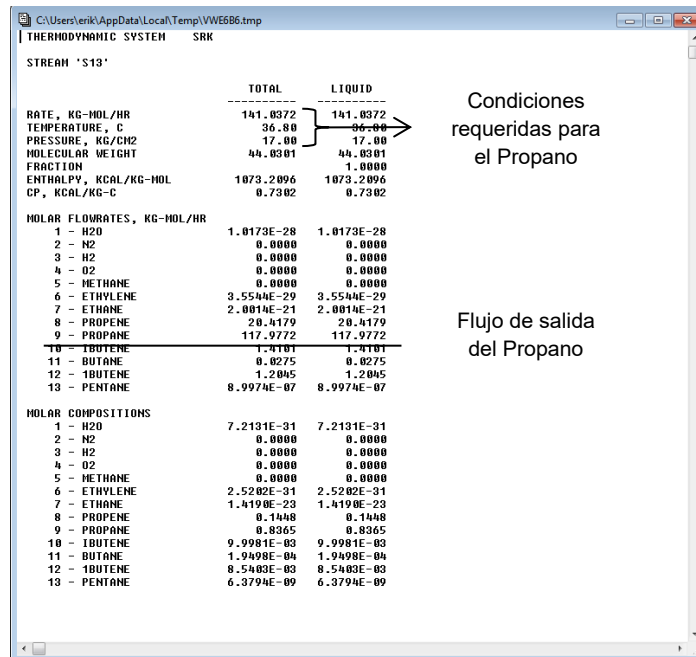


Fig. 4.75 Resultados finales en la salida del Propano.

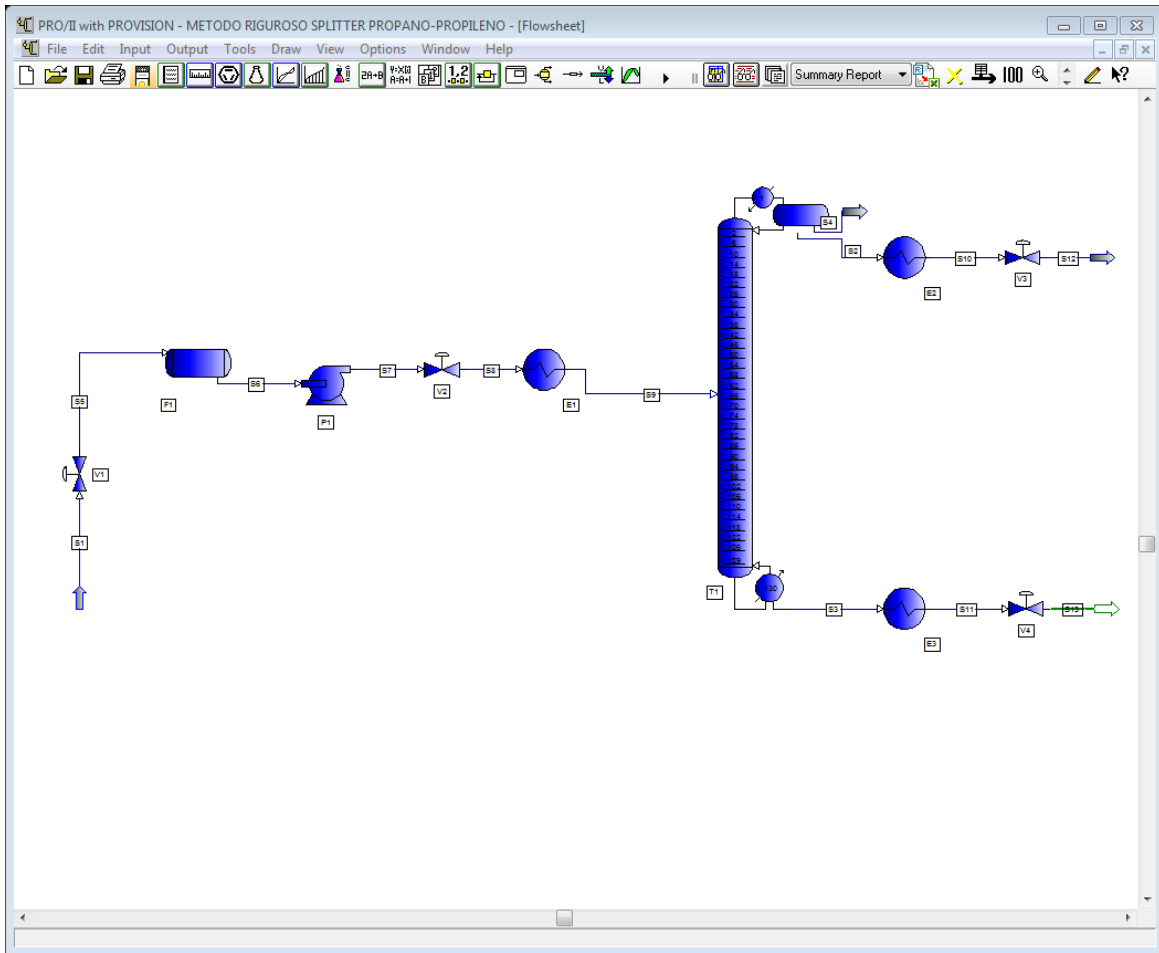


Fig. 4.76 Simulación del proceso Splitter Propano-Propileno.

## Conclusiones.

---

- I. Se cumplió el objetivo general, ya que se logró demostrar la participación del ingeniero químico, como especialista en el área de Ingeniería de Procesos, en la modelación de tanques flash y torres de destilación multicomponente, mediante el uso del simulador de procesos PRO II. Aplicando conocimientos teóricos aprendidos en las asignaturas como: Fisicoquímica, termodinámica, balance de materia y diseño de equipo de separación. Tomando como casos de estudio, problemas didácticos.
- II. Se dio una pequeña introducción de lo importante que es el uso del simulador en cuestión (PRO II). Así como también, el significado de la simulación de procesos mostrando en paralelo las ventajas y desventajas del uso de un simulador de procesos comercial.
- III. Aunque en definitiva este trabajo es, una herramienta de apoyo para el alumno de ingeniería química, que desee reforzar los conocimientos teóricos adquiridos y/o experimentar con nuevas situaciones sobre las cuales tiene poca o ninguna información. reduciendo tiempo en la solución de problemas.
- IV. Este trabajo puede usarse como un manual para aprender a utilizar el simulador de procesos PRO II ya que describe de manera particular la simulación de: Tanques Flash y Torres de destilación multicomponente, con el modo “paso a paso”.
- V. Por otro lado, durante el proceso de simulación en el software PRO II, para la realización del presente trabajo, surgieron algunas dificultades, que serán enlistadas a continuación para las cuales se dan algunas recomendaciones.

<b>Dificultades.</b>	<b>Recomendaciones.</b>
Falta de conocimientos teóricos.	Se recomienda revisar detenidamente las especificaciones del problema, tanto las variables de entrada como de salida.
Dificultad para seleccionar el modelo termodinámico.	Tener en cuenta las propiedades termodinámicas a las que el modelo es más sensible. Por ejemplo en las columnas de destilación es importante predecir el equilibrio liquido-vapor.
Dificultad para familiarizarse con interfaz gráfica del simulador.	Revisar de manera gradual cada uno de los elementos que se tienen presentes en la ventana de trabajo, utilizando el “prueba-error”.
Confusión en el orden de la modelación.	Se propone que al iniciar una simulación, se establezcan claramente las entradas y salidas organizando y supervisando los flujos de información a lo largo de la simulación.

**ANEXO.**

## Índice de Figuras.

---

- Fig. 1.1** Estructura del simulador en estado estacionario.
- Fig. 1.2** Diagrama de flujo para una simulación general.
- Fig. 2.1** Inicio del simulador.
- Fig. 2.2** Nuevo archivo.
- Fig. 2.3** Barras de herramientas.
- Fig. 2.4** Selección del sistema termodinámico.
- Fig. 2.5** Selección del sistema de unidades general.
- Fig. 2.6** Selección de las unidades de una variable.
- Fig. 2.7** Selección de componentes.
- Fig. 2.8** Lista de componentes.
- Fig. 2.9** Nuevo componente.
- Fig. 2.10** Definición del nuevo componente.
- Fig. 2.11** Barra de equipos.
- Fig. 2.12** Selección de la línea.
- Fig. 2.13** Datos de entrada.
- Fig. 2.13** Asignación del número de Línea.
- Fig. 2.14** Datos de Entrada.
- Fig. 2.15** Definición de la composición.
- Fig. 2.16** Definición de la composición con el flujo total de la alimentación.
- Fig. 2.17** Definición de la composición con el flujo individual de cada componente.
- Fig. 2.18** Primera especificación.
- Fig. 2.19** Segunda especificación.
- Fig. 2.20** Ejecución del programa.
- Fig. 3.1** Primera especificación del equipo flash



**Fig. 3.2** Segunda especificación del equipo flash

**Fig. 3.3** Especificación por parámetros.

**Fig. 3.4** Selección de los diferentes parámetros.

**Fig. 3.5** Salidas del equipo flash

**Fig. 3.6** Sistema termodinámico.

**Fig. 3.7** Selección del sistema de unidades.

**Fig. 3.8** Selección de componente.

**Fig. 3.9** Especificación de las condiciones térmicas.

**Fig. 3.10** Definición del flujo de alimentación.

**Fig. 3.11** Modificación de unidades.

**Fig. 3.12** Cambio de unidades.

**Fig. 3.13** Unidades modificadas.

**Fig. 3.14** Conexión de la línea de alimentación y productos.

**Fig. 3.15** Especificación del equipo flash.

**Fig. 3.16** Obtención de resultados.

**Fig. 3.17** Tabla de resultados.

**Fig. 3.18** Presentación de resultados.

**Fig. 3.19** Selección de las líneas.

**Fig. 3.20** Tabla de resultados.

**Fig. 3.21** Sistema termodinámico.

**Fig. 3.22** Sistema de unidades.

**Fig. 3.23** Selección de componente n-Butano.

**Fig. 3.24** Condiciones térmicas.

**Fig. 3.25** Flujo de alimentación.

**Fig. 3.26** Especificación del equipo.

**Fig. 3.27** Simulación y tabla de resultados.

**Fig. 3.28** Generación de reporte.

**Fig. 3.29** Sistema termodinámico.

**Fig. 3.30** Sistema de unidades.

**Fig. 3.31** Selección de componentes.

**Fig. 3.32** Condiciones Térmica.

**Fig. 3.33** Definición del flujo de alimentación.

**Fig. 3.34** Conexión de línea de alimentación y productos.

**Fig. 3.35** Especificación del equipo flash.

**Fig. 3.36** Tabla de resultados.

**Fig. 3.37** Modelo termodinámico.

**Fig. 3.38** Sistema de unidades.

**Fig. 3.39** Selección de componentes.

**Fig. 3.40** Condiciones térmicas.

**Fig. 3.41** Especificación del flujo de alimentación.

**Fig. 3.42** Conexión de líneas al equipo.

**Fig. 3.43** Especificación del equipo.

**Fig. 3.44** Tabla de resultados.

**Fig. 3.45** Selección de Condensador y Reboiler.

**Fig. 3.46** Selección de Condensador y Reboiler.

**Fig. 3.47** Ventana de especificación del “ShortCut”.

**Fig. 3.49** Selección del condensador.

**Fig. 3.50** Especificación de Minimum Reflux.

Fig. 3.51 Specifications.

**Fig. 3.52** Selección de Stream/Unit.

**Fig. 3.53** Selección del parámetro.

**Fig. 3.54** Selección de “ShortCut”.

**Fig. 3.55** Selección de “ShortCut”.

**Fig. 3.56** Productos.

**Fig. 3.57** Opciones para el método riguroso.

**Fig. 3.58** Equipo del Método riguroso.

**Fig. 3.59** Ventana de especificación método riguroso.

**Fig. 3.60** Especificación de Feeds and Products.

**Fig. 3.61** Especificación de la presión *Overall*.

**Fig. 3.62** Especificación de la presión *By Individual Trays*.

**Fig. 3.63** Especificación *Condenser*.

**Fig. 3.64** Especificación para condensador *Partial*.

**Fig. 3.65** Extracción de producto líquido del condensador *Partial*.

**Fig. 3.66** Condensador *Bubble Temperature*.

**Fig. 3.67** Condensador *Subcooled, Fixed Temperature*.

**Fig. 3.68** Condensador *Subcooled, Fixed Temperature Drop*.

**Fig. 3.69** Reboiler tipo *Kettle (Conventional)*.

**Fig. 3.70** Especificación de rehervidores y otros tipos de reboiler

**Fig. 3.71** Especificación de *Pumparounds*.

**Fig. 3.72** Especificación de *Pumparounds*.

**Fig. 3.73** Uso de *Pumparounds*.

**Fig. 3.74** Especificación *Performance Specifications*.

**Fig. 3.75** Parámetros para la columna.

**Fig. 3.76** Parámetros para las corrientes de los productos.

**Fig. 4.1** Modelo termodinámico.

**Fig. 4.2** Sistema de unidades.

**Fig. 4.3** Selección de componentes.

**Fig. 4.4** Condiciones térmicas.

**Fig. 4.5** Especificación del flujo de alimentación.

**Fig. 4.6** Conexión de líneas al quipo.

**Fig. 4.7** Especificación del equipo flash.

**Fig. 4.8** Obtención de resultados.

**Fig. 4.9** Generación de tabla de resultados.

**Fig. 4.10** Corrientes disponibles

**Fig. 4.11** Selección de líneas.

**Fig. 4.12** Tabla de resultados

**Fig. 4.13** Modelo termodinámico.

**Fig. 4.14** Sistema de unidades.

**Fig. 4.15** Selección de componentes.

**Fig. 4.16** Condiciones térmicas

**Fig. 4.17** Especificación del flujo de alimentación.

**Fig. 4.18** Especificación del tanque flash.

**Fig. 4.19** Tabla de resultados.

**Fig. 4.20** Modelo termodinámico

**Fig. 4.21** Sistema de unidades

**Fig. 4.22** Selección de componentes.

**Fig. 4.23** Condiciones térmicas.

**Fig. 4.24** Especificación del flujo de alimentación.

**Fig. 4.25** Especificación del tanque flash.

**Fig. 4.26** Tabla de resultados.

**Fig. 4.27** Modelo termodinámico.

**Fig. 4.28** Sistema de unidades.

**Fig. 4.29** Selección de componentes.

**Fig. 4.30** Condiciones térmicas.

**Fig. 4.31** Especificación del flujo de alimentación

**Fig. 4.32** Especificación del tanque flash

**Fig. 4.33** Tabla de resultados.

**Fig. 4.34** Definición de las condiciones térmicas.

**Fig. 4.35** Definición del flujo de alimentación.

**Fig. 4.36** Selección del "ShortCut".

**Fig. 4.37** Conexión de líneas.

**Fig. 4.38** Selección de condensador

**Fig. 4.39** Definición del componente clave ligero y pesado

**Fig. 4.40** Selección de Stream 2

**Fig. 4.41** Selección del parámetro

**Fig. 4.42** Definición de la salida de Domo.

**Fig. 4.43** Definición de salida de Fondos.

**Fig. 4.44** Especificación Fenske Estimates

**Fig. 4.45** Definición de la especificación Products.

**Fig. 4.46** Resultados del Domo

**Fig. 4.47** Resultados del Fondo

**Fig. 4.48** Búsqueda de resultados del método corto.

**Fig. 4.49** Resultado del método corto

**Fig. 4.50** Selección de Distillation.

**Fig. 4.51** Conexión de líneas

**Fig. 4.52** Especificación Pressure Profile.

**Fig. 4.53** Especificación Feeds and Products.

**Fig. 4.54** Selección del tipo de condensador.

**Fig. 4.55** Especificación Performance Specification.

**Fig. 4.56** Selección de parámetro.

**Fig. 4.57** Selección de Column.

- Fig. 4.58** Especificación de los parámetros.
- Fig. 4.59** Resultados de salida de los Domos.
- Fig. 4. 60** Resultados de salida de los fondos
- Fig. 4.61** Resultados finales.
- Fig. 4.62** Selección de la línea de alimentación.
- Fig. 4.63** Cambio de condiciones térmicas para la línea de alimentación.
- Fig. 4.64** Selección de la posición del tanque Flash.
- Fig. 4.65** Especificación de la válvula.
- Fig. 4.66** Especificación del tanque flash.
- Fig. 4.67** Especificación de la bomba.
- Fig. 4.68** Especificación de la válvula
- Fig. 4.69** Especificación del intercambiador de calor
- Fig. 4.70** Especificación del plato de alimentación
- Fig. 4.71** Diagrama del Splitter Propano-Propileno.
- Fig. 4.72** Especificación del intercambiador de calor.
- Fig. 4.73** Especificación de la válvula.
- Fig. 4.74** Resultados finales en la salida del Propileno.
- Fig. 4.75** Resultados finales en la salida del Propano.
- Fig. 4.76** Simulación del proceso Splitter Propano-Propileno.

## Índice de Tablas.

**Tabla 1.1** Módulos de simulación de unidades de proceso.

**Tabla 1.2** Simuladores Comerciales.

**Tabla 2.1** Modelos termodinámicos que maneja PRO II.

**Tabla 3.1** Tipos Tanques Flash.

**Tabla 3.2** Composición de corrientes –Punto de rocío.

**Tabla 3.3** Composición de corrientes-Flash isotérmico.

**Tabla 3.4** Composición de corrientes –Flash adiabático.

**Tabla 4.1.** Composiciones Flash adiabático.

**Tabla 4.2.** Composiciones Flash isotérmico.

**Tabla 4.3.** Composiciones Punto de rocío.

**Tabla 4.4.** Composiciones Punto de burbuja.

**Tabla 4.5.** Composiciones del Splitter Propano-Propileno.

**Tabla 4.6.** Datos obtenidos del método riguroso

## Bibliografía.

---

- [1] Ludwig. E. Ernest. (1967). *Applied Process Design for Chemical and Petrochemical Plants*, (3<sup>th</sup> ed.). Houston TX.
- [2] Walas. M. Stanley. (1990). *Chemical Process Equipment Selection and Design*. Butterworth-Heinemann, USA.
- [3] Geankoplis Christie J. (1998.), *Procesos de Transporte y Operaciones Unitarias*. (3<sup>th</sup> ed.) Continental, México,
- [4] Henley E. J. y Seader J. D. (2000). *Operaciones de Separación por Etapas de Equilibrio en Ingeniería Química*, Reverté, México.
- [5] Finlayson A. Bruce. (2006). *Introduction to Chemical Engineering Computing*. Wiley-Interscience, USA.
- [6] Treybal Robert E. (1981) *Mass-Transfer Operations*, (3<sup>th</sup> ed.), McGraw-Hill, USA.
- [7] Gary James H., Handwerk Glenn E. (2001) *Petroleum Refining Technology and Economics*. Fourth Edition, Marcel Dekker, New York.
- [8] Bequette Wayne. (1998) *Process Dynamics Modeling, Analysis, and Simulation*, Prentice Hall PTR, New Jersey.
- [9] J. Healy, D. H. Withers, and B. L. Nelson. (1997). *Introduction to Modeling and Simulation*. Edit. Andradóttir, USA.



- [10] Warren L. McCabe, Julian C. Smith, Peter Harriot. (1993). *Unit Operations of Chemical Engineering*. Fifth Edition, McGraw-Hill, USA.
- [11] Holland C. F. (1981). *Fundamentals of Multicomponent Distillation*, McGraw-Hill, USA,
- [12] Perry R. (1996), *Manual del Ingeniero Químico*, Sexta Edición, Mc Graw Hill, México.
- [13] Invensys Systems. (2007), *PRO II Academic Manual Student Edition*. USA.
- [14] Motard R., Shacham M., Rosen E.M. (1975). *Steady State Chemical Process Simulation*, USA, AIChE Journal 21.
- [15] Westerbert A., Hutchison H., Motard R., Winter P., (1979) *Process flow sheeting*, Cambridge University Press, London.
- [16] Lorenz T. Biegler. (1933) *Simultaneous Modular Simulation and Optimization*, Department of Chemical Engineering.
- [17] *Métodos aproximados para el cálculo de operaciones de separación de mezclas multicomponentes*. (2012). Universidad de Alicante .Depto. Ingeniería química.
- [18] *Planteamiento de problemas de equilibrio*. (2011). Facultad de Química – Depto. Maestría en Ingeniería Química - Termodinámica química.
- [19] Rodríguez H. Francisco. (2011). *“Modelado de un separador Flash”*, ULA.
- [20] Smith Robin. (1995). *“Chemical Process Design”*, McGraw Hill, New York.
- [21] Baré Wadou, Ojeda David. (2004). *Termodinámica del equilibrio, separación flash de mezcla acetano y ciclohexano*. Caracas, Venezuela.
- [22] Tesis de licenciatura. Flores Alvarado Manuel Agustín. (1992). Simulación modular secuencial.

- [23] Invensys Systems Inc. (2009). *Guía de ayuda técnica del simulador de procesos. PRO II 2009®*. IMP.
- [24] Apuntes del curso de: Diseño de equipo 7<sup>mo</sup> semestre. (2011). UNAM FES Zaragoza.
- [25] M. Zygula Timothy, Kolmetz Karl. (2011). *Design Guidelines for Propylene Splitters*. Chicago, Illinois.