



INSTITUTO TECNOLÓGICO DE TUXTLA GUTIÉRREZ

Reporte Final de Residencia Profesional
ENE-JUN 2018

Elaboración de un Manual Integral de Procesos Químicos Asistido por Computadora

Brenda Pulido Garduño
Número de Control: 13270810
Ingeniería Química

Asesor Interno: Dr. Arnulfo Rosales Quintero

Revisores:
Ing. Leonardo Gómez Gutiérrez
Mtro. Miguel Cid del Prado Martínez

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas, Agosto del 2018

Agradecimientos

A Dios por poner en mi camino a cada una de las personas que han sido mi soporte a lo largo de este proyecto.

A mí misma por seguir adelante y nunca rendirme.

A mi asesor el Dr. Arnulfo Rosales Quintero por su gran apoyo, dedicación y paciencia, en especial por inspirarme a lograr mis metas y a seguir preparándome profesionalmente.

A mis padres Antonio Pulido y Yolanda Garduño por brindarme su apoyo y fortaleza durante todos mis estudios, ser un ejemplo a seguir y motivarme a seguir adelante.

A mis amigos, Carlos, Eric y Daniel, por su amistad incondicional y su constante motivación.

A mis profesores de la carrera que me brindaron su apoyo constante.

Resumen

La finalidad del presente proyecto fue el de implementar diversos procesos químicos, que se caracterizaran por contener las secuencias básicas de los procesos industriales, como son reacciones químicas, procesos de separación y recirculación e integración de energía, en un simulador especializado (Aspen HYSYS).

Para el desarrollo del proyecto se utilizaron una variedad extensa de fuentes de información en libros, artículos, revistas, medios electrónicos e incluso la experiencia y conocimientos del profesor-investigador, el Dr. Arnulfo Rosales Quintero.

En el manual se plasmó brevemente la importancia de la simulación de procesos en el área de Ingeniería Química y la importancia del uso de simuladores especializados en los procesos químicos. Además, se expusieron cada uno de los pasos a seguir desde la inicialización del simulador especializado (Aspen HYSYS), la configuración del entorno de simulación y la configuración de cada uno de los equipos utilizados en cada proceso químico.

Igualmente, se recopiló información general de 8 procesos químicos: Síntesis de Acrilonitrilo, Acroleína, Amoniaco, Anhídrido Maleico, Anhídrido Ftálico, Ciclo de Brayton y Rankine, Ciclos de Refrigeración, Ciclohexano y el proceso Fischer Tropsch. Asimismo, se describió brevemente la secuencia de cada uno de ellos y se plantearon diversos casos de estudio, con diferentes configuraciones de proceso, que posteriormente se simularon en el software especializado (Aspen HYSYS).

El desarrollo de este proyecto ayudó a recopilar, sintetizar y plasmar la información relacionada con la simulación de procesos químicos en un manual claro, sencillo y fácil entendimiento por los alumnos de la carrera de Ingeniería Química que su vez sirvió de guía para la docencia de las asignaturas de Síntesis y Optimización de Procesos y Simulación de Procesos.

Índice

Agradecimientos	II
Resumen	III
Índice	IV
Índice de Figuras	IX
Índice de Tablas.....	XII
Índice de Diagramas	XIII
Introducción.....	1
Capítulo 1. Descripción de la Organización.....	2
1.1 Nombre de la Organización.....	2
1.2 Ubicación de la Organización.....	2
1.3 Organigrama.....	3
1.4 Descripción de la Organización.....	4
1.5 Descripción del Área en la que se Participó.....	5
1.6 Funciones y Ubicación del Residente.....	8
Capítulo 2. Problemas a Resolver.....	9
Capítulo 3. Objetivos.....	10
3.1. Objetivo General.....	10
3.2. Objetivos Específicos	10
Capítulo 4. Justificación	11
Capítulo 5. Marco Teórico.....	12
5.1 Generalidades de los Simuladores.....	12
5.1.1 Clasificación De Los Métodos De Simulación.....	13
5.1.2 Clasificación de los Simuladores de Procesos Químicos	15
5.2 Generalidades del HYSYS	16
Capítulo 6. Procedimiento y Descripción de las Actividades Realizadas	17

Capítulo 7. Introducción al Aspen HYSYS.....	19
7.1 Pantalla Inicial de HYSYS	19
7.1.1 Agregar Compuestos a la Simulación	21
7.1.2 Métodos Termodinámicos	24
7.1.3 Reacciones Químicas.....	28
7.2 Operaciones Unitarias.....	33
7.2.1 Intercambiadores de Calor.....	36
7.2.2 Separador Flash	40
7.2.3 Reactores	41
7.3 Otros	43
7.3.1 Mezclador y Divisor	43
7.3.3 Compresor y Expansor	46
7.3.4 Bombas	48
7.3.5 Válvulas.....	50
7.3.6 Recirculación.....	52
Capítulo 8. Procesos Químicos.....	54
8.1 Producción de Acrilonitrilo.....	54
8.1.1 Generalidades	54
8.1.1.1 Propiedades Físicas y Termoquímicas	54
8.1.1.2 Importancia Económica.....	55
8.1.1.2.1. Costos de la Materia Prima y Productos.....	55
8.1.1.3 Aplicaciones del Acrilonitrilo	56
8.1.2 Descripción del Proceso	56
8.1.2.1 Proceso con Recuperación de Calor	57
8.1.2.1.1 Resultados de la simulación en HYSYS	58
8.2 Producción de Acroleína	60
8.2.1 Generalidades	60
8.2.1.1 Propiedades Físicas y Termoquímicas	60
8.2.1.2 Importancia Económica.....	60
8.2.1.2.1 Costos de la Materia Prima y Productos.....	61
8.2.1.3 Aplicaciones de la Acroleína.....	61
8.2.2 Descripción del Proceso	61

8.2.2.1	Proceso con Inter-Enfriamiento.....	63
8.2.2.1.1	Resultados de la simulación en HYSYS	63
8.3	Síntesis de Amoníaco	65
8.3.1	Generalidades	65
8.3.1.1	Propiedades Físicas y Termoquímicas	65
8.3.1.2	Importancia Económica.....	65
8.3.1.2.1	Costos de la Materia Prima y Productos.....	66
8.3.1.3	Aplicaciones del Amoníaco.....	66
8.3.2	Descripción del Proceso	67
8.3.2.1	Proceso con Recirculación.....	68
8.3.2.1.1	Resultados de la simulación en HYSYS	69
8.3.2.2	Proceso con Inter-enfriamiento y Quench (enfriamiento súbito).....	70
8.3.2.2.1	Resultados de la Simulación en HYSYS	71
8.3.2.3	Proceso con Recuperación de Calor	72
8.3.2.3.1	Resultados de la Simulación en HYSYS.....	73
8.4	Anhídrido Maleico.....	74
8.4.1	Generalidades	74
8.4.1.1	Propiedades Físicas y Termoquímicas	74
8.4.1.2	Importancia Económica.....	74
8.4.1.2.1	Costos de la Materia Prima y Productos.....	75
8.4.1.3	Aplicaciones del Anhídrido Maleico.....	75
8.4.2	Descripción del Proceso	75
8.4.2.1	Proceso con Recirculación a partir de Butano.....	77
8.4.2.1.1	Resultados de la Simulación en HYSYS.....	78
8.4.2.2	Proceso con Recirculación a partir de Benceno	79
8.4.2.2.1	Resultados de la Simulación en HYSYS.....	80
8.5	Anhídrido Ftálico.....	82
8.5.1	Generalidades	82
8.5.1.1	Propiedades Físicas y Termoquímicas	82
8.5.1.2	Importancia Económica.....	82
8.5.1.2.1	Costos de la Materia Prima y Productos.....	83
8.5.1.3	Aplicaciones del Anhídrido Ftálico.....	83

8.5.2 Descripción del Proceso	83
8.5.2.1 Proceso con Recirculación.....	84
8.5.2.1.1 Resultados de la Simulación en HYSYS.....	85
8.5.2.2 Proceso con Recuperación de Calor	86
8.5.2.2.1 Resultados de la Simulación en HYSYS.....	87
8.6 Ciclos Termodinámicos.....	89
8.6.1 Generalidades	89
8.6.1.1 Propiedades Físicas y Termoquímicas	89
8.6.1.2 Importancia Económica.....	90
8.6.1.2.1 Costos de la Materia Prima y Producto	91
8.6.1.3 Aplicaciones de los Ciclos Termodinámicos.....	92
8.6.2 Descripción del Proceso	92
8.7.2.1 Ciclo de Brayton.....	93
8.6.2.1.1 Proceso con Regeneración.....	93
8.6.2.1.1.1 Resultados de la simulación en HYSYS	94
8.6.2.1.1.2 Proceso con Inter-enfriamiento y Regeneración.	95
8.6.2.1.2.1 Resultados de la simulación en HYSYS	96
8.6.2.2 Ciclo de Rankine	98
8.6.2.2.1 Proceso con Recalentamiento	98
8.6.2.2.1.1 Resultados de la simulación en HYSYS	99
8.6.2.2.2 Proceso Ideal	100
8.6.2.2.2.1 Resultados de la simulación en HYSYS	101
8.6.2.3 Ciclos de Refrigeración	103
8.6.2.3.1 Proceso con Dos Ciclos	104
8.6.2.3.1.1 Resultados de la simulación en HYSYS	105
8.6.2.3.2 Proceso con Propileno como Refrigerante	106
8.6.2.3.2.1 Resultados de la simulación en HYSYS	107
8.7 Producción de Ciclohexano.....	109
8.7.1 Generalidades	109
8.7.1.1 Propiedades Físicas y Termoquímicas	109
8.7.1.2 Importancia Económica.....	109
8.7.1.2.1 Costos de la Materia Prima y Producto	110

8.7.1.3 Aplicaciones del Ciclohexano	110
8.7.2 Descripción del Proceso	110
8.7.2.1 Proceso con Recirculación.....	111
8.7.2.1.1 Resultados de la Simulación en HYSYS.....	111
8.8 Fischer Tropsch	114
8.8.1 Generalidades	114
8.8.1.1 Propiedades físicas y Termoquímicas	114
8.8.1.2 Importancia Económica.....	115
8.8.1.2.1 Costos de la Materia Prima y Producto	115
8.8.1.3 Aplicaciones del Proceso Fischer Tropsch.....	115
8.8.2 Descripción del Proceso	116
8.8.2.1 Proceso con Recuperación de Calor	117
8.8.2.1.1 Resultados de la Simulación en HYSYS	118
8.8.2.2 Proceso con Tres Reactores	119
8.8.2.2.1 Resultados de la Simulación en HYSYS.....	120
8.8.2.3 Proceso con Inter-enfriamiento y Quench (enfriamiento súbito)	122
8.8.2.3.1 Resultados de la Simulación en HYSYS.....	123
Conclusiones y Recomendaciones	125
Competencias Desarrolladas y Aplicadas.....	126
Fuentes de Información	128

Índice de Figuras

<i>Figura 1.1 Organigrama del Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez.</i>	3
<i>Figura 7. 1 Pantalla de Escritorio.</i>	19
<i>Figura 7. 2 Ubicación del programa Aspen HYSYS.</i>	20
<i>Figura 7. 3 Inicialización de Aspen HYSYS.</i>	20
<i>Figura 7. 4 Entorno de trabajo de Aspen HYSYS.</i>	21
<i>Figura 7. 5 Selección de los compuestos en Aspen HYSYS.</i>	22
<i>Figura 7. 6 Agregar y eliminar compuestos al simulador.</i>	22
<i>Figura 7. 7 Filtro por formula química o nombre para búsqueda de compuestos.</i>	23
<i>Figura 7. 8 Filtro por familias para la búsqueda de compuestos.</i>	23
<i>Figura 7. 9 Inserción del método termodinámico.</i>	25
<i>Figura 7. 10 Selección del método termodinámico.</i>	25
<i>Figura 7. 11 Inicialización del asistente de métodos termodinámicos.</i>	26
<i>Figura 7. 12 Selección del tipo de componentes del proceso.</i>	26
<i>Figura 7. 13 Selección del sistema que mejor se adapta al proceso.</i>	27
<i>Figura 7. 14 Selección de las presiones de proceso.</i>	27
<i>Figura 7. 15 Métodos termodinámicos propuestos por el asistente.</i>	28
<i>Figura 7. 16 Inserción de las reacciones químicas.</i>	28
<i>Figura 7. 17 Menú principal para agregar reacciones químicas.</i>	29
<i>Figura 7. 18 Selección del tipo de reacción química.</i>	29
<i>Figura 7. 19 Configuración de la reacción química.</i>	30
<i>Figura 7. 20 Selección de los componentes de la reacción química.</i>	30
<i>Figura 7. 21 Inserción de los coeficientes estequiométricos de la reacción química.</i>	31
<i>Figura 7. 22 Set de reacciones.</i>	32
<i>Figura 7. 23 Inserción del set de reacciones a la simulación.</i>	32
<i>Figura 7. 24 Entorno de la Simulación.</i>	33
<i>Figura 7. 25 Paleta de trabajo.</i>	- 33 -
<i>Figura 7. 26 Ventana de corriente de material.</i>	34
<i>Figura 7. 27 Adicción de composición a la corriente de material.</i>	35

Figura 7. 28	<i>Adicción de las fracciones molares a una corriente de material.</i>	35
Figura 7. 29	<i>Selección de un Enfriador.</i>	- 37 -
Figura 7. 30	<i>Selección de un Calentador.</i>	- 37 -
Figura 7. 31	<i>Selección de un LNG.</i>	37
Figura 7. 32	<i>Configuración de un enfriador.</i>	38
Figura 7. 33	<i>Configuración de la caída de presión en un enfriador.</i>	38
Figura 7. 34	<i>Adicción de la temperatura a la corriente de salida de un IC.</i>	39
Figura 7. 35	<i>Configuración de un intercambiador LNG.</i>	39
Figura 7. 36	<i>Selección de un separador flash.</i>	40
Figura 7. 37	<i>Configuración de un separador flash.</i>	41
Figura 7. 38	<i>Selección de un reactor de conversión.</i>	41
Figura 7. 39	<i>Configuración de un reactor de conversión.</i>	42
Figura 7. 40	<i>Adicción del set de reacciones al reactor de conversión.</i>	42
Figura 7. 41	<i>Selección de un mezclador.</i>	- 43 -
Figura 7. 42	<i>Selección de un divisor.</i>	- 43 -
Figura 7. 43	<i>Configuración de un mezclador.</i>	44
Figura 7. 44	<i>Configuración de un divisor.</i>	44
Figura 7. 45	<i>Configuración de la relación de flujo.</i>	45
Figura 7. 46	<i>Selección de un compresor.</i>	- 46 -
Figura 7. 47	<i>Selección de un expansor.</i>	- 46 -
Figura 7. 48	<i>Configuración de un compresor.</i>	47
Figura 7. 49	<i>Inserción de la presión de salida de un compresor.</i>	47
Figura 7. 50	<i>Selección de una bomba.</i>	48
Figura 7. 51	<i>Configuración de una bomba.</i>	49
Figura 7. 52	<i>Selección de una válvula.</i>	50
Figura 7. 53	<i>Configuración de una válvula.</i>	51
Figura 7. 54	<i>Selección de una recirculación.</i>	52
Figura 7. 55	<i>Configuración de una recirculación.</i>	53
Figura 7. 56	<i>Selección del número de iteraciones en una recirculación.</i>	53

Figura 8.1 Molécula de Anhídrido Maleico 74
Figura 8.2 Molécula de Anhídrido Ftálico..... 82
Figura 8.3 Molécula de Ciclohexano..... 109

Índice de Tablas

<i>Tabla 8.1</i>	<i>Propiedades físicas y termoquímicas del Acrilonitrilo.....</i>	<i>54</i>
<i>Tabla 8.2</i>	<i>Distribución regional de producción de Acrilonitrilo, 10⁶ t/a.....</i>	<i>55</i>
<i>Tabla 8.3</i>	<i>Costos de los reactivos y productos para la producción de Acrilonitrilo.</i>	<i>55</i>
<i>Tabla 8.4</i>	<i>Propiedades físicas y termoquímicas de la Acroleína.</i>	<i>60</i>
<i>Tabla 8.5</i>	<i>Costos de los reactivos y productos para la producción de Acroleína.</i>	<i>61</i>
<i>Tabla 8. 6</i>	<i>Propiedades físicas y termoquímicas del Amoniacó.</i>	<i>65</i>
<i>Tabla 8.7</i>	<i>Producción mundial de Amoniacó.....</i>	<i>66</i>
<i>Tabla 8.8</i>	<i>Costos de los reactivos y productos para la producción de Amoniacó.</i>	<i>66</i>
<i>Tabla 8.9</i>	<i>Propiedades físicas y termoquímicas del Anhídrido Maleico.</i>	<i>74</i>
<i>Tabla 8.10</i>	<i>Consumo mundial de Anhídrido Maleico en el año 2012.....</i>	<i>75</i>
<i>Tabla 8.11</i>	<i>Costos de los reactivos y productos para el proceso de producción de Anhídrido Maleico.....</i>	<i>75</i>
<i>Tabla 8.12</i>	<i>Propiedades físicas y termoquímicas del Anhídrido Ftálico.</i>	<i>82</i>
<i>Tabla 8.13</i>	<i>Costos de los reactivos y productos para la producción del Anhídrido Ftálico.</i>	<i>83</i>
<i>Tabla 8.14</i>	<i>Propiedades físicas y termoquímicas del Agua.</i>	<i>89</i>
<i>Tabla 8.15</i>	<i>Propiedades físicas y termoquímicas del R-134a.</i>	<i>90</i>
<i>Tabla 8.16</i>	<i>Propiedades físicas y termoquímicas del Propileno.....</i>	<i>90</i>
<i>Tabla 8.17</i>	<i>Consumo Mundial de Energía Eléctrica 2010-2014</i>	<i>90</i>
<i>Tabla 8.18</i>	<i>Sistemas de Refrigeración que operan en el mundo.</i>	<i>91</i>
<i>Tabla 8.19</i>	<i>Costos de los reactivos y productos para los Ciclos Termodinámicos de Brayton, Rankine y Ciclos de Refrigeración.</i>	<i>91</i>
<i>Tabla 8.20</i>	<i>Propiedades físicas y termoquímicas del Ciclohexano.</i>	<i>109</i>
<i>Tabla 8.21</i>	<i>Costos de los reactivos y productos para la producción de Ciclohexano.</i>	<i>110</i>
<i>Tabla 8.22</i>	<i>Propiedades físicas y termoquímicas del Butano.</i>	<i>114</i>
<i>Tabla 8.23</i>	<i>Propiedades físicas y termoquímicas del Pentano.</i>	<i>114</i>
<i>Tabla 8. 24</i>	<i>Consumo de petróleo a nivel mundial.....</i>	<i>115</i>
<i>Tabla 8. 25</i>	<i>Costos de los reactivos y productos para el proceso Fischer Tropsch.</i>	<i>115</i>

Índice de Diagramas

<i>Diagrama 8.1 Producción de Acrilonitrilo por Recuperación de Calor.</i>	58
<i>Diagrama 8.2 Simulación en HYSYS de la producción de Acrilonitrilo por Recuperación de Calor.</i>	58
<i>Diagrama 8.3 Producción de Acroleína con Inter-enfriamiento.</i>	63
<i>Diagrama 8.4 Simulación en HYSYS de la producción de Acroleína con Inter-enfriamiento.</i>	63
<i>Diagrama 8.5 Síntesis de Amoniaco por Recirculación.</i>	68
<i>Diagrama 8.6 Simulación en HYSYS de la producción de Amoniaco por Recirculación.</i> ..	69
<i>Diagrama 8.7 Síntesis de Amoniaco por Inter-enfriamiento y Quench. ¡Error! Marcador no definido.</i>	
<i>Diagrama 8.8 Simulación en HYSYS de la producción de Amoniaco por Inter-enfriamiento y Quench.</i>	71
<i>Diagrama 8.9 Síntesis de Amoniaco por Recuperación de Calor.</i>	72
<i>Diagrama 8.10 Simulación en HYSYS de la producción de Amoniaco por Recuperación de Calor.</i>	73
<i>Diagrama 8.11 Producción de Anhídrido Maleico a partir de n-butano con Recirculación.</i>	77
<i>Diagrama 8.12 Simulación en HYSYS de la producción de Anhídrido Maleico con Recirculación.</i>	78
<i>Diagrama 8.13 Producción de Anhídrido Maleico a partir de benceno con Recirculación.</i>	80
<i>Diagrama 8.14 Simulación en HYSYS de la producción de Anhídrido Maleico con Recirculación.</i>	80
<i>Diagrama 8.15 Producción de Anhídrido Ftálico con Recirculación.</i>	84
<i>Diagrama 8.16 Simulación en HYSYS de la producción de Anhídrido Ftálico con Recirculación.</i>	85
<i>Diagrama 8.17 Producción de Anhídrido Ftálico con Recuperación de Calor.</i>	87
<i>Diagrama 8.18 Simulación en HYSYS de la producción de Anhídrido Ftálico con Recuperación de Calor.</i>	87
<i>Diagrama 8.19 Ciclo de Brayton con Regeneración.</i>	94

<i>Diagrama 8.20 Simulación en HYSYS del ciclo de Brayton con Regeneración.</i>	94
<i>Diagrama 8.21 Ciclo de Brayton con Inter-enfriamiento y Regeneración.</i>	96
<i>Diagrama 8.22 Simulación en HYSYS del ciclo de Brayton con Inter-enfriamiento y Regeneración.</i>	96
<i>Diagrama 8.23 Ciclo de Rankine con Recalentamiento.</i>	99
<i>Diagrama 8.24 Simulación en HYSYS del ciclo de Rankine con Recalentamiento.</i>	99
<i>Diagrama 8.25 Ciclo de Rankine Ideal.</i>	101
<i>Diagrama 8.26 Simulación en HYSYS del ciclo de Rankine Ideal.</i>	101
<i>Diagrama 8.27 Ciclo de Refrigeración en Cascada.</i>	104
<i>Diagrama 8.28 Simulación en HYSYS de un ciclo de Refrigeración en Cascada.</i>	105
<i>Diagrama 8.29 Ciclo de Refrigeración con propileno.</i>	106
<i>Diagrama 8.30 Simulación en HYSYS de un ciclo de Refrigeración con propileno.</i>	107
<i>Diagrama 8.31 Proceso de producción de Ciclohexano con Recirculación.</i>	111
<i>Diagrama 8.32 Simulación en HYSYS del proceso de producción de Ciclohexano con Recirculación.</i>	112
<i>Diagrama 8.33 Proceso Fischer Tropsch con Recuperación de Calor.</i>	117
<i>Diagrama 8.34 Simulación en HYSYS del proceso Fischer Tropsch con Recuperación de Calor.</i>	118
<i>Diagrama 8.35 Proceso Fischer Tropsch con tres Reactores.</i>	120
<i>Diagrama 8.36 Simulación en HYSYS del proceso Fischer Tropsch con tres Reactores.</i>	120
<i>Diagrama 8.37 Proceso Fischer Tropsch con Inter-enfriamiento y Quench.</i>	122
<i>Diagrama 8.38 Simulación en HYSYS del proceso Fischer Tropsch con Inter-enfriamiento y Quench.</i>	123

Introducción

El presente proyecto se deriva de la realización de mi práctica profesional en el Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez. Esta institución educativa, que lleva más de 42 años instruyendo profesionales, cuenta con 12 edificios educativos y con más de 10 laboratorios.

Fui asignada a la División de Estudios de Posgrado e Investigación en el área de Investigación de Procesos Químicos con el proyecto de elaborar un manual integral que sirva como guía y/o marco teórico para mejorar el desempeño del estudiante promedio de la carrera de Ingeniería Química en asignaturas como Síntesis y Optimización de Procesos y Simulación de Procesos.

La importancia de este proyecto en el área de la Ingeniería Química radica en la búsqueda y síntesis de la información relacionada con simulación de procesos químicos, la aplicación de softwares especializados y el planteamiento de casos de estudio reales, con ello se planea que el alumno mejore su desempeño escolar y conozca a más profundidad la variedad de procesos químicos que existen en la industria, para de esta manera extender su visión y generar nuevas ideas de investigación en el área.

La estructura del manual está integrada en 2 secciones. La primera está formada por los pasos que deben seguirse en el programa especializado (HYSYS) desde su inicialización hasta la forma en cómo deben configurarse los diferentes equipos en el simulador. La segunda sección la integran los procesos químicos estudiados. En esta sección se describen los aspectos generales de los compuestos de interés, la manera en cómo se lleva a cabo el proceso a nivel industrial y el caso de estudio a simular en HYSYS con sus respectivos resultados.

Para la realización de este manual se han utilizado diversos recursos bibliográficos como son artículos científicos y libros de Michael L. Luyben, el “Manual del Ingeniero Químico” de Robert H. Perry, el manual de “Chemical and Process Design” de James G. Speight, enciclopedias como “Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry”, entre muchos otros recursos con los que el instituto educativo contaba. Cabe hacer mención importante que de igual manera se utilizaron artículos desarrollados por mi asesor de proyecto el Dr. Arnulfo Rosales Quintero.

Es importante mencionar que esta experiencia contribuye de manera significativa en mi desarrollo profesional, ya que enriquece los conocimientos que adquirí durante mi preparación como Ingeniero Químico en el prestigiado Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez. Además, me permitió familiarizarme con el ambiente laboral en el área de investigación científica y trabajar en conjunto con mi asesor para lograr los objetivos deseados.

Capítulo 1. Descripción de la Organización

A continuación, se presentan los datos generales de la organización en la que se realizó el presente proyecto como es su nombre, ubicación, contacto, organigrama y una breve historia de su fundación. También se describe de manera breve los objetivos de la institución su misión, visión y valores. Posteriormente se describe el área en dónde se laboró y las funciones y responsabilidades que se le confiaron al residente.

1.1 Nombre de la Organización

Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez

1.2 Ubicación de la Organización

Carretera Panamericana Km. 1080 s/n

Tuxtla Gutiérrez, Chiapas

C.P: 29050

Apartado Postal: 599

Fax: (961)61 5 16 87

Teléfono: (961)61 5 04 61

RFC: SEP210905778

Contacto: <http://www.ittg.edu.mx>

1.3 Organigrama

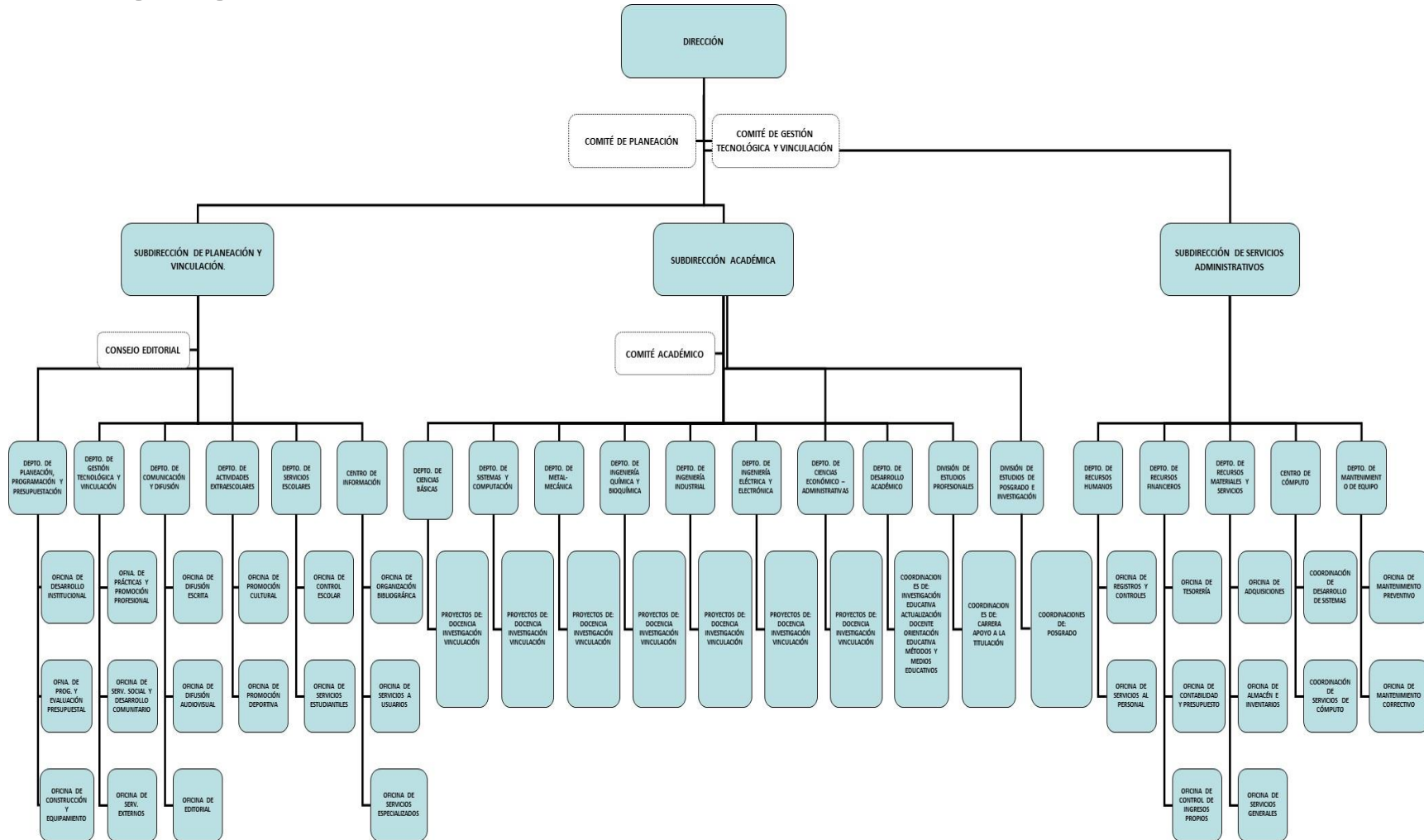


Figura 1.1 Organigrama del Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez.

1.4 Descripción de la Organización

En la década de los 70's, se incorpora el estado de Chiapas al movimiento educativo nacional extensión educativa, por intervención del Gobierno del Estado de Chiapas ante la federación.

Esta gestión dio origen a la creación del Instituto Tecnológico Regional de Tuxtla Gutiérrez (ITRTG) hoy Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez (ITTG). El día 23 de agosto de 1971 el Gobernador del Estado, Dr. Manuel Velasco Suárez, colocó la primera piedra de lo que muy pronto sería el Centro Educativo de nivel medio superior más importante de la entidad.

El día 22 de octubre de 1972, con una infraestructura de 2 edificios con 8 aulas, 2 laboratorios y un edificio para talleres abre sus puertas el Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez con las carreras de Técnico en Máquinas de Combustión Interna, Electricidad, Laboratorista Químico y Máquinas y Herramientas.

En el año 1974 dio inicio la modalidad en el nivel superior, ofreciendo las carreras de Ingeniería Industrial en Producción y Bioquímica en Productos Naturales.

En 1980 se amplió la oferta educativa al incorporarse las carreras de Ingeniería Industrial Eléctrica e Ingeniería Industrial Química.

En 1987 se abre la carrera de Ingeniería en Electrónica y se liquidan en 1989 las carreras del sistema abierto del nivel medio superior y en el nivel superior se reorientó la oferta en la carrera de Ingeniería Industrial Eléctrica y se inicia también Ingeniería Mecánica.

En 1991 surge la licenciatura en Ingeniería en Sistemas Computacionales.

Desde 1997 el Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez ofrece la Especialización en Ingeniería Ambiental como primer programa de postgrado.

En 1998 se estableció el programa interinstitucional de postgrado con la Universidad Autónoma de Chiapas para impartir en el Instituto Tecnológico la Maestría en Biotecnología.

En el año 1999 se inició el programa de Maestría en Administración como respuesta a la demanda del sector industrial y de servicios de la región.

A partir de 2000 se abrió también la Especialización en Biotecnología Vegetal y un año después dio inicio el programa de Maestría en Ciencias en Ingeniería Bioquímica y la Licenciatura en Informática.

Misión

Formar de manera integral profesionistas de excelencia en el campo de la ciencia y la tecnología con actitud emprendedora, respeto al medio ambiente y apego a los valores éticos.

Visión

Ser una Institución de Excelencia en la Educación Superior Tecnológica del Sureste, comprometida con el desarrollo socioeconómico sustentable de la región.

Política de Calidad

“En el Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez estamos comprometidos con la formación de profesionales altamente capacitados en el campo de la ciencia y tecnología, garantizando su formación integral a través del desarrollo de competencias, bajo el cumplimiento de los requisitos de un Sistema de Gestión de la Calidad con la responsabilidad de mantener su eficacia y mejora continua”

Valores

- ✓ El ser humano.
- ✓ El espíritu de servicio.
- ✓ El liderazgo.
- ✓ El trabajo en equipo.
- ✓ La calidad.
- ✓ El alto desempeño.
- ✓ Respeto al medio ambiente.

Objetivo General de la Carrera de Ingeniería Química

Formar profesionistas en Ingeniería Química competentes para investigar, generar y aplicar el conocimiento científico y tecnológico, que le permita identificar y resolver problemas de diseño, operación, adaptación, optimización y administración en industrias químicas y de servicios, con calidad, seguridad, economía, usando racional y eficientemente los recursos naturales, conservando el medio ambiente, cumpliendo el código ético de la profesión y participando en el bienestar del país.

1.5 Descripción del Área en la que se Participó

Fui asignada en la División de Estudios de Posgrado e Investigación en el área de Investigación de Procesos Químicos con el profesor-investigador el Dr. Arnulfo Rosales Quintero.

A continuación, se describen las funciones principales que se llevan a cabo en dicho departamento:

En materia de planeación

- Coordinar las acciones para la detección de necesidades de estudios de posgrado relacionados con la educación superior tecnológica de la región.
- Proponer objetivos, metas y actividades en materia de docencia, investigación y vinculación con el sector productivo relacionadas con los posgrados y convenios de investigación para la integración del programa operativo anual de la Subdirección Académica.
- Determinar los recursos humanos, financieros, materiales y servicios requeridos para el logro de objetivos y metas del programa operativo anual de la división de estudios de posgrado e investigación.

- Coordinar la integración del programa operativo anual y del anteproyecto de presupuesto de la división y presentarlos al Subdirector Académico para lo conducente.
- Participar en las acciones de evaluación programática y presupuestal que se realicen en la división a su cargo.
- Participar en la integración de la estadística básica y los sistemas de información del Instituto Tecnológico.
- Elaborar propuestas para la ampliación y equipamiento de los espacios educativos a su cargo.
- Fungir como miembro del Consejo Editorial y de los comités de planeación y gestión tecnológica y vinculación.

En materia de Organización Escolar:

- Asignar al personal de la división de conformidad con la estructura orgánica y puestos autorizados.
- Participar en la integración del Comité Académico del Instituto Tecnológico de conformidad con los procedimientos establecidos, fungir como miembro del mismo y promover su funcionamiento.
- Participar en la integración de las academias de profesores del Instituto Tecnológico de acuerdo a los procedimientos establecidos.
- Verificar que las actividades de las áreas su cargo se realice de acuerdo con las normas, lineamientos y procedimientos establecidos.

En materia Académica:

- Elaborar e integrar en su caso, propuestas de planes y programas de estudio relacionados con los posgrados que se imparten en el Instituto Tecnológico y difundir los aprobados.
- Elaborar documentos técnicos que apoyen al docente en el desarrollo de tareas derivadas de la aplicación de planes de estudio, relacionados con los posgrados que se imparten en el Instituto Tecnológico.
- Coordinar la aplicación de los lineamientos técnico-metodológicos para el diseño y uso de apoyos didácticos y técnicos e instrumentos de evaluación del aprendizaje derivados de los planes de estudio de posgrado que se imparten en el Instituto Tecnológico.
- Solicitar a los jefes de los departamentos académicos el personal docente e investigadores que se requieren para integrar la plantilla de personal para dar atención a los estudios de posgrado que se ofrecen en el Instituto Tecnológico.
- Integrar las propuestas de convenios e intercambio académico de los departamentos académicos de la subdirección
- Coordinar acciones para la atención de las necesidades de superación y actualización del personal docente de los departamentos académicos.
- Integrar propuestas de material bibliográfico derivados de la producción académica de los departamentos y presentarlas al Subdirector Académico para su publicación.

- Verificar la utilización óptima de espacios educativos de conformidad con las normas y lineamientos establecidos.
- Proponer al Subdirector Académico, programas de becas para la superación académica de docentes de la división a su cargo.
- Participar en las acciones de evaluación de las actividades de docencia que se realicen en las coordinaciones a su cargo.
- Coordinar el desarrollo de programas de investigación educativa, así como el diseño y utilización de materiales y auxiliares didácticos requeridos para el desarrollo del proceso educativo.

En materia de Docencia:

- Ejercer la docencia frente a grupo en un mínimo de cuatro horas-semana-mes, en materias afines a su formación.

En materia de Administración de Recursos Humanos:

- Aplicar en la división de las disposiciones administrativas y reglamentarias que en materia de recursos humanos emita la Secretaría de Educación Pública.
- Asignar al personal de la división de conformidad con la estructura ocupacional y los perfiles de puestos autorizados.
- Proponer la selección y contratación del personal de la división al Subdirector Académico.
- Presentar al Subdirector Académico los movimientos e incidencias del personal adscrito a la división de conformidad con los procedimientos establecidos.
- Mantener actualizada la plantilla de personal de la división a su cargo y promover su actualización.
- Coordinar la realización de eventos de superación y actualización profesional para el personal docente y de investigación de la división a su cargo.
- Detectar las necesidades de capacitación y desarrollo del personal administrativo de la división a su cargo y presentarlas al Subdirector Académico para su atención.

En materia de Administración de Recursos Financieros:

- Participar en el ejercicio y control del presupuesto asignado a la división conforme a las normas, lineamientos y procedimientos establecidos.
- Solicitar al Subdirector Académico, viáticos y pasajes para el personal de la división cuando éstos sean requeridos, de conformidad con los procedimientos establecidos.
- Presentar al Subdirector Académico la documentación comprobatoria del gasto de viáticos asignados para el personal de la división de acuerdo con los procedimientos establecidos.

En materia de Administración de Recursos Materiales y Servicios:

- Participar en el control de bienes muebles e inmuebles asignados a la división a su cargo, de conformidad con los procedimientos establecidos.
- Presentar al Subdirector Académico las solicitudes de construcción y equipamiento de instalaciones para su autorización y trámite correspondientes.
- Otorgar visto bueno a las solicitudes de material requerido por el personal adscrito a la división.
- Proponer al Subdirector Académico la adquisición de bienes muebles, materiales y equipo que se requieran en las áreas de la división.

1.6 Funciones y Ubicación del Residente

La función que realicé durante la instancia fue de elaborar un manual integral de procesos químicos que pudiese ser utilizado por los estudiantes de la carrera de Ingeniería Química en diversas asignaturas, en especial para las asignaturas de Síntesis y Optimización de Procesos y Simulación de Procesos.

Dicho manual, a petición del asesor, tenía que cumplir con 3 características básicas: enseñar al alumno a utilizar HYSYS, describir diversos procesos químicos de la industria y aplicar el software para dichos procesos. Para su realización se recurrió a la recopilación y búsqueda de información necesaria como las características de cada proceso, sus propiedades termoquímicas y las configuraciones de planta posibles a utilizar para cada uno de los casos de estudio, entre otros.

Me encargué de formular los problemas para los casos de estudio de acuerdo a las propiedades termodinámicas del proceso encontradas en la bibliografía y aplicar las configuraciones de planta a cada uno de ellos, adaptándolas al entorno de la simulación.

Realicé las simulaciones en HYSYS de cada proceso con sus diferentes configuraciones de planta y verifiqué que las mismas no tuviesen incongruencias en las propiedades físicas y químicas, así como también, di solución a los problemas de convergencia que se presentaron.

Se trabajó en las instalaciones de cómputo dónde se encontraba instalado el software (HYSYS) en el departamento de División de Estudios de Posgrado e Investigación en la planta alta del edificio Z del instituto.

Capítulo 2. Problemas a Resolver

En la actualidad el manejo de softwares especializados para la simulación de procesos químicos está limitado a un sector bilingüe, lo que constituye una barrera para la formación académica. La preocupación por mejorar la enseñanza y el conocimiento nos obliga a reflexionar acerca de la necesidad del correcto manejo de estos softwares. Desafortunadamente las investigaciones que existen al respecto son poco difundidas y no existe una doctrina hacia la práctica del docente. Por ello este trabajo propone nuevas alternativas de enseñanza-aprendizaje bajo una línea constructiva donde maestro y alumno dialogan e interactúan para integrar sus conocimientos.

Una gran cantidad de estudiantes que hacen uso de los softwares especializados para la simulación de procesos químicos tienen problemas en el manejo de los mismos, debido a la complejidad de dicho software y que no hay una guía generalizada en español para el correcto manejo del mismo. Es por ello que se considera necesario crear un marco de referencia que sirva como guía, tanto para los alumnos como para los profesores que imparten la carrera de Ingeniería Química.

El desarrollo de este trabajo nos permitirá aplicar los conocimientos adquiridos en las asignaturas previas a Simulación de Procesos y Síntesis y Optimización de Procesos (Termodinámica, Balance de Materia y Energía, Mecanismos de Transferencia, Balance de Momentum, Calor y Masa, Procesos de Separación, Físicoquímica, Reactores Químicos, Ingeniería de Proyectos e Ingeniería de Costos), experimentando diversas simulaciones de procesos químicos que son aplicados en la industria y que podrían suponer un reto a lo largo de la carrera e incluso en la vida laboral del estudiante.

En la actualidad en el Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez se necesita acercar a sus estudiantes a extender su visión y conceptualizar la gran variedad de procesos químicos que existen en la industria, para así motivar al alumno de la carrera de Ingeniería Química a generar nuevas ideas de investigación, debido a que existen una variedad de ofertas de trabajo que no son aprovechadas porque los egresados optan por elegir solamente la opción que está actualmente saturada.

Capítulo 3. Objetivos

3.1. Objetivo General

- ✓ Implementar diversos procesos químicos que tengan las secuencias básicas de los procesos industriales, reactores, separación, recirculación e integración de calor, en un simulador especializado (HYSYS).

3.2. Objetivos Específicos

- ✓ Investigar e implementar el proceso de producción de Acrilonitrilo.
- ✓ Investigar e implementar el proceso de producción de Acroleína.
- ✓ Investigar e implementar el proceso de producción de Amoniaco.
- ✓ Investigar e implementar el proceso de producción de Anhídrido Maleico.
- ✓ Investigar e implementar el proceso de producción de Anhídrido Ftálico.
- ✓ Investigar e implementar los procesos de los ciclos termodinámicos Rankine, Brayton y Refrigeración.
- ✓ Investigar e implementar el proceso de producción de Ciclohexano.
- ✓ Investigar e implementar el proceso Fischer Tropsch.

Capítulo 4. Justificación

La elaboración de un manual integral de procesos químicos asistido por computadora, nos permitirá integrar los conocimientos de los docentes expertos en el tema en una guía generalizada que sirva de apoyo para el aprendizaje de los alumnos de la carrera de Ingeniería Química en el Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez.

Este proyecto es significativo puesto que la implementación de cada uno de los procesos requiere del conocimiento previo de las condiciones de operación de los reactores y operaciones unitarias, además requiere de conocimientos de balance de materia y energía, transferencia de calor, procesos de separación I y II, fisicoquímica I y II, reactores químicos, ingeniería de proyectos e ingeniería de costos, por lo que es un proyecto integral puesto que involucra muchas áreas de la ingeniería química aplicadas a procesos químicos.

Los resultados de este proyecto pueden ser utilizados para entrenamiento de los alumnos y profesores del área de ingeniería química, así mismo, dado que son casos de estudio, pueden ser utilizados como primer paso para su extrapolación a procesos industriales existentes.

También es importante dar a conocer a los estudiantes de la carrera de Ingeniería Química la versatilidad de los diferentes procesos químicos y sus diferentes formas de simulación en software especializado (HYSYS). Así como también, generar interés por la investigación detallada de cada uno de los procesos mostrados.

Así mismo en el ITTG no se tiene un reporte de un manual de estas características para el área de ingeniería de procesos químicos, por lo que el manual realizado se consideraría un primer aporte para el desarrollo de esta área.

Se espera que con el desarrollo de dicho manual el alumno de la carrera de Ingeniería Química adquiera un mejor desempeño académico en las asignaturas de Síntesis y Optimización de Procesos y Simulación de Procesos.

Capítulo 5. Marco Teórico

5.1 Generalidades de los Simuladores

Actualmente en la industria de procesos químicos y petroleras se requiere del uso creciente de computadoras electrónicas para la solución de ecuaciones matemáticas complejas para el diseño y operación de procesos (Moncada). El Ingeniero Químico presta sus servicios profesionales a estas dos grandes áreas de la industria y por ello existe la necesidad de herramientas de software que satisfagan esta problemática.

La simulación de procesos químicos es una tarea del Ingeniero Químico que se ha llevado a cabo a lo largo de los años y que con ayuda del gran avance tecnológico es posible disminuir los tiempos de cálculos complejos que ésta requiere, es decir, aquellas ecuaciones tediosas que se resolvían de manera manual ahora con el uso de los softwares especializados solo requieren de insertar las variables independientes y esperar unos segundos para encontrar la solución.

La simulación de procesos químicos está ampliamente relacionada con el cálculo de balances de materia, energía y cantidad de movimiento, de un proceso del cual se conoce su estructura y los datos preliminares de los equipos que lo conforman (Scenna, 1999).

Con la finalidad de poder adentrarnos un poco más acerca de la simulación de procesos en la Ingeniería Química es necesario recurrir a la historia de la simulación, entender su definición y conocer más a fondo las diversas áreas que la componen.

Las primeras simulaciones que realizó el ser humano fueron hechas en circuitos analógicos, debido a que la teoría de sistemas menciona que diversos principios físicos tienen asociados modelos matemáticos equivalentes, es decir, que algunos circuitos hidráulicos, eléctricos, de transferencia de materia, energía o cantidad de movimiento pueden ser descritos y analizados por el mismo conjunto de ecuaciones diferenciales; con ello haciendo posible el estudio de las variables equivalentes del proceso químico con el circuito eléctrico (Scenna, 1999).

A partir del desarrollo y uso masivo de la tecnología en todas las áreas de la ingeniería se hace la transición de la era analógica a la digital. La sustitución de las señales analógicas por digitales es considerada como el impacto más significativo de las últimas décadas. La señal digital en comparación con la analógica se presta a ser comprimida, procesada con tecnologías informáticas y almacenada (Hernández).

Es importante mencionar que el desarrollo de la tecnología genera consecuencias importantes en el diseño y creación de los simuladores para procesos químicos, pues para simular es necesario el uso de computadoras electrónicas.

En 1946 se desarrolló la primer computadora electrónica operativa ENIAC y en 1951 se presentó la primera computadora comercial (Scenna, 1999). Tiempo más tarde en la década de los 70's aparecen los primeros microprocesadores que dan paso a la masificación de las computadoras personales, permitiendo que la información y el manejo de programas ingenieriles estuviera al alcance de profesores y alumnos.

En la actualidad existen una variedad extensa de computadoras diseñadas en base a las diferentes necesidades del usuario, trabajo o actividad que se requiera desempeñar. Como ejemplo de ello se tienen las supercomputadoras, los servidores, las estaciones de trabajo, los sistemas multimedia, etcétera (Salas, 2014).

Como consecuencia de estos sucesos se empieza a cubrir la brecha entre los métodos pre-computadora y los algoritmos numéricos programados aplicados a la Ingeniería Química. En el año 1974 aparece el primer simulador de procesos químicos “FLOWTRAN”. A partir de este simulador se empiezan a desarrollar un gran número de nuevos y eficientes simuladores comerciales como son: SPEED UP, ASPEN PLUS, PRO II, HYSYM, HYSYS, CHEMCAD, y otros (Scenna, 1999).

En el siguiente apartado se describirá de manera breve la clasificación de los diferentes métodos de simulación utilizados con más frecuencia en la industria, así como también se mencionarán los conceptos principales de simulación, modelo matemático y soluciones analíticas.

5.1.1 Clasificación De Los Métodos De Simulación

Según el diccionario de la Real Academia Española la acción de simular significa representar algo. Entonces se puede considerar a la tarea de simular como aquella en la que introducimos ciertos valores de entrada al simulador o programa para obtener ciertos resultados de salida, tales que estiman el comportamiento del sistema real bajo esas condiciones (Scenna, 1999).

En las simulaciones el proceso que se desea estudiar se le denomina sistema y de manera de poder estudiarlo científicamente se hacen ciertas suposiciones acerca de cómo funciona para facilitar la simulación (Law & Kelton, 1991). Estas suposiciones que en su gran mayoría tienen una forma matemática conforman los modelos.

Si los modelos matemáticos son sencillos de calcular se utilizan las técnicas y métodos usuales para llegar a la estimación exacta, a este tipo de soluciones se les denomina soluciones analíticas (Scenna, 1999). Sin embargo, la mayoría de los procesos en la vida real están compuestos por modelos matemáticos sumamente complejos, por ello se recurre a la simulación de procesos con softwares especializados para poder evaluar el modelo matemático numéricamente de los respectivos equipos que conforman la planta, cuyos resultados obtenidos se utilizarán para estimar las características reales del modelo.

Una de las aplicaciones más importantes de la simulación de procesos químicos, es que sirve para determinar si es económicamente factible y productivo construir una planta de procesamiento y/o expandir una ya existente. Además, es ampliamente utilizada para la investigación de las operaciones y ciencia de gestión (Scenna, 1999).

Las herramientas de simulación se pueden clasificar en base a diferentes criterios:

- Dependiendo del tipo de proceso: Batch o Continuo
- Si involucra el tiempo: Estacionario o Dinámico
- Si maneja variables: estocásticas o determinísticas y/o variables cuantitativas o cualitativas.

A continuación, se expone una breve descripción general de las características de los distintos tipos de herramientas de simulación generalmente utilizadas.

- **Simulación Cualitativa:** Tiene como objeto el estudio de las relaciones casuales y las tendencias temporales cualitativas de un sistema. Se trabaja con valores +, - y 0. Y es aplicable para análisis de tendencias, supervisión y diagnóstico de fallas, análisis e interpretación de alarmas, etc.
- **Simulación Cuantitativa:** Describe numéricamente el comportamiento de un proceso, a través de un modelo matemático del mismo. Para ello se procede a la resolución de balances de materia, energía y cantidad de movimiento. Es aplicable para la simulación en estado estacionario y en estado dinámico.
- **Simulación en Estado Estacionario:** Implica resolver los balances de un sistema no involucrando la variable temporal (tiempo), por lo que el sistema de ecuaciones busca reflejar en el modelo las variables de interés con las coordenadas espaciales.
- **Simulación en Estado No Estacionario (Dinámico):** Plantea los balances en su dependencia con el tiempo, ya sea para representar el comportamiento en equipos batch, o bien para analizar la evolución que se manifiesta entre dos estados estacionarios para un equipo o planta completa. En este caso el modelo matemático estará constituido por una serie de ecuaciones diferenciales ordinarias cuya variable diferencial es el tiempo.
- **Modelo Determinístico:** En este modelo las ecuaciones serán dependientes de parámetros y variables conocidas con certeza de un estado inicial, es decir no existe incertidumbre ni leyes de probabilidades asociadas a la misma.
- **Modelo Estocástico:** En este modelo ciertas variables estará sujetas a incertidumbre, que podrán ser expresadas por funciones de distribución de probabilidad.
- **Simulación de Eventos Discretos:** Se refiere a las variables de interés que no tienen un comportamiento continuo, es decir, que las variables de estado cambian instantáneamente en puntos separados en el tiempo, se vuelven eventos únicos (Law & Kelton, 1991).
- **Simulación de Eventos Continuos:** Se refiere a las variables de estado que cambian continuamente con respecto al tiempo.

En el siguiente apartado se describirán las principales características de un simulador apto para la simulación de procesos químicos, es importante mencionar que su descripción y clasificación se hará de manera generalizada sin destacar de manera específica cada uno de los simuladores anteriormente mencionados.

5.1.2 Clasificación de los Simuladores de Procesos Químicos

Existen diferentes softwares de simulación de procesos químicos, una de las diferencias más importantes entre ellos es si el simulador está diseñado para estimar los valores numéricos de un equipo de proceso en específico (bombas, compresores, mezcladores, etc.) o para la estimación de los valores correspondientes al conjunto de equipos de proceso que conforman la planta. Si bien se sabe no es lo mismo simular un solo equipo de proceso que el conjunto de equipos interconectados de una planta química.

Con base en esta visión los simuladores de procesos se dividen en los siguientes tipos según la filosofía en la que se plantean los modelos matemáticos que representan el proceso:

- **Simuladores Globales u Orientados a Ecuaciones:**

En este tipo de simuladores se plantea el modelo matemático que representa a todo el proceso de la planta o un conjunto de ella como un gran sistema de ecuaciones algebraicas, es decir, los equipos que conforman el proceso no se estudian o plantean de manera individual. Por lo general las ecuaciones son no lineales y la velocidad de convergencia es mayor en comparación con los otros tipos de simuladores, debido a la complejidad de los sistemas de ecuaciones. Sin embargo, este tipo de simuladores pierden su confiabilidad cuando aumenta la complejidad de las ecuaciones algebraicas. Además, para la estimación de los valores de grandes sistemas es necesario inicializar con valores cercanos a la solución del sistema.

- **Simuladores Secuenciales Modulares:**

Estos simuladores se basan en módulos de simulación independientes que siguen aproximadamente la misma filosofía de las operaciones unitarias, es decir, cada equipo es modelado de manera específica. Tiene la ventaja de que el sentido de la información coincide con el flujo “físico” de la planta. Cada sistema de ecuaciones es resuelto con una metodología que resulta adecuada para el mismo, ya que es posible analizar bajo todas las circunstancias posibles el comportamiento del método de resolución propuesto. Para encarar la solución de los sistemas de ecuaciones deben de identificarse claramente los valores conocidos y los que se desean conocer, teniendo en cuenta los grados de libertad con la finalidad de obtener un sistema de solución única.

Es importante mencionar que este tipo de simuladores son los más usados por ingenieros no especialistas en simulación por su facilidad de comprensión y de manejo de la información, ya que es más fácil checar e interpretar los parámetros que se ingresan. Sin embargo, es un modelo poco versátil debido a los problemas que se originan entre la conexión entre módulos independientes.

- **Simuladores Híbridos o Modular Secuencial-Simultáneo:**

Es posible plantear el desarrollo de un simulador combinado que aproveche las ventajas de las dos filosofías anteriormente descritas, de tal forma que se seleccionen las variables que se deseen calcular simultáneamente (simulador global), mientras que el resto de variables se resuelvan de manera independiente (simulador modular).

En conclusión, a pesar del planteamiento de los tres modelos de simuladores, debido al deficiente desarrollo de hardware y software capaz procesar grandes cantidades de variables para la resolución de problemas de ecuaciones de gran dimensión, se ha optado por desarrollar simuladores comerciales con sistemas modulares.

Para el presente proyecto se hará uso del software especializado ASPEN HYSYS, que corresponde a un simulador modular, en el cual se estimarán los modelos matemáticos correspondientes a cada proceso químico estudiado. En el siguiente apartado se mencionarán las características generales de este software.

5.2 Generalidades del HYSYS

El software de simulación HYSYS es un programa diseñado por la compañía AspenTech que permite modelar, simular y diseñar procesos químicos tanto en estado estacionario como en estado transitorio (AspenTech, 2018). Por diseñar se hace referencia a que la herramienta puede emplearse para probar varias configuraciones del sistema para optimizarlo, ya que los parámetros de diseño como el número de tubos de un intercambiador de calor, diámetro de carcasa y número de platos de una columna de destilación no pueden ser calculados por HYSYS.

Es importante recalcar que HYSYS es una herramienta para simular un sistema previamente descrito con anterioridad, es decir, HYSYS simula y el Ingeniero Químico diseña (Moncada Albitres). Por ello todos los ejemplos descritos en el presente documento son obtenidos de investigaciones previas de cada proceso químico.

HYSYS posee las herramientas necesarias para estimar propiedades físicas, balances de materia y energía, equilibrio líquido-vapor y la simulación de variados equipos utilizados en la Ingeniería Química, como evaporadores, columnas de destilación, intercambiadores de calor, compresores, bombas, reactores químicos, turbinas, separadores, tuberías, válvulas de bloqueo y control, columnas de extracción, etcétera (Universidad Central de Ecuador, 2018).

Algunas de las ventajas más importantes que nos proporciona este software se enlistan a continuación:

- ✓ Proporciona una visión amplia para examinar distintas configuraciones de una planta.
- ✓ Reduce los tiempos de diseño y de estimación de parámetros.
- ✓ Estima los parámetros óptimos del proceso.

Capítulo 6. Procedimiento y Descripción de las Actividades Realizadas

Las actividades realizadas durante la práctica profesional fueron con base al desarrollo de un manual de procesos químicos, enfocado de manera especial a las asignaturas de Simulación de Procesos y Síntesis y Optimización de Procesos de la carrera de Ingeniería Química. A continuación, se mencionan las actividades realizadas para el desarrollo de dicho manual.

Primero se realizó una búsqueda de información en diversos medios bibliográficos, en su mayoría de lengua inglesa, como son libros, artículos, revistas, manuales y medios electrónicos. Seguidamente, se mencionan las actividades específicas correspondientes a la búsqueda de información:

- ✓ **Guía de uso de HYSYS:** Se indagó en diversos manuales del software, videos y páginas web relacionadas al tema para realizar un apartado dedicado al alumno de Ingeniería Química dónde se expusieron las instrucciones, con su correspondiente captura de pantalla, para inicializar el software y posteriormente explicar de manera breve, sencilla y ejemplificada el proceso con el que se realizan las simulaciones, desde el ingreso de los compuestos del proceso, selección de los métodos termodinámicos y adicción de las reacciones químicas hasta la introducción de los equipos de proceso utilizados en las simulaciones como son bombas, compresores, columnas de destilación fraccionada, separadores flash, reactores de conversión, divisores y purga, intercambiadores de calor, válvulas y recirculación.
- ✓ **Propiedades físicas y termoquímicas de los productos de cada proceso:** Se buscó en diversas fuentes las propiedades que caracterizan a cada uno de los productos de cada proceso de estudio como son densidad, masa molar, punto de fusión, punto de ebullición, temperatura crítica, presión crítica, factor acéntrico y calores de formación en fase gaseosa y/o líquida cuando el proceso así lo requiera.
- ✓ **Importancia económica de cada proceso a nivel nacional y/o internacional:** Se investigó el impacto económico que tiene cada proceso incluyendo demanda y/o consumo y su relevancia en la economía mundial, haciendo hincapié en los países con mayor oferta de los mismos.
- ✓ **Costos de las materias primas y productos de cada proceso:** Se indagó una aproximación de los precios de la materia prima o materias primas y productos de cada proceso de acuerdo a los valores cotizados en el mercado actual.
- ✓ **Aplicaciones de los productos de cada proceso:** Se buscó información sobre la aplicación y uso de cada producto desde su uso doméstico y comercial hasta usos industriales y/o aplicaciones como subproductos en la producción de otros compuestos químicos.

- ✓ **Descripción general de cada proceso de estudio:** Se incluyó una breve descripción de los equipos que conforman la planta de proceso, su secuencia y/o configuración de planta habitual, reacciones químicas involucradas, capacidad de la planta, propiedades termodinámicas del proceso como son: temperaturas de reacción, conversión de reacción y/o reacciones secundarias, composiciones de entrada y salida del proceso, presiones de proceso, etc. Cabe mencionar que el contenido en cada proceso de estudio varía dependiendo del tipo de proceso y de la información obtenida de las fuentes de información.

Posteriormente y en base a la información obtenida y las propiedades termodinámicas del proceso se procedió a plantear las configuraciones de los casos de estudio para cada proceso. Entre las configuraciones utilizadas destacan:

Procesos con inter-enfriamiento: Se refiere a la configuración de proceso en la cual se mezcla una corriente fría a la salida de los reactores con reacción exotérmica para enfriar la mezcla y evitar gastar energía en un intercambiador de calor que cumpla con dicha función de enfriamiento. De esta manera además de ahorrar energía se consigue un mayor enriquecimiento en la corriente y por lo tanto una mayor conversión de reactivo.

Procesos con regeneración de calor: Se refiere a la configuración de proceso en la cual se reutiliza la corriente caliente que sale del reactor para pre-calentar la mezcla de reactivo de entrada del mismo. La ventaja de este tipo de configuración de proceso es que reutiliza la energía generada en el reactor disminuyendo el requerimiento energético para los procesos de calentamiento.

Procesos con recirculación de corrientes: Se refiere a la configuración de proceso en la que se recicla un porcentaje, generalmente del 95%, de la corriente de salida (producto) siendo conectada de manera estratégica a las etapas iniciales del proceso. Una de los beneficios de las recirculaciones es que enriquecen la mezcla de reactivo para desplazar el equilibrio químico de tal manera que el porcentaje de conversión sea mayor.

Estas tres últimas configuraciones mencionadas fueron las más utilizadas en cada proceso, sin embargo, en casos especiales y por la complejidad del proceso se utilizaron las configuraciones de planta encontradas en la bibliografía, ejemplo de ello son la producción de ciclohexano, los ciclos termodinámicos y el proceso Fischer Tropsch.

Posteriormente se procedió a simular cada caso de estudio en el software especializado (Aspen HYSYS) dónde se estimaron los balances de materia y energía, las composiciones de cada corriente, su temperatura, estado y presión.

Capítulo 7. Introducción al Aspen HYSYS

En este capítulo se explicará de manera breve, clara y ejemplificada los pasos a seguir para inicializar el software Aspen HYSYS desde una computadora personal con Windows 7. Además se enlistan los pasos para preparar el entorno de la simulación (selección de compuestos, selección del método termodinámico e ingreso de reacciones químicas) y las instrucciones para aprender a ingresar al simulador todos los equipos utilizados para el desarrollo del manual como son intercambiadores de calor, reactores de conversión, separadores flash, bombas, compresores y válvulas, así como también se muestran las instrucciones para ingresar recirculaciones, divisores de flujo y purga.

7.1 Pantalla Inicial de HYSYS

Primero debemos identificar la ruta en la que se encuentra el programa después de su instalación, cabe aclarar que el sistema operativo utilizado fue Windows 7:

1. Seleccionar el menú Inicio.
2. Seleccionar Todos los Programas.
3. Abrir la carpeta **AspenTech**.

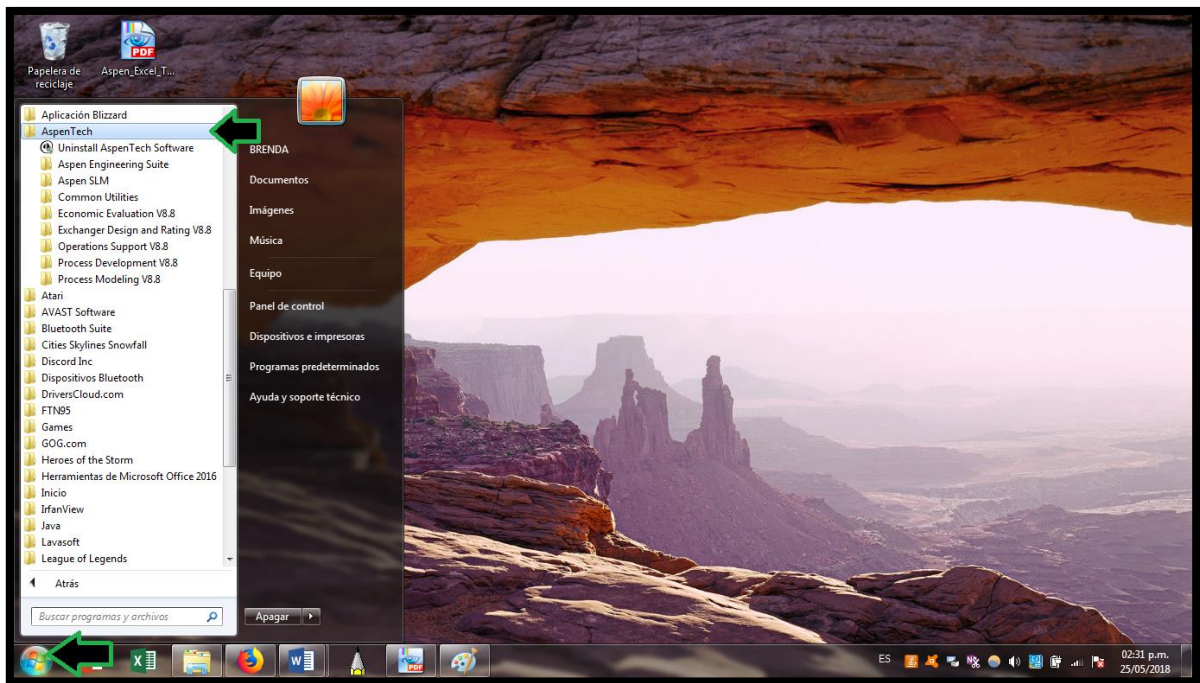


Figura 7. 1 Pantalla de Escritorio.

4. Abrir la carpeta **Process Modeling V8.8**.
5. Abrir la carpeta **Aspen HYSYS**.
6. Seleccionar el programa **Aspen HYSYS V8.8**.



Figura 7. 2 Ubicación del programa Aspen HYSYS.

La pantalla principal del programa Aspen HYSYS se visualizará de la siguiente forma:

7. Seleccionar la pestaña **New** para iniciar un caso nuevo.

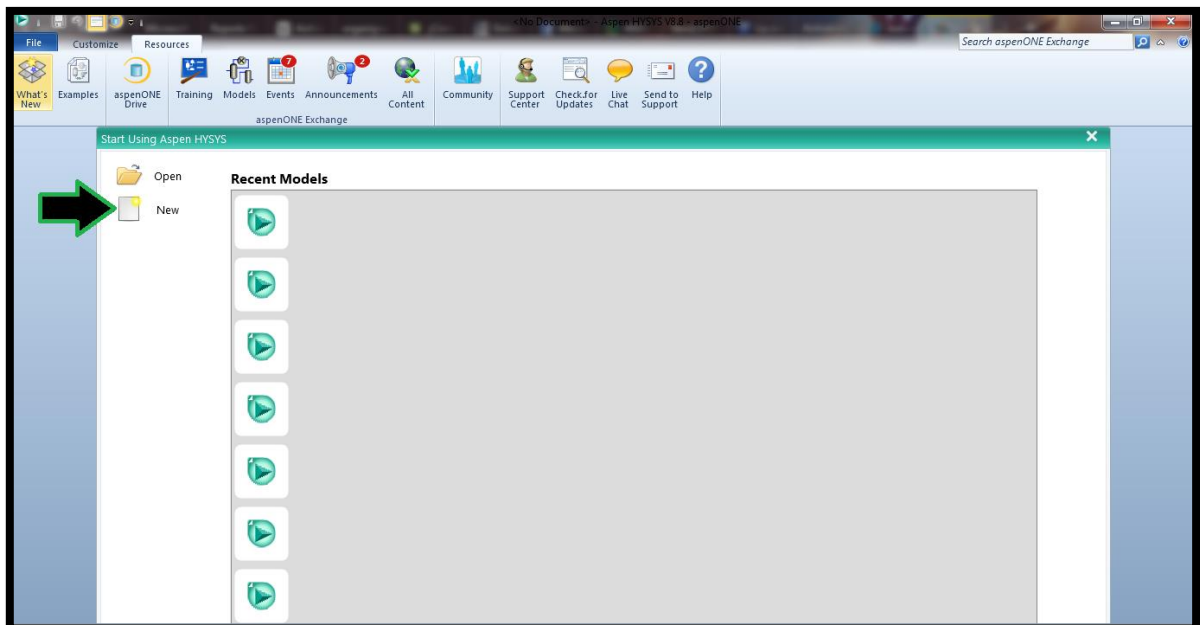


Figura 7. 3 Inicialización de Aspen HYSYS.

A continuación, se presenta la pantalla de propiedades donde se insertarán los componentes del proceso a estudiar, se elegirá el paquete termodinámico y se anexarán las reacciones existentes en el proceso:

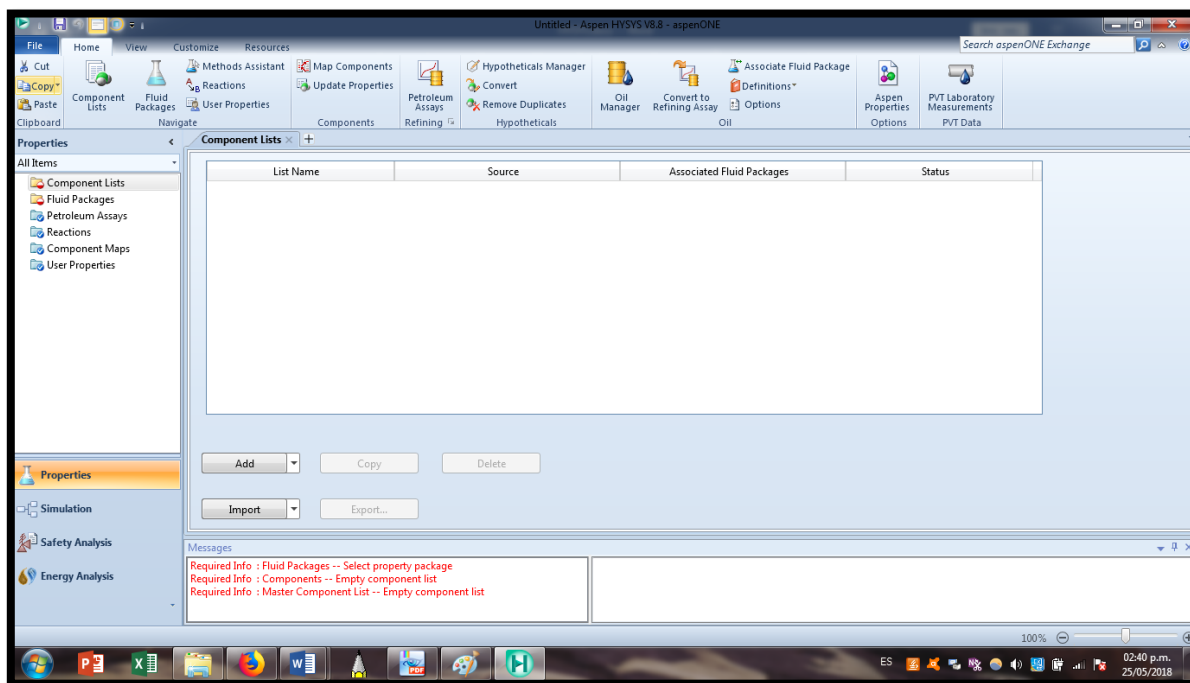


Figura 7. 4 Entorno de trabajo de Aspen HYSYS.

7.1.1 Agregar Compuestos a la Simulación

Para agregar los diferentes compuestos químicos que se manejan en el proceso al entorno de la simulación se seguirán los siguientes pasos:

1. Seleccionar la pestaña **Component List**.
2. Seleccionar el botón **Add**.

Se abrirá otra pestaña automáticamente y en la parte izquierda de esta misma se buscará el nombre de los compuestos requeridos en el proceso en la pestaña **Search for**, cabe recordar que debido a que el programa está en idioma inglés debe buscarse el nombre del compuesto en el mismo idioma.

Como ejemplificación de lo antes mencionado se presenta la figura 5 dónde se busca el compuesto metano, que en su idioma inglés se escribe como methane:

Elaboración de un Manual Integral de Procesos Químicos Asistido por Computadora

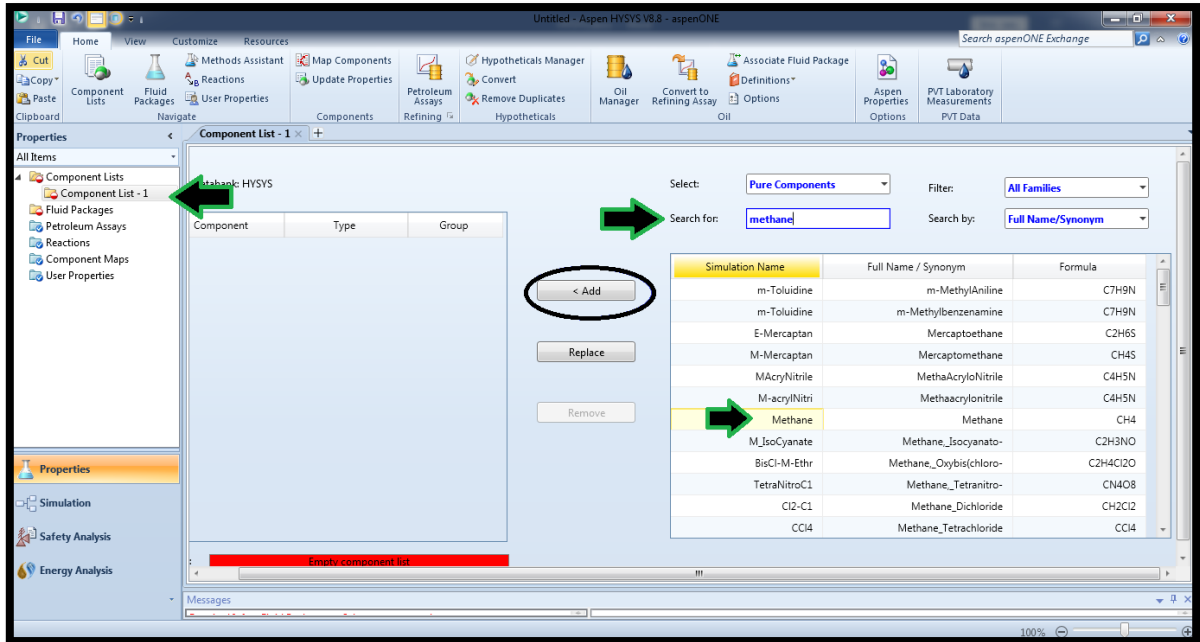


Figura 7. 5 Selección de los compuestos en Aspen HYSYS.

Para agregar los compuestos al entorno de la simulación se debe seleccionar dos veces (doble click) sobre el compuesto deseado o también se puede seleccionar el compuesto en la tabla (un solo click) y posteriormente seleccionar la pestaña **Add**. Seguidamente el compuesto seleccionado aparecerá en la lista del lado derecho como se muestra a continuación:

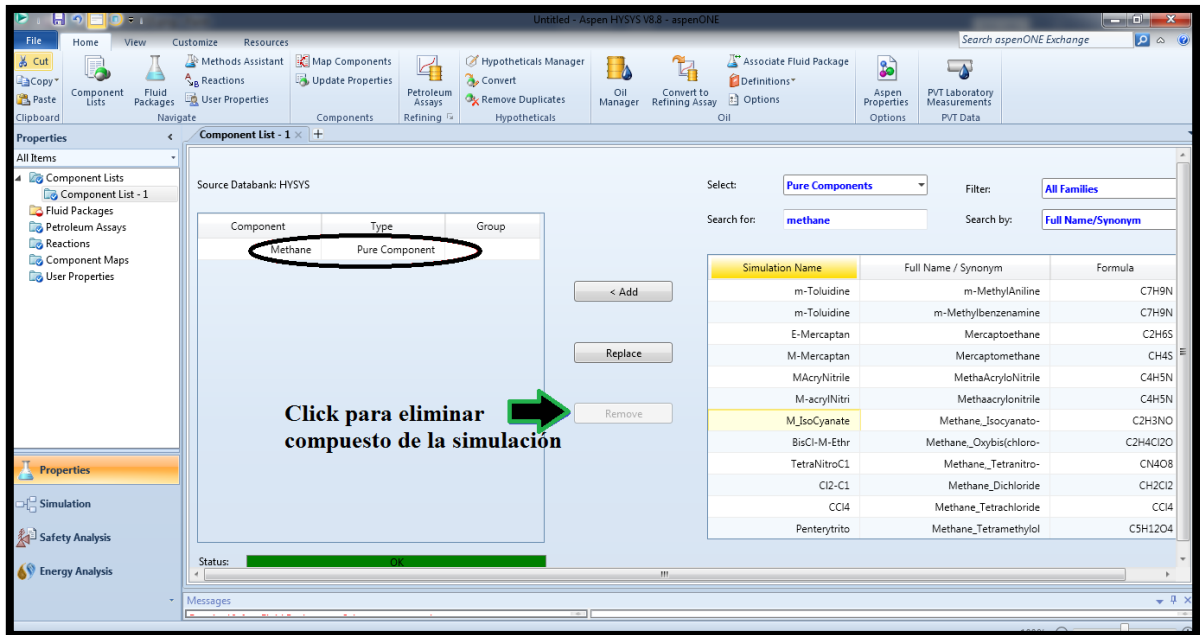


Figura 7. 6 Agregar y eliminar compuestos al simulador.

Si se requiere eliminar el compuesto de la simulación es necesario seleccionar el compuesto y posteriormente seleccionar el botón **Remove**.

Se recomienda prestar atención en las fórmulas químicas y números de CAS de los componentes que se agreguen al simulador para evitar equivocaciones.

Otra manera similar de buscar los componentes es seleccionar en la pestaña **Search by** y cambiar las opciones por **Full name/Synonym**, para buscarlos por su nombre completo, o **Formula**, para buscarlos por medio de su fórmula química.

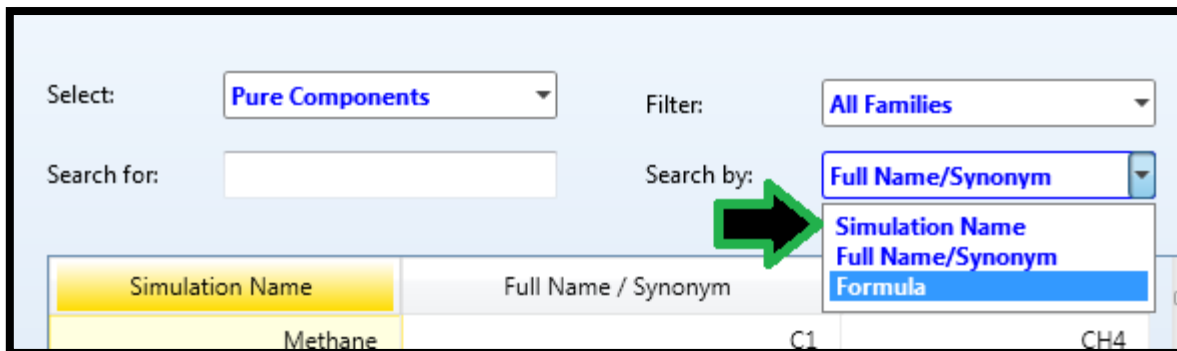


Figura 7. 7 Filtro por formula química o nombre para búsqueda de compuestos.

También si se requiere ser más específicos se puede seleccionar la pestaña **Filter** y elegir la familia a la que correspondan los compuestos deseados (hidrocarburos, sólidos, aminas, aldehídos, etc.).

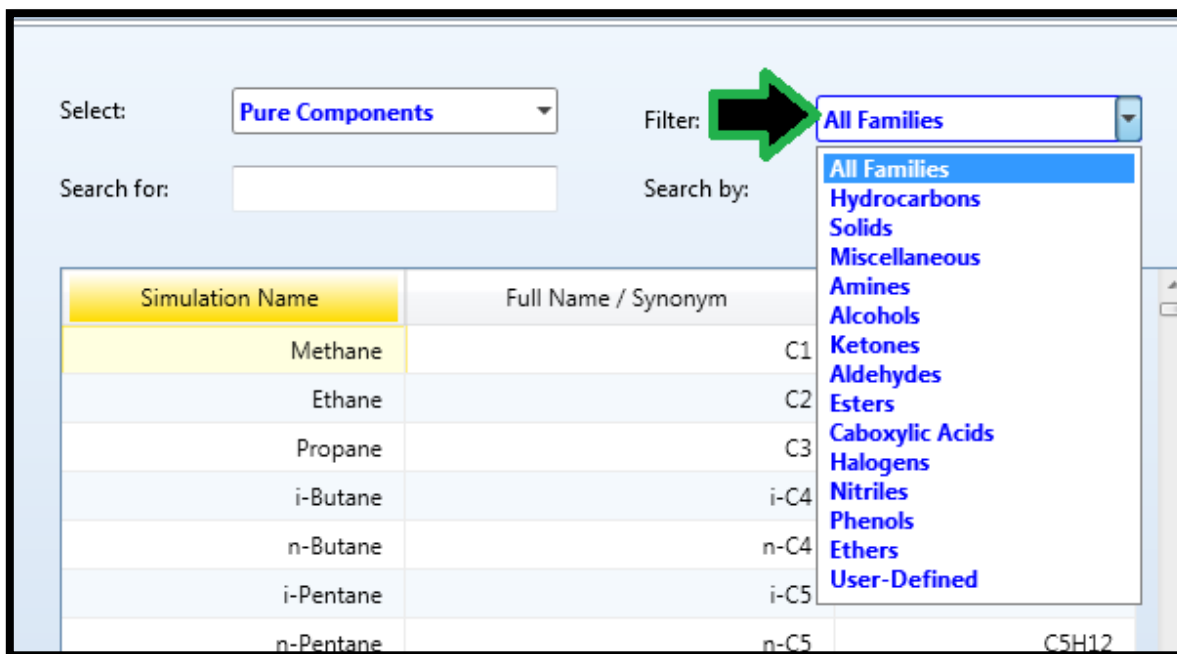


Figura 7. 8 Filtro por familias para la búsqueda de compuestos.

7.1.2 Métodos Termodinámicos

Los métodos termodinámicos son modelos matemáticos que ayudan a predecir las propiedades físicas y de transporte de un componente puro o una mezcla, dependiendo del tipo de componentes y operaciones unitarias que tenga el proceso dependerá la elección del método termodinámico. Para tener un panorama general de las propiedades físicas que puede calcular Aspen HYSYS se mencionan algunos ejemplos como:

- **Propiedades de transporte:** coeficiente de difusión, conductividad térmica, viscosidad.
- **Propiedades termodinámicas:** entalpia, entropía, coeficientes de fugacidad, energía libre de Gibbs.
- **Reacciones moleculares y datos de cinética:** velocidad de reacción, energías de activación, mecanismos de reacción.

Además, cuenta con más de 30 modelos termodinámicos. A continuación, se muestra un resumen de los modelos más importantes que contiene el software:

- ✓ **Ecuación de Estado**
 - Peng Robinson (PR)
 - Soave-Redlich-Kwong (SRK)
 - Lee Kesler Plocker (LKP)
 - Peng-Robinson Stryjek-Vera (PRSV)
 - Zudkevitch Joffee (ZJ)
 - Kabadi Danner (KD)
- ✓ **Modelos de Coeficiente de Actividad**
 - Margules
 - Van Laar
 - Wilson
 - Ley de Henry
 - NRTL (Non-Random-Two-Liquid)
 - UNIQUAC (Universal QUAsi Chemical)
- ✓ **Modelos semi empíricos**
 - Chao-Seader (CS)
 - Grayson-Streed (GS)
- ✓ **Modelos de presión de vapor**
 - Modelo modificado de Antoine
 - Modelo Braun K10
 - Modelo Esso K
- ✓ **Modelos especiales**
 - Glycol Package
 - Amines Gas
 - Steam Tables

Elaboración de un Manual Integral de Procesos Químicos Asistido por Computadora

Una vez determinado el modelo termodinámico que mejor se adapta al proceso de estudio se procede a seleccionarlo en el menú **Fluid Package** y posteriormente se selecciona la pestaña **Add**, como se muestra a continuación:

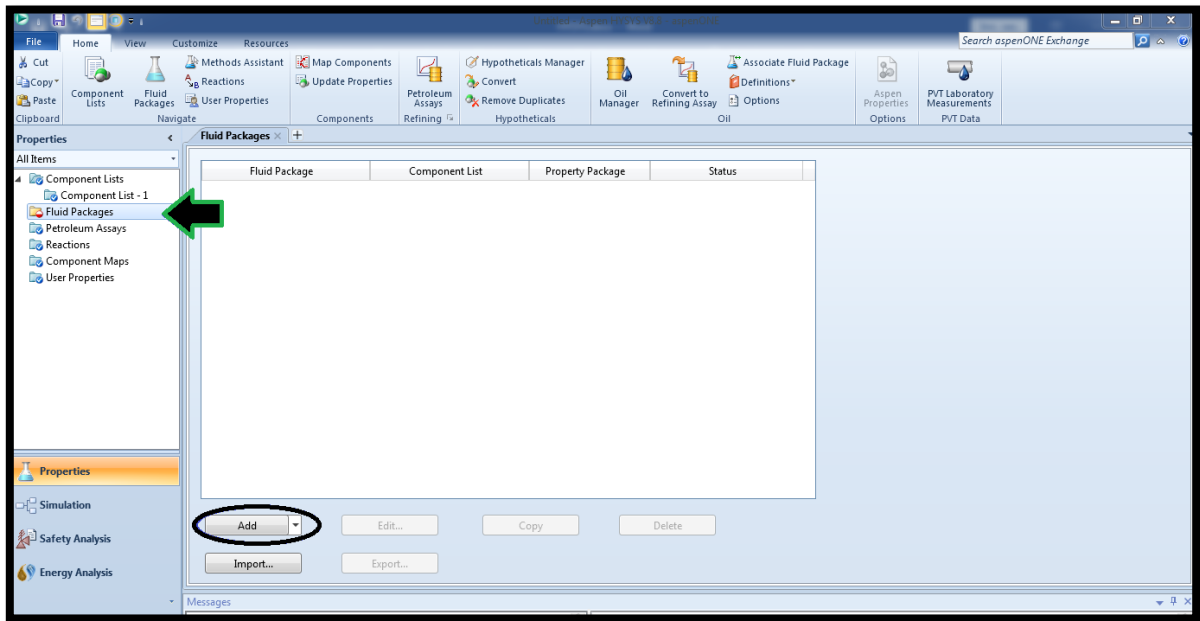


Figura 7. 9 Inserción del método termodinámico.

Seguidamente se desplegará una lista de todos los paquetes termodinámicos disponibles llamada **Property Package Selection**, en la cual se seleccionará el paquete termodinámico deseado:

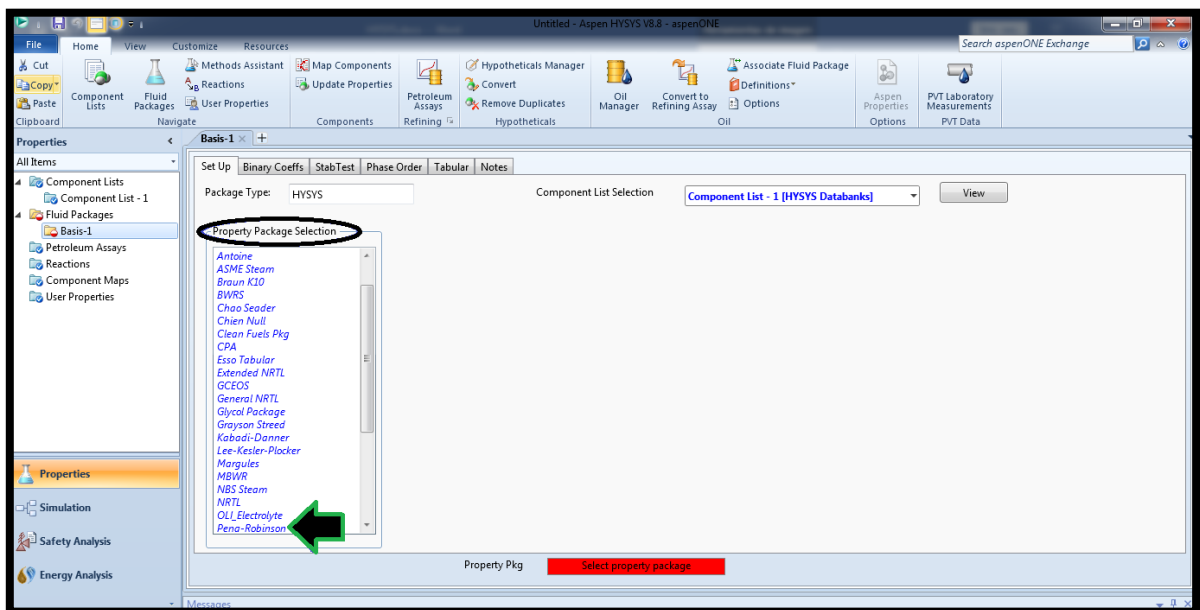


Figura 7. 10 Selección del método termodinámico.

Ahora bien, HYSYS cuenta con un asistente computarizado que nos ayuda a elegir el método termodinámico adecuado, este asistente se encuentra en la pestaña **Home** en el grupo **Navigate**, seguidamente se selecciona el botón **Methods Assistant**.

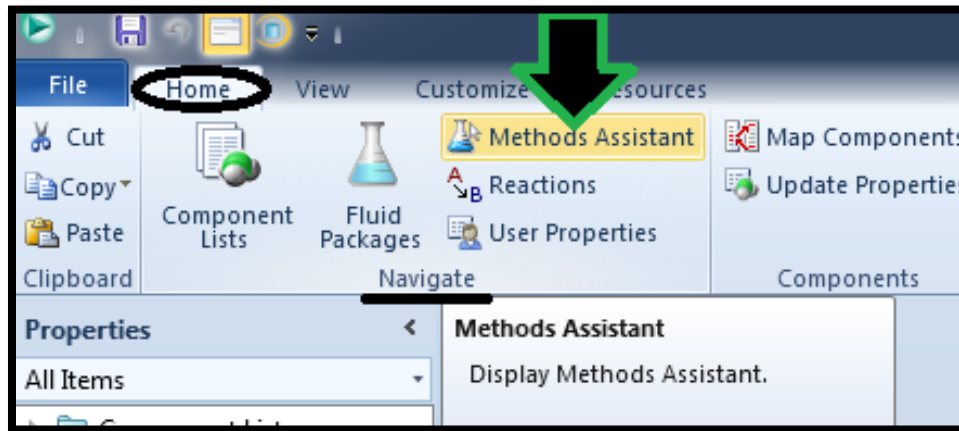


Figura 7. 11 Inicialización del asistente de métodos termodinámicos.

Se desplegará una ventana nueva y se visualizará de la siguiente manera:

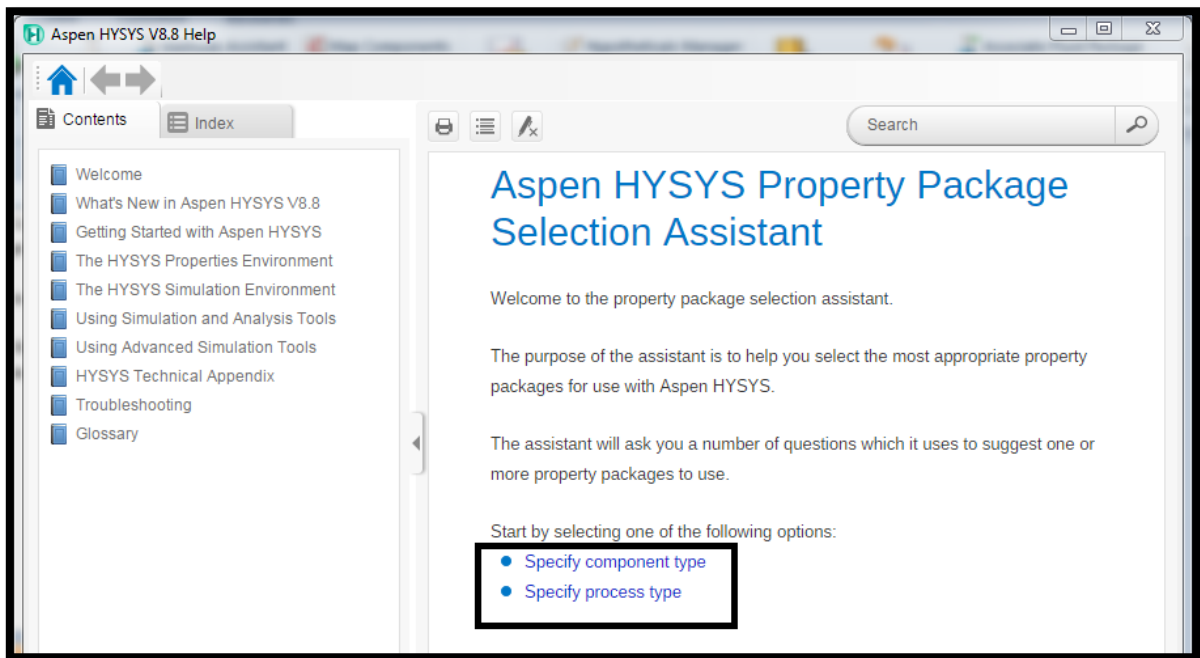


Figura 7. 12 Selección del tipo de componentes del proceso.

En la ventana nos dará la bienvenida al asistente y nos pedirá especificar el tipo de proceso o el tipo de componente que se desea simular. Con la finalidad de ver cómo funciona el asistente se eligió empezar por el tipo de componente:

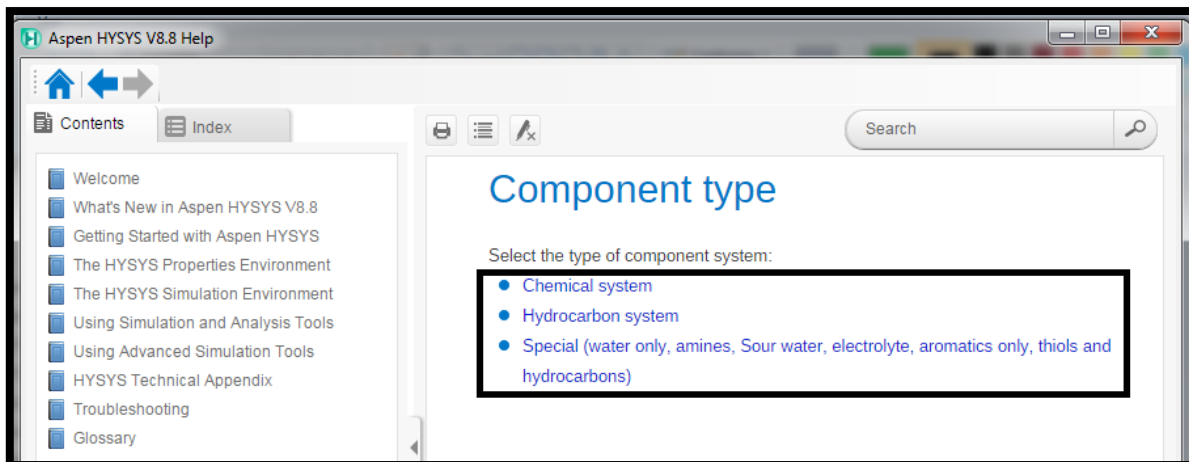


Figura 7. 13 Selección del sistema que mejor se adapta al proceso.

A lo largo del asistente se le harán una serie de preguntas sobre el proceso, en dónde el usuario tendrá que responder de acuerdo a las características del proceso que se desea simular:

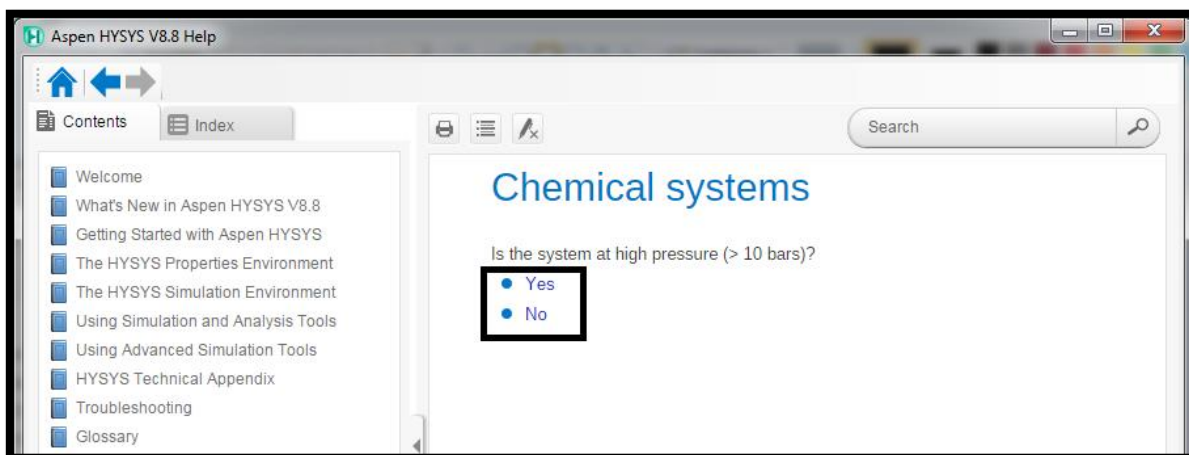


Figura 7. 14 Selección de las presiones de proceso.

Finalmente, una vez contestadas las preguntas el asistente le recomendará un grupo de métodos termodinámicos que puede usar para la simulación del proceso.

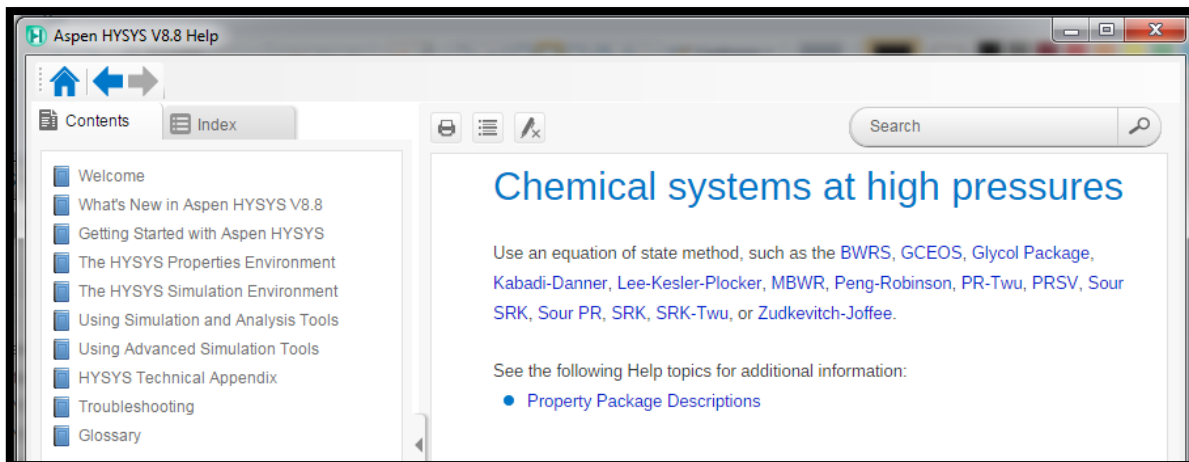


Figura 7. 15 Métodos termodinámicos propuestos por el asistente.

7.1.3 Reacciones Químicas

Para ingresar las reacciones químicas a la simulación primero se selecciona la pestaña **Reactions** que se encuentra en el menú **Properties** en la parte izquierda de la pantalla inicial de HYSYS. Seguidamente se selecciona la pestaña **Add**.

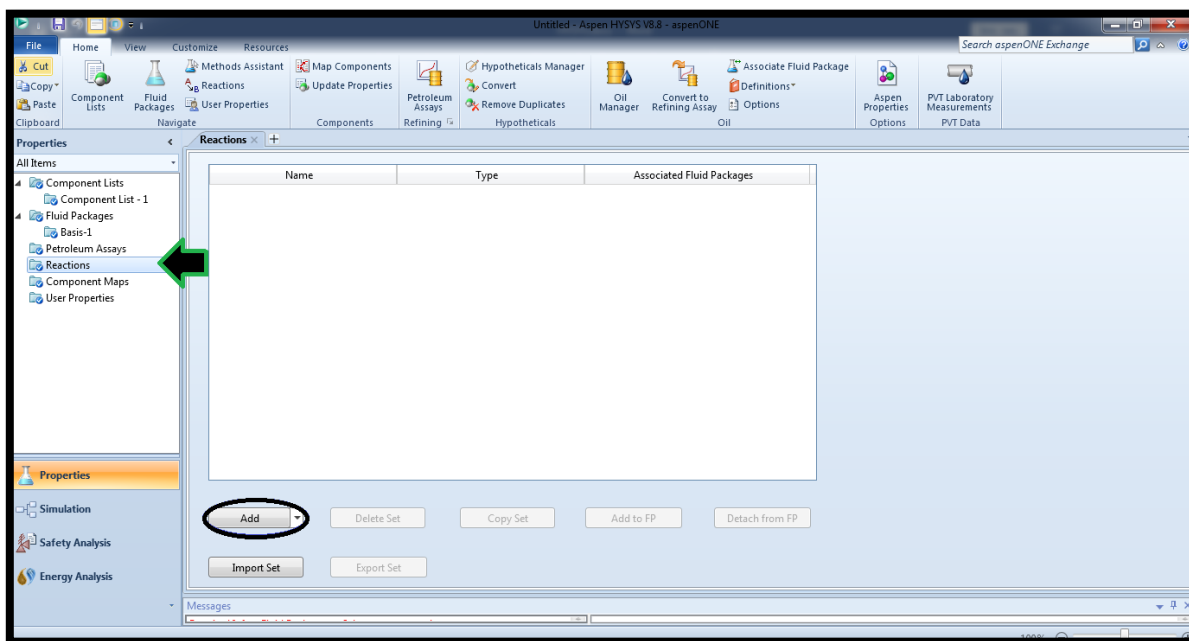


Figura 7. 16 Inserción de las reacciones químicas.

Se abrirá una nueva ventana y se seleccionará la pestaña **Add Reaction** que se encuentra en la parte inferior.

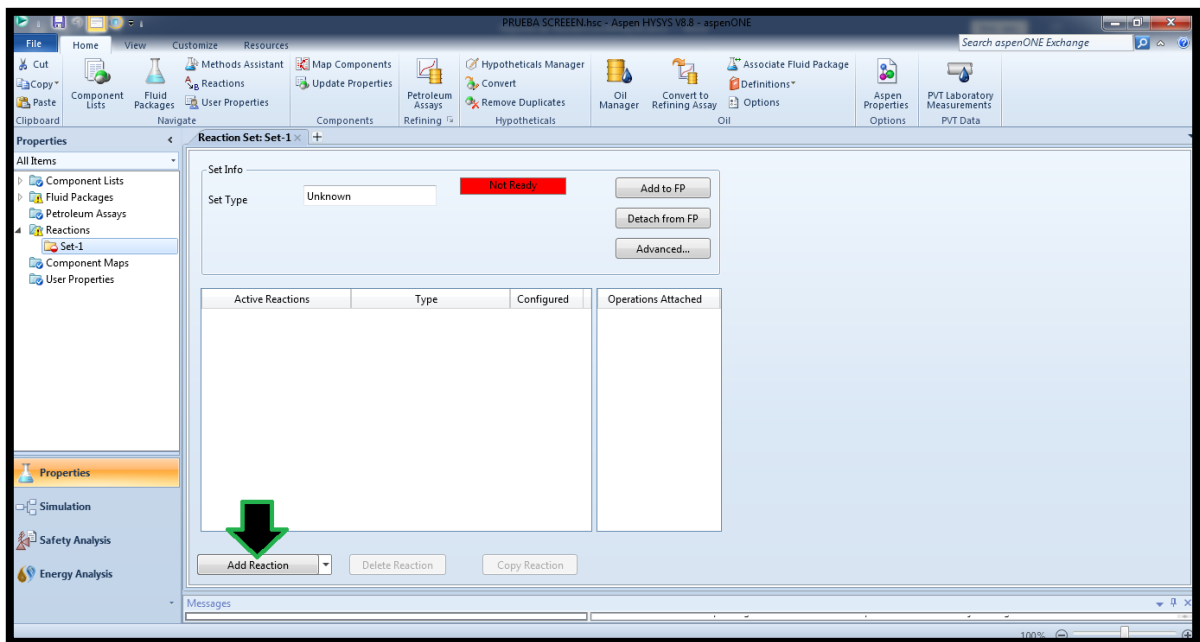


Figura 7. 17 Menú principal para agregar reacciones químicas.

Automáticamente se abrirá una nueva ventana emergente que pedirá elegir el tipo de reactor que se desea utilizar, para el caso específico de este manual se utilizarán únicamente reactores de conversión, ya que en ellos se puede especificar la estequiometría de la reacción, el componente base y el porcentaje de conversión.

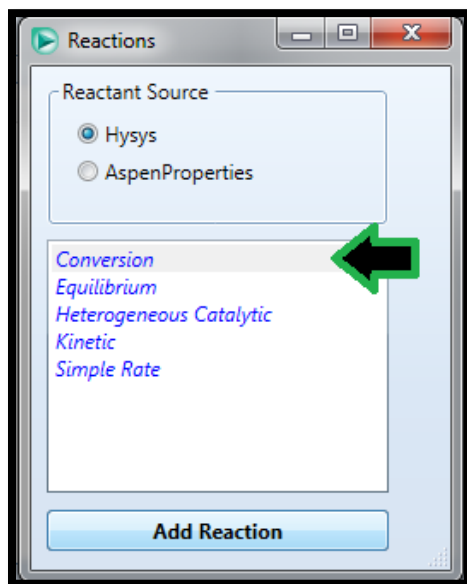


Figura 7. 18 Selección del tipo de reacción química.

Posteriormente se cerrará la ventana emergente y la pantalla inicial del HYSYS cambiará como se muestra a continuación, en dónde se seleccionará (doble click) en la reacción agregada **Rxn-1** que se encuentra en el panel de **Active Reactions**.

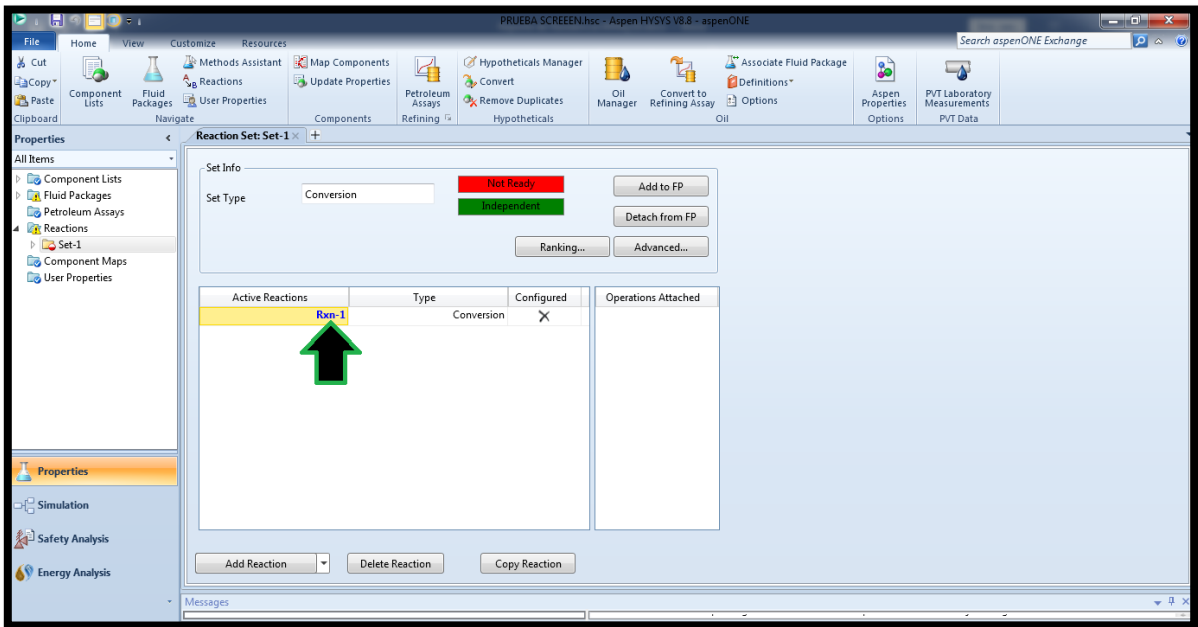


Figura 7. 19 Configuración de la reacción química.

Se desplegará una ventana emergente en dónde se seleccionará la pestaña ****Add Comp**** dónde aparecerá la lista de componentes agregados a la simulación y se deberá seleccionar los reactivos y productos de la reacción que se desee agregar. Como ejemplo se tomará en cuenta la siguiente reacción para producir metano:

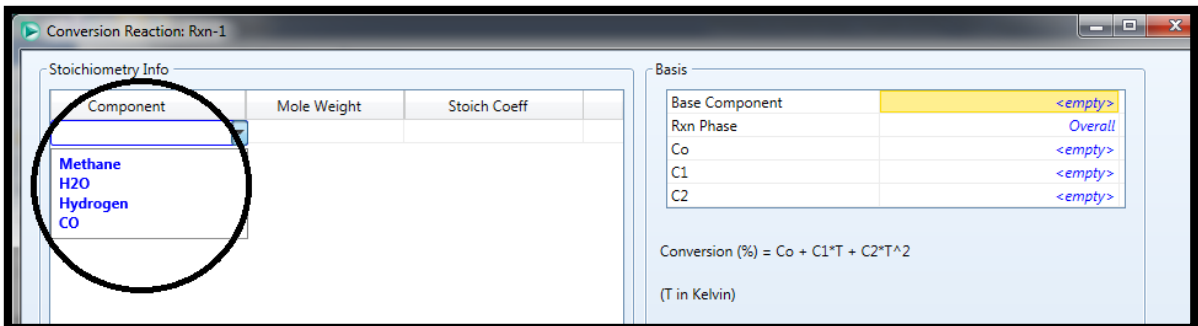
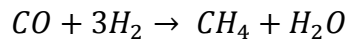


Figura 7. 20 Selección de los componentes de la reacción química.

Después deben agregarse los coeficientes estequiométricos de la reacción alado de cada componente en la lista **Stoich Coeff**, para los reactivos los coeficientes estequiométricos serán negativos y para los productos positivos, también se debe agregar el porcentaje de conversión de la reacción en el espacio **empty** a lado de **Co** que se encuentra en el menú **Basis**. Por último, deberá verificarse que no exista errores en el balance de la reacción, es decir, que el valor en la pestaña **Balance Error** sea 0 y que el indicador en la parte inferior de la pestaña se encuentre en verde con la palabra **Ready**.

The screenshot displays the 'Conversion Reaction: Rxn-1' window. It is divided into several sections:

- Stoichiometry Info:** A table with columns for Component, Mole Weight, and Stoich Coeff.

Component	Mole Weight	Stoich Coeff
CO	28.011	-1.000
Hydrogen	2.016	-3.000
Methane	16.043	1.000
H2O	18.015	1.000
Add Comp		
- Basis:** A table for defining basis components and their conversion percentages.

Base Component	Overall
Rxn Phase	Overall
Co	90.00
C1	<empty>
C2	<empty>
- Conversion Formula:** $Conversion (\%) = Co + C1 \cdot T + C2 \cdot T^2$ (T in Kelvin)
- Balance Error:** A small table showing the balance error and reaction heat.

Balance Error	0.00000
Reaction Heat (25 C)	-4.9e+04 kcal/kgmole
- Status Bar:** A green bar at the bottom with the text 'Ready'.

Annotations in the image include a box around the 'Stoich Coeff' column, a box around the 'Co' conversion value, a box around the 'Balance Error' table, and a text label 'Verificar que no haya errores' pointing to the balance error section.

Figura 7. 21 Inserción de los coeficientes estequiométricos de la reacción química.

Finalmente se cierra la ventana y se agrega el set de reacciones al entorno de la simulación seleccionando la pestaña **Add to FP**.

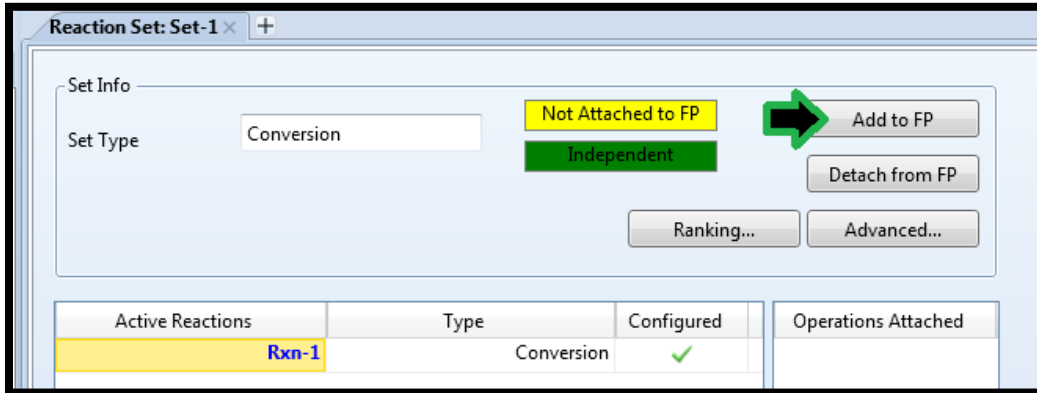


Figura 7. 22 Set de reacciones.

Se hará selección del set **Basis-1** y seguidamente se presionará el botón **Add Set To Fluid Package**. Esto permite asociar la estequiometría y la cinética de la reacción con el paquete termodinámico y el diagrama de flujo de procesos. Un error común es no aplicar el **Fluid Package**, si este no es aplicado los reactores químicos no podrían converger en el momento de realizar los balances de materia y energía.

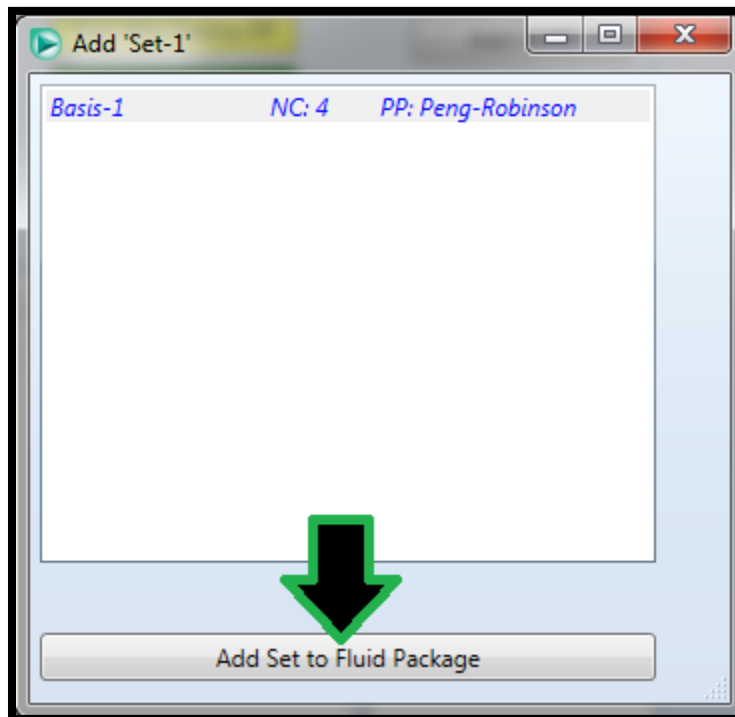


Figura 7. 23 Inserción del set de reacciones a la simulación.

7.2 Operaciones Unitarias

En este apartado se explicarán paso a paso cómo insertar en la simulación los equipos correspondientes a las operaciones unitarias como son intercambiadores de calor, separadores flash, columnas de destilación fraccionada y reactores.

Primero se debe entrar al entorno de la simulación seleccionando la pestaña **Simulation** situada en la parte inferior izquierda de la pantalla de HYSYS.

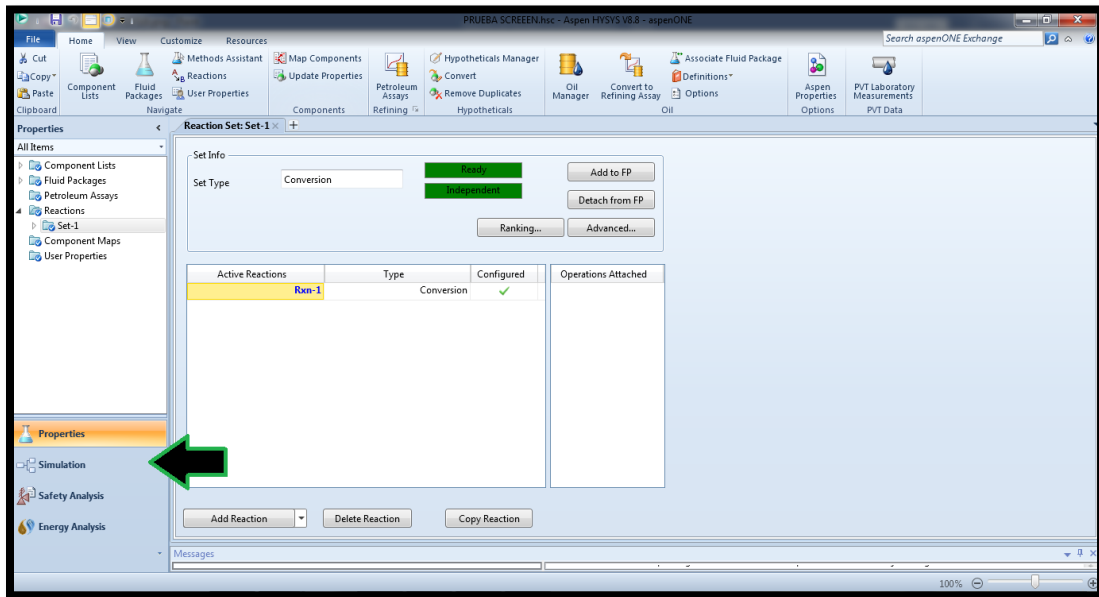


Figura 7. 24 Entorno de la Simulación.

Automáticamente aparecerá una paleta de trabajo que será desde donde se insertaran cada uno de los equipos, dicha paleta puede cerrarse y abrirse presionando el botón **F4** del teclado.

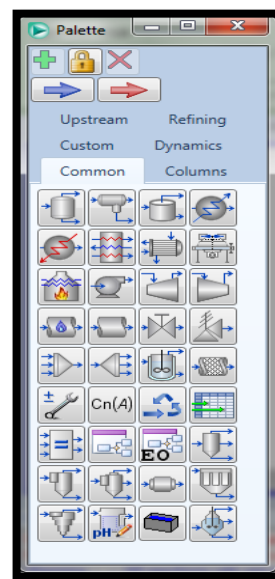


Figura 7. 25 Paleta de trabajo para las operaciones unitarias.

Para ingresar todos los equipos al diagrama de flujo de la simulación es necesario también agregar de primera instancia la corriente de materia de entrada de la siguiente manera:

1. Abrir la paleta de trabajo (F4).
2. Seleccionar la corriente de materia (flecha de color azul).
3. Seleccionar el lugar dónde se desea colocar en la pantalla del diagrama de flujo.
4. Seleccionar (doble click) sobre la corriente de materia.

A continuación, se muestra la ventana emergente de las propiedades de la corriente de materia:

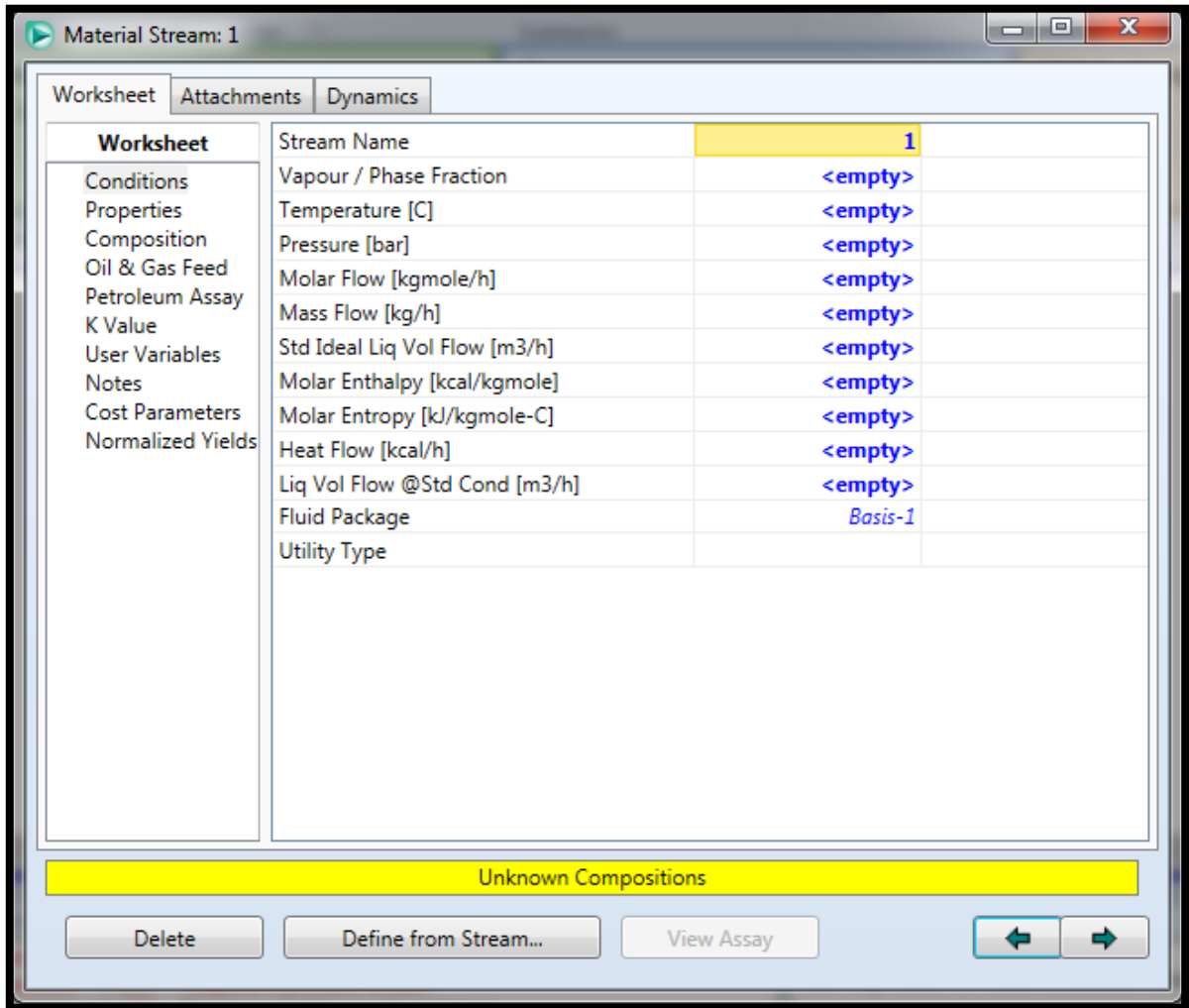


Figura 7. 26 Ventana de corriente de material.

En esta ventana deben especificarse las propiedades de la corriente, teniendo especial cuidado en los grados de libertad del proceso. Las propiedades que generalmente se especifican en las corrientes de materia son composiciones, temperatura, presión, vapor phase y flujo molar o másico.

Vapor/Fase fraction es la fracción de la corriente que se encuentra en fase vapor, si no es especificada puede calcularse automáticamente con la temperatura y presión definidas.

Para especificar los valores de temperatura, presión y flujo molar o másico debe colocarse el valor en la ventana **empty** que se muestra de lado derecho correspondiente a cada parámetro **Temperature, Pressure, Molar Flow** o **Mass Flow** respectivamente.

Para especificar la composición de la corriente de materia se siguen los siguientes pasos:

1. Seleccionar el menú **Composition**.
2. Seleccionar (doble click) en alguno de los espacios vacíos que se encuentran a lado del nombre de los compuestos bajo la lista **Mole Fractions**.

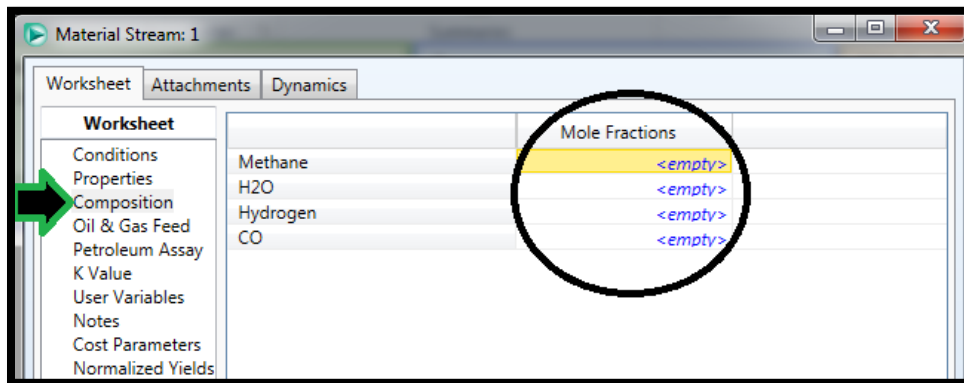


Figura 7. 27 Adición de composición a la corriente de material.

Se abrirá una ventana emergente que se visualizará de la siguiente manera:

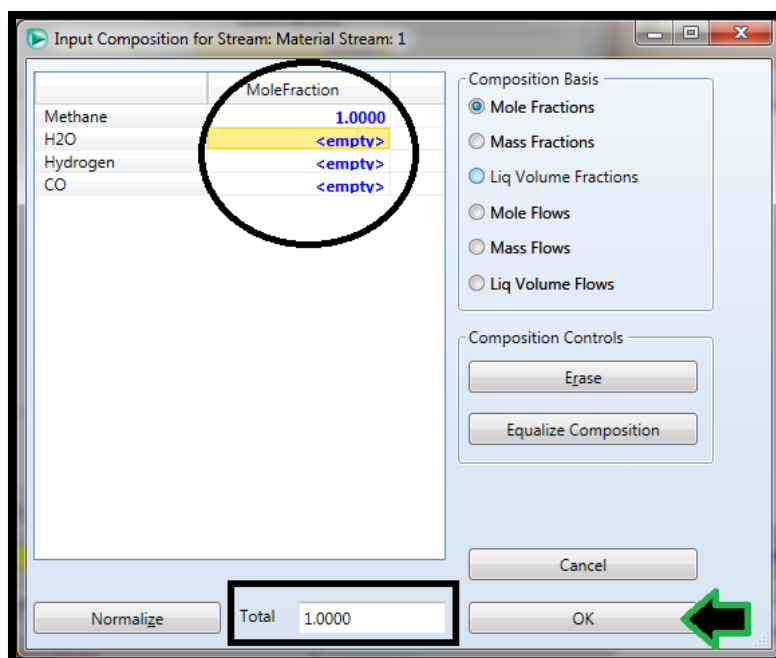


Figura 7. 28 Adición de las fracciones molares a una corriente de material.

Posteriormente se debe:

3. Ingresar los valores correspondientes a las fracciones molares en los espacios vacíos que se encuentran en la lista **Mole Fractions** correspondientes a cada componente.
4. Verificar que el total de la suma de dichas fracciones molares sea 1.
5. Seleccionar el botón **OK**.

7.2.1 Intercambiadores de Calor

Los intercambiadores de calor son dispositivos diseñados para transferir calor entre dos medios, separados por una barrera que entra en contacto con ambos. En general se pueden utilizar para los siguientes casos:

- ✓ Calentar un fluido frío mediante un fluido con mayor temperatura.
- ✓ Reducir la temperatura de un fluido mediante un fluido con menor temperatura.
- ✓ Llevar a punto de ebullición a un fluido mediante uno con mayor temperatura.
- ✓ Condensar un fluido en estado gaseoso por medio de un fluido frío.

En Aspen HYSYS existen seis tipos de intercambiadores de calor, a continuación, se explicará brevemente para que son utilizados cada uno de ellos en las simulaciones de procesos químicos:

- **Enfriador (Cooler):** En este tipo de intercambiadores se enfría una sola corriente de entrada a una temperatura específica conocida. Se utilizan cuando solo se está interesado en saber la cantidad de energía requerida para enfriar una corriente de proceso.
- **Calentador (Heater):** En este tipo de intercambiadores se calienta una corriente de entrada a una temperatura específica conocida. Se utilizan cuando solo se está interesado en conocer la cantidad de energía requerida para calentar una corriente de proceso.
- **LNG:** En este tipo de intercambiadores se especifican dos corrientes (o más dependiendo del caso de estudio) una fría, que absorben energía, y una caliente, que cede energía. Se pueden utilizar cuando se conocen las propiedades de las corrientes frías y calientes, según los grados de libertad, se podrán calcular la temperatura de salida o la cantidad de fluido requerido para calentar o enfriar.
- **Carcaza y Tubos:** En este tipo de intercambiadores se especifican el número de tubos y tamaño de la carcasa. Se utilizan cuando se conocen las especificaciones de los intercambiadores de tubos y coraza.
- **Enfriadores de Aire (Air Cooler):** En este tipo de intercambiador se utiliza aire como medio de transferencia de calor para enfriar o calentar una corriente de proceso a las condiciones de salida requeridas. El flujo de aire puede ser especificado o calculado mediante las especificaciones del ventilador. Se utilizan cuando se necesita calcular los coeficientes de transferencia, el flujo total de la corriente de salida y la temperatura de esta misma.

- **Horno (Furnance Heater):** En este tipo de intercambiador se especifican las corrientes de entrada y salida del proceso y las corrientes de entrada de aire para la combustión, el tipo de combustible utilizado y la corriente de gases de combustión. Se utilizan cuando el proceso necesita utilizar medios calefactores de gran magnitud.

Para el caso específico de este manual únicamente se utilizarán enfriadores, calentadores y LNG en las simulaciones de procesos.

Para insertar los intercambiadores de calor a la simulación se abre la paleta de trabajo y seleccionan los siguientes iconos correspondiente al sub-menú **Common**:

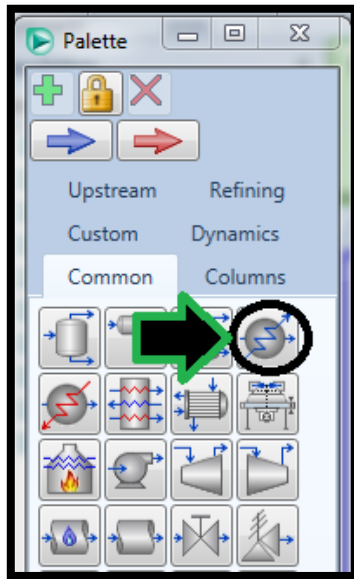


Figura 7. 29 Selección de un Enfriador.

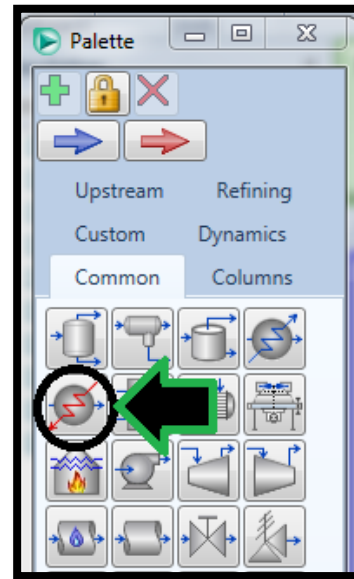


Figura 7. 30 Selección de un Calentador.

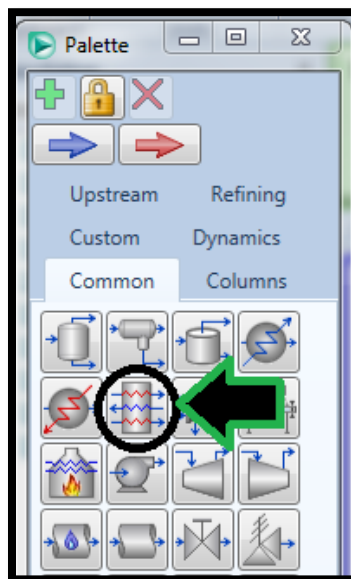


Figura 7. 31 Selección de un LNG.

Se selecciona una sola vez el intercambiador de calor que más se ajusta al proceso y se arrastra el cursor al diagrama de flujo de la simulación, se debe seleccionar nuevamente sobre el diagrama de flujo para colocar el equipo en el lugar deseado.

Para configurar los intercambiadores de calor, específicamente enfriadores y calentadores, se selecciona (doble click) en el equipo, seguidamente se abrirá una ventana emergente y en la pestaña **Connections** del menú **Design** en la pestaña **Inlet** se agregará la corriente de entrada al intercambiador de calor y en la pestaña **Outlet** la salida del mismo. También es necesario agregar la corriente de energía en la pestaña **Energy**. La corriente de energía no es sin más que la diferencia de entalpías entre la corriente de entrada y la de salida.

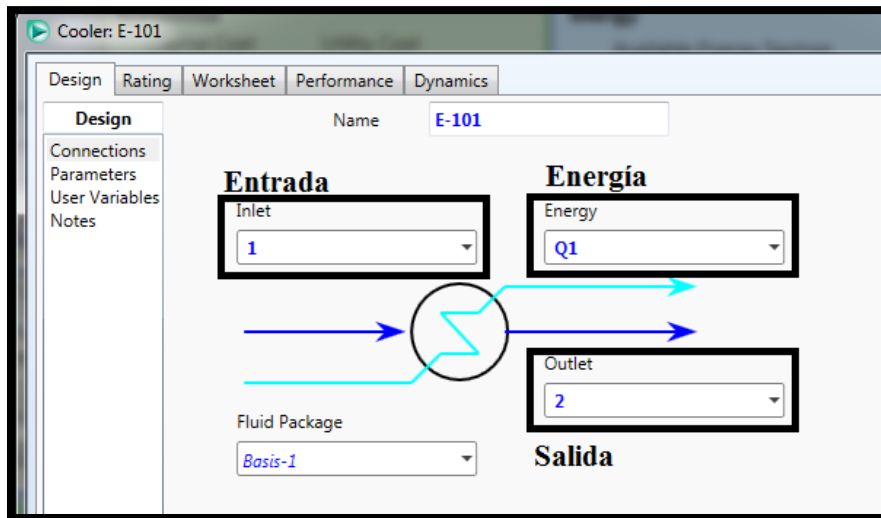


Figura 7. 32 Configuración de un enfriador.

Posteriormente se selecciona la pestaña **Parameters** en el menú **Design** y en la pestaña **Delta P** se escribe el valor de la caída de presión en el intercambiador de calor.

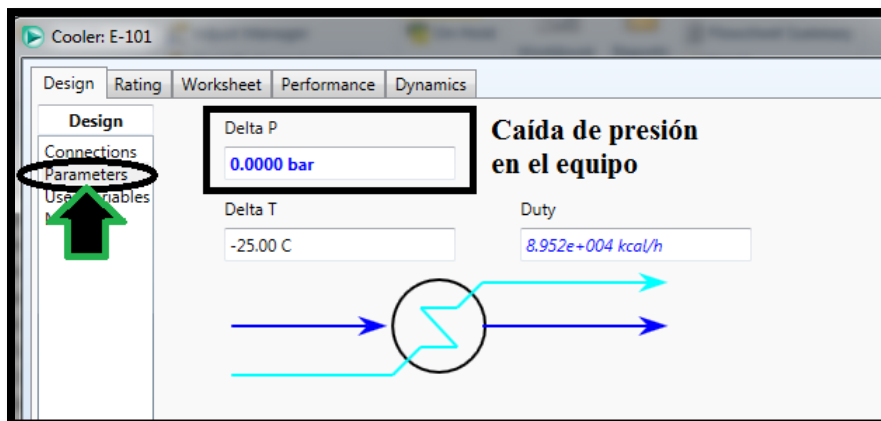


Figura 7. 33 Configuración de la caída de presión en un enfriador.

Finalmente se cierra el menú del equipo y se abre la corriente de material de salida del intercambiador de calor, en la cual se determinará en la pestaña **Temperature** del menú **Conditions** la temperatura a la que se desea calentar o enfriar la corriente.

Worksheet	Stream Name	2	Vapour Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0.5161	0.5161
Properties	Temperature [C]	25.00	25.00
Composition	Pressure [bar]	1.000	1.000
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	100.0	51.61
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	1703	831.2
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	3.582	2.708
User Variables	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-4.299e+004	-1.915e+004
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	121.2	184.4
Cost Parameters	Heat Flow [kcal/h]	-4.299e+006	-9.885e+005
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	3.637	1217
	Fluid Package	Basis-1	
	Utility Type		

Figura 7. 34 Adicción de la temperatura a la corriente de salida de un IC.

Para el caso de los intercambiadores de calor LNG se selecciona (doble click) en el equipo, seguidamente se abrirá una ventana emergente y en la pestaña **Connections** del menú **Design** se agregarán las corrientes de entrada y de salida al intercambiador de calor. Es necesario especificar en la pestaña **Pressure Drop** las caídas de presión en el equipo, así como también en la pestaña **Hot/Cold** especificar las corrientes frías y calientes. Las corrientes calientes (Hot) son aquellas que se desean enfriar, por lo que se les reconoce como aquellas que ceden calor. En el caso de las corrientes frías (Cold) son aquellas que se desean calentar, por lo que absorben calor.

Inlet Streams	Outlet Streams	Pressure Drop	Hot/Cold	FlowSheet	Fluid Pkg
Entrada	Salida	0.0000	Cold	Case (Main)	Basis-1
Entrada 2	Salida 2	0.0000	Hot	Case (Main)	Basis-1

Figura 7. 35 Configuración de un intercambiador LNG.

Finalmente, para que el intercambiador de calor converja es necesario especificar en las corrientes de material de entrada y salida la composición, temperatura, presión y flujo molar o másico. Los valores que se especifiquen dependerán de los grados de libertad y la variable que se desea estimar.

7.2.2 Separador Flash

Para insertar el separador flash a la simulación se abre la paleta de trabajo y selecciona el siguiente icono correspondiente al sub-menú **Common**:

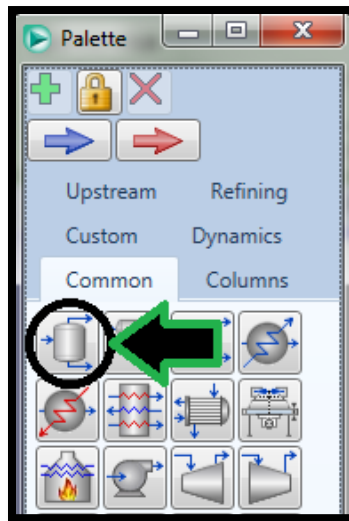


Figura 7. 36 Selección de un separador flash.

Se selecciona una sola vez y se arrastra el cursor al diagrama de flujo de la simulación, se debe seleccionar nuevamente sobre el diagrama de flujo para colocar el equipo en el lugar deseado.

Para configurar el separador flash se selecciona (doble click) el separador en la parte roja del mismo, seguidamente se abrirá una ventana emergente y en la pestaña **Stream** del menú **Inlets** se agregarán las corrientes de entrada al separador.

En caso de que el separador flash sea isotérmico no se especificará la energía en la ventana **Energy**. En caso de que sea adiabático debe especificarse en la ventana **Energy** el valor de 0.

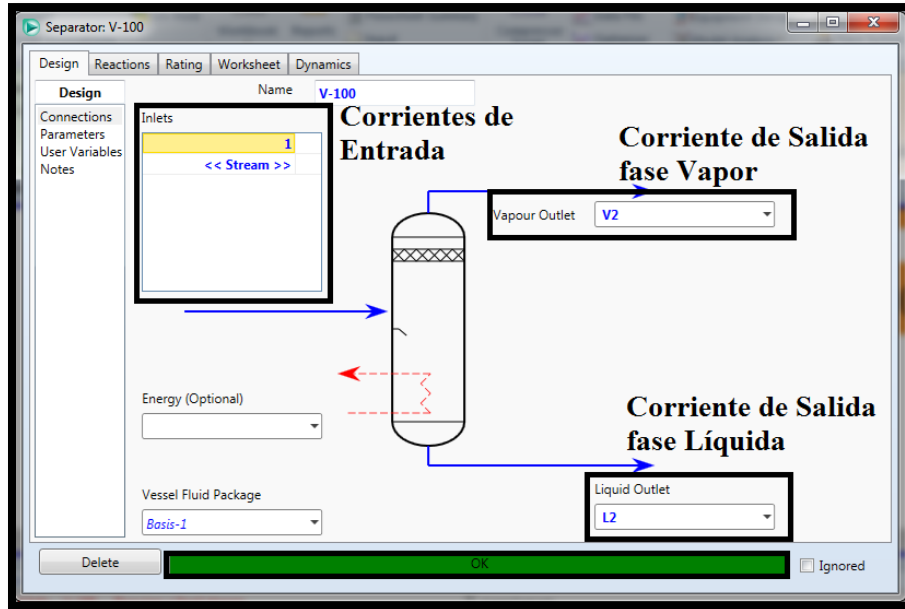


Figura 7. 37 Configuración de un separador flash.

En la ventana **Vapour Outlet** se debe especificar el nombre de la corriente de salida en fase vapor, en este caso se le colocó el nombre **V2**, lo mismo sucede en la ventana **Liquid Outlet** dónde se especifica el nombre de la corriente en fase líquida como **L2**.

Una vez que hayamos introducido estos valores en la parte posterior de la ventana aparecerá un recuadro de color verde indicando que el separador convergió con éxito. Seguidamente cerramos la ventana y regresamos al diagrama de flujo de la simulación.

7.2.3 Reactores

Para insertar un reactor de conversión a la simulación se abre la paleta de trabajo y selecciona el siguiente icono correspondiente al sub-menú **Columns**:

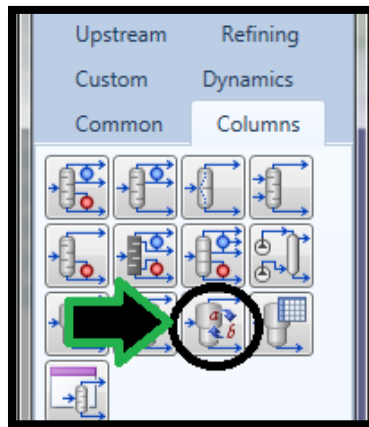


Figura 7. 38 Selección de un reactor de conversión.

Se selecciona una sola vez y se arrastra el cursor al diagrama de flujo de la simulación, se debe seleccionar nuevamente sobre el diagrama de flujo para colocar el equipo en el lugar deseado. De igual manera se seleccionará el equipo (doble click) para abrir el panel de configuración del reactor que se mostrará de la siguiente manera:

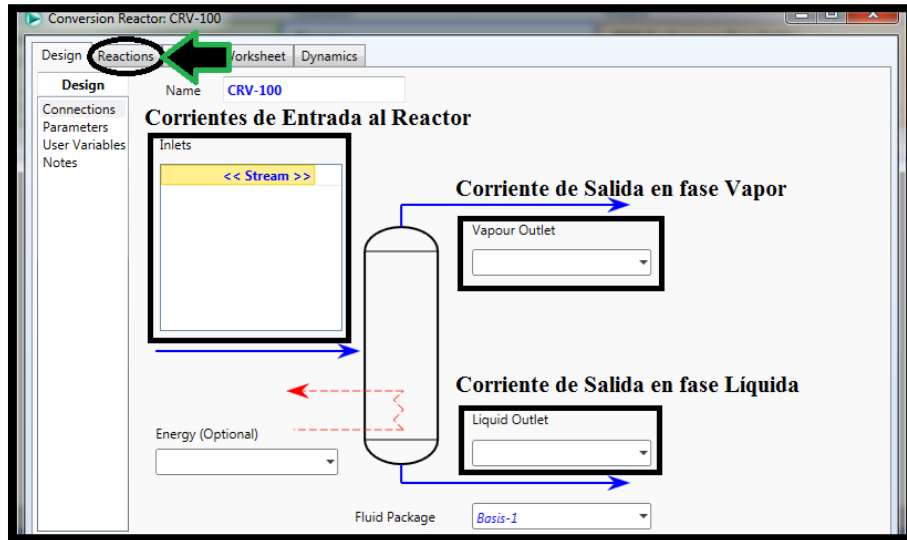


Figura 7. 39 Configuración de un reactor de conversión.

En caso de que el reactor sea isotérmico no se especificará la energía en la ventana **Energy**, sin embargo, debe especificarse la temperatura del reactor. En caso de ser adiabático debe especificarse en a la ventana **Energy** el valor de 0.

Se deberán especificar las corrientes que entran al reactor en **Inlets** y las corrientes de salida en fase vapor y líquida **Vapour Outlet** y **Liquid Outlet** respectivamente. Posteriormente se debe especificar la reacción o conjunto de reacciones que se llevaran a cabo en dicho reactor, para ello se seleccionará el menú **Reactions**.

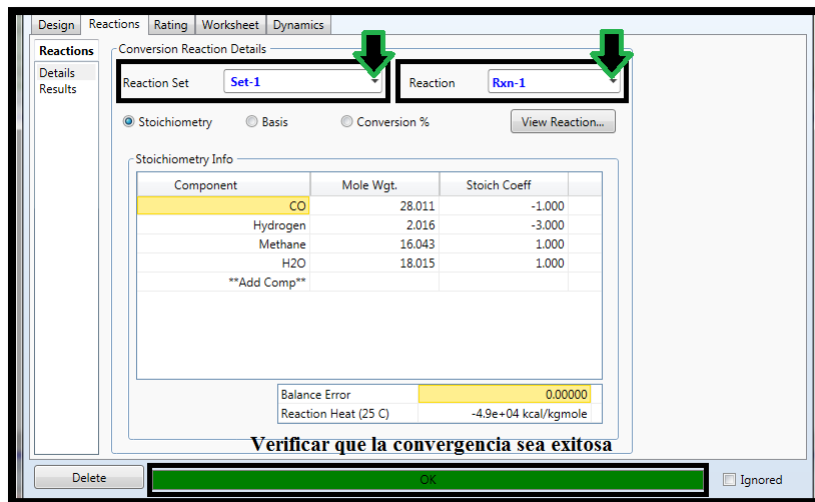


Figura 7. 40 Adición del set de reacciones al reactor de conversión.

En la pestaña **Reaction Set** del menú **Conversion Reaction Details** se deberá seleccionar el Set de reacciones deseado, después aparecerán las reacciones del set en la pestaña **Reaction**, dónde el usuario podrá corroborar las reacciones agregadas al reactor. Por último, debe de verificarse que la convergencia del reactor sea exitosa.

7.3 Otros

7.3.1 Mezclador y Divisor

Para insertar un mezclador y un divisor a la simulación se abre la paleta de trabajo y seleccionan los siguientes iconos correspondientes al sub-menú **Common**:

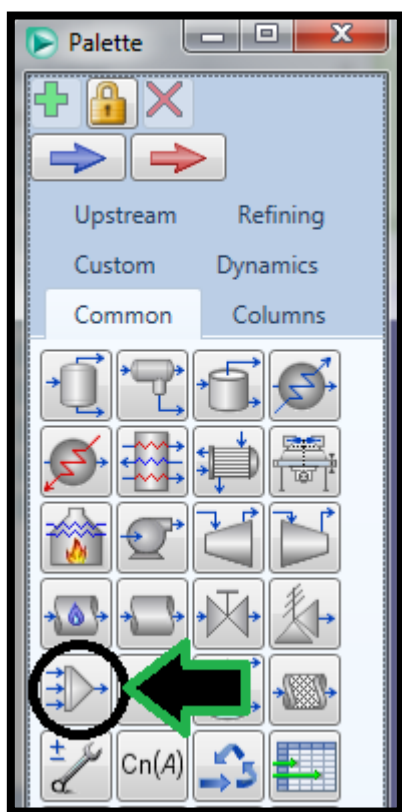


Figura 7. 41 Selección de un mezclador.

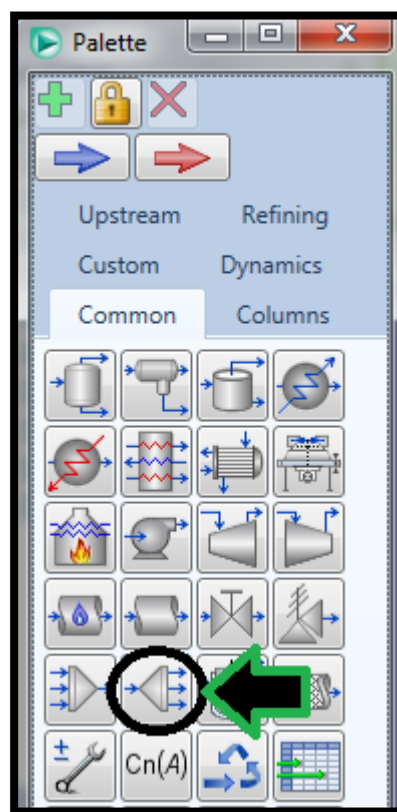


Figura 7. 42 Selección de un divisor.

Se selecciona una sola vez y se arrastra el cursor al diagrama de flujo de la simulación, se debe seleccionar nuevamente sobre el diagrama de flujo para colocar el equipo en el lugar deseado.

Para el caso del mezclador se abrirá el panel de configuración seleccionando el equipo (doble click), deberá agregarse las corrientes de entrada que se desean mezclar en **Inlets** y el nombre de la corriente de salida del mezclador en **Outlet**. Posteriormente se verifica que la convergencia sea exitosa.

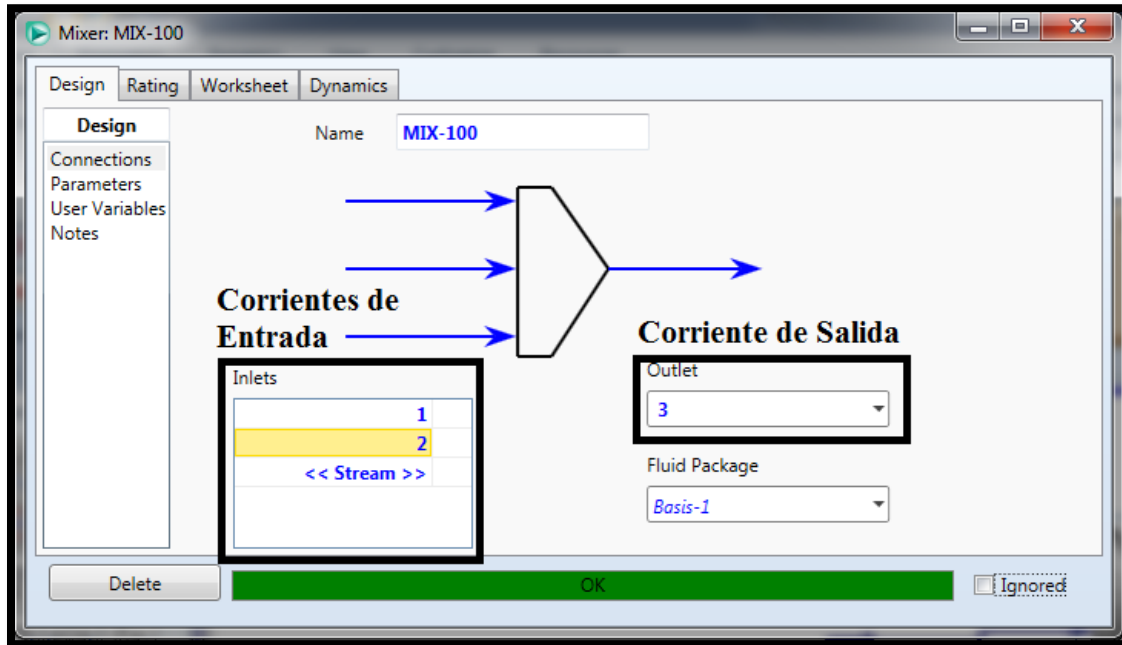


Figura 7. 43 Configuración de un mezclador.

La temperatura de salida y composiciones de salida serán resultado del balance de materia y de energía (no es el promedio de las temperaturas de entrada ni de las composiciones de entrada)

Para el caso del divisor se abrirá el panel de configuración seleccionando el equipo (doble click), deberá agregarse la corriente de entrada que se desea purgar o dividir en **Inlet** y el nombre de las corrientes de salida en **Outlets**. Posteriormente en el menú **Design** se selecciona la pestaña **Parameters** para ingresar el porcentaje de purga que se desea en cada corriente.

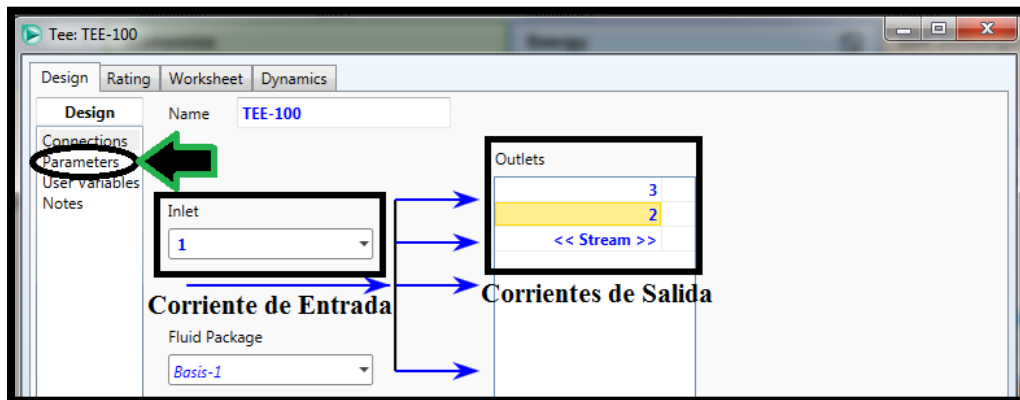


Figura 7. 44 Configuración de un divisor.

En el sub-menú **Splits** bajo la ventana **Flow Ratios** se designa la relación de flujo para una o dos corrientes de salida (dependiendo de los grados de libertad del proceso). Posteriormente se verifica que la convergencia sea exitosa.

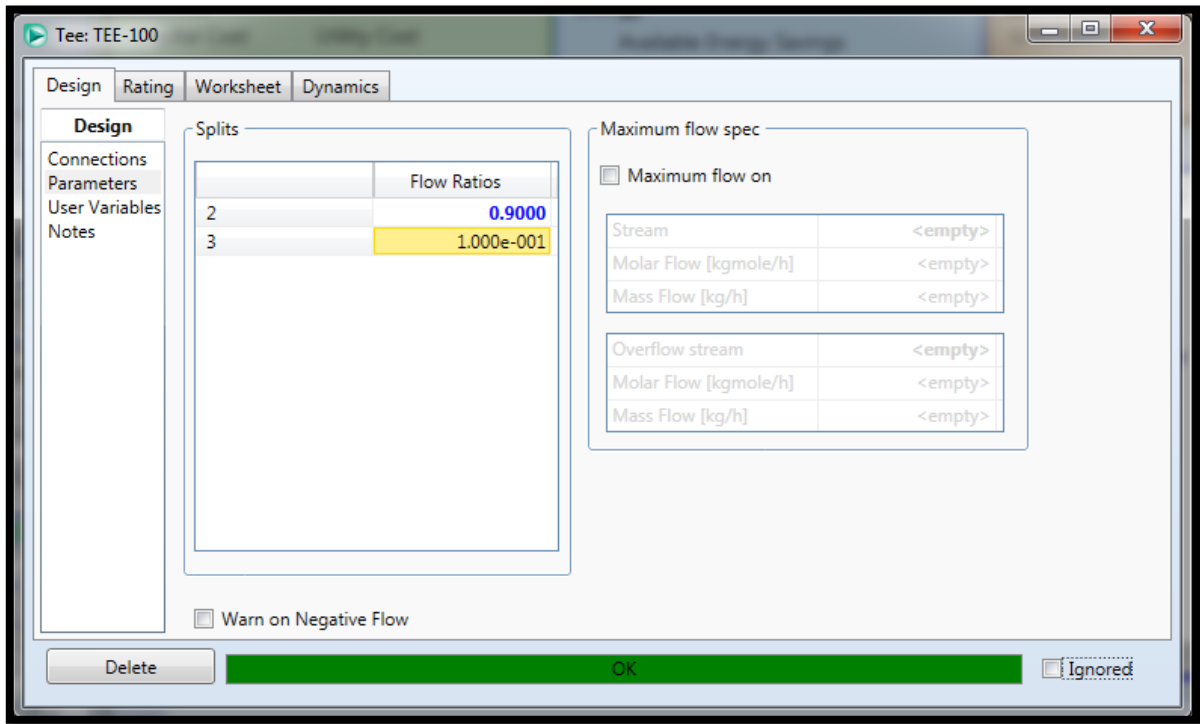


Figura 7. 45 Configuración de la relación de flujo.

La temperatura y composición son las misma a la entrada y en cada salida.

7.3.3 Compresor y Expansor

Para insertar un compresor y un expansor a la simulación se abre la paleta de trabajo y seleccionan los siguientes iconos correspondientes al sub-menú **Common**:

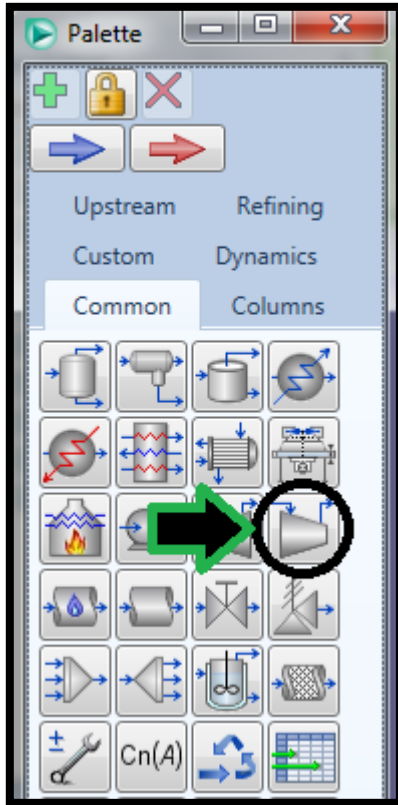


Figura 7. 46 Selección de un compresor.

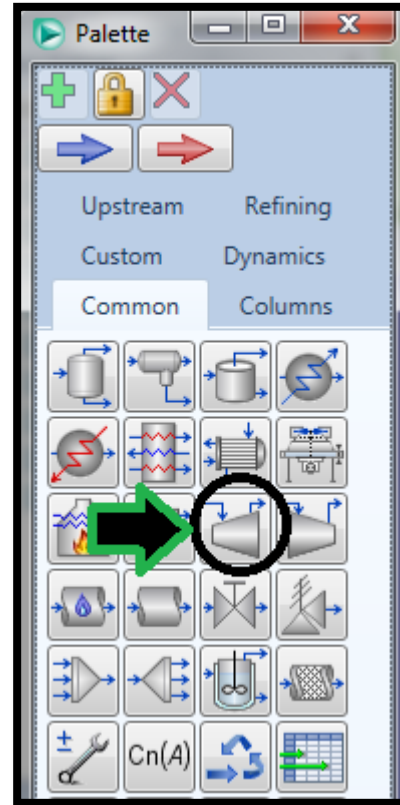


Figura 7. 47 Selección de un expansor.

Se selecciona una sola vez y se arrastra el cursor al diagrama de flujo de la simulación, se debe seleccionar nuevamente sobre el diagrama de flujo para colocar el equipo en el lugar deseado.

Para el caso del compresor se abrirá el panel de configuración seleccionando el equipo (doble click), deberá agregarse la corriente de entrada al compresor en **Inlet** y la de salida en **Outlet**. Además, deberá agregarse el nombre de la corriente de energía correspondiente al trabajo realizado por el compresor en **Energy**.

La eficiencia isotrópica del compresor y las turbinas por default en hysys es----

Un error común es no revisar la entrada de gas y tener una mezcla gas/liquido, si esto pasa el compresor/turbina marcara error ya que los liquidos son por definición incompresibles.

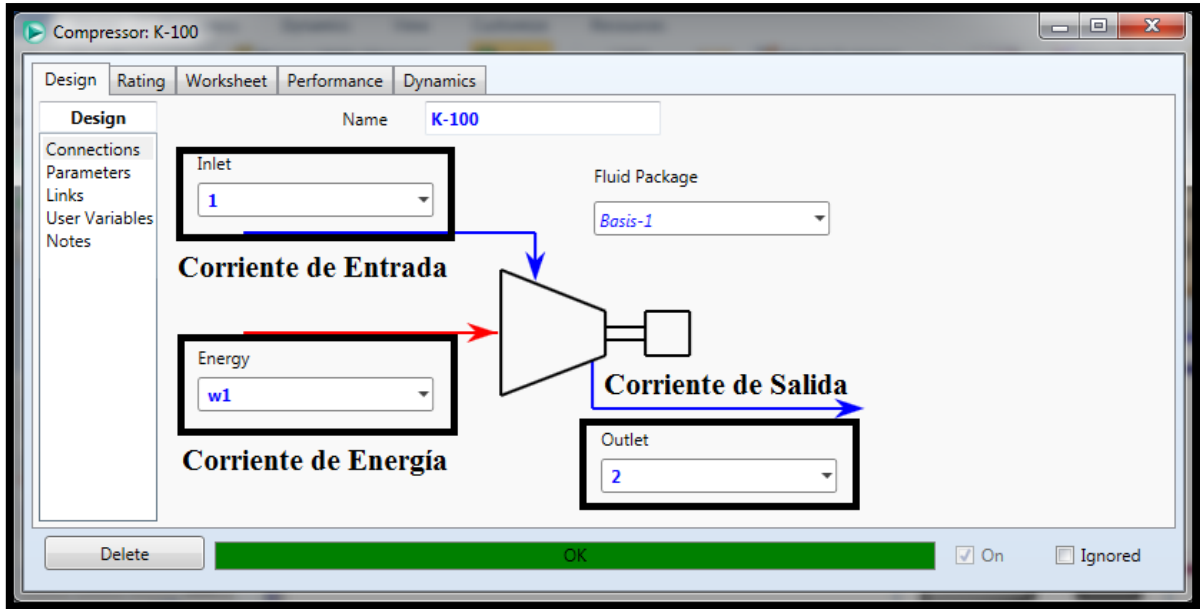


Figura 7. 48 Configuración de un compresor.

Posteriormente se cierra la ventana del compresor y se abre la corriente de material (doble click) que se agregó cómo la corriente de salida del compresor, en ella en la pestaña **Worksheet** a la izquierda del parámetro **Pressure** se agregará el valor de la presión a la que se desea comprimir la corriente de entrada. Finalmente se verifica que la convergencia sea exitosa.

Worksheet	Stream Name	2	Vapour Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000
Properties	Temperature [C]	275.4	275.4
Composition	Pressure [bar]	5.000	5.000
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	100.0	100.0
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	1703	1703
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	3.582	3.582
User Variables	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	-3.557e+004	-3.557e+004
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	194.1	194.1
Cost Parameters	Heat Flow [kcal/h]	-3.557e+006	-3.557e+006
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	3.637	3.637
	Fluid Package	Basis-1	
	Utility Type		

Figura 7. 49 Inserción de la presión de salida de un compresor.

Para el caso del expansor se realizan los mismos pasos, sin embargo, debe tenerse cautela en la presión de salida del expansor, puesto que debe ser menor a la presión de la corriente de entrada al mismo. También es importante mencionar que para que el compresor y el expansor funcionen de manera correcta la corriente de entrada a estos debe encontrarse en estado gaseoso.

7.3.4 Bombas

Para insertar una bomba a la simulación se abre la paleta de trabajo y selecciona el siguiente icono correspondiente al sub-menú **Common**:

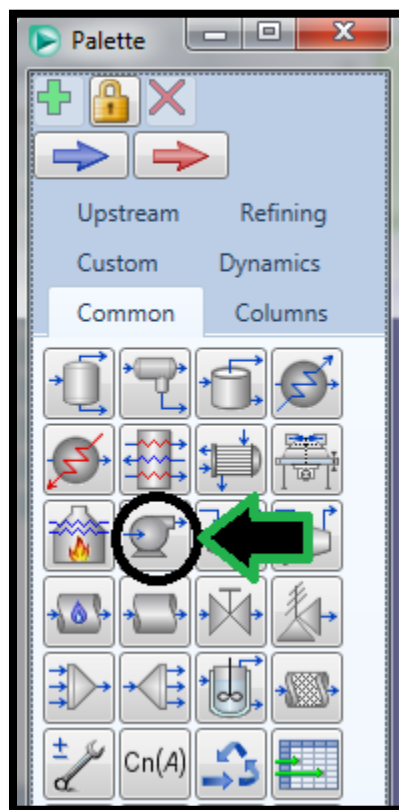


Figura 7. 50 Selección de una bomba.

Se selecciona una sola vez y se arrastra el cursor al diagrama de flujo de la simulación, se debe seleccionar nuevamente sobre el diagrama de flujo para colocar el equipo en el lugar deseado.

Seguidamente se abrirá el panel de configuración seleccionando el equipo (doble click), deberá agregarse la corriente de entrada a la bomba en **Inlet** y la de salida en **Outlet**. Además, deberá agregarse el nombre de la corriente de energía correspondiente al trabajo realizado por la bomba en **Energy**.

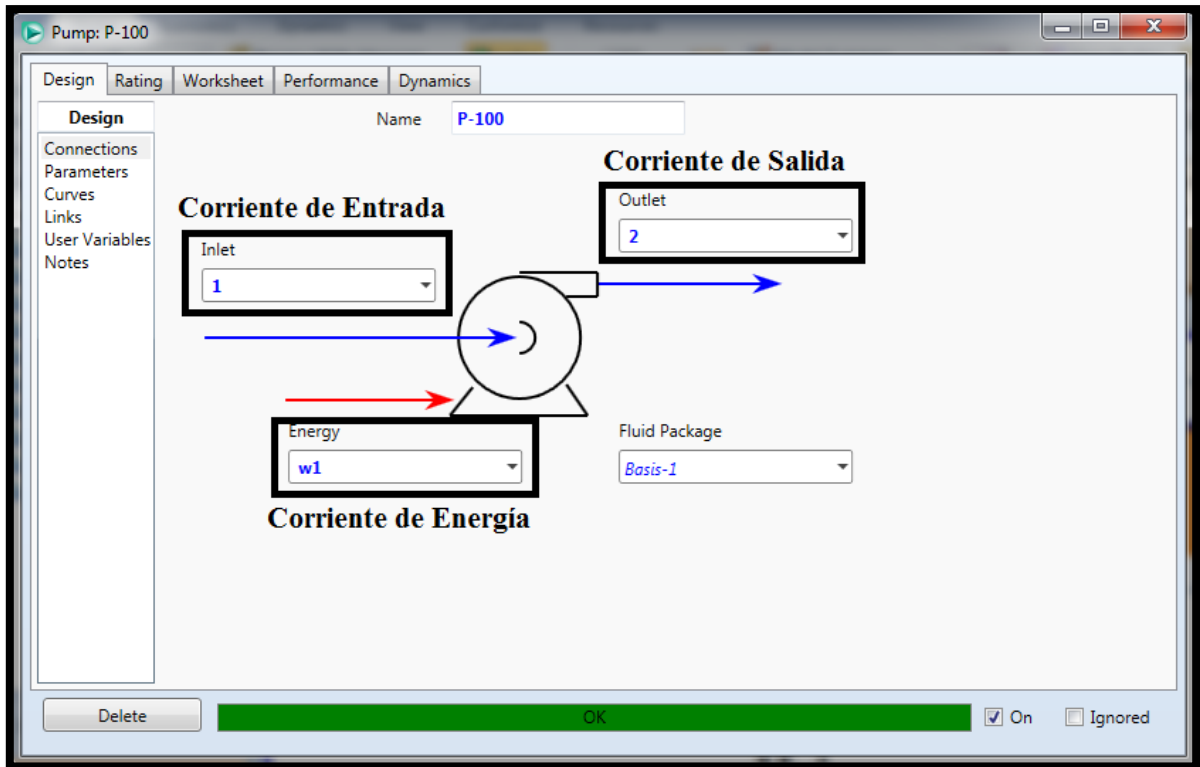


Figura 7. 51 Configuración de una bomba.

Posteriormente se cierra la ventana de la bomba y se abre la corriente de material (doble click) que se agregó cómo la corriente de salida de la misma, en ella en la pestaña **Worksheet** a la izquierda del parámetro **Pressure** se agregará el valor de la presión a la que se desea elevar la corriente de entrada. Finalmente se verifica que la convergencia sea exitosa. Es importante mencionar que las bombas únicamente pueden trabajar con corrientes líquidas.

La eficiencia de la bomba por default en hysys es -----

7.3.5 Válvulas

Para insertar una válvula a la simulación se abre la paleta de trabajo y selecciona el siguiente icono correspondiente al sub-menú **Common**:

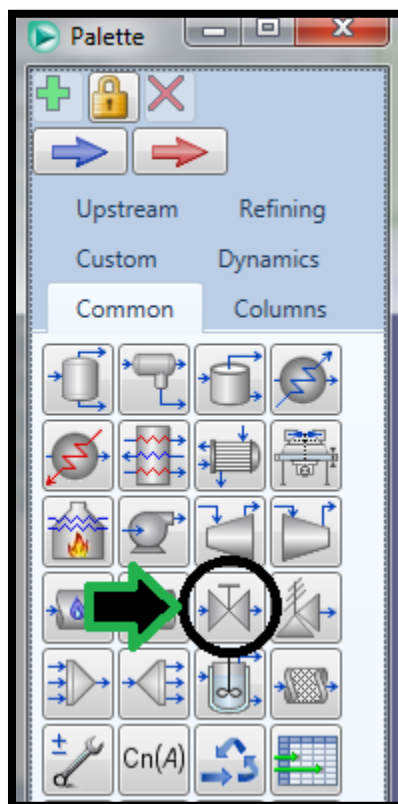


Figura 7. 52 Selección de una válvula.

Se selecciona una sola vez y se arrastra el cursor al diagrama de flujo de la simulación, se debe seleccionar nuevamente sobre el diagrama de flujo para colocar el equipo en el lugar deseado.

Seguidamente se abrirá el panel de configuración seleccionando el equipo (doble click), deberá agregarse la corriente de entrada a la válvula en **Inlet** y la de salida en **Outlet**.

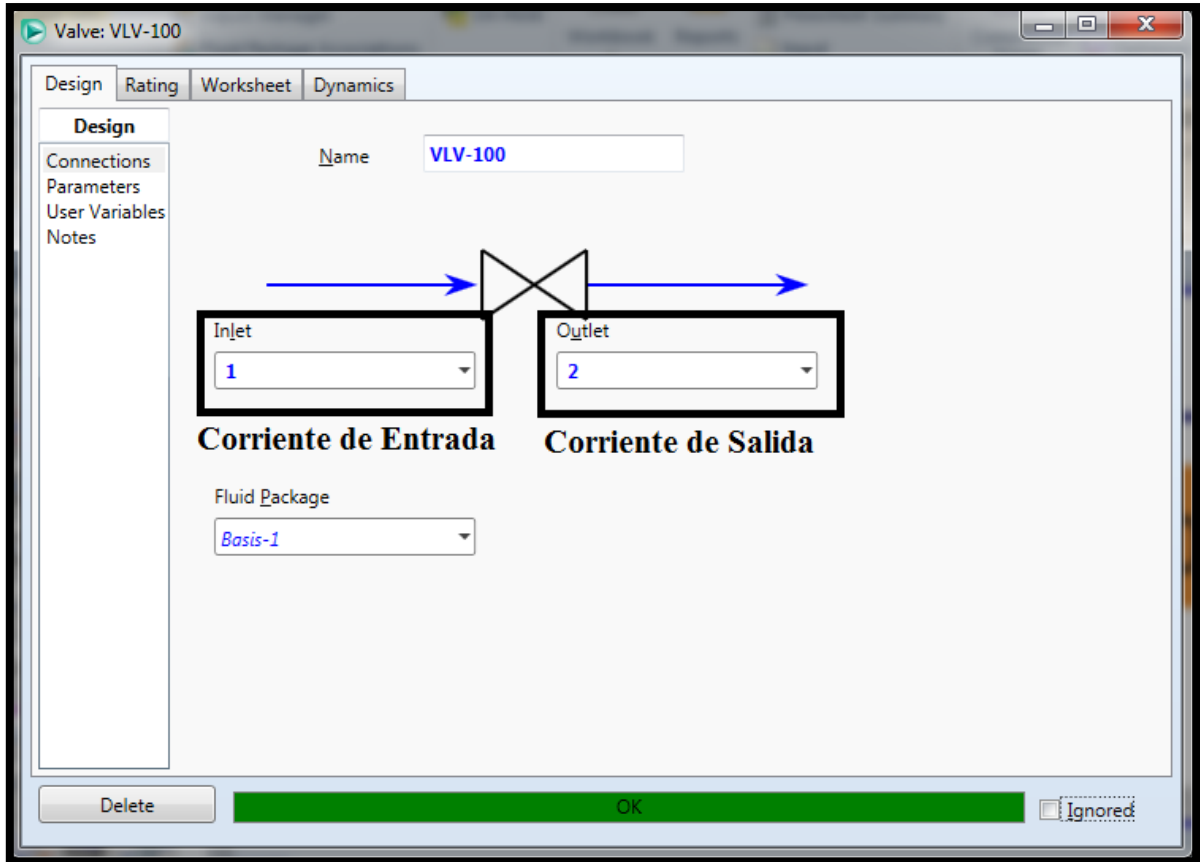


Figura 7. 53 Configuración de una válvula.

Posteriormente se cierra la ventana y se abre la corriente de material (doble click) que se agregó cómo la corriente de salida de la válvula, en ella en la pestaña **Worksheet** a la izquierda del parámetro **Pressure** se agregará el valor de la presión a la que se desea expandir la corriente de entrada. Finalmente se verifica que la convergencia sea exitosa. Es importante mencionar que las válvulas únicamente pueden trabajar con corrientes líquidas en la entrada de éstas y que la presión de salida debe ser menor a la de entrada.

La válvula se puede usar para reducir la presión, es un decir un proceso de expansión isoentálpica resultado del efecto Joule-Thompson

7.3.6 Recirculación

La recirculación es una herramienta del programa Aspen HYSYS que nos permite conectar corrientes de salida del proceso con corrientes de entrada del proceso. Es necesario especificarle al software que se está recirculando una corriente, ya que, para estimar los valores en un estado estacionario es necesario realizar una serie de iteraciones.

Para insertar una recirculación a la simulación se abre la paleta de trabajo y selecciona el siguiente icono correspondiente al sub-menú **Common**:

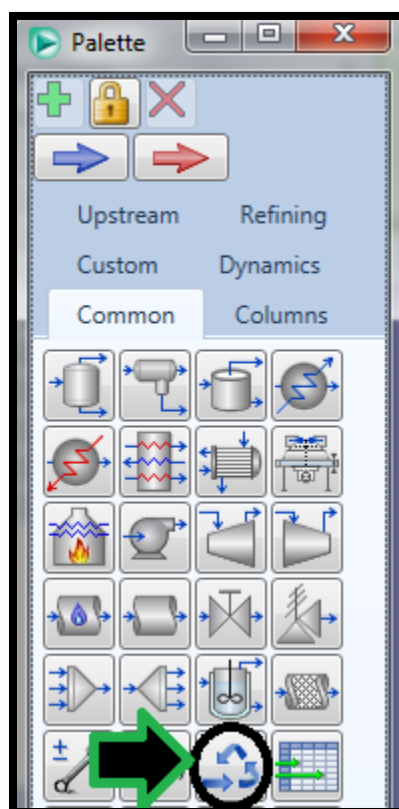


Figura 7. 54 Selección de una recirculación.

Se selecciona una sola vez y se arrastra el cursor al diagrama de flujo de la simulación, se debe seleccionar nuevamente sobre el diagrama de flujo para colocar el ícono en el lugar deseado.

Seguidamente se abrirá el panel de configuración seleccionando el equipo (doble click), deberá agregarse la corriente de entrada en **Inlet** y la de salida en **Outlet**.

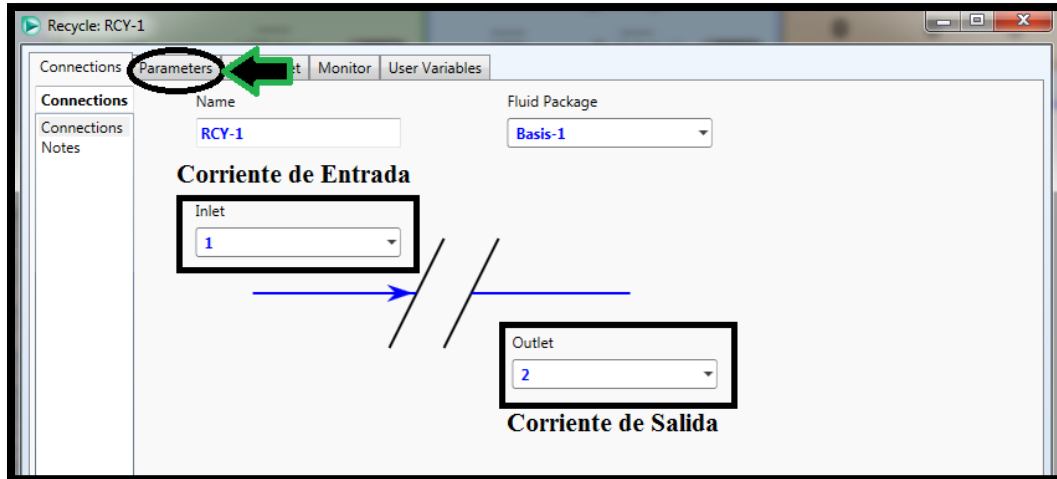


Figura 7. 55 Configuración de una recirculación.

Las iteraciones se harán automáticamente al conectar ambas corrientes, sin embargo, en ocasiones el número predeterminado de iteraciones que requiere el proceso no son suficientes para alcanzar la convergencia. Para cambiar el número de iteraciones de la recirculación se selecciona la pestaña superior **Parameters** en el sub-menú **Numerical** se inserta en la parte izquierda de la pestaña **Maximum Iterations** el número de iteraciones que considere el usuario adecuadas para el proceso.

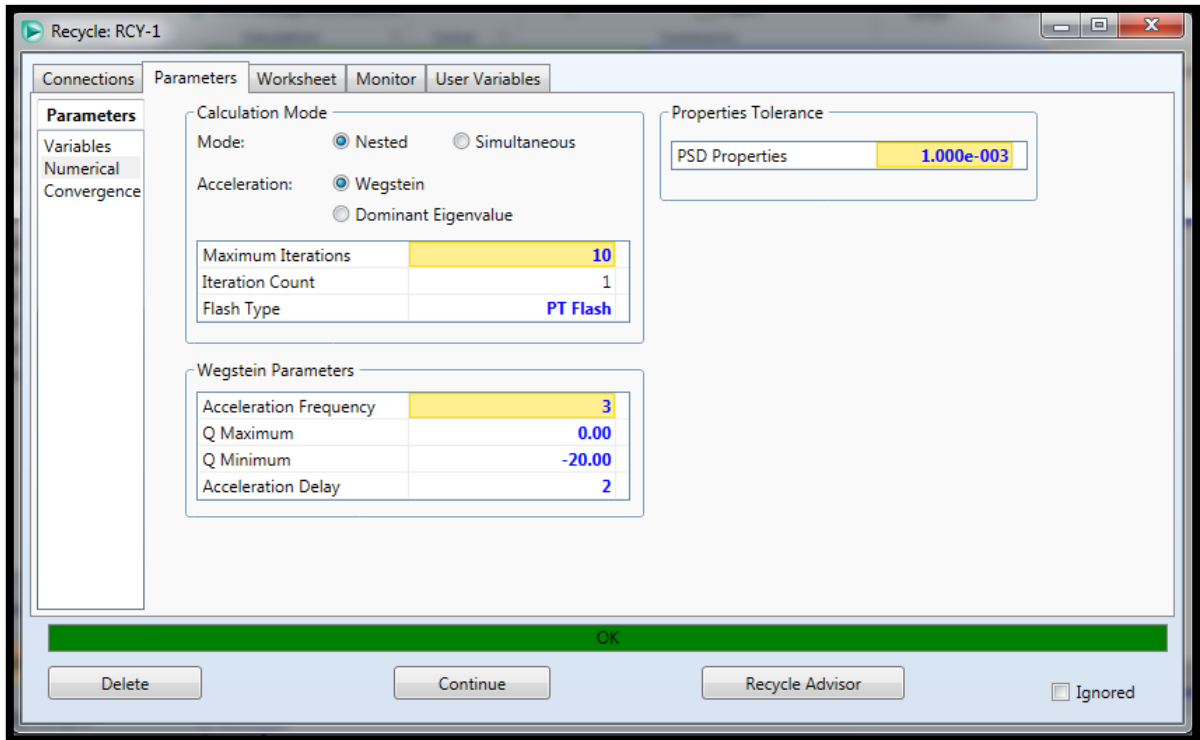


Figura 7. 56 Selección del número de iteraciones en una recirculación.

Capítulo 8. Procesos Químicos

En el presente capítulo se presentan los datos generales correspondientes a los diferentes procesos químicos que sirvieron de caso de estudio. Se especifican sus propiedades físicas y termoquímicas, su importancia económica a nivel nacional (en casos específicos) e internacional, el costo de los reactantes y productos principales y su aplicación en la vida diaria e industria.

También se describe brevemente las características que conforman cada proceso y posteriormente se plantean y simulan en HYSYS los respectivos casos de estudio, exponiendo el diagrama de proceso, los resultados de los balances de materia y energía y la composición química.

8.1 Producción de Acrilonitrilo

8.1.1 Generalidades

En el presente apartado se presentan los aspectos generales del proceso de producción de acrilonitrilo, sus propiedades físicas y termoquímicas, la importancia económica a nivel nacional y/o internacional (cuando así se presente) y el precio en el mercado de los reactivos y productos correspondientes al proceso de estudio, así como también, las aplicaciones y usos en la vida diaria y a nivel industrial a los que es destinado este compuesto.

8.1.1.1 Propiedades Físicas y Termoquímicas

El acrilonitrilo (C_3H_3N) es un líquido sintético e incoloro con olor penetrante con un ligero parecido al ajo o a la cebolla. Es soluble en compuestos orgánicos y se evapora rápidamente (Fernández y otros, 2012). A continuación, se proporcionan las propiedades físicas y termoquímicas de este compuesto.

Tabla 8.1 Propiedades físicas y termoquímicas del Acrilonitrilo.

Propiedades Físicas	
Densidad	806 kg/m ³
Masa molar	53.06 g/mol
Punto de fusión	-83.55 °C
Punto de ebullición	77.30 °C
Temperatura crítica	246 °C
Presión crítica	35.4 bar
Factor acéntrico (ω)	----
ΔH°_{fgas}	185 kJ/mol
$\Delta H^{\circ}_{flíquido}$	150 kJ/mol

8.1.1.2 Importancia Económica

La empresa Pemex Petroquímica es propietaria de 3 plantas de acrilonitrilo ubicadas en sus complejos petroquímicos Morelos, Independencia y Tula, con capacidades de 60, 50 y 65 miles de toneladas anuales, respectivamente (Gutiérrez, 2015). En la actualidad, desafortunadamente, las 3 plantas se encuentran fuera de operación, debido al deplorable estado de las instalaciones.

De acuerdo a los últimos datos recabados en el periodo 2001-2012 por Petróleos Mexicanos la producción de acrilonitrilo en Complejo Petroquímico Morelos no superaba las 55 mil toneladas de acrilonitrilo anuales, existiendo inclusive años, cómo en 2001, 2006, 2007 y 2008, dónde la producción fue nula (PEMEX Petroquímica, 2012).

A nivel internacional los principales exportadores de Acrilonitrilo son Estados Unidos, Países Bajos y Corea del Sur (Quatrx, 2009). En la Tabla 8.2 se presenta la distribución regional de la producción de acrilonitrilo en los años 2009 y 2010.

Tabla 8.2 Distribución regional de producción de Acrilonitrilo, 10⁶ t/a.

Región	2009	2010
Norteamérica	1.612	1.531
Sudamérica	0.088	0.088
Europa Oriental	0.881	0.840
Europa Occidental	0.262	0.262
Medio Oriente	0.092	0.092
Asia del Pacífico	2.966	2.974
Total	5.901	5.787

Fuente: F. Brazdil, 2012. *Ullmann's Encyclopedia Of Industrial Chemistry (p.7)*. NaperVille Illinois: Wiley-VCH.

8.1.1.2.1. Costos de la Materia Prima y Productos

A continuación, se presentan los costos de los reactivos y productos que intervienen en el proceso de producción de acrilonitrilo.

Tabla 8.3 Costos de los reactivos y productos para la producción de Acrilonitrilo.

Nombre	Costos
Propileno (13/01/2018)	\$18,570.00 MXN/Tonelada
Amoniaco (29/12/2017)	\$6,050.00-\$10,800.00 MXN/Tonelada
Acrilonitrilo (31/12/2007)	\$20,421.94 MXN/Tonelada

Fuente: *CME Group y el Sistema Nacional de Información e Integración de Mercados y Petróleos Mexicanos. Base Institucional.*

8.1.1.3 Aplicaciones del Acrilonitrilo

La producción de acrilonitrilo, como producto químico intermediario en la industria, es sumamente importante para la manufactura de una gran variedad de productos de uso cotidiano como son prendas de vestir, resinas, plásticos, suelas de zapatos, cartuchos de tinta, piezas de automóviles, entre muchos otros más.

El acrilonitrilo es utilizado principalmente para la manufactura de fibras acrílicas, resinas de acrilonitrilo-butadieno-estireno (ABS), adiponitrilo, acrilamida, cauchos de nitrilo y fibras de carbono (Fernández y otros, 2012).

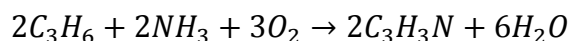
La fibra acrílica es la más comercializada a nivel mundial, debido a que de ella derivan la manufactura de productos de uso cotidiano como las prendas de vestir y artículos del hogar. Gran parte de la producción de fibra acrílica es enviada desde los Estados Unidos de América y países europeos hacia China y otros países de Asia para la manufactura de los productos finales (W. Langvardt, 2012).

Las resinas ABS, debido a su alta resistencia, fácil coloración y procesamiento, tienen una variedad de usos en áreas automotrices, de construcción, electrodomésticos y electrónica. En cuanto al adiponitrilo es utilizado para fabricar hexametildiamina por electrohidromerización, que a su vez es utilizada para la fabricación de nylon-6,6. La acrilamida cuando es polimerizada se utiliza para el tratamiento de aguas residuales, producción de petróleo, procesamiento de minerales y fabricación de papel (F. Brazdil, 2012). Finalmente, los cauchos de nitrilo se utilizan en la industria para la manufactura de equipos de protección personal, mangueras y correas (Badia y otros, 2013).

8.1.2 Descripción del Proceso

Proceso Sohio fue desarrollado en 1950 por científicos e ingenieros de la compañía petrolera estadounidense “Standard Oil of Ohio” (American Chemical Society National Historic Chemical Landmarks, 2015).

El proceso Sohio consta de hacer reaccionar, por medio de un catalizador, propileno (C_3H_6), oxígeno (aire) y amoníaco (NH_3) en un reactor de lecho fluidizado para producir acrilonitrilo (C_3H_3N). Las temperaturas de operación del reactor varían de 400 a 500°C y las presiones de 0.3 a 2 bar, aunque éstas últimas pueden variar también entre 1.5 y 3 atm (NPTEL, 2012).



Al reactor entran en proporciones estequiométricas los reactivos con un tiempo de residencia de escasos segundos. El proceso es altamente selectivo por lo que no requiere de recirculación de acrilonitrilo para aumentar el rendimiento. El principal subproducto de este proceso es el acetonitrilo y el cianuro de hidrogeno. Es posible recuperar el calor producido por la reacción por medio de vapor a alta presión.

El catalizador utilizado para llevar a cabo la reacción es una combinación de bismuto con fosfomolibdato, es posible utilizar otro tipo de catalizadores para aumentar la eficiencia del

proceso y de esta forma disminuir la cantidad de subproductos, ejemplo de estos son combinaciones como: antimonio-uranio y ferrobismuto-fosfomolibdato (W. Langvardt, 2012).

El efluente del reactor es enfriado y lavado con agua en un absorbedor a contracorriente. El gas residual, que contiene principalmente nitrógeno, se ventila. Los productos de reacción permanecen en la fase acuosa. El acetonitrilo se elimina por destilación extractiva. El acrilonitrilo en bruto y el cianuro de hidrógeno se destilan por la cabeza, mientras que el agua y el acetonitrilo se eliminan del fondo de las columnas. En destilaciones posteriores, el cianuro de hidrógeno se separa del acrilonitrilo húmedo, luego se reduce el contenido de agua y finalmente se eliminan las impurezas no volátiles.

Los principales subproductos de este proceso, el cianuro de hidrógeno y el acetonitrilo, normalmente se incineran ya que su suministro a menudo excede la demanda. El amoníaco no utilizado puede recuperarse como sulfato de amonio y luego desecharse, pero normalmente se ventila a la atmósfera. Los residuos acuosos que contienen cianuros, sulfatos y diversos subproductos orgánicos deben eliminarse mediante incineración o inyección en pozos profundos o en algunos casos deben ser pre-tratados para su posterior manejo como desechos biológicos (W. Langvardt, 2012).

8.1.2.1 Proceso con Recuperación de Calor

A continuación, se simuló en HYSYS la producción de acrilonitrilo a partir de la reacción de propileno, amoníaco y oxígeno (aire). Se utilizó un sistema con recuperación de calor de la corriente de gases provenientes del reactor.

Las condiciones de reacción son 450°C a la entrada del reactor y 500°C en la salida del mismo, con una conversión del 95% y una presión de 2 bar. En la entrada se tendrá una corriente de amoníaco y una mezcla de propileno (90%) y propeno (10%) con un flujo de 100 kmol/h y 112 kmol/h respectivamente. También se tendrá una corriente de aire para suministrar el oxígeno necesario a 50% de exceso. Las 3 corrientes de entrada se encuentran a 25°C y 1 bar.

Primeramente, las corrientes de entrada de amoníaco, propileno y aire se mezclaron y se introdujeron a un compresor para elevar su presión a la presión de reacción. Seguidamente se mezclaron con vapor a 2 bar y 50 kmol/h para evitar que los compuestos se inflamen. Posteriormente se introdujeron al intercambiador de calor EA-101 para precalentarse a 440°C y para nuevamente pasar por un intercambiador de calor y elevar su temperatura a la temperatura de reacción y de esta manera entrar al reactor. A la salida del reactor se introdujo la corriente nuevamente al intercambiador EA-101 para aprovechar el calor generado durante la reacción. Para esta simulación se utilizó el paquete termodinámico de Antoine.

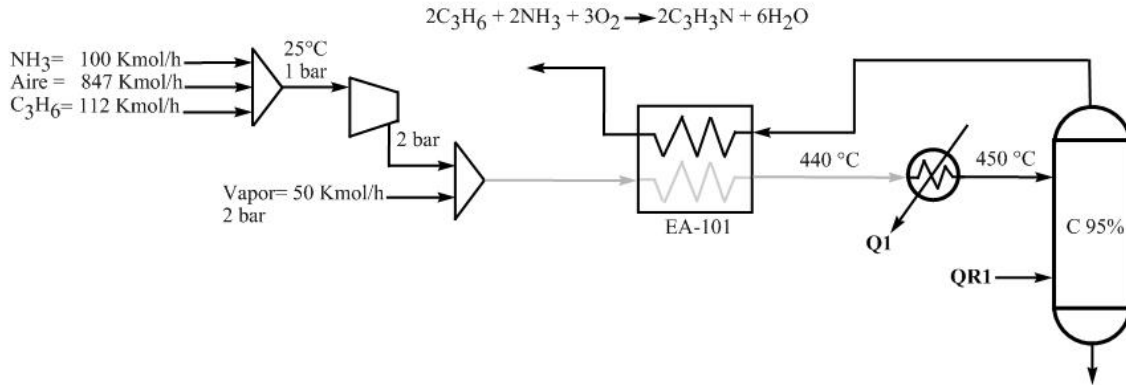


Diagrama 8.1 Producción de Acrilonitrilo por Recuperación de Calor.

8.1.2.1.1 Resultados de la simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS.

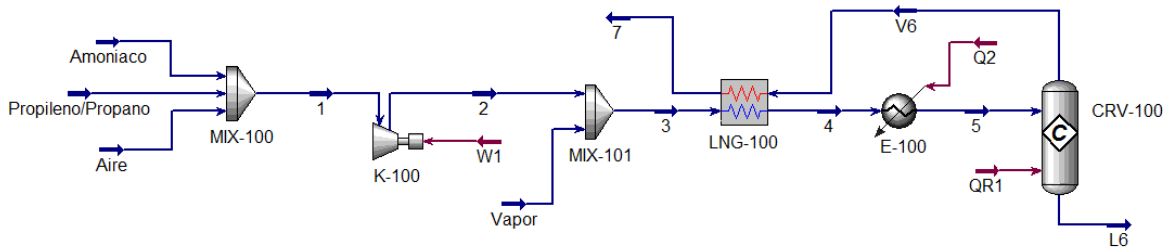


Diagrama 8.2 Simulación en HYSYS de la producción de Acrilonitrilo por Recuperación de Calor.

Material Streams								
		Propileno/Propano	Amoniaco	Aire	1	2	4	
Vapour Fraction		1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Temperature	C	25.00	25.00	25.00	24.66	97.31	440.0	
Pressure	kPa	100.0	100.0	100.0	100.0	200.0	200.0	
Molar Flow	kgmole/h	112.0	100.0	847.0	1059	1059	1109	
Mass Flow	kg/h	4736	1703	2.444e+004	3.087e+004	3.087e+004	3.178e+004	
Liquid Volume Flow	m3/h	9.117	2.764	28.25	40.13	40.13	41.03	
Heat Flow	kJ/h	8.826e+005	-4.579e+006	-5362	-3.701e+006	-1.064e+006	1.764e+006	
		5	V6	L6	7	Vapor	3	
Vapour Fraction		1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	
Temperature	C	450.0	500.0	500.0	173.8	120.2	97.80	
Pressure	kPa	200.0	200.0	200.0	200.0	200.0	200.0	
Molar Flow	kgmole/h	1109	1157	0.0000	1157	50.00	1109	
Mass Flow	kg/h	3.178e+004	3.177e+004	0.0000	3.177e+004	900.8	3.178e+004	
Liquid Volume Flow	m3/h	41.03	38.08	0.0000	38.08	0.9026	41.03	
Heat Flow	kJ/h	2.234e+006	-4.454e+007	0.0000	-5.927e+007	-1.190e+007	-1.297e+007	

Elaboración de un Manual Integral de Procesos Químicos Asistido por Computadora

Compositions						
	Propileno/Propano	Amoniaco	Aire	1	2	4
Comp Mole Frac (Propene)	0.9000	0.0000	0.0000	0.0952	0.0952	0.0909
Comp Mole Frac (Propane)	0.1000	0.0000	0.0000	0.0106	0.0106	0.0101
Comp Mole Frac (Ammonia)	0.0000	1.0000	0.0000	0.0944	0.0944	0.0902
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000	0.2099	0.1679	0.1679	0.1603
Comp Mole Frac (AcryloNitril)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0451
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.0000	0.7901	0.6320	0.6320	0.6035
	5	V6	L6	7	Vapor	3
Comp Mole Frac (Propene)	0.0909	0.0035	0.0060	0.0035	0.0000	0.0909
Comp Mole Frac (Propane)	0.0101	0.0097	0.0197	0.0097	0.0000	0.0101
Comp Mole Frac (Ammonia)	0.0902	0.0028	0.0023	0.0028	0.0000	0.0902
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.1603	0.0282	0.0144	0.0282	0.0000	0.1603
Comp Mole Frac (AcryloNitril)	0.0000	0.0836	0.6134	0.0836	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (H2O)	0.0451	0.2940	0.0389	0.2940	1.0000	0.0451
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.6035	0.5782	0.3053	0.5782	0.0000	0.6035

Energy Streams				
		W1	Q2	QR1
Heat Flow	kJ/h	2.637e+006	4.704e+005	-4.677e+007

8.2 Producción de Acroleína

8.2.1 Generalidades

En el presente apartado se presentan los aspectos generales del proceso de producción de acroleína, sus propiedades físicas y termoquímicas, la importancia económica a nivel nacional y/o internacional (cuando así se presente) y el precio en el mercado de los reactivos y productos correspondientes al proceso de estudio, así como también, las aplicaciones y usos en la vida diaria y a nivel industrial a los que es destinado este compuesto.

8.2.1.1 Propiedades Físicas y Termoquímicas

La acroleína ($\text{CH}_2=\text{CHCHO}$) es un líquido volátil, incoloro, de olor desagradable, soluble en agua y extremadamente inflamable. Se caracteriza por su alta reactividad, debido a la conjugación del grupo carbonilo con el grupo vinilo. La acroleína es extremadamente tóxica y es sumamente inflamable bajo temperatura y presión normales. Se polimeriza a temperatura ambiental, catalizada por la luz y el aire, debido a ello comercialmente es almacenada con hidroquinona y ácido acético como inhibidores (Arntz, y otros, 2012). A continuación, se proporcionan las propiedades físicas y termoquímicas de este compuesto.

Tabla 8.4 Propiedades físicas y termoquímicas de la Acroleína.

Propiedades Físicas	
Densidad	0.8427 kg/m ³
Masa molar	56.06 g/mol
Punto de fusión	-87 °C
Punto de ebullición	52.7 °C
Temperatura crítica	233 °C
Presión crítica	50.66 bar
Factor acéntrico (ω)	----
$\Delta H^\circ_{\text{fgas}}$	kJ/mol
$\Delta H^\circ_{\text{flíquido}}$	kJ/mol

8.2.1.2 Importancia Económica

En México anteriormente se utilizaba la acroleína para la producción de metionina (aminoácido), sin embargo, su producción no era lo suficientemente grande para alcanzar una fracción arancelaria en el mercado internacional. Sin embargo, otros países como Canadá, Estados Unidos, Bélgica, Brasil, Francia, Japón y Unión de Repúblicas Socialistas emplean a la acroleína como materia prima para la producción de este mismo compuesto para la producción de alimento de ganado (Galindo, 1997).

Actualmente es un compuesto de interés como intermediario en la síntesis y producción industrial de compuestos orgánicos terminados de alto valor comercial en el mercado nacional e internacional.

8.2.1.2.1 Costos de la Materia Prima y Productos

A continuación, se presentan los costos de los reactivos y productos principales que intervienen en el proceso de producción de acroleína.

Tabla 8.5 Costos de los reactivos y productos para la producción de Acroleína.

Nombre	Costos
Propileno (13/01/2018)	\$18,570.00 MXN/Tonelada
Acroleína (06/06/2016)	\$21,000.00 MXN/Tonelada

Información obtenida de: *CME Group y el Sistema Nacional de Información e Integración de Mercados y Petróleos Mexicanos. Base Institucional.*

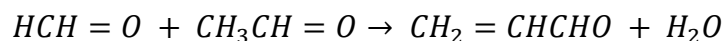
8.2.1.3 Aplicaciones de la Acroleína

La acroleína es utilizada para la producción de metionina; un aminoácido que es empleado en alimentos balanceados para animales de producción de carne, especialmente en especies de gran tamaño. También se utiliza como pesticida para controlar algas, hierbas, bacterias y moluscos, así como también para la producción de glutaraldehído y ácido acrílico por oxidación de la misma (Agency For Toxic Substances And Disease Registry, 1999). Anteriormente era utilizada para la producción de glicerina, sin embargo, este proceso fue sustituido debido al impacto medio ambiental de la acroleína.

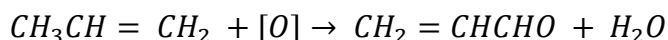
Otra de sus aplicaciones más comunes en la industria de la manufactura es como materia prima para la producción de alcohol alílico, mediante su hidrogenación (Rojas & otros, 2009), y ácido acrílico (Csepei, 2011).

8.2.2 Descripción del Proceso

El primer proceso comercial para la producción de acroleína consiste en la condensación de la fase vapor del acetaldehído y formaldehído como se muestra en la siguiente reacción.



Durante años de investigación los procesos catalíticos condujeron a procesos de fase vapor para la producción de acroleína a partir del propileno como reactivo.



La oxidación catalítica en fase de vapor de propileno es generalmente llevada a cabo en un reactor multi-tubo de lecho fijo a presiones casi atmosféricas o hasta de 2 bar y temperaturas elevadas (alrededor de 350 °C); es común que en la industria se utilice sal fundida para el control de la temperatura (G. Speight, 2002).

El aire se usa comúnmente como fuente de oxígeno, a éste se le agrega vapor para suprimir la formación de mezclas de gases inflamables. La operación puede ser de un solo paso o el vapor puede ser reutilizado en la planta.

Los efluentes gaseosos que salen del reactor se enfrían para condensar y separar la acroleína del propileno sin reaccionar, oxígeno y otros componentes de bajo punto de ebullición (nitrógeno).

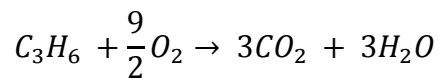
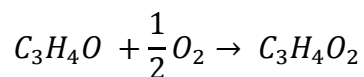
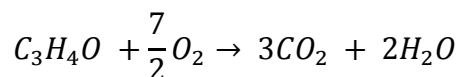
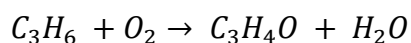
Esto se logra comúnmente en dos etapas de absorción:

- **Etapa 1:** En esta etapa el ácido acrílico acuoso ($\text{CH}_2 = \text{CHCO}_2\text{H}$) se condensa a partir del efluente de la reacción y se absorbe en una corriente acuosa.
- **Etapa 2:** Seguidamente la acroleína se condensa y se absorbe en agua para separarla del propileno, nitrógeno, oxígeno y óxidos de carbono. Es posible recuperar el ácido acrílico de la corriente de producto acuosa si se desea.

Los pasos posteriores de refinación de destilación separan agua y acetaldehído (CH_3CHO) de la acroleína cruda. Posteriormente en otra columna de destilación, la acroleína refinada se recupera como un azeótropo con agua.

Es importante mencionar que las principales reacciones secundarias producen ácido acrílico, acetaldehído, ácido acético, monóxido de carbono y dióxido de carbono, y una variedad de otros aldehídos y ácidos que se forman en pequeñas cantidades (G. Speight, 2002).

Es importante tener consideraciones de seguridad y mantenimiento del catalizador, una de ellas es no superar en el reactor una temperatura mayor a 320°C y tener en cuenta que en la realidad existen las siguientes reacciones secundarias durante el proceso (West Virginia University):



8.2.2.1 Proceso con Inter-Enfriamiento

A continuación, se simuló en HYSYS la producción de acroleína a partir de la reacción de propileno y oxígeno (aire). Se representará al reactor multi-tubo como 3 reactores de conversión y se utilizó un sistema de inter-enfriamiento en la entrada de cada reactor para favorecer una mayor conversión de los reactivos.

Las condiciones de reacción son 270°C a la entrada del reactor y 320°C en la salida del mismo, con una conversión del 40% y una presión de 2 bar.

En la entrada se tendrá una corriente de propileno con un flujo de 500 kmol/h. También se tendrá una corriente de aire para suministrar el oxígeno necesario a 50% de exceso. Las 2 corrientes de entrada se encuentran a 25°C y 1 bar.

Se mezclan las dos corrientes de entrada y se comprimen a 2 bar. Posteriormente se precalientan a 110 °C para luego elevar su temperatura nuevamente a 270°C. Subsecuentemente pasan al primer reactor para después ser enfriados los vapores nuevamente a la temperatura de reacción, el ciclo se repite hasta el tercer reactor en dónde finalmente se enfrían los vapores de acroleína a 120°C. Para esta simulación se utilizó el paquete termodinámico de Antoine.

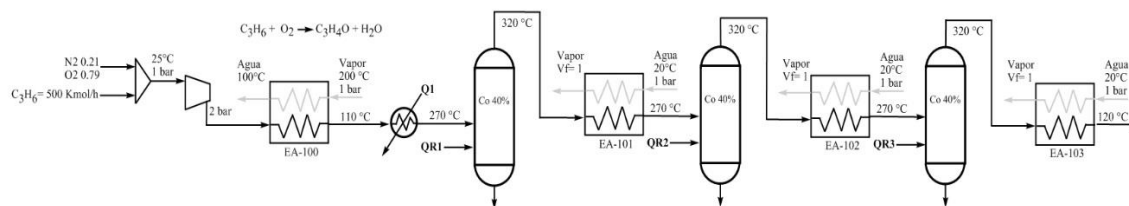


Diagrama 8.3 Producción de Acroleína con Inter-enfriamiento.

8.2.2.1.1 Resultados de la simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS.

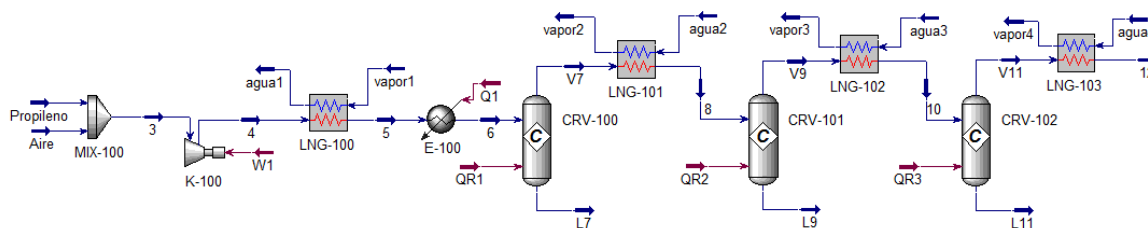


Diagrama 8.4 Simulación en HYSYS de la producción de Acroleína con Inter-enfriamiento.

Elaboración de un Manual Integral de Procesos Químicos Asistido por Computadora

Material Streams									
		Propileno	Aire	3	4	5	vapor1	agua1	6
Vapour Fraction		1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Temperature	C	25.00	25.00	24.70	95.21	110.0	200.0	100.0	270.0
Pressure	bar	1.000	1.000	1.000	2.000	2.000	1.000	1.000	2.000
Molar Flow	kgmole/h	500.0	2822	3322	3322	3322	497.6	497.6	3322
Mass Flow	kg/h	2.104e+004	8.142e+004	1.025e+005	1.025e+005	1.025e+005	8964	8964	1.025e+005
Liquid Volume Flow	m3/h	40.39	94.12	134.5	134.5	134.5	8.982	8.982	134.5
Heat Flow	kcal/h	2.428e+006	-4270	2.423e+006	4.396e+006	4.825e+006	-2.794e+007	-2.837e+007	9.752e+006
		V7	L7	8	agua2	vapor2	V9	L9	10
Vapour Fraction		1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000
Temperature	C	320.0	320.0	270.0	20.00	99.61	320.0	320.0	270.0
Pressure	bar	2.000	2.000	2.000	1.000	1.000	2.000	2.000	2.000
Molar Flow	kgmole/h	3322	0.0000	3322	147.4	147.4	3322	0.0000	3322
Mass Flow	kg/h	1.025e+005	0.0000	1.025e+005	2656	2656	1.025e+005	0.0000	1.025e+005
Liquid Volume Flow	m3/h	129.6	0.0000	129.6	2.662	2.662	126.7	0.0000	126.7
Heat Flow	kcal/h	-4.439e+006	0.0000	-6.085e+006	-1.005e+007	-8.407e+006	-1.394e+007	0.0000	-1.559e+007
		agua3	vapor3	V11	L11	12	agua4	vapor4	
Vapour Fraction		0.0000	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0000	
Temperature	C	20.00	99.61	320.0	320.0	120.0	20.00	99.61	
Pressure	bar	1.000	1.000	2.000	2.000	2.000	1.000	1.000	
Molar Flow	kgmole/h	147.6	147.6	3322	0.0000	3322	566.6	566.6	
Mass Flow	kg/h	2659	2659	1.025e+005	0.0000	1.025e+005	1.021e+004	1.021e+004	
Liquid Volume Flow	m3/h	2.665	2.665	124.9	0.0000	124.9	10.23	10.23	
Heat Flow	kcal/h	-1.006e+007	-8.417e+006	-1.964e+007	0.0000	-2.596e+007	-3.863e+007	-3.231e+007	

Compositions												
	Propileno	Aire	3	4	5	vapor1	agua1	6	V7	L7	8	agua2
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	1.0000	0.0000	0.0602	0.0170	0.0602	1.0000
Comp Mole Frac (Propene)	1.0000	0.0000	0.1505	0.1505	0.1505	0.0000	0.0000	0.1505	0.0903	0.1728	0.0903	0.0000
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.2100	0.1784	0.1784	0.1784	0.0000	0.0000	0.1784	0.1182	0.0376	0.1182	0.0000
Comp Mole Frac (Acrolein)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0602	0.5647	0.0602	0.0000
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.7900	0.6711	0.6711	0.6711	0.0000	0.0000	0.6711	0.6711	0.2079	0.6711	0.0000
	vapor2	V9	L9	10	agua3	vapor3	V11	L11	12	agua4	vapor4	
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	0.0963	0.0240	0.0963	1.0000	1.0000	0.1180	0.0277	0.1180	1.0000	1.0000	
Comp Mole Frac (Propene)	0.0000	0.0542	0.0815	0.0542	0.0000	0.0000	0.0325	0.0433	0.0325	0.0000	0.0000	
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0821	0.0205	0.0821	0.0000	0.0000	0.0604	0.0134	0.0604	0.0000	0.0000	
Comp Mole Frac (Acrolein)	0.0000	0.0963	0.7104	0.0963	0.0000	0.0000	0.1180	0.7708	0.1180	0.0000	0.0000	
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.6711	0.1635	0.6711	0.0000	0.0000	0.6711	0.1448	0.6711	0.0000	0.0000	

Energy Streams						
		W1	Q1	QR1	QR2	QR3
Heat Flow	kcal/h	1.973e+006	4.927e+006	-1.419e+007	-7.855e+006	-4.053e+006

8.3 Síntesis de Amoniacó

8.3.1 Generalidades

En el presente apartado se presentan los aspectos generales del proceso de producción de amoniacó, sus propiedades físicas y termoquímicas, la importancia económica a nivel nacional y/o internacional (cuando así se presente) y el precio en el mercado de los reactivos y productos correspondientes al proceso de estudio, así como también, las aplicaciones y usos en la vida diaria y a nivel industrial a los que es destinado este compuesto.

8.3.1.1 Propiedades Físicas y Termoquímicas

El amoniacó (NH_3) es un gas incoloro con un olor penetrante y desagradable que, en altas concentraciones, produce una sensación sofocante cuando se inhala. El amoniacó es soluble en agua y es capaz de formar una solución alcalina cuando es mezclado con ésta. A continuación, se proporcionan las propiedades físicas y termoquímicas de este compuesto.

Tabla 8. 6 Propiedades físicas y termoquímicas del Amoniacó.

Propiedades Físicas	
Densidad	0.817 a -79°C / 0.617 a 15°C kg/m^3
Masa molar	17.03 g/mol
Punto de fusión	-77.7°C
Punto de ebullición	-33.4°C
Temperatura crítica	132°C
Presión crítica	112.99 bar
Factor acéntrico (ω)	0.25
$\Delta H^\circ_{\text{fgas}}$	-45.92 kJ/mol
$\Delta H^\circ_{\text{flíquido}}$	-40.2 kJ/mol

8.3.1.2 Importancia Económica

Alrededor del 1.4% de energía fósil es utilizada para la producción de amoniacó. En los países desarrollados el amoniacó generalmente es el producto número uno de la industrialización. Casi el 85% del nitrógeno en el mundo es utilizado para la producción de fertilizantes, lo que hace pensar que la industria del amoniacó crecerá al mismo ritmo que la población mundial.

El amoniacó ocupa el segundo lugar, después del ácido sulfúrico, como el producto químico con más tonelaje en el mundo. Actualmente es producido por países que cuentan con bajos costos de materia prima de gas natural y carbón, cómo son China y Rusia. Las plantas químicas más grandes del mundo producen alrededor de 3,000 toneladas al día. Actualmente se planea la construcción de nuevas industrias que puedan producir entre 4,000 y 5,000 toneladas diarias. La producción de este compuesto en el mundo se divide de la siguiente manera:

Tabla 8.7 Producción mundial de Amoníaco.

País	Millones de Toneladas
China	48
Rusia	12
India	11
Estados Unidos	9
Indonesia	5
Trinidad y Tobago	5
Ucrania	4
Total Mundial	146

Fuente: U.S. Geological Survey, Mineral Commodity Summaries, 2016.

Según los datos obtenidos de la *International Fertilizer Association* en 2014, se espera que en el año 2018 la demanda de amoníaco en todo el mundo sea de aproximadamente 200 millones de toneladas.

8.3.1.2.1 Costos de la Materia Prima y Productos

A continuación, se presentan los costos de los reactivos y productos que intervienen en el proceso de producción de Amoníaco.

Tabla 8.8 Costos de los reactivos y productos para la producción de Amoníaco.

Nombre	Costos
Gas natural (13/01/2018)	\$63.44 MXN/MMBtu
Amoníaco (29/12/2017)	\$11,140.02 - \$14,853.36 MXN/Tonelada

Información obtenida de: *CME Group y el Sistema Nacional de Información e Integración de Mercados*.

8.3.1.3 Aplicaciones del Amoníaco

La producción de amoníaco es de vital importancia para la industria agrícola en el mundo debido a que más del 85% de este compuesto se utiliza para la producción de fertilizantes que incluyen urea, sales de amonio como: fosfatos de amonio, nitrato de amonio, nitrato de calcio y amonio, y soluciones de amoníaco (The NEED Project, 2014).

Actualmente, cada átomo de nitrógeno en compuestos químicos utilizados industrialmente proviene directamente o indirectamente del amoníaco. Uno de sus usos más importantes, parcialmente después de su conversión a ácido nítrico, es en la producción de plásticos y fibras, como son las poliamidas, urea, resinas en base de melamina, poliuretanos y poli-acrilonitrilo. Otra de sus aplicaciones se encuentra en la fabricación de explosivos, hidracina, aminas, amidas, nitrilos y otros componentes orgánicos de nitrógeno, que sirven de intermediarios para la manufactura de tintes y farmacéuticos. Algunos otros productos inorgánicos son ácido nítrico, nitrato de sodio, cianuro de sodio, cloruro de amonio y bicarbonato de amonio (Appl, 2012).

Dentro del sector ambiental el amoniaco es utilizado para la remoción de SO₂ proveniente de efluentes de gases de plantas de combustible fósil. El sulfato de amoniaco resultante es vendido como fertilizante.

Otra de sus aplicaciones se encuentra en el uso de éste como solvente para procesos específicos, así como también en la nitruración de acero y en algunos casos como refrigerante, debido a que cuenta con un bajo punto de ebullición y un alto calor de evaporación.

8.3.2 Descripción del Proceso

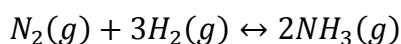
La producción de amoniaco a partir de nitrógeno e hidrogeno tiene lugar en dos etapas:

a) La manufactura de hidrógeno

El hidrógeno es obtenido a partir de diferentes fuentes de energía como es el gas natural, el carbón y/o la nafta. La mayoría de las plantas productoras de amoniaco generan el hidrógeno a partir del reformado con vapor de agua del gas natural o hidrocarburos como la nafta. Para más información sobre el tema se recomienda indagar sobre la producción del Gas de Síntesis.

b) Síntesis de amoniaco (Proceso Haber)

El primer avance para la síntesis de amoniaco fue en 1913 con el desarrollo del proceso Haber, en el cual el amoniaco es producido con la combinación directa del nitrógeno y el hidrógeno en presencia de un catalizador a temperaturas elevadas (550°C) y presiones bajas (20.3 MPa). El catalizador original que Haber utilizó fue Fe₃O₄, que se redujo por el reactivo, hidrógeno, a hierro, sin embargo, es posible utilizar otros tipos de catalizadores como hidróxido de potasio (University of York Centre for Industry Education Collaboration, 2016).



En el proceso Haber la corriente de gases que alimentan al reactor se encuentran entre los 400 y 600 °C. El reactor contiene óxido de hierro como catalizador, que es reducido a hierro. Los gases de salida son enfriados entre -0 y -20°C, y parte del amoniaco es licuado; los gases remanentes se recirculan nuevamente a la entrada del reactor (University of York Centre for Industry Education Collaboration, 2016).

El corazón del proceso es la reacción entre el hidrógeno y el nitrógeno en un reactor de lecho fijo. Debido a que la reacción es exotérmica, en la práctica se agregan los reactivos fríos (nitrógeno e hidrógeno) para reducir la temperatura de los reactores.

En reactores de lecho múltiple, el catalizador está dispuesto en lechos separados. Entre las capas, el gas se enfría con un intercambiador de calor o mediante la adición de gas de síntesis frío. Un ejemplo de este tipo de reactor es el ÖSW, diseñado por Österreichischen S. W. Los reactores, directamente enfriados mediante la alimentación de gas frío (llamados también como reactores Quench), son los más utilizados. Un ejemplo de este tipo de reactor es el Kellog (Appl, 2012).

Actualmente se utilizan una amplia gama de condiciones, dependiendo de la construcción del reactor. Las temperaturas utilizadas varían entre 600 y 700 K, y las presiones entre 100 y 200 atmósferas. Además, para obtener un rendimiento razonable y una velocidad favorable, se usan altas presiones, temperaturas moderadas y un catalizador (Appl, 2012).

El amoníaco generalmente se almacena y se bombea a otra parte de la planta donde se convierte en un fertilizante (urea o una sal de amonio). Sin embargo, a veces se transporta por mar o por carretera, para ser utilizado en otra planta.

Recientemente, la investigación se ha centrado en encontrar catalizadores aún más efectivos para permitir que el proceso tenga lugar a presiones y temperaturas más bajas. Actualmente se apuesta a que el uso de rutenio en una superficie de grafito es una propuesta prometedora.

8.3.2.1 Proceso con Recirculación

A continuación, se simuló en HYSYS la producción de amoníaco a partir de la reacción de nitrógeno e hidrógeno. Se utilizó un sistema con recirculación de vapor de amoníaco con la finalidad de enriquecer la mezcla de gases y obtener un mejor rendimiento en el reactor.

Las condiciones de reacción son 450°C a la entrada del reactor y 500°C en la salida del mismo con una conversión del 90%. En la entrada se tendrá una corriente de aire y otra de hidrógeno resultante de la producción de gas de síntesis. Los flujos de entrada son 1,000 kmol/h de aire y 1,000 kmol/h de hidrógeno a 25°C y 1 bar. Seguidamente ambas corrientes se mezclan y se comprimen a 100 bar. Posteriormente se calienta la corriente a la temperatura de reacción y se introduce al reactor, a la salida del mismo se enfría la corriente a 0°C y se pasa por una válvula donde se expande a 1 bar. Finalmente pasa a un separador flash a presión constante donde se separa el amoníaco, los gases resultantes se purgan y se recirculan hacia la entrada del proceso. Para este proceso se utilizó el paquete termodinámico de Peng-Robinson.

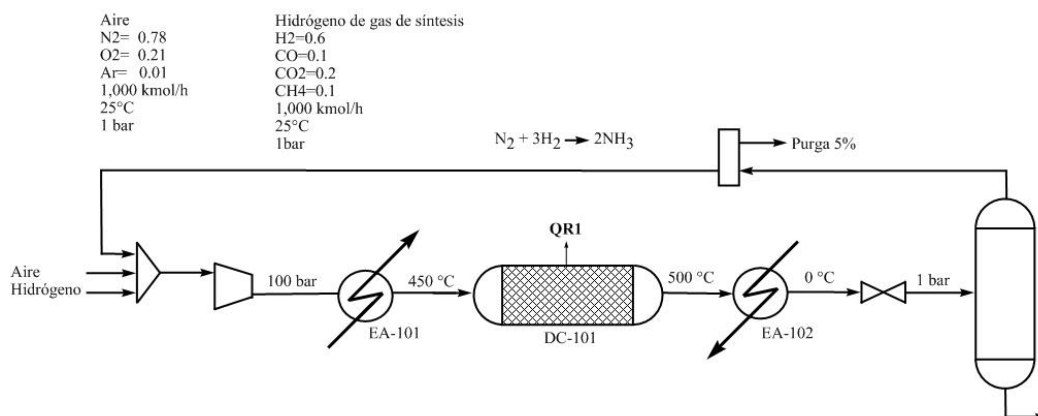


Diagrama 8.5 Síntesis de Amoníaco por Recirculación.

8.3.2.1.1 Resultados de la simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS. La función de recircular la corriente 9V en el proceso es de enriquecer la mezcla de gases de entrada con hidrógeno y nitrógeno que no reaccionaron dentro del reactor, con ello se pretende aumentar la conversión de ambos reactivos en amoníaco, reduciendo de esta manera los reactivos remanentes.

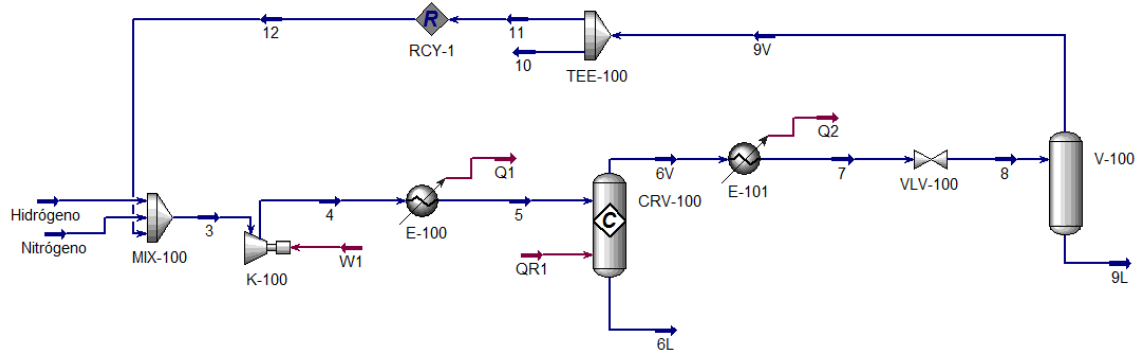


Diagrama 8.6 Simulación en HYSYS de la producción de Amoníaco por Recirculación.

Material Streams								
		Hidrógeno	Nitrógeno	3	4	5	6V	6L
Vapour Fraction		1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000
Temperature	C	25.00	25.00	-64.08	549.8	450.0	500.0	500.0
Pressure	kPa	100.0	100.0	100.0	1.000e+004	1.000e+004	1.000e+004	1.000e+004
Molar Flow	kgmole/h	1000	1000	3.455e+004	3.455e+004	3.455e+004	3.431e+004	0.0000
Mass Flow	kg/h	1.442e+004	2.897e+004	8.568e+005	8.568e+005	8.568e+005	8.568e+005	0.0000
Liquid Volume Flow	m3/h	36.84	33.30	1229	1229	1229	1221	0.0000
Heat Flow	kJ/h	-9.731e+007	-8091	-2.215e+009	-1.492e+009	-1.623e+009	-1.571e+009	0.0000
		7	8	9V	9L	10	11	12
Vapour Fraction		0.9485	0.9979	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Temperature	C	0.0000	-69.50	-69.50	-69.50	-69.50	-69.50	-69.46
Pressure	kPa	1.000e+004	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0
Molar Flow	kgmole/h	3.431e+004	3.431e+004	3.424e+004	71.41	1712	3.253e+004	3.255e+004
Mass Flow	kg/h	8.568e+005	8.568e+005	8.555e+005	1256	4.278e+004	8.127e+005	8.134e+005
Liquid Volume Flow	m3/h	1221	1221	1219	2.012	60.97	1158	1159
Heat Flow	kJ/h	-2.233e+009	-2.233e+009	-2.227e+009	-5.805e+006	-1.113e+008	-2.115e+009	-2.117e+009

Compositions							
	Hidrógeno	Nitrógeno	3	4	5	6V	6L
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.2100	0.1226	0.1226	0.1226	0.1235	0.1235
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.7800	0.3889	0.3889	0.3889	0.3881	0.3880
Comp Mole Frac (Argon)	0.0000	0.0100	0.0058	0.0058	0.0058	0.0059	0.0059
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.6000	0.0000	0.1462	0.1462	0.1462	0.1367	0.1366
Comp Mole Frac (CO2)	0.2000	0.0000	0.1163	0.1163	0.1163	0.1171	0.1172
Comp Mole Frac (CO)	0.1000	0.0000	0.0584	0.0584	0.0584	0.0588	0.0588
Comp Mole Frac (Methane)	0.1000	0.0000	0.0584	0.0584	0.0584	0.0588	0.0588
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Ammonia)	0.0000	0.0000	0.1034	0.1034	0.1034	0.1112	0.1113
	7	8	9V	9L	10	11	12
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.1235	0.1235	0.1237	0.0001	0.1237	0.1237	0.1237
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.3881	0.3881	0.3889	0.0000	0.3889	0.3889	0.3888
Comp Mole Frac (Argon)	0.0059	0.0059	0.0059	0.0000	0.0059	0.0059	0.0059
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.1367	0.1367	0.1369	0.0000	0.1369	0.1369	0.1368
Comp Mole Frac (CO2)	0.1171	0.1171	0.1173	0.0208	0.1173	0.1173	0.1173
Comp Mole Frac (CO)	0.0588	0.0588	0.0589	0.0000	0.0589	0.0589	0.0589
Comp Mole Frac (Methane)	0.0588	0.0588	0.0589	0.0001	0.0589	0.0589	0.0589
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Ammonia)	0.1112	0.1112	0.1094	0.9790	0.1094	0.1094	0.1098

Energy Streams					
		Q1	QR1	W1	Q2
Heat Flow	kJ/h	1.311e+008	5.214e+007	7.223e+008	6.613e+008

8.3.2.2 Proceso con Inter-enfriamiento y Quench (enfriamiento súbito)

Para fines de estudio se simuló en HYSYS la producción de amoníaco a partir de la reacción de hidrógeno y nitrógeno. Debido a que el simulador tiene limitaciones en los diseños de reactores en vez de utilizar un reactor con 3 camas de reacción se ejemplificará con 3 reactores de conversión. Además, se utilizó un sistema de inter-enfriamiento y Quench que enriquecerá la mezcla proporcionando un mejor rendimiento para la obtención de amoníaco, así como también, regulará las temperaturas de entrada a cada reactor.

Las condiciones de reacción son 450°C a la entrada del reactor y 500°C a la salida del mismo, así como una conversión del 90%. Se tendrá una corriente de entrada de 1,500 kmol/h con una mezcla de 60% hidrógeno y 40% nitrógeno a 25°C y 1 bar. Seguidamente se comprime la corriente a 100 bar y se enfría a la temperatura de reacción, después pasa un divisor de flujo en dónde se divide la corriente de entrada en 3 partes iguales. Posteriormente la primera corriente pasa directamente al primer reactor y a la salida es mezclada con la segunda corriente de entrada, es enfriada a la temperatura de reacción y nuevamente se introduce al segundo reactor donde sucede el mismo proceso. A la salida del tercer reactor la corriente de proceso es enfriada a 0°C para posteriormente pasar por la válvula y expandirse a 1 bar. Finalmente, la corriente pasa a un separador flash. Para esta simulación se usará el paquete termodinámico de Peng Robinson.

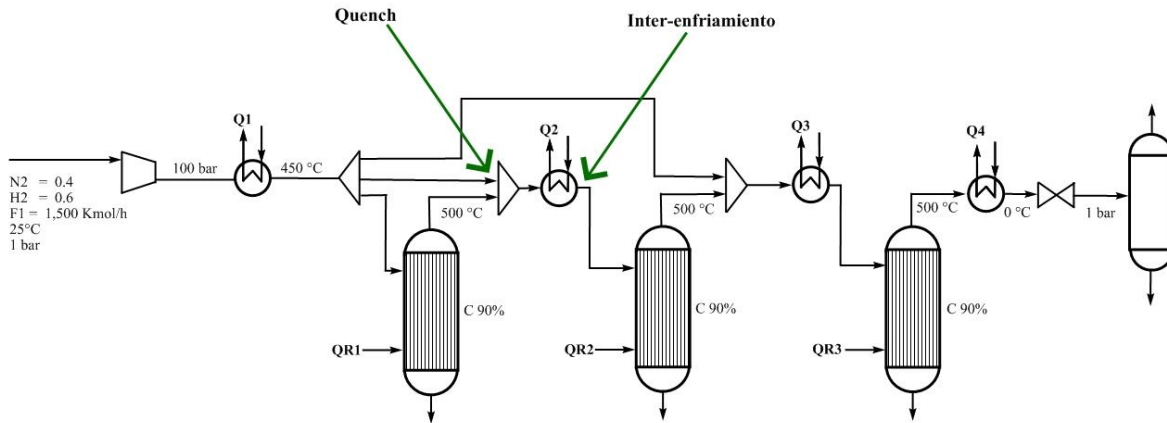


Diagrama 8.7 Síntesis de Amoníaco por Inter-enfriamiento y Quench.

8.3.2.2.1 Resultados de la Simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS. La función de aplicar un Quench (enfriamiento súbito) a la salida de los reactores es la de aumentar la conversión de los reactivos en amoníaco y remover parte del calor generado por la reacción exotérmica. Ahora bien, al implementar un intercambiador de calor que enfríe la mezcla permite regular con mayor precisión las temperaturas de entrada al reactor, proporcionando un mejor control del proceso.

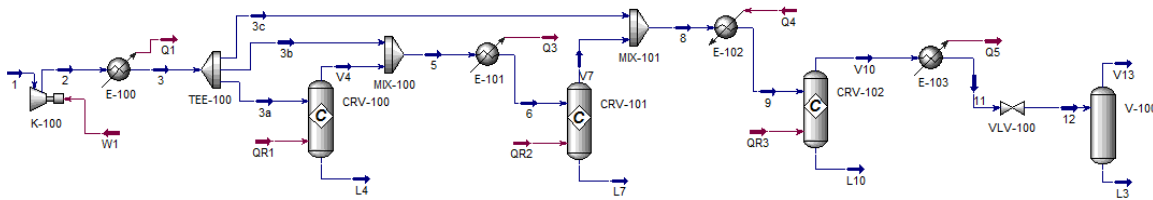


Diagrama 8.8 Simulación en HYSYS de la producción de Amoníaco por Inter-enfriamiento y Quench.

Material Streams											
		1	2	3	3a	3b	3c	V4	L4	5	6
Vapour Fraction		1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000
Temperature	C	25.00	1048	450.0	450.0	450.0	450.0	500.0	500.0	471.8	400.0
Pressure	kPa	100.0	1.000e+004	1.000e+004	1.000e+004	1.000e+004	1.000e+004	1.000e+004	1.000e+004	1.000e+004	1.000e+004
Molar Flow	kgmole/h	1500	1500	1500	495.0	495.0	510.0	316.8	0.0000	811.8	811.8
Mass Flow	kg/h	1.862e+004	1.862e+004	1.862e+004	6145	6145	6332	6145	0.0000	1.229e+004	1.229e+004
Liquid Volume Flow	m3/h	46.82	46.82	46.82	15.45	15.45	15.92	9.566	0.0000	25.02	25.02
Heat Flow	kJ/h	-3453	4.721e+007	1.895e+007	6.255e+006	6.255e+006	6.445e+006	-2.652e+006	0.0000	3.603e+006	1.569e+006
		V7	L7	8	9	V10	L10	11	12	V13	L3
Vapour Fraction		1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	0.3994	0.5247	1.0000	0.0000
Temperature	C	500.0	500.0	479.6	426.9	500.0	500.0	0.0000	-55.56	-55.56	-55.56
Pressure	kPa	1.000e+004	1.000e+004	1.000e+004	1.000e+004	1.000e+004	1.000e+004	1.000e+004	100.0	100.0	100.0
Molar Flow	kgmole/h	615.8	0.0000	1126	1126	922.6	0.0000	922.6	922.6	484.0	438.5
Mass Flow	kg/h	1.229e+004	0.0000	1.862e+004	1.862e+004	1.862e+004	0.0000	1.862e+004	1.862e+004	1.115e+004	7468
Liquid Volume Flow	m3/h	18.54	0.0000	34.46	34.46	27.75	0.0000	27.75	27.75	15.63	12.12
Heat Flow	kJ/h	-6.285e+006	0.0000	1.591e+005	-2.066e+006	-1.010e+007	0.0000	-3.966e+007	-3.966e+007	-7.553e+006	-3.211e+007

Compositions										
	1	2	3	3a	3b	3c	V4	L4	5	6
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.6000	0.6000	0.6000	0.6000	0.6000	0.6000	0.0937	0.0938	0.4024	0.4024
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.4000	0.4000	0.4000	0.4000	0.4000	0.4000	0.3437	0.3439	0.3780	0.3780
Comp Mole Frac (Ammonia)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.5625	0.5623	0.2195	0.2195
	V7	L7	8	9	V10	L10	11	12	V13	L3
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0531	0.0531	0.3008	0.3008	0.0367	0.0368	0.0367	0.0367	0.0700	0.0000
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.3392	0.3397	0.3668	0.3668	0.3374	0.3380	0.3374	0.3374	0.6431	0.0000
Comp Mole Frac (Ammonia)	0.6077	0.6072	0.3324	0.3324	0.6259	0.6252	0.6259	0.6259	0.2869	1.0000

Energy Streams									
		W1	Q1	Q3	Q4	Q5	QR1	QR2	QR3
Heat Flow	kJ/h	4.721e+007	2.825e+007	2.034e+006	-2.225e+006	2.956e+007	-8.907e+006	-7.854e+006	-8.032e+006

8.3.2.3 Proceso con Recuperación de Calor

Se simuló en HYSYS la producción de amoniaco a partir de la reacción de hidrógeno y nitrógeno. Se utilizó un sistema de recuperación de calor que consiste en utilizar el calor generado por la reacción exotérmica para calentar las corrientes de entrada al reactor (nitrógeno e hidrógeno).

Las condiciones de reacción son 450°C a la entrada del reactor y 500°C a la salida del mismo, con una conversión del 90%. Se tendrán dos corrientes de entrada una de 98% hidrógeno con 2% de metano y otra de nitrógeno puro. Los flujos molares de las corrientes son 150 Kmol/h y 50 Kmol/h respectivamente, ambas a 50°C y 100 bar. La corriente de hidrógeno entrará al intercambiador de calor EA-102 y se calentará a la temperatura de reacción, mientras que la corriente de nitrógeno entrará al intercambiador de calor EA-101 y de igual forma se calentará a la temperatura de reacción. Seguidamente ambas corrientes se mezclarán y se introducirán al reactor. Posteriormente la corriente de salida pasará a los dos intercambiadores de calor (EA-101 y EA-102) donde se aprovechará su energía para precalentar las corrientes de entrada. Se usará el paquete termodinámico de Peng Robinson.

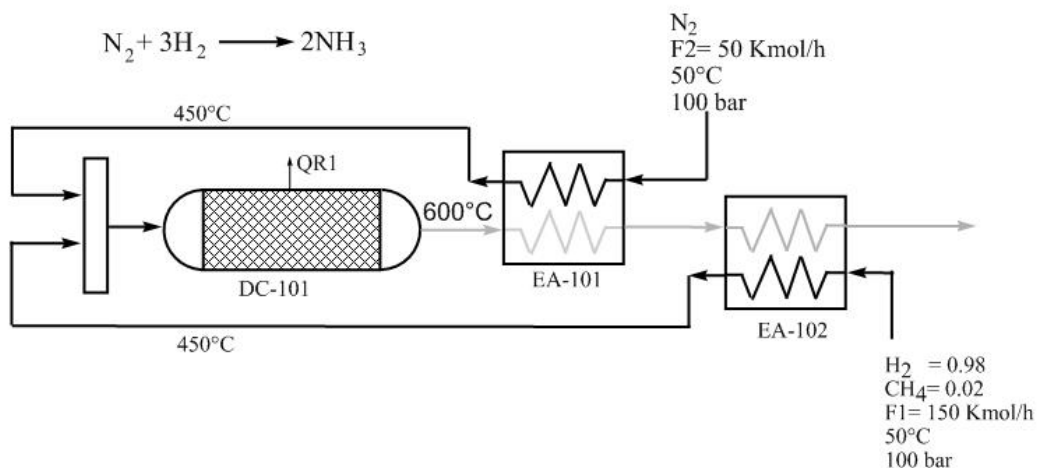


Diagrama 8.9 Síntesis de Amoniaco por Recuperación de Calor.

8.3.2.3.1 Resultados de la Simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS. La función de los intercambiadores de calor LNG-100 y LNG-101 en el proceso es de recuperar el calor generado por la reacción exotérmica y utilizarlo para calentar las corrientes de entrada de nitrógeno e hidrógeno, con la finalidad de aprovechar al máximo la energía evitando el uso de otros equipos de calentamiento.

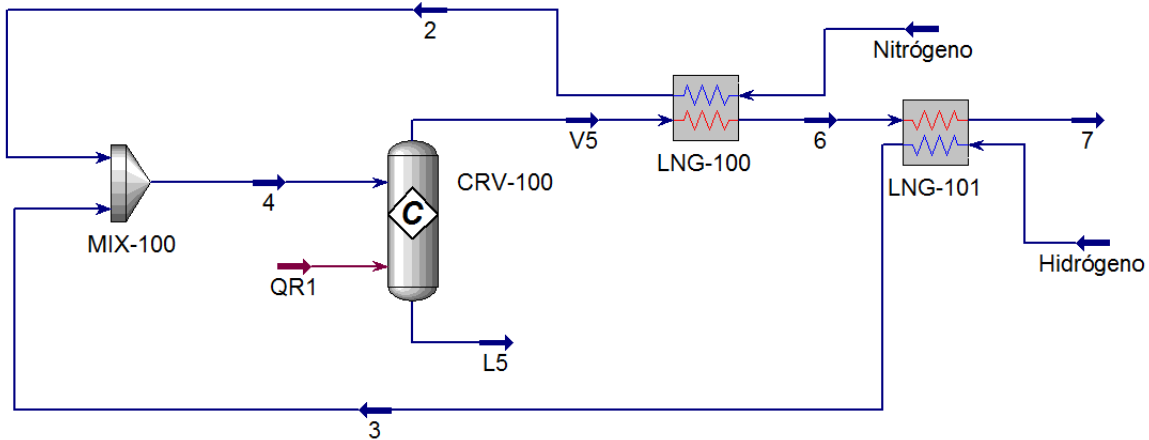


Diagrama 8.10 Simulación en HYSYS de la producción de Amoníaco por Recuperación de Calor.

Material Streams										
		Nitrógeno	4	V5	L5	6	7	2	Hidrógeno	3
Vapour Fraction		1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Temperature	C	50.00	449.8	600.0	600.0	486.9	149.3	450.0	50.00	450.0
Pressure	bar	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0
Molar Flow	kgmole/h	50.00	200.0	110.0	0.0000	110.0	110.0	50.00	150.0	150.0
Mass Flow	kg/h	1401	1745	1745	0.0000	1745	1745	1401	344.5	344.5
Liquid Volume Flow	m3/h	1.737	6.140	3.169	0.0000	3.169	3.169	1.737	4.403	4.403
Heat Flow	kcal/h	2336	5.531e+005	-4.126e+005	0.0000	-5.624e+005	-9.910e+005	1.521e+005	-2.756e+004	4.010e+005

Compositions									
	Nitrógeno	4	V5	L5	6	7	2	Hidrógeno	3
Comp Mole Frac (Nitrogen)	1.0000	0.2500	0.0455	0.0452	0.0455	0.0455	1.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.7350	0.1091	0.1086	0.1091	0.1091	0.0000	0.9800	0.9800
Comp Mole Frac (Ammonia)	0.0000	0.0000	0.8182	0.8190	0.8182	0.8182	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Methane)	0.0000	0.0150	0.0273	0.0272	0.0273	0.0273	0.0000	0.0200	0.0200

Energy Streams		
		QR1
Heat Flow	kcal/h	-9.657e+005

8.4 Anhídrido Maleico

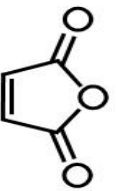
8.4.1 Generalidades

En el presente apartado se presentan los aspectos generales del proceso de producción de anhídrido maleico, sus propiedades físicas y termoquímicas, la importancia económica a nivel nacional y/o internacional (cuando así se presente) y el precio en el mercado de los reactivos y productos correspondientes al proceso de estudio, así como también, las aplicaciones y usos en la vida diaria y a nivel industrial a los que es destinado este compuesto.

8.4.1.1 Propiedades Físicas y Termoquímicas

El anhídrido maleico ($C_2H_2(CO)_2O$), conocido también como anhídrido tóxico o anhídrido butanodióico, en su estado puro, es un sólido cristalino incoloro o blanco de olor acre, irritante y muy corrosivo. Es un ácido fuerte que reacciona de forma violenta con bases y oxidantes fuertes. A continuación, se proporcionan las propiedades físicas y termoquímicas de este compuesto.

Tabla 8.9 Propiedades físicas y termoquímicas del Anhídrido Maleico.

Molécula	Propiedades Físicas y Termoquímicas	
 <p>Figura 8.1 Molécula de Anhídrido Maleico</p>	Densidad	1,323 kg/m ³
	Masa molar	98.06 g/mol
	Punto de fusión	52.85 °C
	Punto de ebullición	202 °C
	Temperatura crítica	447.9 °C
	Presión crítica	72.8 bar
	Factor acéntrico (ω)	0.5463
	$\Delta H^\circ_{\text{fgas}}$	-3.983e+005 kJ/mol
	$\Delta H^\circ_{\text{flíquido}}$	kJ/mol

8.4.1.2 Importancia Económica

La importancia de la fabricación de anhídrido maleico se basa casi en su totalidad en el mercado de la producción de resinas de poliéster insaturadas (UPR), esto es debido a la gran demanda de esta resina en la industria de la construcción (Velázquez Canseco, 2016).

Actualmente las industrias están realizando investigaciones exhaustivas para encontrar tecnologías que aprovechen todos los beneficios del AM evitando el daño al medio ambiente.

El mercado del AM ha venido creciendo desde el año 2010, tan solo el 44% de la capacidad de producción mundial corresponde al conjunto de países del continente asiático (Tecnon OribiChem, 2013).

A continuación, en la siguiente tabla se muestran los porcentajes de los principales consumidores de AM en el año 2012:

Tabla 8.10 Consumo mundial de Anhídrido Maleico en el año 2012.

País	Porcentaje
China	52.9%
USA	15%
Italia	4.7%
Alemania	4.9%
Japón	5%
Otros Países	17.5%

Fuente: Anhídrido maleico (MA): 2013 World Market Outlook y Pronóstico hasta 2017.

8.4.1.2.1 Costos de la Materia Prima y Productos

A continuación, se presentan los costos actualizados de los reactivos y productos del proceso de producción de anhídrido maleico.

Tabla 8.11 Costos de los reactivos y productos para el proceso de producción de Anhídrido Maleico.

Nombre	Costos
Benceno (30/11/2013)	\$19,618.51 MXN/Tonelada
Butano (13/11/2017)	\$ 10,790.53 MXN/Tonelada
Anhídrido Maleico	\$243,440.00 MXN/Tonelada

8.4.1.3 Aplicaciones del Anhídrido Maleico

A partir de este compuesto se fabrican una cantidad considerable de sustancias químicas que se utilizan en la industria química, como son: ácido fumárico, ácido sulfocínico, ácido succínico, ácido aspártico y el ácido tartárico. Todos estos compuestos mencionados tienen una gran importancia en la industria farmacéutica, textil, químicos de fotografía, agentes de actividad superficial, agentes de bronceado y aditivos del petróleo (IDEAM, 2014).

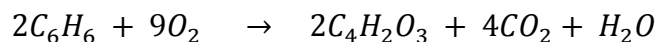
La aplicación principal al anhídrido maleico se encuentra en las industrias de navegación aérea, automotriz e industria de la construcción, debido a que a partir de este se producen resinas de poliéster y alquílicas, lacas, plastificantes, copolímeros y lubricantes (Velázquez Canseco, 2016).

8.4.2 Descripción del Proceso

El anhídrido maleico (AM) puede ser fabricado mediante la oxidación selectiva de n-butano (C_4H_{10}) o benceno (C_6H_6). El primer método que se utilizó para producirlo fue a partir de la oxidación de benceno, sin embargo, actualmente las plantas industriales que lo producen se encuentran sustituyendo su proceso por el de oxidación con butano debido a diversos factores tales como, el incremento en el costo de benceno, producción de elevadas cantidades de monóxido de carbono (CO_2) y otros subproductos (Velázquez Canseco, 2016).

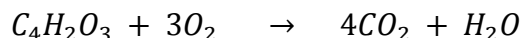
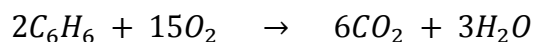
Proceso por oxidación de benceno:

A continuación, se presenta la reacción ocurrida por la oxidación del benceno catalizada por aproximadamente 70% de pentóxido de vanadio y 25 o 30% de trióxido molibdeno:



El benceno y el aire en estado gaseoso se mezclan y calientan a temperaturas entre 300 y 400 °C antes de entrar al reactor tubular de lecho fijo o fluidizado, cabe mencionar que la reacción es exotérmica. Dentro del reactor la mezcla reacciona en presencia del catalizador para formar vapor de anhídrido maleico, agua y dióxido de carbono. El rendimiento en el reactor es del 70% y la selectividad del 90%. El vapor resultante contiene también pequeñas cantidades de oxígeno, nitrógeno, monóxido de carbono, benceno, ácido maleico, formaldehído, ácido fórmico y otros compuestos de las diversas reacciones secundarias (Environmental Protection Agency, 1983).

A continuación, se presentan las reacciones secundarias productoras de CO₂ más importantes en este proceso:

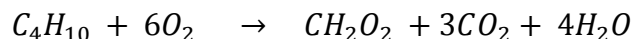
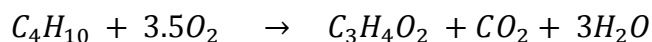
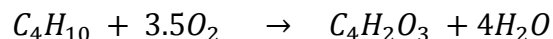


Seguidamente los vapores obtenidos son parcialmente condensados, en donde aproximadamente el 40% del AM es recuperado en su estado líquido. Después el efluente líquido es separado hacia el tanque de almacenamiento, mientras que los vapores son enviados a una torre de absorción en donde tienen contacto con agua recuperando aproximadamente 40% del ácido maleico, que posteriormente por medio de una destilación azeotrópica con xileno es convertido en AM. Después estos dos efluentes de AM son mezclados y tratados en una columna de destilación fraccionada para remover las impurezas. Usualmente el AM es almacenado en forma líquida, sin embargo, también se puede aflojar y peletizar en briquetas para su posterior empaquetado (Velázquez Canseco, 2016).

Proceso por oxidación de butano:

El n-butano es utilizado para producir anhídrido maleico desde el año 1974, la reacción generalmente se realiza a 400°C en fase gaseosa; utilizando como catalizador oxido mixto de Vanadio y Fósforo (Velázquez Canseco, 2016).

A continuación, se presentan las reacciones que ocurren por la oxidación de n-butano:



Dependiendo del tipo de tecnología empleada (reactores de lecho fijo o fluidizado) la conversión de n-butano oscila de aproximadamente entre 65% y 80%, mientras que la selectividad de las reacciones es de 70% AM, 1% CO₂, 1% ácido acrílico y 1% ácido fórmico (Velázquez Canseco, 2016).

El n-butano y el aire se mezclan y precalientan para después pasarse a una torre de absorción en donde, con agua a contracorriente, se separan las impurezas de la mezcla de gases para después separarse en un equipo flash y entrar en el reactor. Posteriormente para separar el anhídrido maleico de los reactivos que no reaccionaron se hace pasar la mezcla a una columna de destilación fraccionada (United States Patente n° 4,052,417, 1977).

8.4.2.1 Proceso con Recirculación a partir de Butano

A continuación, se simuló en HYSYS la producción de anhídrido maleico a partir de la oxidación de butano. Se utilizó un sistema con recirculación de oxígeno con la finalidad de enriquecer la mezcla de gases y obtener un mejor rendimiento en el reactor.

Las condiciones de reacción son 450°C a la entrada del reactor y 500°C en la salida del mismo con una conversión del 95% para la Rxn1, 3% para la Rxn2 y 3% para la Rxn3. En la entrada se tendrá una corriente de n-butano y otra de oxígeno con un flujo de entrada de 100 kmol/h y 600 kmol/h respectivamente, ambos a 25°C y 1 bar. Seguidamente ambas corrientes se mezclan y se comprimen a 1.5 bar. Posteriormente se calienta la corriente a la temperatura de reacción y se introduce al reactor, a la salida del mismo se enfría la corriente a 30°C. Finalmente pasa al separador flash a presión constante donde se separa el anhídrido maleico, los gases resultantes se purgan en un 10% y se recirculan hacia el mezclador anterior al reactor. Para este proceso se utilizó el paquete termodinámico de Antoine.

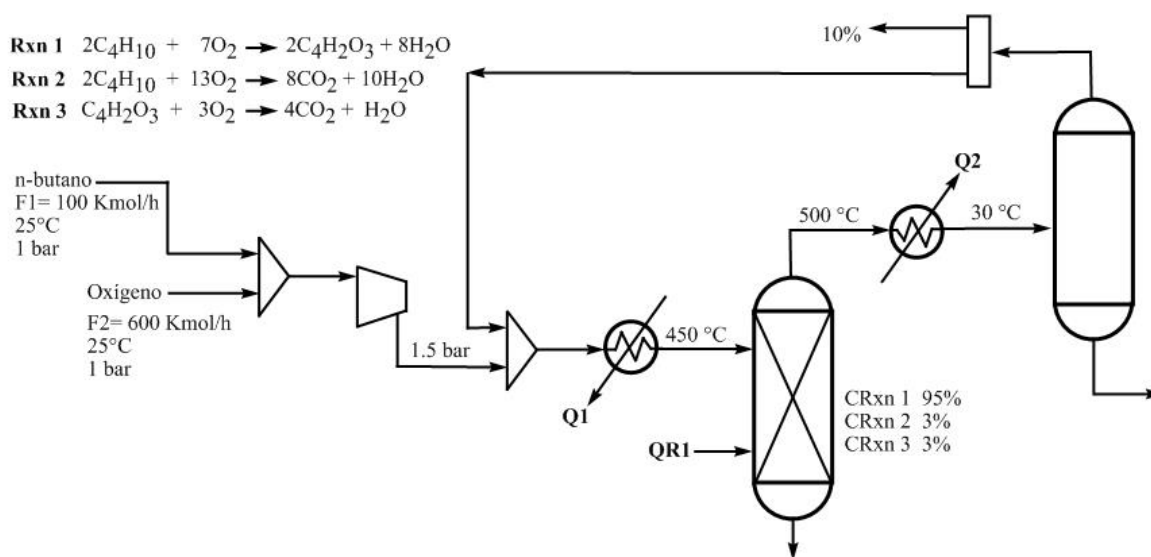


Diagrama 8.11 Producción de Anhídrido Maleico a partir de n-butano con Recirculación.

8.4.2.1.1 Resultados de la Simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS.

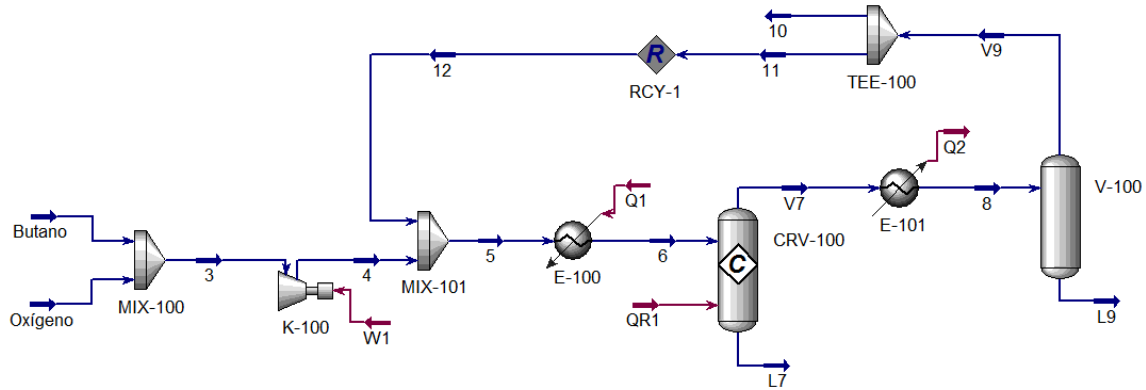


Diagrama 8.12 Simulación en HYSYS de la producción de Anhídrido Maleico con Recirculación.

Material Streams											
		Butano	Oxígeno	4	3	6	V7	L7			
Vapour Fraction		1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	
Temperature	C	25.00	25.00	59.40	24.37	450.0	500.0	500.0			
Pressure	kPa	100.0	100.0	150.0	100.0	150.0	150.0	150.0			
Molar Flow	kgmole/h	100.0	600.0	700.0	700.0	3067	3124	0.0000			
Mass Flow	kg/h	5812	1.920e+004	2.501e+004	2.501e+004	1.025e+005	1.025e+005	0.0000			
Liquid Volume Flow	m3/h	9.966	16.88	26.84	26.84	98.35	93.53	0.0000			
Heat Flow	kJ/h	-1.264e+007	-4538	-1.167e+007	-1.265e+007	-6.542e+007	-1.919e+008	0.0000			
		8	V9	L9	10	11	12	5			
Vapour Fraction		0.8397	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000			
Temperature	C	30.00	30.00	30.00	30.00	30.00	30.00	38.25			
Pressure	kPa	150.0	150.0	150.0	150.0	150.0	150.0	150.0			
Molar Flow	kgmole/h	3124	2623	500.8	262.3	2361	2367	3067			
Mass Flow	kg/h	1.025e+005	8.584e+004	1.666e+004	8584	7.726e+004	7.749e+004	1.025e+005			
Liquid Volume Flow	m3/h	93.53	79.14	14.40	7.914	71.22	71.51	98.35			
Heat Flow	kJ/h	-2.703e+008	-1.107e+008	-1.596e+008	-1.107e+007	-9.961e+007	-9.959e+007	-1.113e+008			

Compositions							
	Butano	Oxígeno	4	3	6	V7	L7
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	1.0000	0.8571	0.8571	0.8754	0.7398	0.3898
Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0686	0.0752	0.0426
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0219	0.1535	0.0180
Comp Mole Frac (MaleicAnhydr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0004	0.0309	0.5476
Comp Mole Frac (n-Butane)	1.0000	0.0000	0.1429	0.1429	0.0338	0.0007	0.0021
	8	V9	L9	10	11	12	5
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.7398	0.8810	0.0003	0.8810	0.8810	0.8808	0.8754
Comp Mole Frac (CO2)	0.0752	0.0895	0.0004	0.0895	0.0895	0.0889	0.0686
Comp Mole Frac (H2O)	0.1535	0.0283	0.8089	0.0283	0.0283	0.0283	0.0219
Comp Mole Frac (MaleicAnhydr)	0.0309	0.0005	0.1904	0.0005	0.0005	0.0005	0.0004
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0007	0.0008	0.0001	0.0008	0.0008	0.0015	0.0338

Energy Streams					
		W1	Q1	QR1	Q2
Heat Flow	kJ/h	9.747e+005	4.584e+007	-1.264e+008	7.840e+007

8.4.2.2 Proceso con Recirculación a partir de Benceno

A continuación, se simuló en HYSYS la producción de anhídrido maleico a partir de la oxidación de benceno. Se utilizó un sistema con recirculación de oxígeno con la finalidad de enriquecer la mezcla de gases y obtener un mejor rendimiento en el reactor.

Las condiciones de reacción son 350°C a la entrada del reactor y 450°C en la salida del mismo con una conversión del 95% para la Rxn1, 3% para la Rxn2 y 3% para la Rxn3. En la entrada se tendrá una corriente de benceno y otra de oxígeno con un flujo de entrada de 100 kmol/h y 600 kmol/h respectivamente, ambos a 25°C y 1 bar. Ambas corrientes se elevan a 1.5 bar, sin embargo, para el caso del benceno por encontrarse en estado líquido en las condiciones iniciales se pasa por una bomba, en cuanto al oxígeno por encontrarse en estado gaseoso se utiliza un compresor. Seguidamente ambas corrientes se mezclan y se calientan a la temperatura de reacción. Posteriormente se enfría a 50°C y se introduce a un separador flash a presión constante. Finalmente se purga el 10% de la mezcla de gases y se recircula al mezclador anterior al reactor. Para este proceso se utilizó el paquete termodinámico de Antoine.

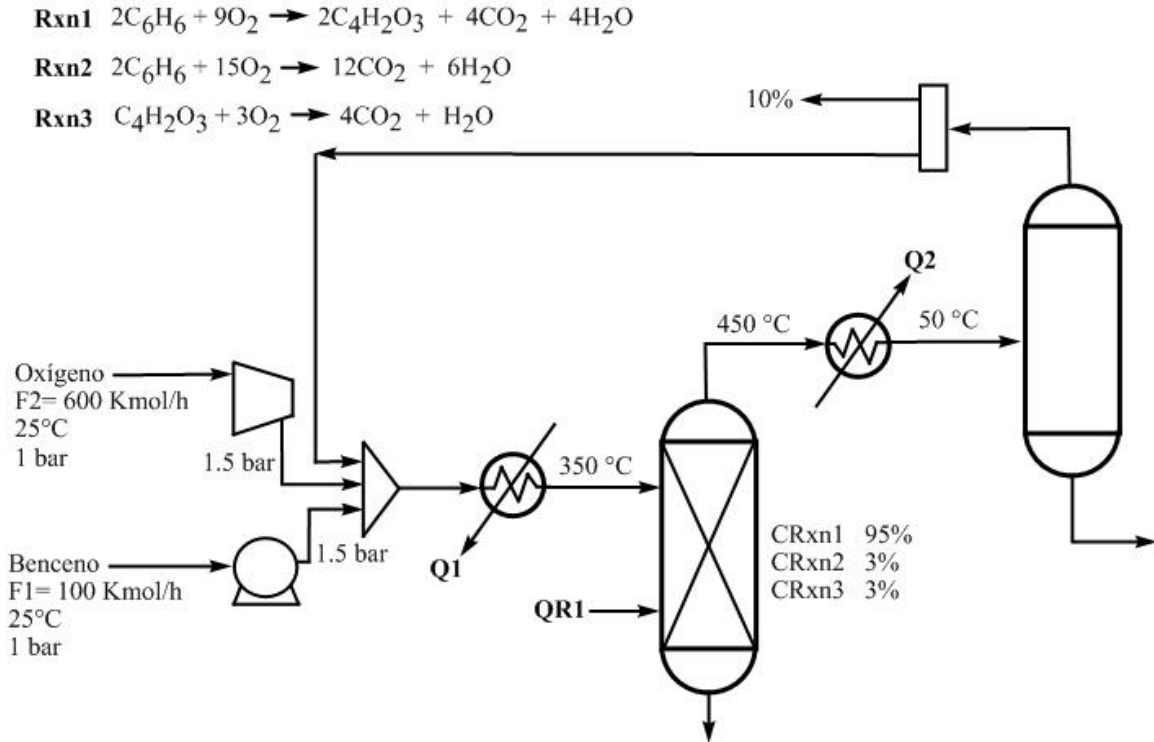


Diagrama 8.13 Producción de Anhídrido Maleico a partir de benceno con Recirculación.

8.4.2.2.1 Resultados de la Simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS.

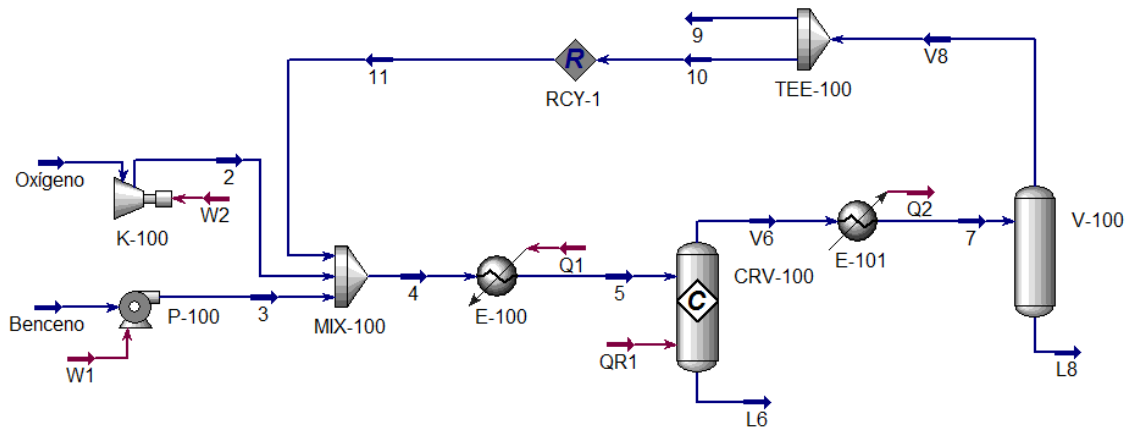


Diagrama 8.14 Simulación en HYSYS de la producción de Anhídrido Maleico con Recirculación.

Elaboración de un Manual Integral de Procesos Químicos Asistido por Computadora

Material Streams								
		Benceno	Oxígeno	3	2	4	5	V6
Vapour Fraction		0.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.9885	1.0000	1.0000
Temperature	C	25.00	25.00	25.02	73.19	43.18	350.0	450.0
Pressure	kPa	100.0	100.0	150.0	150.0	150.0	150.0	150.0
Molar Flow	kgmole/h	100.0	600.0	100.0	600.0	4187	4187	4144
Mass Flow	kg/h	7811	1.920e+004	7811	1.920e+004	1.589e+005	1.589e+005	1.589e+005
Liquid Volume Flow	m3/h	8.854	16.88	8.854	16.88	171.4	171.4	172.0
Heat Flow	kJ/h	4.938e+006	-4538	4.938e+006	8.465e+005	-8.460e+008	-7.930e+008	-9.564e+008
		L6	7	V8	L8	9	10	11
Vapour Fraction		0.0000	0.9355	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Temperature	C	450.0	50.00	50.00	50.00	50.00	50.00	50.00
Pressure	kPa	150.0	150.0	150.0	150.0	150.0	150.0	150.0
Molar Flow	kgmole/h	0.0000	4144	3877	267.2	387.7	3489	3487
Mass Flow	kg/h	0.0000	1.589e+005	1.467e+005	1.228e+004	1.467e+004	1.320e+005	1.319e+005
Liquid Volume Flow	m3/h	0.0000	172.0	162.0	10.07	16.20	145.8	145.7
Heat Flow	kJ/h	0.0000	-1.039e+009	-9.472e+008	-9.210e+007	-9.472e+007	-8.525e+008	-8.518e+008

Compositions							
	Benceno	Oxígeno	3	2	4	5	V6
Comp Mole Frac (Benzene)	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0243	0.0243	0.0005
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.4307	0.4307	0.3226
Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.4751	0.4751	0.5341
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0686	0.0686	0.1189
Comp Mole Frac (MaleicAnhydr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0014	0.0014	0.0239
Comp Mole Frac (Nitrogen)							
	L6	7	V8	L8	9	10	11
Comp Mole Frac (Benzene)	0.0031	0.0005	0.0005	0.0007	0.0005	0.0005	0.0005
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.1335	0.3226	0.3448	0.0002	0.3448	0.3448	0.3451
Comp Mole Frac (CO2)	0.2640	0.5341	0.5707	0.0028	0.5707	0.5707	0.5705
Comp Mole Frac (H2O)	0.0250	0.1189	0.0824	0.6488	0.0824	0.0824	0.0824
Comp Mole Frac (MaleicAnhydr)	0.5744	0.0239	0.0016	0.3476	0.0016	0.0016	0.0016
Comp Mole Frac (Nitrogen)							

Energy Streams						
		W1	W2	Q1	QR1	Q2
Heat Flow	kJ/h	597.1	8.511e+005	5.293e+007	-1.634e+008	8.288e+007

8.5 Anhídrido Ftálico

8.5.1 Generalidades

En el presente apartado se presentan los aspectos generales del proceso de producción de anhídrido ftálico, sus propiedades físicas y termoquímicas, la importancia económica a nivel nacional y/o internacional (cuando así se presente) y el precio en el mercado de los reactivos y productos correspondientes al proceso de estudio, así como también, las aplicaciones y usos en la vida diaria y a nivel industrial a los que es destinado este compuesto.

8.5.1.1 Propiedades Físicas y Termoquímicas

El anhídrido ftálico ($C_6H_4(CO)_2O$), también conocido como comoftalandiona, es un compuesto orgánico que se encuentra en la naturaleza como un sólido cristalino (agujas rómbicas), incoloro y con un olor característico. A continuación, se proporcionan las propiedades físicas y termoquímicas de este compuesto.

Tabla 8.12 Propiedades físicas y termoquímicas del Anhídrido Ftálico.

Molécula	Propiedades Físicas y Termoquímicas	
 <p>Figura 8.2 Molécula de Anhídrido Ftálico.</p>	Densidad	1.53 kg/m ³
	Masa molar	1.481 g/mol
	Punto de fusión	131 °C
	Punto de ebullición	295 °C
	Temperatura crítica	516.9 °C
	Presión crítica	47.20 bar
	Factor acéntrico (ω)	0.7084
	ΔH°_{fgas}	---- kJ/mol
	$\Delta H^{\circ}_{flíquido}$	---- kJ/mol

8.5.1.2 Importancia Económica

La importancia de la síntesis de ácido ftálico radica principalmente en su uso como plastificante. Los plastificantes ftálicos son los más empleados en el mundo para la fabricación de polímeros desde la antigüedad, convirtiéndose en la actualidad en la familia de plastificantes más grandes del siglo XXI (Mexichem, 2018).

Los plastificantes son necesarios, ya que imparten flexibilidad y maleabilidad a los polímeros. Un ejemplo del uso de los plastificantes ftálicos se encuentra en el polímero más conocido y utilizado: el poli vinil cloruro (PVC). El PVC por si solo tiene un gran impacto en la economía mundial, tan solo en el año 2010 tuvo una demanda mundial de más de 34 millones de toneladas, se espera que en los años posteriores su demanda creciera más del 4% (Rosero Ramírez, 2011).

8.5.1.2.1 Costos de la Materia Prima y Productos

A continuación, se presentan los costos de los reactivos y productos

Tabla 8.13 Costos de los reactivos y productos para la producción del Anhídrido Ftálico.

Nombre	Costos
O-xileno (30/12/2013)	\$ 17,500.54 MXN/Tonelada
Anhídrido Ftálico (22/07/2018)	\$ 19,023.40 MXN/Tonelada

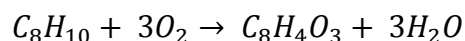
8.5.1.3 Aplicaciones del Anhídrido Ftálico

El anhídrido ftálico es un ácido utilizado como precursor de la síntesis y manufactura de muchos compuestos. Como ejemplo de algunos de sus destinos finales en la industria se pueden mencionar resinas de poliésteres, plastificantes, resinas alquílicas, recubrimientos, polioles de poliésteres, pigmentos, tinturas, plásticos procesados, pirorretardantes, etc.

A su vez algunas aplicaciones y usos frecuentes de este compuesto se encuentran en cascos de barcos, cubículos de duchas, empapelado de vinilo, mangueras de jardín, cañerías flexibles, recubrimientos de pinturas domésticas y comerciales entre muchos otros usos (Stepan, 2018).

8.5.2 Descripción del Proceso

El proceso de producción de anhídrido ftálico se lleva a cabo a partir de la oxidación parcial de o-xileno con exceso de oxígeno, dicha reacción, al ser altamente exotérmica, libera cantidades considerables de calor.



Actualmente la reacción se lleva a cabo en presencia de un catalizador de óxido de vanadio soportado en TiO₂. La reacción selectiva generalmente se lleva a cabo en temperaturas que oscilan entre 360 y 390°C (Huerta De la Cruz, 2013).

El proceso de oxidación de o-xileno para dar lugar al anhídrido ftálico se lleva a cabo en fase gaseosa o líquida con un reactor multi-tubular (1000 tubos). La selectividad tiende a ser del 78% debido a que se forman muchos productos secundarios de este proceso (Sanz Tejedor, 2017).

El producto de la reacción se recupera enfriando los gases de reacción. El proceso de recuperación por lo general se realiza en dos etapas donde el producto líquido se separa por condensación y el sólido por sublimación. Posteriormente se debe purificar el anhídrido ftálico, para así alcanzar la pureza requerida del 99.8%, por medio de stripping y destilación fraccionada (Jara, Garea, & Irabien, 2005).

8.5.2.1 Proceso con Recirculación

A continuación, se simuló en HYSYS la producción de anhídrido ftálico a partir de la oxidación de o-xileno. Se utilizó un sistema con recirculación de oxígeno con la finalidad de enriquecer la mezcla de gases y obtener un mejor rendimiento en el reactor.

Las condiciones de reacción son 450°C a la entrada del reactor y 500°C en la salida del mismo con una conversión del 98% para la Rxn1, 1% para la Rxn2 y 1% para la Rxn3. En la entrada se tendrá una corriente de o-xileno con un flujo de 100 kmol/h y otra de aire al 50% de exceso en oxígeno, ambas a 25°C y 1 bar.

Ambas corrientes se elevaron a 1.5 bar, sin embargo, para el caso del o-xileno por encontrarse en estado líquido en las condiciones iniciales se pasa por una bomba, en cuanto al aire por encontrarse en estado gaseoso se utiliza un compresor. Seguidamente ambas corrientes se mezclaron y calentaron a la temperatura de reacción. Posteriormente se enfrió la mezcla resultante a 50°C y se introdujo a un separador flash a presión constante. Finalmente se purgó el 10% de la mezcla de gases (en su mayoría oxígeno) y se recirculó al mezclador anterior al reactor. Para este proceso se utilizó el paquete termodinámico de Antoine.

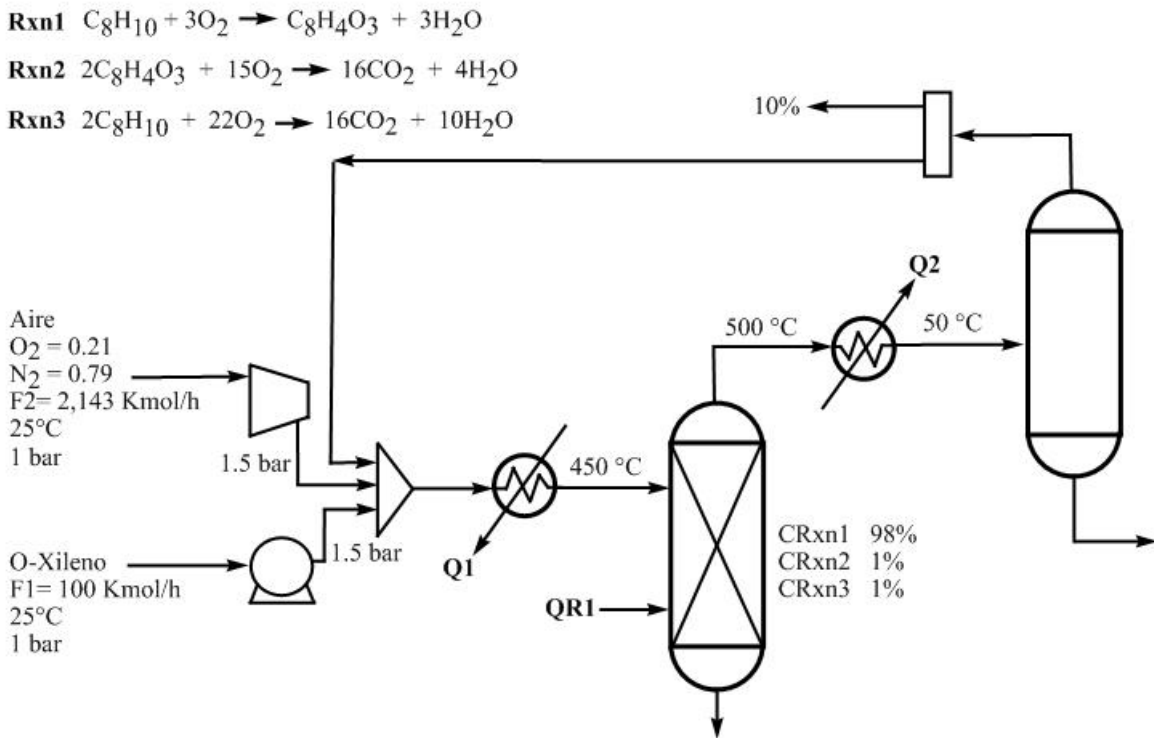


Diagrama 8.15 Producción de Anhídrido Ftálico con Recirculación.

8.5.2.1.1 Resultados de la Simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS. La función de recircular la corriente V8 en el proceso es de enriquecer la mezcla de entrada con el oxígeno remanente de la reacción, con ello se pretende aumentar la conversión de o-xileno en anhídrido ftálico, obteniendo mejores rendimientos en el reactor.

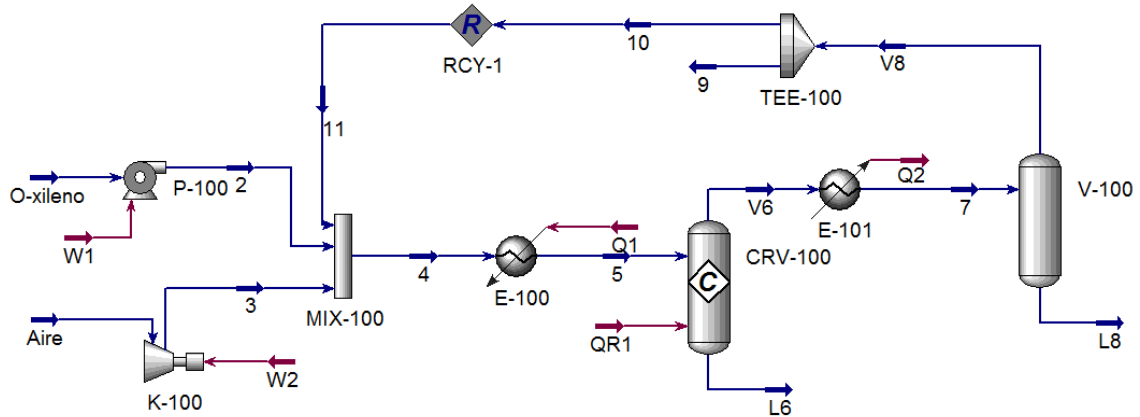


Diagrama 8.16 Simulación en HYSYS de la producción de Anhídrido Ftálico con Recirculación.

Material Streams								
		O-xileno	Aire	2	3	4	5	V6
Vapour Fraction		0.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.9983	1.0000	1.0000
Temperature	C	25.00	25.00	25.02	73.45	47.24	450.0	500.0
Pressure	bar	1.000	1.000	1.500	1.500	1.500	1.500	1.500
Molar Flow	kgmole/h	100.0	2143	100.0	2143	2.034e+004	2.034e+004	2.034e+004
Mass Flow	kg/h	1.062e+004	6.183e+004	1.062e+004	6.183e+004	5.720e+005	5.720e+005	5.720e+005
Liquid Volume Flow	m3/h	12.02	71.47	12.02	71.47	682.2	682.2	678.7
Heat Flow	kcal/h	-5.890e+005	-3243	-5.888e+005	7.237e+005	-9.639e+007	-3.380e+007	-5.401e+007
		L6	7	V8	L8	10	9	11
Vapour Fraction		0.0000	0.9884	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Temperature	C	500.0	50.00	50.00	50.00	50.00	50.00	50.00
Pressure	bar	1.500	1.500	1.500	1.500	1.500	1.500	1.500
Molar Flow	kgmole/h	0.0000	2.034e+004	2.011e+004	235.4	1.810e+004	2011	1.810e+004
Mass Flow	kg/h	0.0000	5.720e+005	5.551e+005	1.694e+004	4.996e+005	5.551e+004	4.996e+005
Liquid Volume Flow	m3/h	0.0000	678.7	665.2	13.55	598.7	66.52	598.7
Heat Flow	kcal/h	0.0000	-1.271e+008	-1.072e+008	-1.987e+007	-9.652e+007	-1.072e+007	-9.653e+007

Compositions							
	O-xileno	Aire	2	3	4	5	V6
Comp Mole Frac (o-Xylene)	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0050	0.0050	0.0000
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.2100	0.0000	0.2100	0.0822	0.0822	0.0667
Comp Mole Frac (PhtlicAnhydr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0001	0.0001	0.0049
Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0071	0.0071	0.0079
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0733	0.0733	0.0882
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.7900	0.0000	0.7900	0.8323	0.8323	0.8322
	L6	7	V8	L8	10	9	11
Comp Mole Frac (o-Xylene)	0.0010	0.0000	0.0000	0.0008	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0422	0.0667	0.0675	0.0000	0.0675	0.0675	0.0675
Comp Mole Frac (PhtlicAnhydr)	0.3979	0.0049	0.0001	0.4139	0.0001	0.0001	0.0001
Comp Mole Frac (CO2)	0.0054	0.0079	0.0080	0.0000	0.0080	0.0080	0.0080
Comp Mole Frac (H2O)	0.0114	0.0882	0.0824	0.5848	0.0824	0.0824	0.0824
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.5421	0.8322	0.8419	0.0004	0.8419	0.8419	0.8419

Energy Streams						
		W1	W2	Q1	Q2	QR1
Heat Flow	kcal/h	192.8	7.270e+005	6.259e+007	7.311e+007	-2.021e+007

8.5.2.2 Proceso con Recuperación de Calor

A continuación, se simuló en HYSYS la producción de anhídrido ftálico a partir de la oxidación de o-xileno. Se utilizó un sistema de recuperación de calor que consiste en utilizar el calor generado por la reacción exotérmica para calentar las corrientes de entrada al reactor.

Las condiciones de reacción son 500°C a la entrada del reactor y 550°C a la salida del mismo, con una conversión del 90%. Se tendrán dos corrientes de entrada una de o-xileno puro y otra de aire. El flujo molar del o-xileno es de 100 Kmol/h. Se usó el 50% en exceso de oxígeno.

Primeramente, se elevaron las presiones de ambas corrientes de entrada a 2 bar, para el caso del aire por ser un gas se utilizó un compresor, en cambio, el o-xileno por encontrarse en estado líquido a las condiciones de entrada se hizo uso de una bomba. Ambas corrientes se mezclaron y precalentaron a 450°C para después volverse a calentar a la temperatura de reacción. Seguidamente se introdujeron al reactor y la mezcla resultante se pasó al intercambiador de calor EA-101 para ceder su energía a la corriente de entrada. Se usó el paquete termodinámico de Antoine.

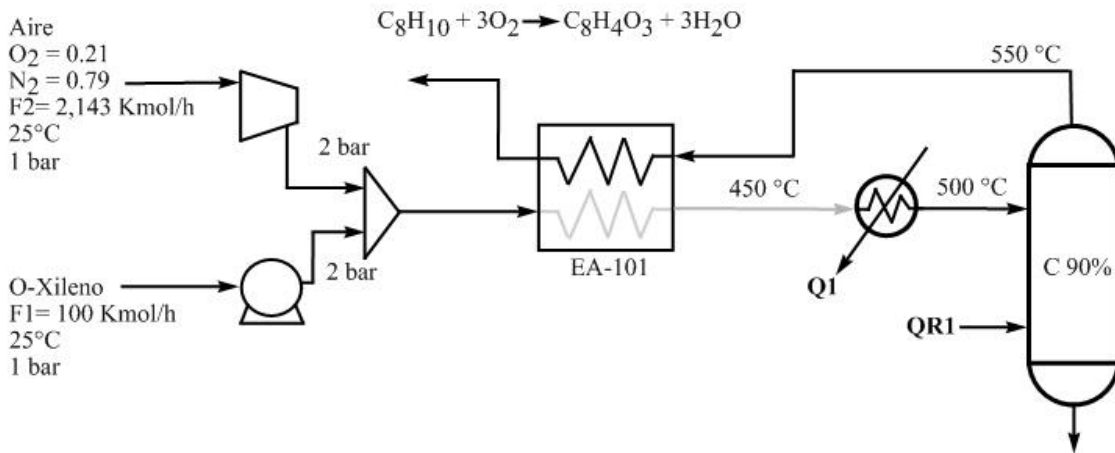


Diagrama 8.17 Producción de Anhídrido Ftálico con Recuperación de Calor.

8.5.2.2.1 Resultados de la Simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS.

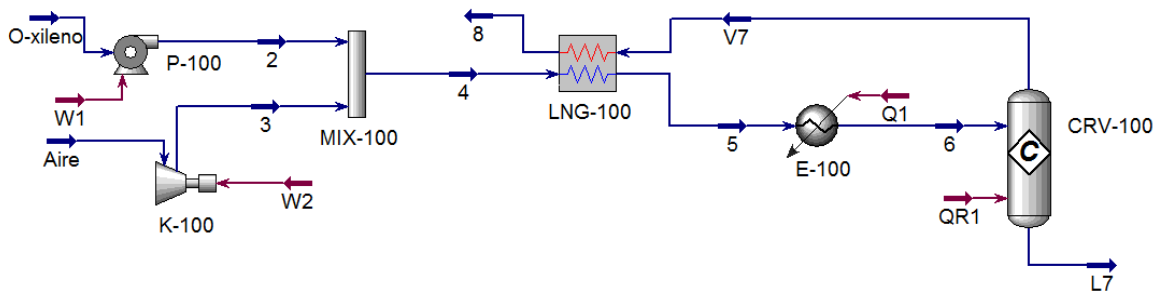


Diagrama 8.18 Simulación en HYSYS de la producción de Anhídrido Ftálico con Recuperación de Calor.

Elaboración de un Manual Integral de Procesos Químicos Asistido por Computadora

Material Streams						
		O-xileno	Aire	2	3	4
Vapour Fraction		0.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.9825
Temperature	C	25.00	25.00	25.04	111.6	60.43
Pressure	bar	1.000	1.000	2.000	2.000	2.000
Molar Flow	kgmole/h	100.0	2143	100.0	2143	2243
Mass Flow	kg/h	1.062e+004	6.183e+004	1.062e+004	6.183e+004	7.244e+004
Liquid Volume Flow	m3/h	12.02	71.47	12.02	71.47	83.49
Heat Flow	kcal/h	-5.890e+005	-3243	-5.886e+005	1.293e+006	7.047e+005
		6	V7	L7	5	8
Vapour Fraction		1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.9877
Temperature	C	500.0	550.0	550.0	450.0	175.2
Pressure	bar	2.000	2.000	2.000	2.000	2.000
Molar Flow	kgmole/h	2243	2243	0.0000	2243	2243
Mass Flow	kg/h	7.244e+004	7.244e+004	0.0000	7.244e+004	7.244e+004
Liquid Volume Flow	m3/h	83.49	80.15	0.0000	83.49	80.15
Heat Flow	kcal/h	1.021e+007	-1.281e+007	0.0000	9.081e+006	-2.119e+007

Compositions										
	O-xileno	Aire	2	3	4	6	V7	L7	5	8
Comp Mole Frac (o-Xylene)	1.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0446	0.0446	0.0045	0.0290	0.0446	0.0045
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.2100	0.0000	0.2100	0.2006	0.2006	0.0803	0.0212	0.2006	0.0803
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0000	0.7900	0.0000	0.7900	0.7548	0.7548	0.7548	0.2075	0.7548	0.7548
Comp Mole Frac (PhiticAnhydr)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0401	0.7406	0.0000	0.0401
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.1204	0.0017	0.0000	0.1204

Energy Streams					
		W1	W2	Q1	QR1
Heat Flow	kcal/h	385.6	1.297e+006	1.129e+006	-2.302e+007

8.6 Ciclos Termodinámicos

8.6.1 Generalidades

En el presente apartado se presentan los aspectos generales de los ciclos termodinámicos de Brayton, Rankine y Ciclos de Refrigeración, las propiedades físicas y termoquímicas de los 3 compuestos más relevantes que forman parte de los ciclos mencionados, la importancia económica a nivel nacional y/o internacional (cuando así se presente) y el precio en el mercado de los reactivos y productos correspondientes a los proceso de estudio, así como también, las aplicaciones y usos en la vida diaria y a nivel industrial.

8.6.1.1 Propiedades Físicas y Termoquímicas

El agua (H₂O) es una sustancia química líquida sin olor, color ni sabor que se encuentra en la naturaleza en cualquiera de sus tres estados líquido, sólido y gaseoso. Es el compuesto químico que más sustancias puede disolver, por ello es considerado el disolvente universal. El agua es una sustancia elemental que permite la vida en nuestro planeta. Además, forma tres cuartas partes de la tierra y se encuentra en los seres vivos. A continuación, se proporcionan las propiedades físicas y termoquímicas de este compuesto.

Tabla 8.14 Propiedades físicas y termoquímicas del Agua.

Propiedades Físicas y Termoquímicas	
Densidad	997 kg/m ³
Masa molar	18.01528 g/mol
Punto de fusión	0 °C
Punto de ebullición	100 °C
Temperatura crítica	374.1 °C
Presión crítica	221.2 bar
Factor acéntrico (ω)	0.3440
$\Delta H^{\circ}_{\text{fgas}}$	-241.8 kJ/mol
$\Delta H^{\circ}_{\text{flíquido}}$	-285.8 kJ/mol

El gas refrigerante R-134a es un HFC que sustituye al R-12 en las nuevas instalaciones de planta. Como todos los refrigerantes HFC no es dañino para la capa de ozono. Tiene una buena estabilidad térmica y química, una baja toxicidad y no es inflamable, además de ser compatible con la mayoría de los materiales y ser miscible en aceites poliésteres (GasServei, 2018). A continuación, se proporcionan las propiedades físicas y termoquímicas de este compuesto.

Tabla 8.15 Propiedades físicas y termoquímicas del R-134a.

Propiedades Físicas y Termoquímicas	
Densidad (25°C)	1.206 kg/m ³
Masa molar	102 g/mol
Punto de fusión	-103 °C
Punto de ebullición (a 1.013 bar)	-26.1 °C
Temperatura crítica	101.1 °C
Presión crítica	40.67 bar
Factor acéntrico (ω)	0.3256

El propileno (C₃H₆), o también conocido como el refrigerante R1270, es un hidrocarburo perteneciente al grupo de los alquenos, que no tiene olor ni color. Este gas es altamente inflamable, no tóxico y soluble en alcohol y éter. A continuación, se proporcionan las propiedades físicas y termoquímicas de este compuesto (The Linde Group, 2018).

Tabla 8.16 Propiedades físicas y termoquímicas del Propileno.

Propiedades Físicas y Termoquímicas	
Densidad	521 kg/m ³
Masa molar	42.08 g/mol
Punto de ebullición	-47.75 °C
Temperatura crítica	91.85 °C
Presión crítica	46.20 bar
Factor acéntrico (ω)	0.1480

8.6.1.2 Importancia Económica

La gran importancia de los ciclos termodinámicos Brayton y Rankine radica en su aplicación en la producción de energía eléctrica en el mundo. La energía eléctrica aporta innumerables beneficios a la humanidad entre las que destacan su uso en motores y procesos de superficies mediante electrólisis, el transporte público, motores de riego y equipos del hogar (Olguín, 2012).

Con la finalidad de concientizar más profundamente sobre la importancia de la energía eléctrica en la economía mundial se presenta a continuación la cantidad de energía eléctrica consumida a nivel mundial.

Tabla 8.17 Consumo Mundial de Energía Eléctrica 2010-2014

Año	kWh
2010	2.954,761
2011	3.019,621
2012	3.046,322
2013	3.015,948
2014	3.127,361

Fuente: Adaptado de *Grupo Banco Mundial*, 2018.

En cuanto a los ciclos de refrigeración su importancia económica deriva de la necesidad de conservar los alimentos y productos orgánicos, tanto en el ámbito doméstico como industrial. La refrigeración es considerada como uno de los principios básicos de la seguridad en la vida del ser humano. Gracias a ella es posible retrasar la actividad de los organismos y enzimas evitando la degradación de los productos alimenticios (Luz y Fuerza de San Lorenzo, S.A., 2017). A continuación, se muestra una aproximación de la cantidad de sistemas de refrigeración que operan en el mundo.

Tabla 8.18 Sistemas de Refrigeración que operan en el mundo.

Aplicaciones	Sectores	Número de Unidades en Operación
Refrigeración Alimenticia	Doméstico	1.5 billones
	Comercial	90 millones
	Transporte	1.6 millones
Aire Acondicionado	Aire acondicionado	600 millones
	Sistemas móviles	700 millones
Refrigeración en el sector Salud	Medicina	25,000
Refrigeración Industrial	Licuefacción de gases	623
Bombas de calor		160 millones
Deportes		13,500

Fuente: Adaptado de *The Role of Refrigeration in the Global Economy*, 2015.

8.6.1.2.1 Costos de la Materia Prima y Producto

A continuación, se presentan los costos actualizados de los reactivos y productos en México de los 3 ciclos termodinámicos estudiados.

Tabla 8.19 Costos de los reactivos y productos para los Ciclos Termodinámicos de Brayton, Rankine y Ciclos de Refrigeración.

Nombre	Costos
Agua (30/12/2017)	\$30.00 MXN/m ³
R-134a (25/05/2018)	\$148.45 MXN/Kg
Propileno (13/01/2018)	\$92.78 MXN/Kg
Gas natural (04/07/2018)	\$63.44 MXN/MMBtu

Fuente: *Conagua México, CME Group y el Sistema Nacional de Información e Integración de Mercados*.

8.6.1.3 Aplicaciones de los Ciclos Termodinámicos

Para el caso del ciclo de Brayton es ampliamente utilizado en las turbinas de gas, ya que es la base de funcionamiento de éstas. Actualmente las turbinas de gas se utilizan para la propulsión de los aviones y la generación de energía eléctrica. También se pueden utilizar para realizar cualquier tipo de trabajo mecánico como motores terrestres o marinos. Otro de sus usos actuales en la industria de alimentos, ya que es aplicado fácilmente para el funcionamiento de aparatos tradicionales como cocinas freidoras y hornos de cocción, también en aparatos industriales como calderas, hornos industriales, generadores de vapor o recipientes de presión (Cengel & Boles, 2012).

Para el caso del ciclo Rankine su aplicación más importante se encuentra en las plantas de energía eléctrica que operen con fluidos que constantemente se evaporen y condensen. Actualmente una de las tecnologías que se han diseñado a partir de este ciclo es la del Ciclo Orgánico de Rankine, que tiene como finalidad utilizar biomasa como fuente de energía renovable (Sánchez, 2012).

Ahora bien, para los ciclos de refrigeración, como su nombre lo indica, se utilizan ampliamente en electrodomésticos como aires acondicionado y refrigeradores. A nivel industrial son utilizados en las áreas de almacenamiento de materias primas y productos terminales, en muchas ocasiones también son utilizados para mantener una temperatura regulada a lo largo de todo el ciclo de producción, esta última se puede observar más ampliamente en procesos agroindustriales.

8.6.2 Descripción del Proceso

Los ciclos termodinámicos son una serie de procesos termodinámicos en dónde el sistema parte de una situación inicial y que tras aplicar la serie de procesos regresa nuevamente al estado inicial. Los ciclos termodinámicos se pueden dividir en dos categorías generales:

- **Ciclos de Potencia:** Son aquellos ciclos que utilizan dispositivos y sistemas para producir una salida neta de potencia, generalmente reciben el nombre de motores o máquinas térmicas.
- **Ciclos de Refrigeración:** Son aquellos ciclos que utilizan dispositivos y sistemas para producir el efecto de refrigeración, generalmente reciben el nombre de refrigeradores, acondicionadores de aire o bombas térmicas.

Para el caso de estudio de este manual se analizará con detalle, dentro de los ciclos de potencia, el ciclo Brayton y el ciclo Rankine, y dentro de los ciclos de refrigeración, el ciclo de refrigeración con R-134a y propileno.

8.7.2.1 Ciclo de Brayton

El ciclo Brayton, también conocido como Joule o Froude, fue propuesto por primera vez por George Brayton en 1870 para ser usado en el motor reciprocante que él mismo había diseñado. En la actualidad este ciclo se utiliza en turbinas de gas donde los procesos de expansión y compresión suceden en maquinarias rotatorias (Fundación Universidad de América, 2014).

El ciclo de Brayton en condiciones ideales consiste en 4 procesos:

1. Compresión adiabática reversible (compresión isentrópica) en el compresor.
2. Adición de calor a presión constante en un intercambiador de calor o una cámara de combustión.
3. Expansión adiabática reversible (expansión isentrópica) en la turbina.
4. Calor expelido a presión constante en un intercambiador de calor o en la atmósfera.

Las turbinas de gas generalmente operan en un ciclo abierto que consiste en introducir aire fresco en condiciones ambientales dentro del compresor, donde se eleva su temperatura y presión. Posteriormente el aire de alta presión entra en la cámara de combustión, donde se quema el combustible a presión constante. Seguidamente los gases que se encuentran a altas temperaturas y que son resultado de la combustión pasan a la turbina, donde se expanden hasta llegar a la presión atmosférica, produciendo de esta manera potencia. Los gases de salida de la turbina son expulsados al exterior, por ello se denomina a este proceso como un ciclo abierto, ya que no hay recirculación de gases (Cengel & Boles, 2012).

También es posible modelar el ciclo de turbina como un ciclo cerrado. En este caso los procesos de compresión y expansión permanecen iguales, sin embargo, el proceso de combustión se sustituye por uno de adición de calor a presión constante desde una fuente externa, mientras que el proceso de escape se sustituye por otro de rechazo de calor a presión constante hacia el aire ambiente (Cengel & Boles, 2012).

La temperatura más alta que se aprecia en el ciclo ocurre al final del proceso de combustión cuando se libera el vapor de agua hacia la turbina y está limitada por la temperatura máxima de los álabes de la turbina.

8.6.2.1.1 Proceso con Regeneración

A continuación, se simuló en HYSYS el ciclo de Brayton con regeneración. La única reacción empleada es la de combustión con metano como combustible. Se utilizó un sistema con recuperación de calor de la corriente de gases provenientes del reactor.

Las condiciones de reacción son 500°C a la entrada del reactor y 900°C en la salida del mismo, con una conversión del 95% y una presión de 5 bar. En la entrada se tendrá una corriente de metano con un flujo de 100 kmol/h a 25°C y 5 bar, y una corriente de aire al 20% en exceso a 25°C y 1 bar.

La corriente de aire se comprimió a 5 bar para posteriormente ser mezclada con el combustible y calentada en una serie de intercambiadores hasta su temperatura de reacción. En el reactor los gases resultantes se expandieron a 1 bar para posteriormente pasar como fluido caliente en la serie de intercambiadores. Para esta simulación se utilizó el paquete termodinámico de Peng Robinson.

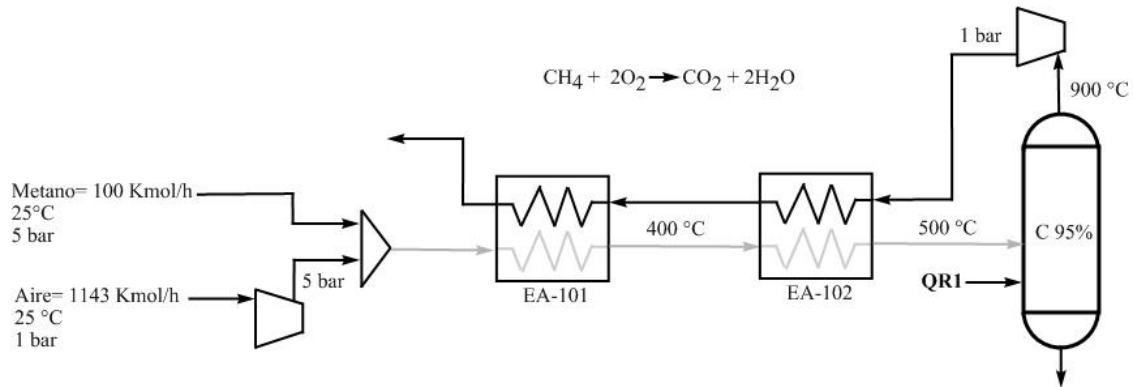


Diagrama 8.19 Ciclo de Brayton con Regeneración.

8.6.2.1.1.1 Resultados de la simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS.

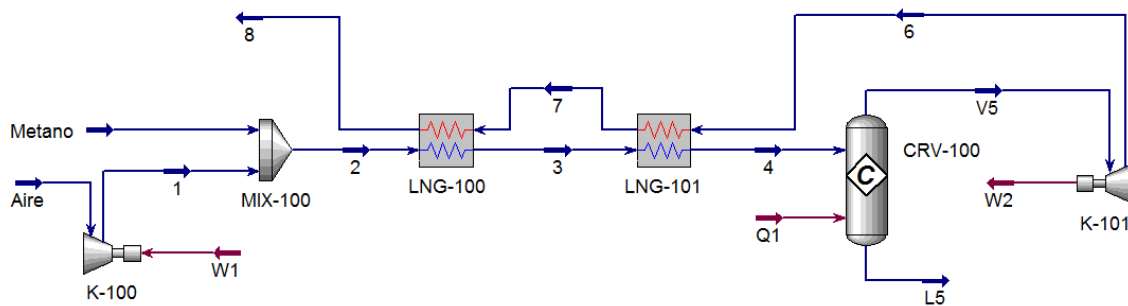


Diagrama 8.20 Simulación en HYSYS del ciclo de Brayton con Regeneración.

Material Streams							
		Aire	Metano	1	2	3	V5
Vapour Fraction		1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Temperature	C	25.00	25.00	253.5	229.1	400.0	900.0
Pressure	bar	1.000	5.000	5.000	5.000	5.000	5.000
Molar Flow	kgmole/h	1143	100.0	1143	1243	1243	1243
Mass Flow	kg/h	3.297e+004	1604	3.297e+004	3.458e+004	3.458e+004	3.458e+004
Liquid Volume Flow	m3/h	38.12	5.358	38.12	43.47	43.47	41.53
Heat Flow	kcal/h	-2206	-1.792e+006	1.841e+006	4.840e+004	1.684e+006	-1.121e+007
		L5	7	8	4	6	
Vapour Fraction		0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	
Temperature	C	900.0	530.6	366.6	500.0	627.6	
Pressure	bar	5.000	1.000	1.000	5.000	1.000	
Molar Flow	kgmole/h	0.0000	1243	1243	1243	1243	
Mass Flow	kg/h	0.0000	3.458e+004	3.458e+004	3.458e+004	3.458e+004	
Liquid Volume Flow	m3/h	0.0000	41.53	41.53	43.47	41.53	
Heat Flow	kcal/h	0.0000	-1.514e+007	-1.677e+007	2.683e+006	-1.414e+007	

Compositions						
	Aire	Metano	1	2	3	V5
Comp Mole Frac (Methane)	0.0000	1.0000	0.0000	0.0805	0.0805	0.0040
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.2100	0.0000	0.2100	0.1931	0.1931	0.0402
Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0764
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.1529
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.7900	0.0000	0.7900	0.7264	0.7264	0.7264
	L5	7	8	4	6	
Comp Mole Frac (Methane)	0.0040	0.0040	0.0040	0.0805	0.0040	
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0402	0.0402	0.0402	0.1931	0.0402	
Comp Mole Frac (CO2)	0.0764	0.0764	0.0764	0.0000	0.0764	
Comp Mole Frac (H2O)	0.1529	0.1529	0.1529	0.0000	0.1529	
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.7264	0.7264	0.7264	0.7264	0.7264	

Energy Streams				
		W1	Q1	W2
Heat Flow	kcal/h	1.843e+006	-1.390e+007	2.925e+006

8.6.2.1.2 Proceso con Inter-enfriamiento y Regeneración.

A continuación, se simuló en HYSYS el ciclo de Brayton con inter-enfriamiento y regeneración. La única reacción empleada es la de combustión con metano como combustible. Se utilizó un sistema con recuperación de calor de la corriente de gases provenientes del reactor y un inter-enfriador entre los compresores de entrada de aire.

Las condiciones de reacción son 500°C a la entrada del reactor y 900°C en la salida del mismo, con una conversión del 95% y una presión de 5 bar. En la entrada se tendrá una corriente de metano con un flujo de 100 kmol/h a 25°C y 5 bar, y una corriente de aire al 20% en exceso a 25°C y 1 bar.

La corriente de aire se comprime a 4 bar para posteriormente enfriarse a 50°C y ser comprimida nuevamente a 5 bar para ser mezclada con el combustible y calentada en una serie de intercambiadores hasta su temperatura de reacción. En el reactor los gases resultantes se expanden a 4 bar y 1 bar para posteriormente pasar como fluido caliente en la serie de intercambiadores. Para esta simulación se utilizó el paquete termodinámico de Peng Robinson.

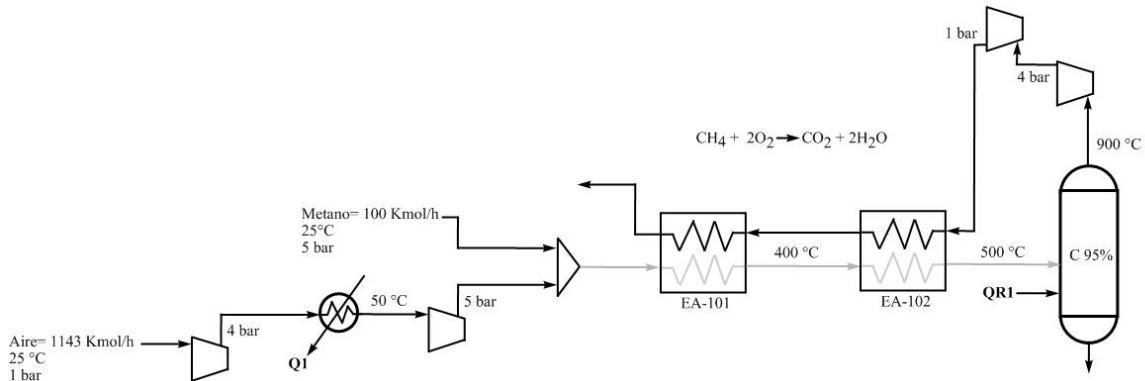


Diagrama 8.21 Ciclo de Brayton con Inter-enfriamiento y Regeneración.

8.6.2.1.2.1 Resultados de la simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS.

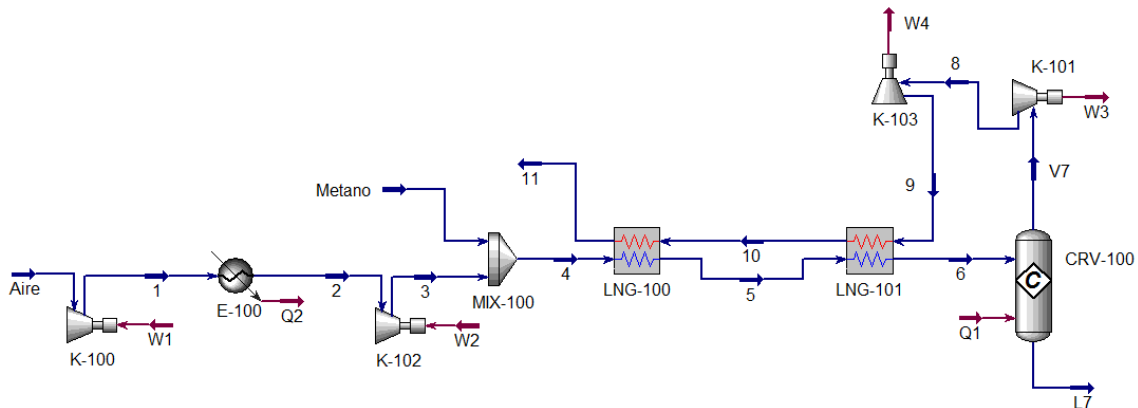


Diagrama 8.22 Simulación en HYSYS del ciclo de Brayton con Inter-enfriamiento y Regeneración.

Elaboración de un Manual Integral de Procesos Químicos Asistido por Computadora

Material Streams								
		Aire	Metano	1	4	5	V7	L7
Vapour Fraction		1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000
Temperature	C	25.00	25.00	215.9	72.92	400.0	900.0	900.0
Pressure	bar	1.000	5.000	4.000	5.000	5.000	5.000	5.000
Molar Flow	kgmole/h	1143	100.0	1143	1243	1243	1243	0.0000
Mass Flow	kg/h	3.297e+004	1604	3.297e+004	3.458e+004	3.458e+004	3.458e+004	0.0000
Liquid Volume Flow	m3/h	38.12	5.358	38.12	43.47	43.47	41.53	0.0000
Heat Flow	kcal/h	-2206	-1.792e+006	1.532e+006	-1.376e+006	1.684e+006	-1.121e+007	0.0000
		10	11	6	8	3	2	9
Vapour Fraction		1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Temperature	C	527.3	214.5	500.0	856.9	78.27	50.00	624.4
Pressure	bar	1.000	1.000	5.000	4.000	5.000	4.000	1.000
Molar Flow	kgmole/h	1243	1243	1243	1243	1143	1143	1243
Mass Flow	kg/h	3.458e+004	3.458e+004	3.458e+004	3.458e+004	3.297e+004	3.297e+004	3.458e+004
Liquid Volume Flow	m3/h	41.53	41.53	43.47	41.53	38.12	38.12	41.53
Heat Flow	kcal/h	-1.517e+007	-1.823e+007	2.683e+006	-1.169e+007	4.167e+005	1.915e+005	-1.417e+007

Compositions							
	Aire	Metano	1	4	5	V7	L7
Comp Mole Frac (Methane)	0.0000	1.0000	0.0000	0.0805	0.0805	0.0040	0.0040
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.2100	0.0000	0.2100	0.1931	0.1931	0.0402	0.0402
Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0764	0.0764
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.1529	0.1529
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.7900	0.0000	0.7900	0.7264	0.7264	0.7264	0.7264
	10	11	6	8	3	2	9
Comp Mole Frac (Methane)	0.0040	0.0040	0.0805	0.0040	0.0000	0.0000	0.0040
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0402	0.0402	0.1931	0.0402	0.2100	0.2100	0.0402
Comp Mole Frac (CO2)	0.0764	0.0764	0.0000	0.0764	0.0000	0.0000	0.0764
Comp Mole Frac (H2O)	0.1529	0.1529	0.0000	0.1529	0.0000	0.0000	0.1529
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.7264	0.7264	0.7264	0.7264	0.7900	0.7900	0.7264

Energy Streams							
		W1	Q1	W2	Q2	W3	W4
Heat Flow	kcal/h	1.534e+006	-1.390e+007	2.252e+005	1.341e+006	4.734e+005	2.484e+006

8.6.2.2 Ciclo de Rankine

El ciclo Rankine es un ciclo que utiliza vapor para la generación de energía. Consiste en una adaptación del ciclo de vapor de Carnot en donde se calienta agua en una caldera hasta evaporarla y elevarla a la presión de vapor, que posteriormente se hace incidir en los álabes de una turbina, donde pierde presión produciendo energía cinética. Seguidamente se licua en un condensador y se bombea nuevamente hacia la caldera, aumentando su presión (Educaragón, 2016).

El ciclo de Rankine en condiciones ideales se puede resumir en 4 procesos:

1. Compresión isentrópica en una bomba.
2. Adición de calor a presión constante en un intercambiador de calor o una cámara de combustión.
3. Expansión isentrópica en una turbina.
4. Calor expelido a presión constante en un intercambiador de calor (condensador).

Es posible utilizar diferentes métodos de configuración de procesos para incrementar la eficiencia del ciclo Rankine, para el presente manual se hará hincapié en los procesos con recalentamiento, sin embargo, también se pueden simular los procesos regenerativos.

Los procesos con recalentamiento se diferencian por contener dos o más etapas en el proceso de expansión del vapor, en donde la primera etapa de expansión cuenta con una turbina de alta presión donde se introduce el vapor expandiéndose isoentrópicamente hasta una presión intermedia regresando posteriormente a la caldera para recalentarse a la temperatura de entrada del segundo proceso de expansión. Después, el vapor se expande en una segunda turbina de baja presión hasta la presión del condensador. Este tipo de adaptación puede llegar a aumentar la eficiencia del proceso del 4% al 5% (Cengel & Boles, 2012).

Ahora bien, los procesos regenerativos se caracterizan por extraer el vapor de la turbina en ciertos puntos del proceso. Este vapor, en vez de producir energía con su expansión, se recircula a la caldera para calentar el agua de alimentación. Los beneficios de utilizar este tipo de configuraciones son que elimina el aire del agua de alimentación (proveniente del condensador) para evitar la corrosión en el equipo. Asimismo, ayuda a controlar los grandes flujos volumétricos del vapor en las etapas finales de la turbina (Cengel & Boles, 2012).

8.6.2.2.1 Proceso con Recalentamiento

A continuación, se simuló en HYSYS el ciclo de Rankine con recalentamiento. En este ciclo termodinámico se utiliza 100 Kmol/h de agua para producir potencia. La incorporación del recalentamiento tiene como objetivo mejorar la eficiencia del proceso.

El vapor entra a la turbina de alta presión a 150 bar y 345 °C. Posteriormente se expande a 40 bar para después pasar por el intercambiador de calor EA-101 y seguidamente entrar a la segunda turbina de baja presión y expandirse a 0.1 bar. Después entra a un intercambiador de calor para condensarse y regresar a su estado inicial para repetir el proceso. Para esta simulación se utilizó el paquete termodinámico de ASME Steam.

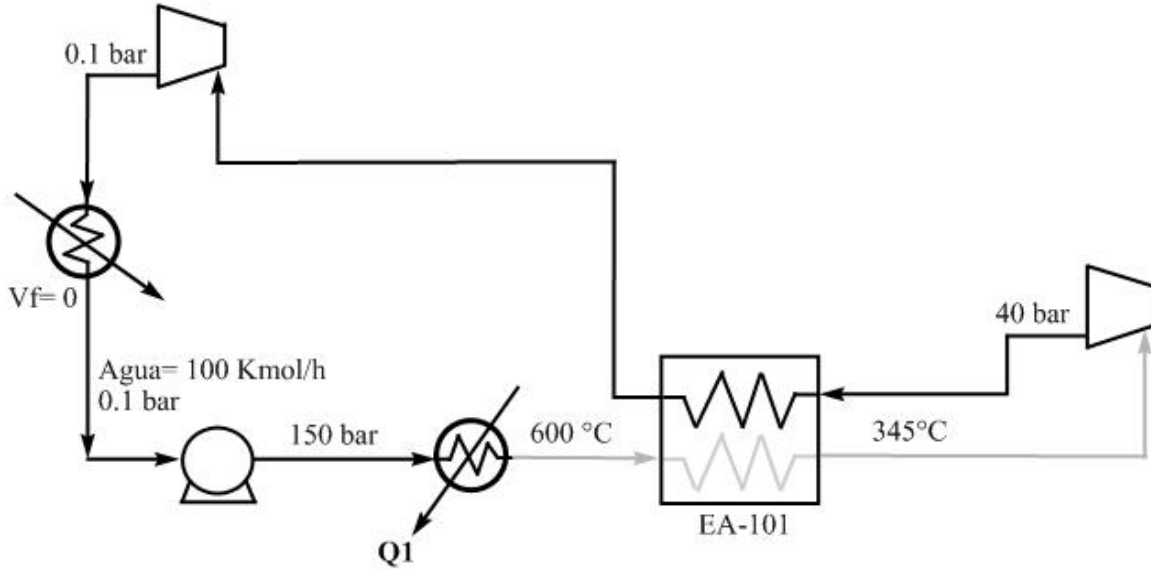


Diagrama 8.23 Ciclo de Rankine con Recalentamiento.

8.6.2.2.1 Resultados de la simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS.

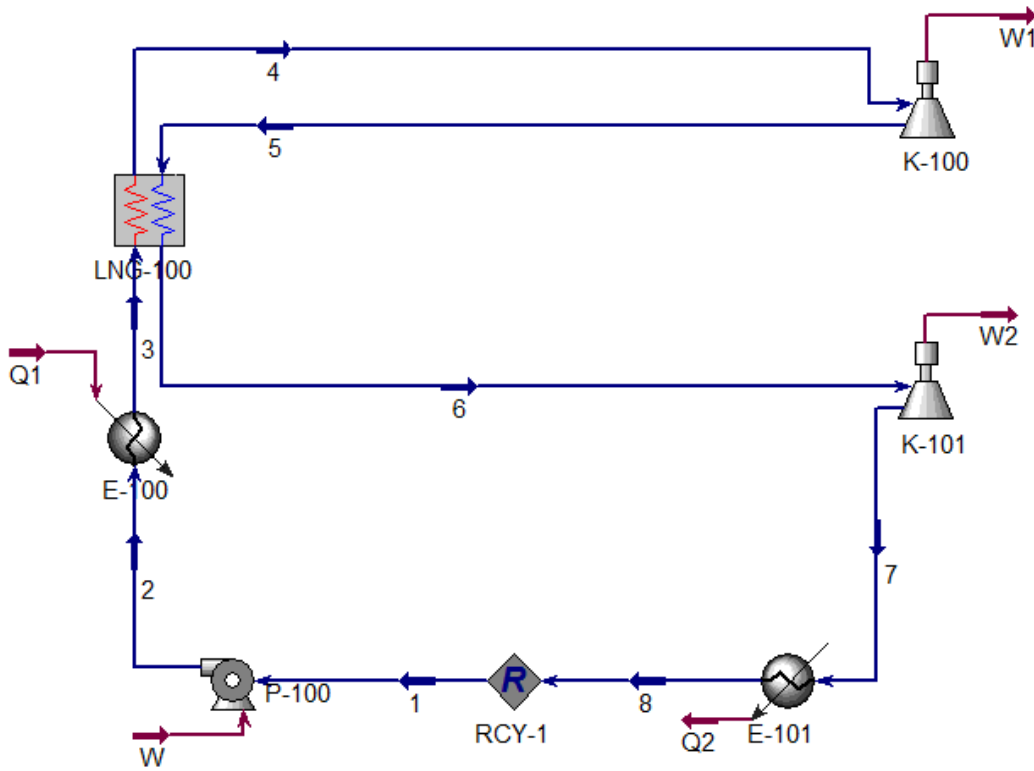


Diagrama 8.24 Simulación en HYSYS del ciclo de Rankine con Recalentamiento.

Material Streams					
		1	2	3	5
Vapour Fraction		0.0000	0.0000	1.0000	0.8180
Temperature	C	45.83	47.56	600.0	250.3
Pressure	kPa	10.00	1.500e+004	1.500e+004	4000
Molar Flow	kgmole/h	100.0	100.0	100.0	100.0
Mass Flow	kg/h	1802	1802	1802	1802
Liquid Volume Flow	m3/h	1.805	1.805	1.805	1.805
Heat Flow	kJ/h	-2.834e+007	-2.831e+007	-2.224e+007	-2.421e+007
		8	4	7	6
Vapour Fraction		0.0000	1.0000	0.9781	1.0000
Temperature	C	45.83	345.0	45.83	489.1
Pressure	kPa	10.00	1.500e+004	10.00	4000
Molar Flow	kgmole/h	100.0	100.0	100.0	100.0
Mass Flow	kg/h	1802	1802	1802	1802
Liquid Volume Flow	m3/h	1.805	1.805	1.805	1.805
Heat Flow	kJ/h	-2.834e+007	-2.392e+007	-2.413e+007	-2.253e+007

Compositions								
	1	2	3	5	8	4	7	6
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000

Energy Streams						
		W	Q1	W1	Q2	W2
Heat Flow	kJ/h	3.638e+004	6.069e+006	2.874e+005	4.218e+006	1.600e+006

8.6.2.2 Proceso Ideal

A continuación, se simuló en HYSYS el ciclo de Rankine Ideal. En este ciclo termodinámico se utiliza 100 Kmol/h de agua para producir potencia. La incorporación del recalentamiento tiene como objetivo mejorar la eficiencia del proceso.

El vapor entra a la turbina de alta presión a 150 bar y 345 °C y se expande isoentrópicamente a 0.1 bar. Posteriormente se hace pasar el vapor a un intercambiador de calor para condensarse, regresando a su estado inicial para continuar el ciclo nuevamente. Para esta simulación se utilizó el paquete termodinámico de ASME Steam.

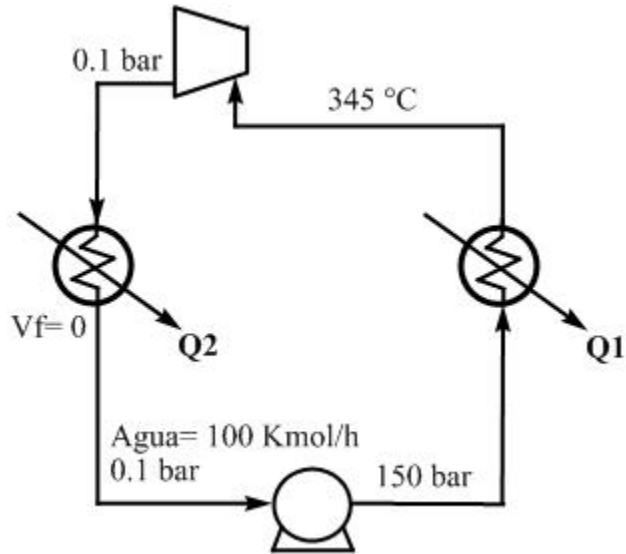


Diagrama 8.25 Ciclo de Rankine Ideal.

8.6.2.2.1 Resultados de la simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS.

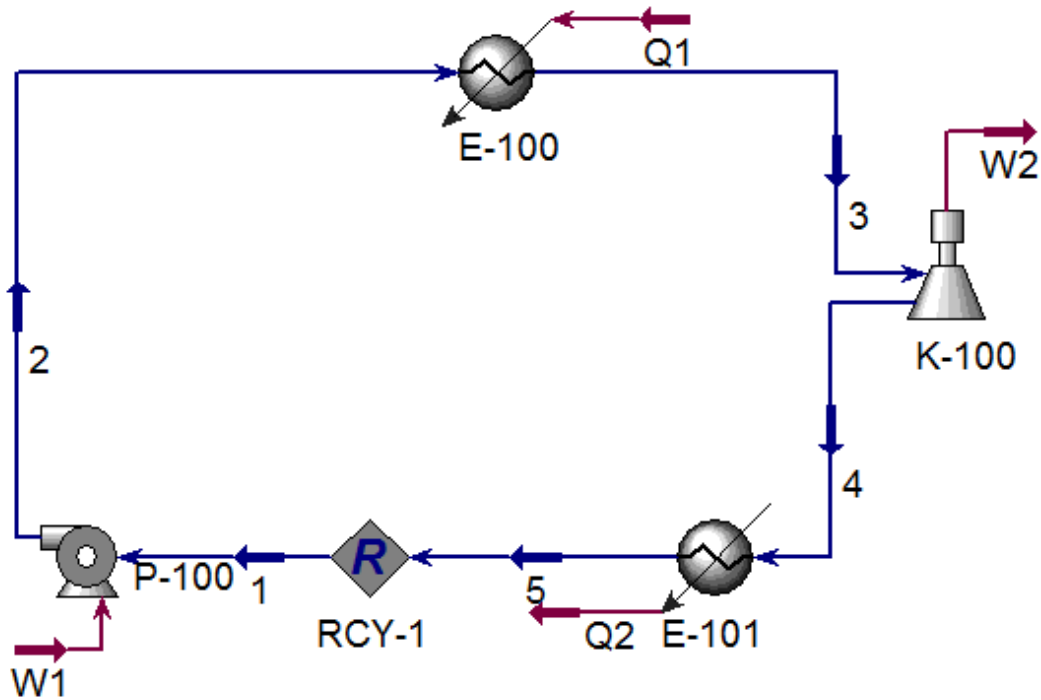


Diagrama 8.26 Simulación en HYSYS del ciclo de Rankine Ideal.

Elaboración de un Manual Integral de Procesos Químicos Asistido por Computadora

Material Streams						
		1	2	3	4	5
Vapour Fraction		0.0000	0.0000	1.0000	0.7287	0.0000
Temperature	C	45.83	47.56	345.0	45.83	45.83
Pressure	bar	0.1000	150.0	150.0	0.1000	0.1000
Molar Flow	kgmole/h	100.0	100.0	100.0	100.0	100.0
Mass Flow	kg/h	1802	1802	1802	1802	1802
Liquid Volume Flow	m3/h	1.805	1.805	1.805	1.805	1.805
Heat Flow	kcal/h	-6.775e+006	-6.766e+006	-5.717e+006	-6.023e+006	-6.775e+006

Compositions					
	1	2	3	4	5
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000

Energy Streams					
		W1	Q1	W2	Q2
Heat Flow	kcal/h	8696	1.049e+006	3.069e+005	7.510e+005

8.6.2.3 Ciclos de Refrigeración

Los ciclos de refrigeración consisten en la transferencia de calor de una región de temperatura inferior hacia una de temperatura superior y para realizar dicho proceso es necesario el uso de dispositivos especiales llamados refrigeradores. Otro dispositivo que también realiza el mismo proceso son las llamadas bombas de calor, la única diferencia es la entre ambos dispositivos es el objetivo que cumplen, los refrigeradores tienen como objetivo mantener el espacio refrigerado a una temperatura baja al extraer calor de él, en cambio las bombas de calor buscan mantener un espacio calentado a alta temperatura (Cengel & Boles, 2012).

Los refrigeradores son dispositivos cíclicos que utilizan fluidos llamados refrigerantes. Actualmente existen una variedad de refrigerantes utilizados para dicho proceso. Villamil y Piamba (2005) refiere que la selección del refrigerante ideal dependerá de diferentes variables, tanto del proceso como del refrigerante, a continuación, se enlistan algunas de los puntos a tener en cuenta para su selección:

- Baja temperatura de Ebullición.
- Fácilmente manejable en estado líquido.
- Alto calor latente de vaporización.
- No inflamable, no explosivo, no tóxico.
- Químicamente estable.
- No corrosivo.
- Presiones de trabajo moderadas.
- Fácil detección y localización de pérdidas.
- Inocuo para los aceites lubricantes.
- Bajo punto de congelación.
- Alta temperatura crítica.
- Moderado volumen específico de vapor.
- Bajo costo.

Los ciclos de refrigeración más utilizados son aquellos que se realizan por compresión de vapor. Este tipo de ciclos son ampliamente utilizados en refrigeradores, sistemas de acondicionamiento de aire y bombas de calor (Cengel & Boles, 2012). A continuación, se describen los 4 procesos del ciclo ideal de refrigeración por compresión de calor:

1. Compresión isentrópica en un compresor.
2. Rechazo de calor a presión constante en un condensador.
3. Estrangulamiento en un dispositivo de expansión.
4. Absorción de calor a presión constante en un evaporador.

8.6.2.3.1 Proceso con Dos Ciclos

A continuación, se simuló en HYSYS un proceso de refrigeración en cascada, que consiste en efectuar un proceso de refrigeración por etapas, es decir, tener dos o más ciclos de refrigeración.

Se tendrán como refrigerantes el R-134a y el propileno, con un flujo de 56.85 kmol/h y 45.36 kmol/h respectivamente. También se usará un intercambiador de calor tipo LNG que funcionará como evaporador para el ciclo de refrigeración del refrigerante R-134a y como condensador para el ciclo de refrigeración del propileno.

Para el ciclo de refrigeración del R-134a la corriente se introdujo al intercambiador de calor EA-101 donde se evaporó en su totalidad, seguidamente se comprimió a 7.72 bar. Posteriormente se condensó y se expandió a 1.44 bar para regresar a su estado inicial.

Para el ciclo de refrigeración con propileno la corriente se introdujo en el intercambiador de calor EA-101 donde se condensó, seguidamente la corriente líquida se expandió a 1.103 bar para posteriormente evaporarse y comprimirse a 3.99 bar para regresar a su estado inicial.

El refrigerante entra al compresor como vapor saturado y se comprime isentrópicamente hasta la presión del condensador 7.72 bar. Después el refrigerante entra en el condensador como vapor sobrecalentado y sale como líquido saturado, como resultado del rechazo de calor a los alrededores. El refrigerante líquido saturado se estrangula hasta la presión del evaporador 1.44 bar. El refrigerante entra al evaporador como un vapor húmedo de baja calidad y se evapora por completo absorbiendo calor. Sale del evaporador como vapor saturado y vuelve a entrar al compresor, completando el ciclo. Para esta simulación se utilizó el paquete termodinámico de Peng Robinson.

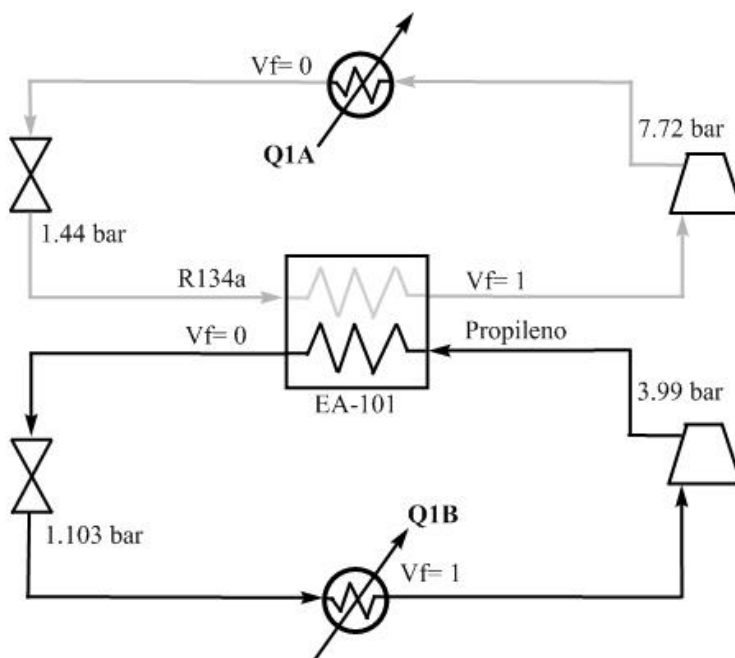


Diagrama 8.27 Ciclo de Refrigeración en Cascada.

8.6.2.3.1.1 Resultados de la simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS.

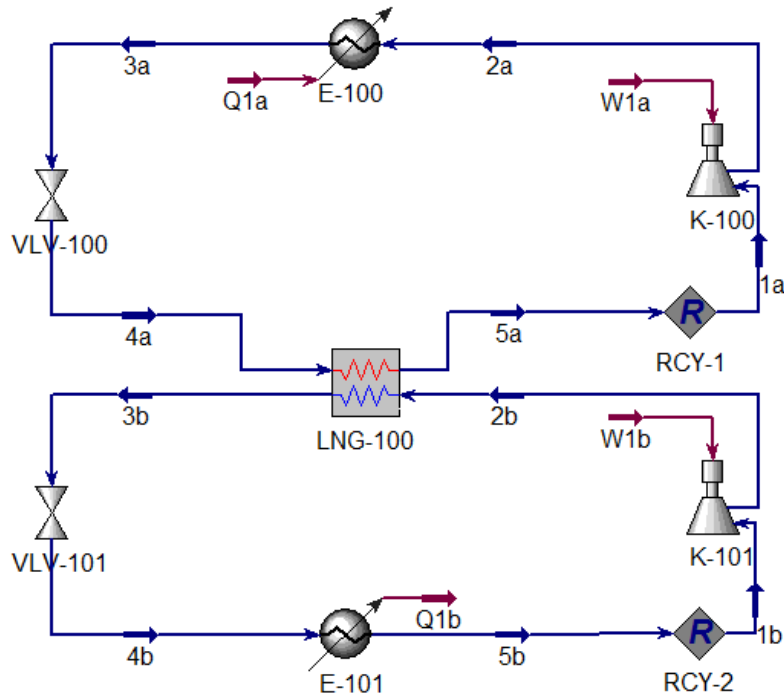


Diagrama 8.28 Simulación en HYSYS de un ciclo de Refrigeración en Cascada.

Material Streams											
		1a	2a	3a	4a	1b	2b	3b	5a	4b	5b
Vapour Fraction		1.0000	1.0000	0.0000	0.3122	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.1671	1.0000
Temperature	C	-18.01	47.29	30.08	-18.01	-45.52	18.99	-11.76	-18.01	-45.52	-45.52
Pressure	bar	1.448	7.722	7.722	1.448	1.103	3.999	3.999	1.448	1.103	1.103
Molar Flow	kgmole/h	56.85	56.85	56.85	56.85	45.36	45.36	45.36	56.85	45.36	45.36
Mass Flow	kg/h	5801	5801	5801	5801	1909	1909	1909	5801	1909	1909
Liquid Volume Flow	m3/h	4.672	4.672	4.672	4.672	3.664	3.664	3.664	4.672	3.664	3.664
Heat Flow	kcal/h	-1.222e+007	-1.216e+007	-1.243e+007	-1.243e+007	1.756e+005	2.127e+005	9723	-1.222e+007	9723	1.756e+005

Compositions											
		1a	2a	3a	4a	1b	2b	3b	5a	4b	5b
Comp Mole Frac (Propene)		0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000
Comp Mole Frac (R134a)		1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000

Energy Streams					
		W1a	Q1a	W1b	Q1b
Heat Flow	kcal/h	6.467e+004	-2.677e+005	3.713e+004	-1.659e+005

8.6.2.3.2 Proceso con Propileno como Refrigerante

A continuación, se simuló en HYSYS un proceso de refrigeración con propileno como refrigerante.

Se tendrá propileno líquido con un flujo de 10 kmol/h a una temperatura de 27.5°C. El refrigerante entra al compresor y se comprime isentrópicamente hasta la presión del condensador 10.13 bar. Después el refrigerante entra en el condensador como vapor sobrecalentado y sale como líquido saturado, como resultado del rechazo de calor a los alrededores. El refrigerante líquido saturado se estrangula hasta la presión del evaporador a 5.066 bar y se introduce en un separador flash. El propileno líquido se estrangula a la presión de 1.013 bar y se introduce en el intercambiador de calor EA-101 donde sale como vapor saturado. Seguidamente el vapor saturado de propileno se introduce a un compresor para elevar su presión hasta la presión del evaporador. Seguidamente es mezclado con el propileno líquido proveniente del separador flash para nuevamente repetir el ciclo. Para esta simulación se utilizó el paquete termodinámico de Peng Robinson.

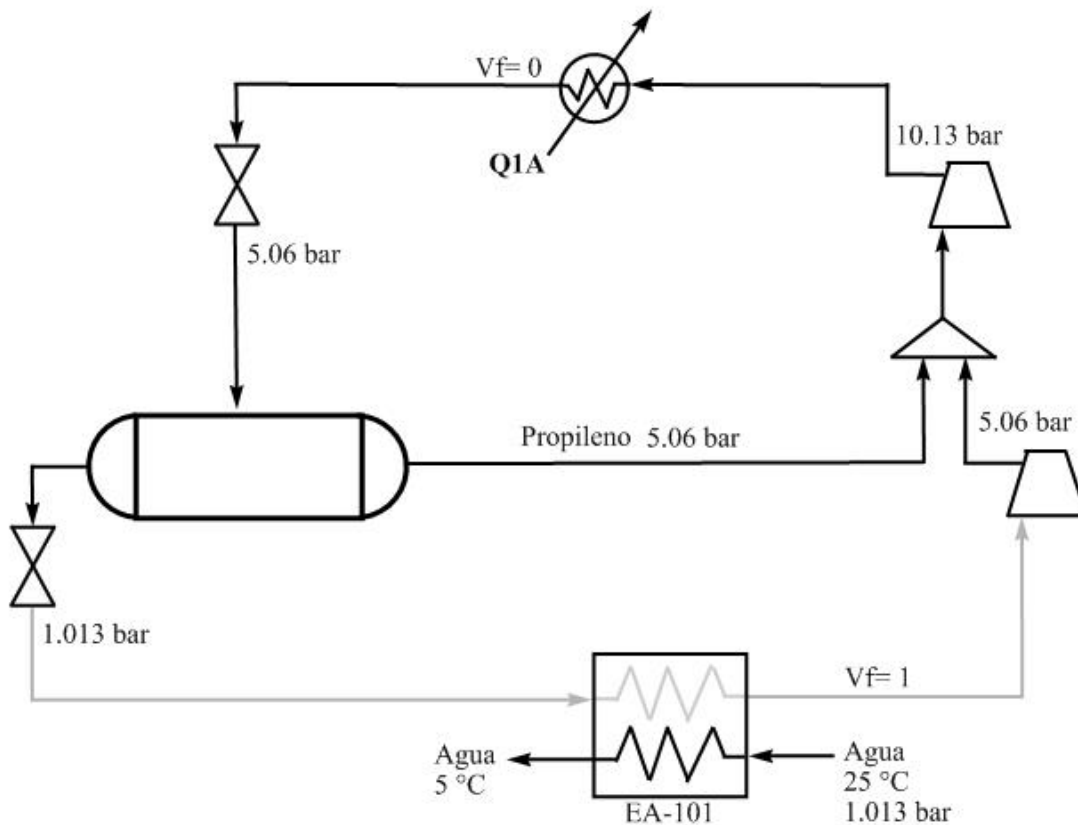


Diagrama 8.29 Ciclo de Refrigeración con propileno.

8.6.2.3.2.1 Resultados de la simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS.

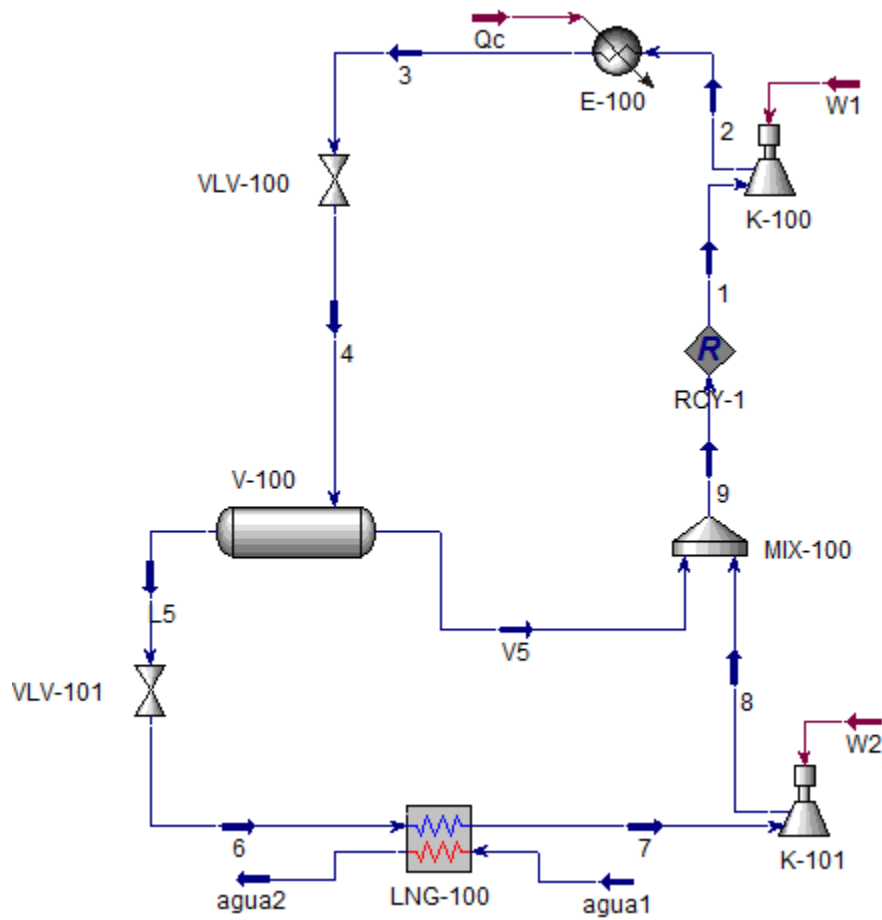


Diagrama 8.30 Simulación en HYSYS de un ciclo de Refrigeración con propileno.

Elaboración de un Manual Integral de Procesos Químicos Asistido por Computadora

Material Streams							
		1	2	3	4	agua1	agua2
Vapour Fraction		1.0000	1.0000	0.0000	0.1578	0.0000	0.0000
Temperature	C	27.50	65.58	20.07	-4.350	25.00	5.000
Pressure	bar	5.066	10.13	10.13	5.066	1.013	1.013
Molar Flow	kgmole/h	10.00	10.00	10.00	10.00	78.45	78.45
Mass Flow	kg/h	420.8	420.8	420.8	420.8	1413	1413
Liquid Volume Flow	m3/h	0.8078	0.8078	0.8078	0.8078	1.416	1.416
Heat Flow	kcal/h	4.796e+004	5.321e+004	1.006e+004	1.006e+004	-5.351e+006	-5.380e+006
		V5	L5	6	7	8	9
Vapour Fraction		1.0000	0.0000	0.2147	1.0000	1.0000	1.0000
Temperature	C	-4.350	-4.350	-47.43	-47.43	33.23	27.50
Pressure	bar	5.066	5.066	1.013	1.013	5.066	5.066
Molar Flow	kgmole/h	1.578	8.422	8.422	8.422	8.422	10.00
Mass Flow	kg/h	66.42	354.4	354.4	354.4	354.4	420.8
Liquid Volume Flow	m3/h	0.1275	0.6803	0.6803	0.6803	0.6803	0.8078
Heat Flow	kcal/h	6789	3273	3273	3.243e+004	4.117e+004	4.796e+004

Compositions						
	1	2	3	4	agua1	agua2
Comp Mole Frac (R134a)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	1.0000
Comp Mole Frac (Propene)	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000
	V5	L5	6	7	8	9
Comp Mole Frac (R134a)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Propene)	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000

Energy Streams				
		W1	Qc	W2
Heat Flow	kcal/h	5245	-4.314e+004	8740

8.7 Producción de Ciclohexano

8.7.1 Generalidades

En el presente apartado se presentan los aspectos generales del proceso de producción de ciclohexano, sus propiedades físicas y termoquímicas, la importancia económica a nivel nacional y/o internacional (cuando así se presente) y el precio en el mercado de los reactivos y productos correspondientes al proceso de estudio, así como también, las aplicaciones y usos en la vida diaria y a nivel industrial a los que es destinado este compuesto.

8.7.1.1 Propiedades Físicas y Termoquímicas

El ciclohexano (C_6H_{12}), también conocido como hexametileno, es un hidrocarburo alicíclico que en las condiciones estándar se encuentra como un líquido incoloro de olor penetrante, parecido al del petróleo. El ciclohexano es poco tóxico e insoluble en solventes polares. A continuación, se proporcionan las propiedades físicas y termoquímicas de este compuesto.

Tabla 8.20 Propiedades físicas y termoquímicas del Ciclohexano.

Molécula	Propiedades Físicas y Termoquímicas	
 <p>Figura 8.3 Molécula de Ciclohexano.</p>	Densidad	779 kg/m ³
	Masa molar	84.161 g/mol
	Punto de fusión	7 °C
	Punto de ebullición	81 °C
	Temperatura crítica	280 °C
	Presión crítica	40.53 bar
	Factor acéntrico (ω)	0.2133
	$\Delta H^\circ_{\text{fgas}}$	-123.2 kJ/mol
	$\Delta H^\circ_{\text{flíquido}}$	-----

8.7.1.2 Importancia Económica

La importancia económica del ciclohexano está íntimamente relacionada con la importancia de la materia prima fundamental de la cual se sintetiza: el benceno. El benceno es un hidrocarburo que actualmente tiene una multitud de usos diferentes en el mundo, por lo que no es de extrañarse que sea considerado la tercera materia prima de la petroquímica a nivel mundial (Robles Iglesias, 2017).

La importancia de la síntesis de ciclohexano radica en que es la materia prima principal para la manufactura de nylon 6 y nylon 6,6, unas de las fibras sintéticas más importantes en el siglo XX. El principal productor de ciclohexano es Estados Unidos de América, ya que produce aproximadamente 1.5×10^6 ton/año; alrededor del 34% de la producción mundial de este compuesto en el año 2000 (Campbell, 2012).

Según la revista "ICIS Chemical Business, 2015" el 90% de la producción de ciclohexano es destinada a la manufactura de nylon 6 y nylon 6,6, mientras que el otro 10% restante es utilizado para la fabricación de disolventes, plastificantes e insecticidas.

Actualmente la demanda de ciclohexano se ha visto afectada por el desarrollo tecnológico de otras alternativas para la manufactura de nylon 6 y nylon 6,6 como son su síntesis a partir de butadieno, acrilonitrilo o fenol (Campbell, 2012).

8.7.1.2.1 Costos de la Materia Prima y Producto

A continuación, se presentan los costos aproximados de los reactivos y productos del proceso encontrados en el mercado.

Tabla 8.21 Costos de los reactivos y productos para la producción de Ciclohexano.

Nombre	Costos
Benceno (30/11/2013)	\$ 19,618.51 MXN/Tonelada
Ciclohexano (20/07/2018)	\$ 368,480.00 MXN/Litro

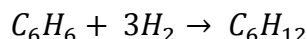
8.7.1.3 Aplicaciones del Ciclohexano

Como se ha mencionado con anterioridad la aplicación más importante del ciclohexano es la manufactura de nylon 6 y nylon 6,6 a partir de la síntesis de productos intermediarios como son el ácido adípico, caprolactama y hexametilendiamina (Campbell, 2012).

Sólo un pequeño porcentaje de ciclohexano es utilizado para la fabricación de fibras poliamídicas, disolventes de ésteres de celulosa, resinas, caucho crudo, extracción de aceites esenciales, pinturas y un sinnúmero de productos finales más (Yacimientos Petrolíferos Fiscales, 2018).

8.7.2 Descripción del Proceso

Actualmente el ciclohexano es fabricado mediante la hidrogenación de benceno, solo una pequeña parte de la industria de este compuesto lo fabrica a partir de la separación de las fracciones de nafta pesada y saturación de olefinas.



El benceno puede ser catalíticamente hidrogenado a ciclohexano en fase vapor o líquida en la presencia de hidrogeno. Actualmente los catalizadores más comercializados para dicho proceso pueden ser níquel, platino o paladio (AspenTech, 2001).

La reacción es altamente exotérmica y generalmente las presiones de los reactores oscilan entre 20 y 30 MP. Además, la reacción no debe excederse de los 300°C, esto es debido a que si se excede de dicho limite el equilibrio de la reacción se verá afectado disminuyendo la pureza del ciclohexano producido (Campbell, 2012).

Actualmente y debido al gran avance tecnológico los procesos comerciales que implican la producción de ciclohexano en fase vapor utilizan reactores multifásicos vapor-líquido con recirculación de ciclohexano a la entrada de los reactores, esto permite aumentar la conversión de benceno a ciclohexano en cada reactor al absorber parte del calor desprendido por la reacción.

8.7.2.1 Proceso con Recirculación

A continuación, se simuló en HYSYS el proceso de producción de ciclohexano a partir de la hidrogenación de benceno. Se utilizó un sistema con recirculación de hidrógeno y ciclohexano con la finalidad de enriquecer la mezcla de entrada al reactor y así obtener un mejor rendimiento en el mismo.

Las condiciones de reacción son 41°C en la entrada del reactor y 200°C en la salida del mismo, con una conversión del 99.85% y una presión de 23.1 bar. En la entrada se tendrán dos corrientes, la primera con 99.7% de hidrógeno y 0.3% de nitrógeno y la segunda de benceno puro, con un flujo de 128.7 kmol/h y 41.79 kmol/h respectivamente. La corriente de hidrógeno estará a 25°C, mientras que la corriente de benceno estará a 37.78°C, ambas a 1.034 bar.

Primeramente, ambas corrientes de entrada se elevaron a la presión de reacción, en el caso del hidrógeno se utilizó un compresor para dicha tarea por encontrarse en estado gaseoso en las condiciones dadas, mientras que en la corriente de benceno se utilizó una bomba por encontrarse en estado líquido. Seguidamente la corriente de hidrógeno se enfrió en un intercambiador de calor tipo LNG a 48.89 °C para después mezclarse con la corriente de benceno. Después la mezcla se introdujo al reactor y en la salida se enfrió a 200 °C y se introdujo en un separador flash. La mezcla gaseosa rica en hidrógeno se purgó 9% y se recirculó hacia la mezcla de entrada al reactor junto con el 38% de la mezcla líquida rica en ciclohexano, el 62% restante se expandió a 1.034 bar y nuevamente se introdujo a un separador flash para obtener una corriente de ciclohexano con un mayor porcentaje de pureza. Para esta simulación se utilizó el paquete termodinámico de Peng Robinson.

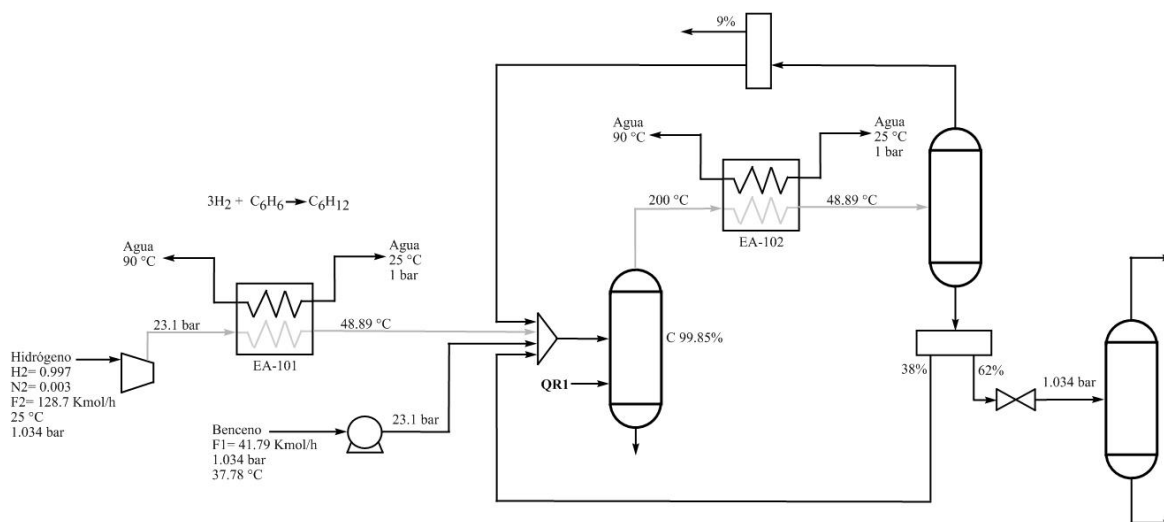


Diagrama 8.31 Proceso de producción de Ciclohexano con Recirculación.

8.7.2.1.1 Resultados de la Simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS.

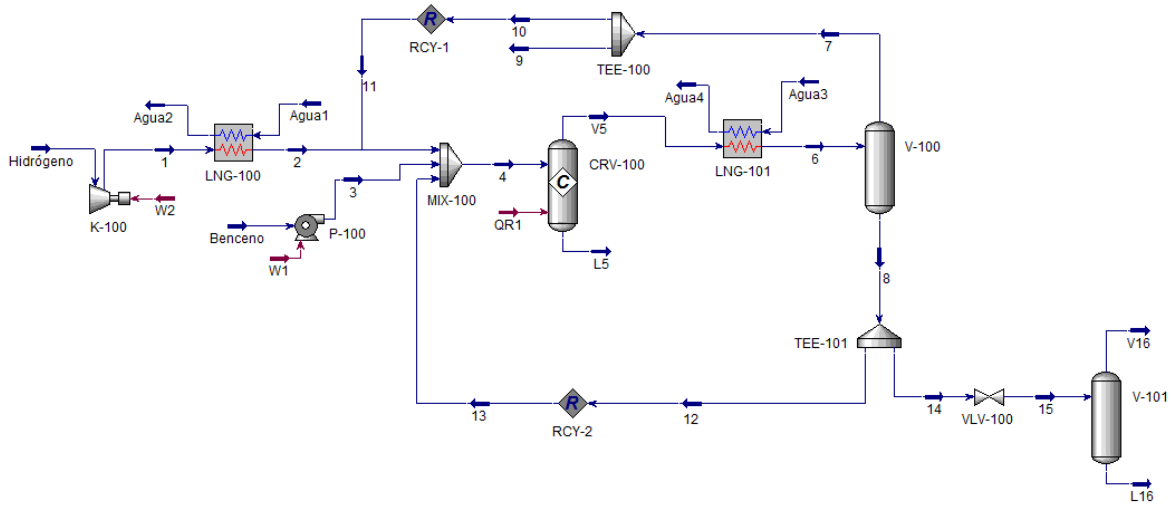


Diagrama 8.32 Simulación en HYSYS del proceso de producción de Ciclohexano con Recirculación.

Material Streams											
		Hidrógeno	Benceno	3	4	V5	L5	6	7		
Vapour Fraction		1.0000	0.0000	0.0000	0.7110	1.0000	0.0000	0.3476	1.0000		
Temperature	C	25.00	37.78	38.89	41.05	200.0	200.0	48.89	48.89		
Pressure	bar	1.034	1.034	23.10	22.75	22.75	22.75	22.75	22.75		
Molar Flow	kgmole/h	128.7	41.79	41.79	229.7	104.4	0.0000	104.4	36.31		
Mass Flow	kg/h	269.4	3265	3265	5884	5884	0.0000	5884	212.6		
Liquid Volume Flow	m3/h	3.717	3.701	3.701	11.21	8.388	0.0000	8.388	1.118		
Heat Flow	kcal/h	-3.808	5.165e+005	5.192e+005	-3.967e+005	-1.590e+006	0.0000	-2.447e+006	-1.270e+004		
		8	9	10	11	14	12	13	V16		
Vapour Fraction		0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000		
Temperature	C	48.89	48.89	48.89	48.89	48.89	48.89	48.89	48.93		
Pressure	bar	22.75	22.75	22.75	22.75	22.75	22.75	22.75	1.034		
Molar Flow	kgmole/h	68.13	2.965	33.34	33.30	42.24	25.89	25.89	0.7408		
Mass Flow	kg/h	5671	17.36	195.3	194.5	3516	2155	2155	24.74		
Liquid Volume Flow	m3/h	7.270	9.128e-002	1.026	1.025	4.508	2.763	2.763	4.212e-002		
Heat Flow	kcal/h	-2.435e+006	-1037	-1.167e+004	-1.165e+004	-1.510e+006	-9.252e+005	-9.252e+005	-7327		
		L16	15	1	2	Agua1	Agua2	Agua3	Agua4		
Vapour Fraction		0.0000	0.0175	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000		
Temperature	C	48.93	48.93	595.3	48.89	25.00	90.00	25.00	90.00		
Pressure	bar	1.034	1.034	23.10	23.10	1.000	1.000	1.000	1.000		
Molar Flow	kgmole/h	41.50	42.24	128.7	128.7	405.8	405.8	706.7	706.7		
Mass Flow	kg/h	3491	3516	269.4	269.4	7311	7311	1.273e+004	1.273e+004		
Liquid Volume Flow	m3/h	4.465	4.508	3.717	3.717	7.326	7.326	12.76	12.76		
Heat Flow	kcal/h	-1.502e+006	-1.510e+006	5.131e+005	2.097e+004	-2.776e+007	-2.727e+007	-4.834e+007	-4.749e+007		

Elaboración de un Manual Integral de Procesos Químicos Asistido por Computadora

Compositions								
	Hidrógeno	Benceno	3	4	V5	L5	6	7
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.9970	0.0000	0.0000	0.6890	0.3159	0.0114	0.3159	0.8903
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0030	0.0000	0.0000	0.0152	0.0334	0.0015	0.0334	0.0921
Comp Mole Frac (Benzene)	0.0000	1.0000	1.0000	0.1821	0.0006	0.0008	0.0006	0.0000
Comp Mole Frac (Cyclohexane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.1138	0.6502	0.9862	0.6502	0.0176
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	8	9	10	11	14	12	13	V16
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0098	0.8903	0.8903	0.8908	0.0098	0.0098	0.0098	0.5431
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0020	0.0921	0.0921	0.0916	0.0020	0.0020	0.0020	0.1097
Comp Mole Frac (Benzene)	0.0009	0.0000	0.0000	0.0000	0.0009	0.0009	0.0009	0.0003
Comp Mole Frac (Cyclohexane)	0.9873	0.0176	0.0176	0.0176	0.9873	0.9873	0.9873	0.3470
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
	L16	15	1	2	Agua1	Agua2	Agua3	Agua4
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0003	0.0098	0.9970	0.9970	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Nitrogen)	0.0001	0.0020	0.0030	0.0030	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Benzene)	0.0009	0.0009	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Cyclohexane)	0.9987	0.9873	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000

Energy Streams				
		W1	QR1	W2
Heat Flow	kcal/h	2674	-1.194e+006	5.131e+005

8.8 Fischer Tropsch

8.8.1 Generalidades

En el presente apartado se presentan los aspectos generales del proceso de producción de hidrocarburos a partir del proceso Fischer Tropsch, las propiedades físicas y termoquímicas de los hidrocarburos producidos, la importancia económica a nivel nacional y/o internacional (cuando así se presente) y el precio en el mercado de los reactivos y productos correspondientes al proceso de estudio, así como también, las aplicaciones y usos en la vida diaria y a nivel industrial a los que son destinados estos compuestos.

8.8.1.1 Propiedades físicas y Termoquímicas

El butano (C_4H_{10}), conocido también como n-butano, es un hidrocarburo saturado, alifático y altamente inflamable. Se caracteriza por ser un gas incoloro, sin olor y por ser parcialmente soluble en agua. A continuación, se proporcionan las propiedades físicas y termoquímicas de este compuesto.

Tabla 8.22 Propiedades físicas y termoquímicas del Butano.

Propiedades Físicas y Termoquímicas	
Densidad	2.52 kg/m ³
Masa molar	58.123 g/mol
Punto de fusión	-138 °C
Punto de ebullición	-0 °C
Temperatura crítica	152 °C
Presión crítica	37.97 bar
Factor acéntrico (ω)	0.2010
$\Delta H^\circ_{f\text{gas}}$	-125.79 kJ/mol
$\Delta H^\circ_{f\text{líquido}}$	----

El pentano (C_5H_{12}), conocido también como n-pentano, es un hidrocarburo líquido saturado, incoloro, característico por un fuerte olor a gasolina y altamente inflamable. A continuación, se proporcionan las propiedades físicas y termoquímicas de este compuesto.

Tabla 8.23 Propiedades físicas y termoquímicas del Pentano.

Propiedades Físicas y Termoquímicas	
Densidad	630 kg/m ³
Masa molar	72.15 g/mol
Punto de fusión	-130 °C
Punto de ebullición	36 °C
Temperatura crítica	197 °C
Presión crítica	33.75 bar
Factor acéntrico (ω)	0.2539
$\Delta H^\circ_{f\text{gas}}$	-146.76 kJ/mol
$\Delta H^\circ_{f\text{líquido}}$	----

8.8.1.2 Importancia Económica

La importancia del proceso Fischer Tropsch radica en el uso final que se les da a los hidrocarburos generados de la reacción. Como ejemplo de ello se tiene la gasolina, el keroseno, gasoil y variedades de lubricantes.

El hidrocarburo con mayor impacto económico en el mundo es la gasolina. La gasolina, obtenida de fuentes de energía fósil, tiene una variedad de usos y aplicaciones desde el hogar hasta las grandes industrias, ya que es el combustible por excelencia que se utiliza para los medios de transporte terrestre, aéreo y marítimo. A continuación, se muestran los 10 países con el mayor consumo de barriles de petróleo en el mundo.

Tabla 8. 24 Consumo de petróleo a nivel mundial.

País	Millones de Barriles de Petróleo
EUA	18.5
China	10.3
Japón	4.7
India	3.6
Rusia	3.2
Arabia Saudita	2.86
Brasil	2.8
Alemania	2.4
Corea del Sur	2.3
Canadá	2.28

Fuente: Praveen Duddu. *Hydrocarbons Technology*, 2012.

8.8.1.2.1 Costos de la Materia Prima y Producto

A continuación, se presentan los costos de los productos producidos en el caso de estudio, como es el butano y el pentano. En este caso particular no existe un precio fijo para la materia prima, gas de síntesis, debido a que los complejos petroquímicos obtienen este gas a partir del fraccionamiento de hulla, carbón, coque nafta o biomasa, obtenidas directamente de la naturaleza.

Tabla 8. 25 Costos de los reactivos y productos para el proceso Fischer Tropsch.

Nombre	Costos
Butano (13/11/2017)	\$18,900.00 MXN/Tonelada
Pentano (30/12/2013)	\$10,790.53 MXN/Tonelada

8.8.1.3 Aplicaciones del Proceso Fischer Tropsch

El proceso Fischer Tropsch es aplicado ampliamente en la industria petroquímica. Se sabe que el proceso puede ser aplicado en la producción de hidrocarburos líquidos de gran peso molecular a partir de carbón, gas natural o biomasa. Esta última es actualmente una de las

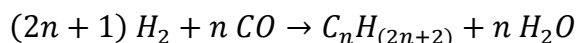
tecnologías más investigadas, ya que aprovecha los desechos orgánicos de las industrias y de la naturaleza para la síntesis de los hidrocarburos (Jin Hu, 2012).

Actualmente en el área de investigación se está probando con diversas modificaciones del proceso Fischer Tropsch para reducir las emisiones de monóxido de carbono (CO₂) a la atmósfera.

8.8.2 Descripción del Proceso

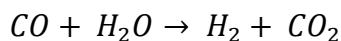
El proceso Fischer Tropsch (FT) es un proceso catalítico para la conversión de gas de síntesis en una mezcla de productos que posteriormente pueden ser refinados en combustibles sintéticos, lubricantes y petroquímicos. Este proceso lleva el nombre de los inventores originales alemanes, Franz Fischer y Hans Tropsch en la década de 1920 (Speight, 2011).

El gas de síntesis es por lo general producido a partir de la gasificación de carbón, biomasa, desperdicios orgánicos o reformado de gas natural. A continuación, se presenta la ecuación general de la conversión del gas de síntesis en hidrocarburos líquidos:



Generalmente las condiciones de los procesos Fisher Tropsch son seleccionadas específicamente para la formación de hidrocarburos líquidos de alto peso molecular, ya que son aquellos que tienen mayor demanda en el mercado.

Existen otras reacciones secundarias que se llevan a cabo, una de las más significativas es la reacción de cambio de agua – gas.



Dependiendo del catalizador, la temperatura y el tipo de proceso empleado se pueden obtener hidrocarburos que van desde metano hasta parafinas y olefinas de mayor peso molecular. Los catalizadores usados en este tipo de procesos se caracterizan por estar basados en metales de transición de hierro, cobalto, níquel y rutenio (U.S. Department of Energy, 2018). Entre los catalizadores mencionados se sabe que:

- ✓ Níquel (Ni) tiende a promover la formación del metano.
- ✓ Hierro (Fe) es el catalizador con menos costo, pero con una mayor actividad de cambio de agua-gas.
- ✓ Cobalto (Co) es el catalizador más activo en comparación con los otros mencionados.

8.8.2.1 Proceso con Recuperación de Calor

A continuación, se simuló en HYSYS el proceso Fischer Tropsch para producir butano y pentano a partir de gas de síntesis, utilizando un sistema de recuperación de calor; que consiste en utilizar el calor generado por la reacción exotérmica para calentar las corrientes de entrada al reactor.

Las condiciones de reacción son 250°C en la entrada del reactor y 300°C en la salida del mismo, con una conversión del 35% para la Rxn1, 35% para la Rxn2 y 10% para la Rxn3. En la entrada se tendrán dos corrientes de gas de síntesis, ambas con una composición de 66.67% de hidrógeno y 33.33% de monóxido de carbono, con un flujo de 900 kmol/h y 450 kmol/h respectivamente, ambas a 25°C y 1 bar.

Primeramente, se introdujo la primera corriente de gas de síntesis al intercambiador de calor tipo LNG EA-101 donde se calentó a la temperatura de reacción y seguidamente se introdujo al reactor. A la salida del reactor se introdujo la corriente al mismo intercambiador de calor y posteriormente se mezcló la segunda corriente de gas de síntesis. Después se introdujo al intercambiador de calor tipo LNG EA-102 donde se calentó la mezcla a la temperatura de reacción para posteriormente ser introducida al reactor y realizar el mismo procedimiento de recuperación de calor antes mencionado. Para esta simulación se utilizó el paquete termodinámico de Antoine.

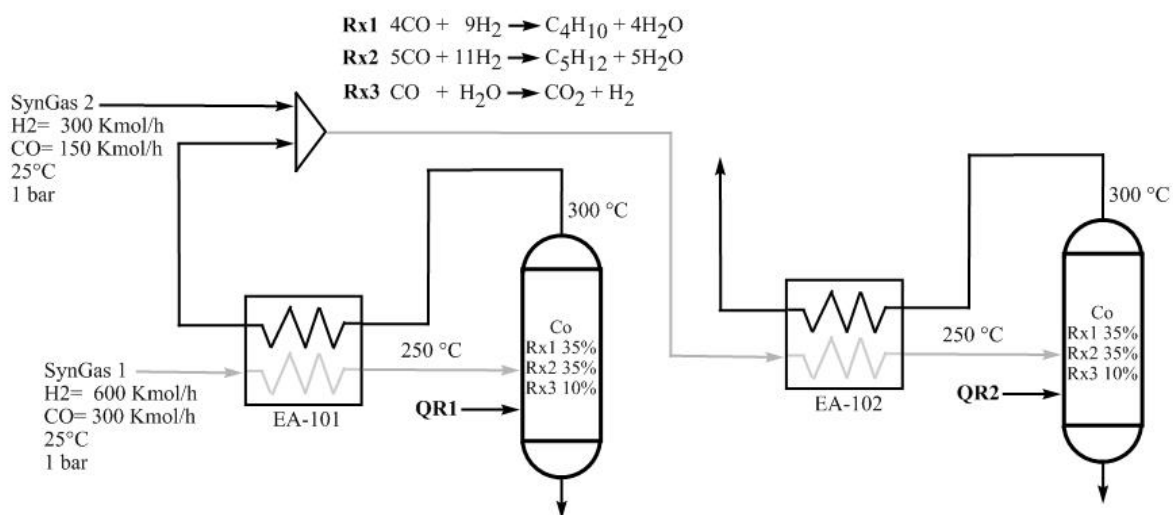


Diagrama 8.33 Proceso Fischer Tropsch con Recuperación de Calor.

8.8.2.1.1 Resultados de la Simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS.

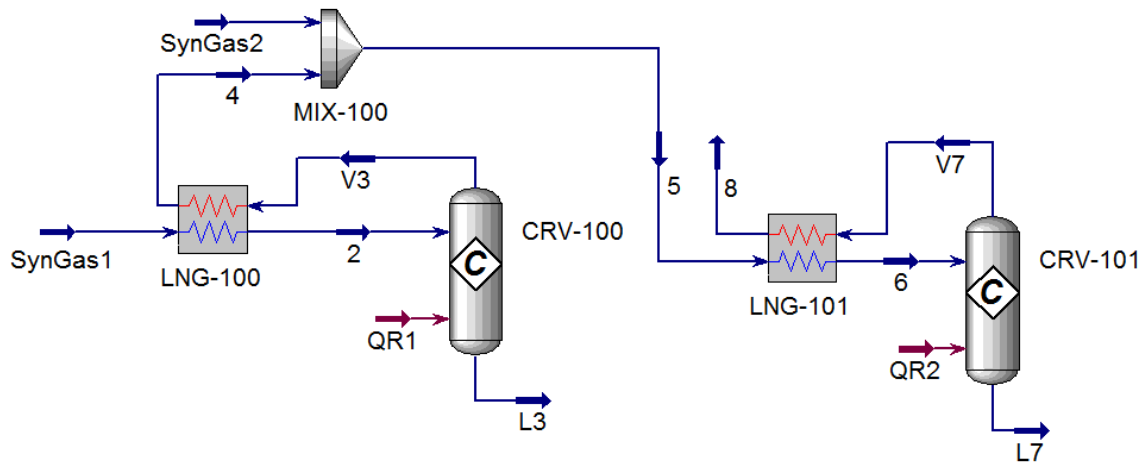


Diagrama 8.34 Simulación en HYSYS del proceso Fischer Tropsch con Recuperación de Calor.

		Material Streams							
		SynGas1	SynGas2	2	L3	V3	4		
Vapour Fraction		1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	0.9674		
Temperature	C	25.00	25.00	250.0	300.0	300.0	66.41		
Pressure	bar	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000		
Molar Flow	kgmole/h	900.0	450.0	900.0	0.0000	553.5	553.5		
Mass Flow	kg/h	9613	4806	9613	0.0000	9613	9613		
Liquid Volume Flow	m3/h	27.83	13.91	27.83	0.0000	18.28	18.28		
Heat Flow	kcal/h	-7.930e+006	-3.965e+006	-6.517e+006	0.0000	-1.329e+007	-1.471e+007		
		5	6	V7	L7	8			
Vapour Fraction		0.9801	1.0000	1.0000	0.0000	0.9769			
Temperature	C	53.00	250.0	300.0	300.0	77.04			
Pressure	bar	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000			
Molar Flow	kgmole/h	1004	1004	698.5	0.0000	698.5			
Mass Flow	kg/h	1.442e+004	1.442e+004	1.442e+004	0.0000	1.442e+004			
Liquid Volume Flow	m3/h	32.20	32.20	23.79	0.0000	23.79			
Heat Flow	kcal/h	-1.867e+007	-1.683e+007	-2.264e+007	0.0000	-2.448e+007			

Compositions						
	SynGas1	SynGas2	2	L3	V3	4
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.6667	0.6667	0.6667	0.4240	0.4088	0.4088
Comp Mole Frac (CO)	0.3333	0.3333	0.3333	0.0627	0.2061	0.2061
Comp Mole Frac (CO2)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0135	0.0229	0.0229
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.2225	0.0474	0.0474
Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.0000	0.0000	0.0000	0.2201	0.0247	0.0247
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0573	0.2901	0.2901
	5	6	V7	L7	8	
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.5244	0.5244	0.2825	0.2652	0.2825	
Comp Mole Frac (CO)	0.2632	0.2632	0.1438	0.0396	0.1438	
Comp Mole Frac (CO2)	0.0126	0.0126	0.0341	0.0182	0.0341	
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0262	0.0262	0.0707	0.3001	0.0707	
Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.0136	0.0136	0.0367	0.2968	0.0367	
Comp Mole Frac (H2O)	0.1600	0.1600	0.4322	0.0802	0.4322	

Energy Streams			
		QR1	QR2
Heat Flow	kcal/h	-6.776e+006	-5.809e+006

8.8.2.2 Proceso con Tres Reactores

A continuación, se simuló en HYSYS el proceso Fischer Tropsch utilizando un sistema de 3 reactores para producir butano y pentano a partir de gas de síntesis.

Las condiciones de reacción son 250°C en la entrada del reactor y 300°C en la salida del mismo, con una conversión del 35% para la Rxn1 y 35% para la Rxn2. En la entrada se tendrá una corriente de gas de síntesis con una composición de 66.67% de hidrógeno y 33.33% de monóxido de carbono, con un flujo de 858 kmol/h a 25°C y 1 bar.

Primeramente, se calentó la corriente de gas de síntesis a la temperatura de reacción y se introdujo en el primer reactor. Seguidamente la corriente de gases de salida del reactor se introdujo en un intercambiador de calor tipo LNG, EA-101, para disminuir su temperatura a la temperatura de reacción, utilizando como fluido de enfriamiento agua a 5 bar. Posteriormente se repite el proceso con los demás reactores. Para esta simulación se utilizó el paquete termodinámico de Antoine.

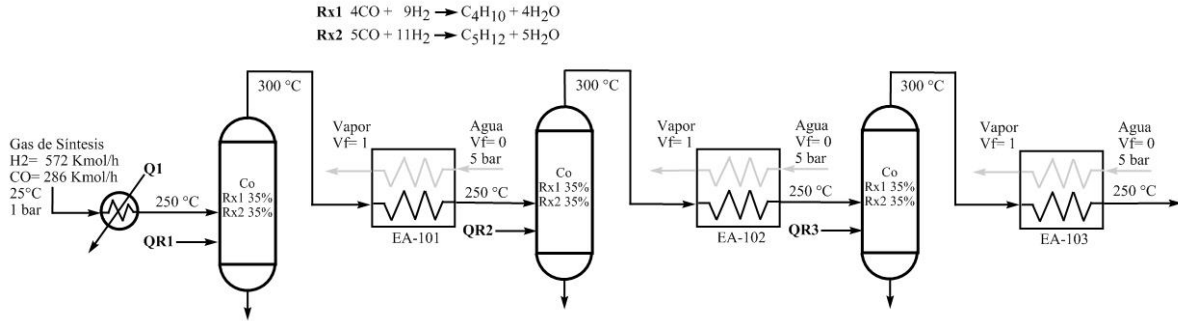


Diagrama 8.35 Proceso Fischer Tropsch con tres Reactores.

8.8.2.2.1 Resultados de la Simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS.

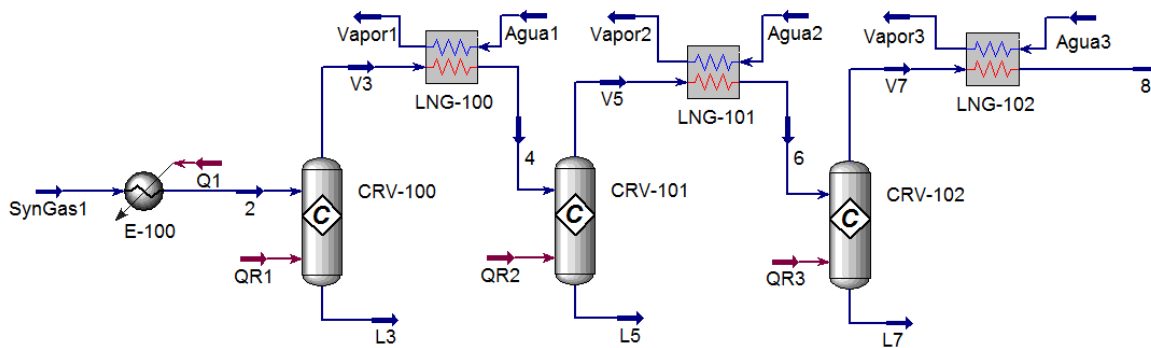


Diagrama 8.36 Simulación en HYSYS del proceso Fischer Tropsch con tres Reactores.

Elaboración de un Manual Integral de Procesos Químicos Asistido por Computadora

Material Streams							
		SynGas1	2	L3	V3	4	V5
Vapour Fraction		1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Temperature	C	25.00	250.0	300.0	300.0	250.0	300.0
Pressure	bar	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Molar Flow	kgmole/h	858.0	858.0	0.0000	457.6	457.6	343.8
Mass Flow	kg/h	9164	9164	0.0000	9164	9164	9164
Liquid Volume Flow	m3/h	26.53	26.53	0.0000	15.06	15.06	11.80
Heat Flow	kcal/h	-7.560e+006	-6.213e+006	0.0000	-1.395e+007	-1.421e+007	-1.624e+007
		L5	6	V7	L7	Agua1	Vapor1
Vapour Fraction		0.0000	1.0000	1.0000	0.0000	0.0000	1.0000
Temperature	C	300.0	250.0	300.0	300.0	151.8	151.8
Pressure	bar	1.000	1.000	1.000	1.000	5.000	5.000
Molar Flow	kgmole/h	0.0000	343.8	343.8	0.0000	28.08	28.08
Mass Flow	kg/h	0.0000	9164	9164	0.0000	505.8	505.8
Liquid Volume Flow	m3/h	0.0000	11.80	11.80	0.0000	0.5069	0.5069
Heat Flow	kcal/h	0.0000	-1.648e+007	-1.624e+007	0.0000	-1.847e+006	-1.592e+006
		Agua2	Vapor2	8	Agua3	Vapor3	
Vapour Fraction		0.0000	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	
Temperature	C	151.8	151.8	200.0	151.8	151.8	
Pressure	bar	5.000	5.000	1.000	5.000	5.000	
Molar Flow	kgmole/h	26.56	26.56	343.8	52.07	52.07	
Mass Flow	kg/h	478.5	478.5	9164	938.1	938.1	
Liquid Volume Flow	m3/h	0.4795	0.4795	11.80	0.9400	0.9400	
Heat Flow	kcal/h	-1.747e+006	-1.506e+006	-1.671e+007	-3.426e+006	-2.953e+006	

Compositions						
	SynGas1	2	L3	V3	4	V5
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.6667	0.6667	0.2657	0.2766	0.2766	0.0000
Comp Mole Frac (CO)	0.3333	0.3333	0.0528	0.1875	0.1875	0.0840
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0000	0.0000	0.2377	0.0547	0.0547	0.0923
Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.0000	0.0000	0.3617	0.0437	0.0437	0.0757
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0820	0.4375	0.4375	0.7479
	L5	6	V7	L7	Agua1	Vapor1
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (CO)	0.0197	0.0840	0.0840	0.0197	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.3342	0.0923	0.0923	0.3342	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.5211	0.0757	0.0757	0.5211	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (H2O)	0.1249	0.7479	0.7479	0.1249	1.0000	1.0000
	Agua2	Vapor2	8	Agua3	Vapor3	
Comp Mole Frac (Hydrogen)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	
Comp Mole Frac (CO)	0.0000	0.0000	0.0840	0.0000	0.0000	
Comp Mole Frac (n-Butane)	0.0000	0.0000	0.0923	0.0000	0.0000	
Comp Mole Frac (n-Pentane)	0.0000	0.0000	0.0757	0.0000	0.0000	
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	1.0000	0.7479	1.0000	1.0000	

Energy Streams					
		QR1	QR2	Q1	QR3
Heat Flow	kcal/h	-7.741e+006	-2.032e+006	1.347e+006	2.409e+005

8.8.2.3 Proceso con Inter-enfriamiento y Quench (enfriamiento súbito)

Para fines de estudio se simuló en HYSYS el proceso Fischer Tropsch para producir butano y pentano a partir de gas de síntesis. Se utilizó un sistema de inter-enfriamiento y Quench que enriquecerá la mezcla proporcionando un mejor rendimiento para la obtención de los hidrocarburos, así como también, regulará las temperaturas de entrada a cada reactor.

Las condiciones de reacción son 250°C a la entrada del reactor y 300°C a la salida del mismo, así como una conversión del 30% para Rxn1 y 30% para Rxn2. Se tendrá una corriente de entrada de 1,500 kmol/h con una mezcla de 66.67% hidrógeno y 33.33% monóxido de carbono a 25°C y 1 bar.

Primeramente, se calienta el gas de síntesis a la temperatura de reacción para después dividirse el flujo en 3 partes iguales. La primera corriente se introdujo al reactor y a su salida se mezcló con la segunda corriente proveniente de la alimentación, posteriormente se enfrió en la mezcla a la temperatura de reacción y se introdujo al segundo reactor donde nuevamente ocurre el mismo procedimiento como se observa en el Diagrama 8.35. Para esta simulación se utilizó el paquete termodinámico de Peng-Robinson.

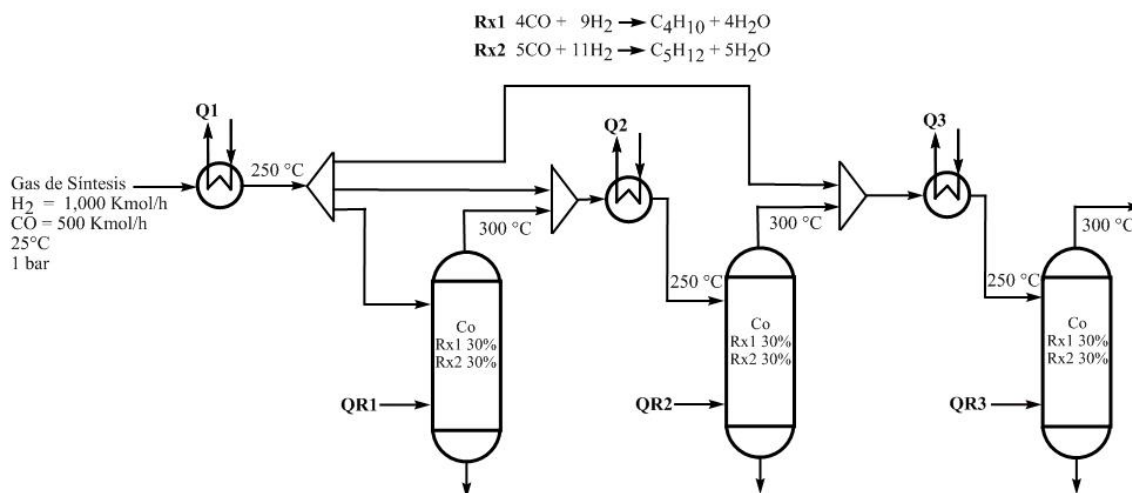


Diagrama 8.37 Proceso Fischer Tropsch con Inter-enfriamiento y Quench.

8.8.2.3.1 Resultados de la Simulación en HYSYS

A continuación, se presentan el diagrama y las matrices de balance del proceso simulado en HYSYS.

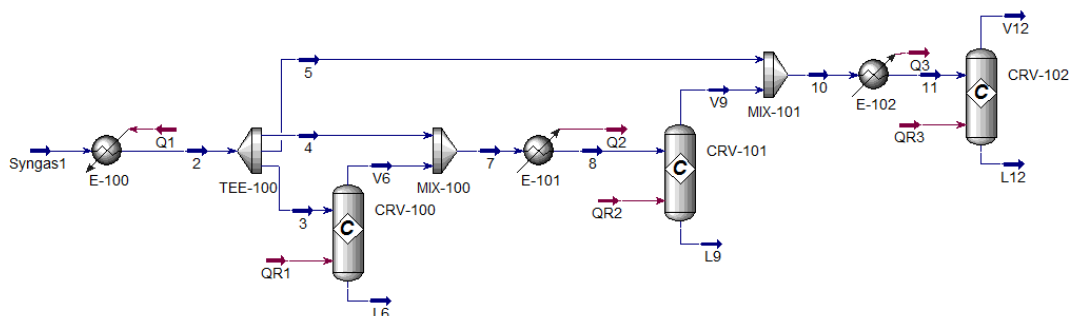


Diagrama 8.38 Simulación en HYSYS del proceso Fischer Tropsch con Inter-enfriamiento y Quench.

Material Streams									
		2	V9	L9	Syngas1	7	3	V6	L6
Vapour Fraction		1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000
Temperature	C	250.0	300.0	300.0	25.00	273.5	250.0	300.0	300.0
Pressure	bar	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000
Molar Flow	kgmole/h	1500	562.8	0.0000	1500	812.0	495.0	317.0	0.0000
Mass Flow	kg/h	1.602e+004	1.057e+004	0.0000	1.602e+004	1.057e+004	5287	5287	0.0000
Liquid Volume Flow	m3/h	46.38	18.37	0.0000	46.38	25.51	15.30	10.21	0.0000
Heat Flow	kcal/h	-1.088e+007	-1.545e+007	0.0000	-1.322e+007	-1.060e+007	-3.591e+006	-7.008e+006	0.0000
		4	5	8	10	11	V12	L12	
Vapour Fraction		1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000	
Temperature	C	250.0	250.0	250.0	281.3	250.0	300.0	300.0	
Pressure	bar	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	1.000	
Molar Flow	kgmole/h	495.0	510.0	812.0	1073	1073	789.7	0.0000	
Mass Flow	kg/h	5287	5447	1.057e+004	1.602e+004	1.602e+004	1.602e+004	0.0000	
Liquid Volume Flow	m3/h	15.30	15.77	25.51	34.14	34.14	26.03	0.0000	
Heat Flow	kcal/h	-3.591e+006	-3.699e+006	-1.075e+007	-1.915e+007	-1.945e+007	-2.468e+007	0.0000	

Compositions									
		2	V9	L9	Syngas1	7	3	V6	L6
Comp Mole Frac (Hydrogen)		0.6667	0.3284	0.0131	0.6667	0.5690	0.6667	0.4164	0.4160
Comp Mole Frac (CO)		0.3333	0.2068	0.0081	0.3333	0.2968	0.3333	0.2397	0.2397
Comp Mole Frac (H2O)		0.0000	0.3795	0.9784	0.0000	0.1096	0.0000	0.2808	0.2812
Comp Mole Frac (n-Butane)		0.0000	0.0469	0.0003	0.0000	0.0135	0.0000	0.0347	0.0347
Comp Mole Frac (n-Pentane)		0.0000	0.0384	0.0001	0.0000	0.0111	0.0000	0.0284	0.0284
		4	5	8	10	11	V12	L12	
Comp Mole Frac (Hydrogen)		0.6667	0.6667	0.5690	0.4892	0.4892	0.2658	0.0080	
Comp Mole Frac (CO)		0.3333	0.3333	0.2968	0.2670	0.2670	0.1834	0.0053	
Comp Mole Frac (H2O)		0.0000	0.0000	0.1096	0.1991	0.1991	0.4497	0.9864	
Comp Mole Frac (n-Butane)		0.0000	0.0000	0.0135	0.0246	0.0246	0.0556	0.0002	
Comp Mole Frac (n-Pentane)		0.0000	0.0000	0.0111	0.0201	0.0201	0.0455	0.0001	

Elaboración de un Manual Integral de Procesos Químicos Asistido por Computadora

		Energy Streams					
		Q1	Q2	Q3	QR1	QR2	QR3
Heat Flow	kcal/h	2.336e+006	1.530e+005	2.976e+005	-3.417e+006	-4.700e+006	-5.234e+006

Conclusiones y Recomendaciones

Durante mi estancia profesional en el Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez reforcé los conocimientos adquiridos, que con esfuerzo y dedicación me fueron instruidos, a lo largo de mi preparación como Ingeniero Químico. En especial en el uso de programas computarizados aplicados a los procesos químicos.

Aprendí a trabajar bajo presión y a tomar decisiones en la corrección y mejora de las configuraciones de cada proceso, con base en los fundamentos teóricos de termodinámica, fisicoquímica y simulación de procesos.

Una de las experiencias invaluable en la realización de este proyecto fue el uso de fuentes de información en el idioma inglés. Dónde, además de mejorar mi dominio del mismo, aportó en gran medida en el aprendizaje y comprensión del funcionamiento de cada uno de los procesos expuestos.

La experiencia y el privilegio de trabajar con el Dr. Arnulfo Rosales Quintero en la elaboración de este proyecto me inspiró a continuar con la investigación y desarrollo de nuevas tecnologías aplicables a los procesos químicos, aumentó mi interés por la investigación de ellos y amplió mi visión acerca del campo laboral en el que el ingeniero químico se puede desempeñar.

Considero que fue un proyecto muy atractivo e interesante porque simplifica de manera sencilla, breve y clara la forma en cómo debe manejarse el simulador Aspen HYSYS y cómo aplicar el software a los procesos químicos. Además, motiva al estudiante y a los docentes a utilizar el software e incluso a implementar nuevos y diferentes procesos químicos.

Como recomendación se sugiere que las fuentes de información con las que cuenta la institución educativa mejoren su difusión entre los estudiantes de la carreras y se facilite el acceso a ellas con procedimientos más sencillos. Además, que año con año se actualicen en temas relacionados con la simulación de procesos químicos.

Otro punto importante por mejorar es la creación de espacios exclusivos para el uso e investigación de los procesos químicos aplicando softwares especializados, con la finalidad de mejorar la calidad de enseñanza en esta área y fomentar su desarrollo.

Competencias Desarrolladas y Aplicadas

Durante la estancia profesional realizada en el Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez adquirí nuevas experiencias profesionales. A lo largo de la realización del manual apliqué los conocimientos adquiridos durante mi formación como Ingeniero Químico, que me ayudaron a entender con mayor facilidad los temas a abordar en el manual. A continuación, menciono los conocimientos aplicados de cada una de las asignaturas que me impartieron durante mi formación profesional:

- **Termodinámica:** Fue esencial para conocer y comprender las propiedades termoquímicas de cada uno de los compuestos químicos utilizados para predecir su comportamiento y verificar posibles errores en la simulación.
- **Mecanismos de Transferencia de Calor:** Fue indispensable para la configuración de los intercambiadores de calor en el simulador, ya que, era necesario reconocer el tipo de corrientes frías y calientes, diagramas de temperatura y la dirección de la transferencia de calor requerida para cada proceso.
- **Balance de Materia y Energía:** Fue sumamente indispensable para la simulación de cada uno de los procesos, era de vital importancia reconocer los tipos de variables de cada proceso y los grados de libertad para así converger con éxito la simulación.
- **Fisicoquímica I:** Se aplicaron los conceptos de equilibrio termodinámico y equilibrio de fases.
- **Fisicoquímica II:** Se aplicaron conceptos de equilibrio líquido y vapor de los sistemas de cada proceso.
- **Procesos de Separación I:** Se aplicaron los conocimientos teóricos de funcionamiento, diseño y significado real de las variables en intercambiadores de calor y bombas para una correcta configuración y funcionamiento de éstos en el simulador.
- **Procesos de Separación II:** Se aplicaron los conocimientos teóricos relacionados con el diseño y funcionamiento de torres de destilación flash y absorbedores.
- **Procesos de Separación III:**
- **Síntesis y Optimización de Procesos:** Se aplicaron los conocimientos adquiridos con el software de simulación de procesos químicos. Además, ya que el manual va dirigido de manera particular a esta asignatura, el mismo abarca los diferentes procesos de estudio que se pueden simular en el programa especializado con sus diferentes tipos de configuraciones de proceso.
- **Reactores Químicos:** Se aplicaron los conocimientos teóricos para la configuración de los reactores químicos necesarios para cada proceso.
- **Simulación de Procesos:** Se aplicaron los conocimientos adquiridos de programación y configuración del proceso para su correcta simulación y convergencia.

Durante la estancia profesional se desarrollaron y aplicaron competencias profesionales que se describen en la siguiente tabla de manera detallada:

Competencia Desarrollada y Aplicada	¿Dónde se aplicó?
Capacidad de Análisis y Síntesis	En la lectura de artículos científicos, revistas, documentos en páginas web, libros, blogs, sitios online y otros para el desarrollo del contenido teórico relacionado a cada proceso.
Capacidad Crítica	En la selección y modificación de algunas de las variables de proceso para corregir errores de convergencia.
Automotivación	En el interés constante por la investigación y realización del presente manual.
Análisis de Problemas	En la resolución de problemas de convergencia del simulador.
Comunicación Escrita	En la redacción y uso del vocabulario técnico de cada una de las partes que componen el manual, como es la descripción del proceso y redacción de casos de estudio.
Compromiso	En la entrega de avances y cumplimiento de las responsabilidades asignadas en tiempo y forma.
Tolerancia al Estrés	En la entrega de los avances en tiempo y forma.
Escucha	Por la capacidad de detectar información importante de la comunicación oral con mi asesor y personal capacitado.
Iniciativa	Por la capacidad de idear y crear alternativas de configuraciones de procesos cuando se presentaban problemas en su convergencia y actuar por cuenta propia.
Meticulosidad	En la selección de las fuentes de información y en la programación detallada de cada proceso de estudio. También en la revisión y corrección de errores de convergencia en el simulador.
Toma de Decisiones	En hacer los cambios pertinentes a las variables de las simulaciones tomando de referencia la información teórica de cada proceso.
Planificación y Organización	En cumplir con los objetivos del plan de trabajo de acuerdo a lo pronosticado.

Fuentes de Información

- Agency For Toxic Substances And Disease Registry. (Julio de 1999). *ATSDR*. Obtenido de ATSDR: <http://www.cvs.saude.sp.gov.br/pdf/toxfaq7.pdf>
- American Chemical Society National Historic Chemical Landmarks. (11 de Mayo de 2015). *American Chemical Society National Historic Chemical Landmarks*. Obtenido de American Chemical Society National Historic Chemical Landmarks: <http://www.acs.org/content/acs/en/education/whatischemistry/landmarks/acrylonitrile.html>
- Appl, M. (2012). Ammonia. En Wiley-VCH, *Ullmann's Encyclopedia Of Industrial Chemistry* (págs. 107-133). Dannstadt-Schauernheim: Wiley-VCH Verlag GmbH y Co.
- Arntz, D., Fischer, A., Höpp, M., Jacobi, S., Sauer, J., Ohara, T., . . . Schwind, H. (2012). Acrolein and Methacrolein. En Wiley-VCH, *Ullmann's Encyclopedia Of Industrial Chemistry* (págs. 329-346). Alemania: Wiley-VCH.
- AspenTech. (12 de Septiembre de 2001). Introduction to Aspen Plus.
- AspenTech. (2018). *AspenTech*. Obtenido de AspenTech: <https://www.aspentech.com/products/engineering/aspen-hysys>
- Badia, J., Bellver, L., Carpio, L., y Frau, M. (Febrero de 2013). *Universidad Autónoma de Barcelona*. Obtenido de Universidad Autónoma de Barcelona: https://ddd.uab.cat/pub/treecpro/2012/hdl_2072_206456/PFC_PlantaAcriloN_part01_especificaciones.pdf
- Barrosco, J. (27 de Septiembre de 2013). *Universidad Autónoma Metropolitana*. Obtenido de Universidad Autónoma Metropolitana: http://sgpwe.izt.uam.mx/files/users/uami/rmro/2906019/sem06/QUE_ES_OCTANAJE.pdf
- Campbell, M. L. (2012). Cyclohexane. En Wiley-VCH, *Ullmann's Encyclopedia of Industrial Chemistry* (págs. 41-47). New Jersey: Wiley-VCH Verlag GmbH y Co.
- Cengel, Y. A., y Boles, M. A. (2012). Ciclo Brayton: El ciclo ideal para los motores de turbina de gas. En Y. A. Cengel, y M. A. Boles, *Termodinámica* (págs. 511-518). New York: McGrawHill.
- Cengel, Y. A., y Boles, M. A. (2012). Ciclos de Potencia de Vapor y Combinados. En Y. A. Cengel, y M. A. Boles, *Termodinámica* (págs. 559-614). New York: McGrawHill.
- Cengel, Y. A., y Boles, M. A. (2012). Ciclos de Refrigeración. En Y. A. Cengel, y M. A. Boles, *Termodinámica* (págs. 615-649). New York: McGrawHill.

- Csepei, L.-I. (19 de Agosto de 2011). *DepositOnce*. Obtenido de DepositOnce:
https://depositonce.tu-berlin.de/bitstream/11303/3269/1/Dokument_8.pdf
- Educaragón. (2016). *Plataforma e-educativa aragonesa*. Obtenido de Plataforma e-educativa aragonesa: http://e-educativa.catedu.es/44700165/aula/archivos/repositorio/4750/4931/html/64_ciclo_de_rankine.html
- Environmental Protection Agency. (Mayo de 1983). *EPA*. Obtenido de EPA:
<https://www3.epa.gov/ttnchie1/ap42/ch06/index.html>
- F. Brazdil, J. (2012). Acrylonitrile. En Wiley-VCH, *Ullmann's Encyclopedia Of Industrial Chemistry* (págs. 1-10). NaperVille Illinois: Wiley-VCH Verlag GmbH y Co.
- Fernández, V., Sayos, B., Terradas, M., Vázquez, S., y Vallespir, F. (2012). *Universidad Autónoma de Barcelona*. Obtenido de Universidad Autónoma de Barcelona:
https://ddd.uab.cat/pub/trerecpro/2012/hdl_2072_206457/PFC_AcridoNitril_part01_especificaciones.pdf
- Fundación Universidad de América. (2014). *Centrales Térmicas de Ciclos Combinados*. Obtenido de Centrales Térmicas de Ciclos Combinados:
www.cicloscombinados.com/index.php/el-ciclo-brayton
- G. Speight, J. (2002). Acrolein. En J. G. Speight, *Chemical And Process Design Handbook* (págs. 223-224). New York: McGraw-Hill.
- Galindo, F. (Septiembre de 1997). *TESIUAMI*. Obtenido de TESIAMI:
<http://tesiuami.izt.uam.mx/uam/aspuam/presentatesis.php?recno=5293ydocs=UAM5293.PDF>
- GasServei. (2018). *GasServei*. Obtenido de GasServei: https://www.gas-servei.com/images/Ficha_tecnica_R134A.pdf
- Gutiérrez, I. (Febrero de 2015). *Instituto Politécnico Nacional*. Obtenido de Instituto Politécnico Nacional:
<http://itzamna.bnct.ipn.mx/bitstream/handle/123456789/20700/Procesos%20de%20obtencion%20del%20acrilonitrilo%20y%20acido%20cianhidrico%2C%20sus%20usos%20y%20la%20reactivacion%20de%20estos%20en%20la%20actualidad.pdf?sequence=1&isAllowed=y>
- Hernández, C. E. (s.f.). *Centro de Investigación para el Desarrollo A.C.* Obtenido de Centro de Investigación para el Desarrollo A.C.b:
http://www.cidac.org/esp/uploads/1/Transici_n_de_la_televisi_n_anal_gica_a_la_digital_PDF.pdf
- Huerta De la Cruz, Z. (Julio de 2013). *Instituto Tecnológico de Celaya*. Obtenido de Instituto Tecnológico de Celaya:
www.iqcelaya.itc.mx/~richart/TesisMaestria/2013%20Zachiel%20Huerta.pdf

- IDEAM. (2014). *Instituto de Hidrología, Metrología y Estudios Ambientales*. Obtenido de Instituto de Hidrología, Metrología y Estudios Ambientales: documentacion.ideam.gov.co/openbiblio/bvirtual/018903/Links/Guia6.pdf
- Jara, J., Garea, A., y Irabien, J. (2005). Simulation of o-Xylene Oxidation into Phthalic Anhydride: Rigorous Multitubular Catalytic Reactor Modelling and Exportation into the Process Flowsheet. En A. Espuña, y L. Puigjaner, *European* (págs. 253-258). Barcelona: Elsevier B.V.
- Jin Hu, F. Y. (1 de Junio de 2012). *ResearchGate*. Obtenido de ResearchGate: https://www.researchgate.net/publication/269927297_Application_of_Fischer-Tropsch_Synthesis_in_Biomass_to_Liquid_Conversion
- Law, A. M., y Kelton, W. D. (1991). Law, Averill M.; Kelton, W. David. En A. M. Law, y W. D. Kelton, *Law, Averill M.; Kelton, W. David*. McGraw-Hill.
- Luz y Fuerza de San Lorenzo, S.A. (8 de Diciembre de 2017). *Lufussa*. Obtenido de Lufussa: <http://lufussa.com/es/para-que-sirve-la-energia-electrica/>
- Mexichem. (2018). *Mexichem*. Obtenido de Mexichem: www.mexichemcompuestos.com/tecnologías/plasticantes/
- Moncada Albitres, L. (s.f.). Conceptos y Definiciones Básicas. En L. Moncada Albitres, *Modelamiento y Simulación de Procesos* (págs. 2-4). Perú. Obtenido de <https://es.scribd.com/document/61646154/1034284-Clases-de-Hysys-2-Paquetes-Termodinamicos-y-Utilities>
- Moncada, L. (s.f.). Modelamiento Y Simulación de Procesos. Trujillo, La Libertad, Perú.
- NPTel. (Julio de 2012). *National Programme on Technology Enhanced Learning*. Obtenido de National Programme on Technology Enhanced Learning: <http://nptel.ac.in/courses/103103029/19#>
- Olguín, C. (05 de Julio de 2012). *La Segunda Online*. Obtenido de La Segunda Online: <http://www.lasegunda.com/Noticias/Buena-Vida/2012/07/761360/La-importancia-de-la-refrigeracion-en-los-alimentos>
- PEMEX Petroquímica. (2012). *Cadena Productiva del Acrilonitrilo (Morelos)*.
- Quatrax. (2009). *SmartExport*. Obtenido de SmartExport: <http://www.smartexport.com/es/Acrilonitrilo.292610.html>
- Robles Iglesias, R. (30 de Junio de 2017). *Universidad de Cantabria*. Obtenido de Universidad de Cantabria: <https://repositorio.unican.es/xmlui/bitstream/handle/10902/12316/401771.pdf?sequence=1>
- Rojas, H., y otros, y. (29 de Mayo de 2009). *SciELO*. Obtenido de SciELO: <http://www.scielo.org.co/pdf/dyna/v76n159/a13v76n159.pdf>

- Rosero Ramírez, Y. S. (2011). *Bdigital*. Obtenido de Bdigital: www.bdigital.unal.edu.co/6360/1/300050.pdf
- Salas, M. (Junio de 2014). *SlideShare*. Obtenido de SlideShare: https://es.slideshare.net/geminis_artahona/evolucion-de-la-computadora-36335097
- Sánchez, L. (Marzo de 2012). *Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Minas*. Obtenido de Escuela Técnica Superior de Ingenieros de Minas: http://oa.upm.es/15019/1/PFC_Laia_Sanchez_Junco_Fiter.pdf
- Sanz Tejedor, A. (2017). *Química Orgánica Industrial*. Obtenido de Química Orgánica Industrial: <https://www.eii.uva.es/organica/qoi/tema-09.php>
- Scenna, N. J. (1999). Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos. En N. J. Scenna, *Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos* (págs. 191-193).
- Slindard, W. (1977). *United States Patente nº 4,052,417*.
- Speight, J. G. (2011). Chapter 8 Hydrocarbons from Synthesis Gas. En J. G. Speight, *Handbook of Industrial Hydrocarbon Processes* (págs. 281-323). Elsevier Inc.
- Stepan. (2018). *Stepan*. Obtenido de Stepan: http://es.stepan.com/Markets/Phthalic_Anhydride.aspx
- The Linde Group. (2018). *Linde*. Obtenido de Linde: http://www.linde-gas.co/es/products_and_supply/gases_fuel/propylene.html
- The NEED Project. (27 de Diciembre de 2014). *The NEED Project*. Obtenido de The NEED Project: <http://chemistry.need.org/content.asp?contentid=147>
- U.S. Department of Energy. (2018). *U.S. Department of Energy*. Obtenido de U.S. Department of Energy: <https://www.netl.doe.gov/research/coal/energy-systems/gasification/gasifipedia/ftsynthesis>
- Universidad Central de Ecuador. (2018). *Universidad Central de Ecuador*. Obtenido de Universidad Central de Ecuador: <https://simulacionprocesos.wikispaces.com/introducción+Hysys>
- University of York Centre for Industry Education Collaboration. (18 de Octubre de 2016). *The Essential Chemical Industry*. Obtenido de The Essential Chemical Industry: <http://www.essentialchemicalindustry.org/chemicals/ammonia.html>
- Velázquez Canseco, D. A. (Mayo de 2016). *Instituto Politécnico Nacional*. Obtenido de Instituto Politécnico Nacional: <https://tesis.ipn.mx/jspui/bitstream/123456789/22229/1/25-1-16941.pdf>
- Villamil Salcedo, H. M., y Piamba Tulcán, O. E. (2005). *Sistema de Información Científica Redalyc*. Obtenido de Sistema de Información Científica Redalyc: <http://www.redalyc.org/pdf/2311/231117496005.pdf>

W. Langvardt, P. (2012). Acrylonitrile. En Wiley-VCH, *Ullmann's Encyclopedia Of Industrial Chemistry* (págs. 365-372). Midland: Wiley-VCH Verlag GmbH y Co.

West Virginia University. (s.f.). *West Virginia University*. Obtenido de West Virginia University: <https://cbe.statler.wvu.edu/files/d/d3a3da7f-9d4e-486c-a25a-02b35dc928a4/acrolein.pdf>

Yacimientos Petrolíferos Fiscales. (Enero de 2018). *Yacimientos Petrolíferos Fiscales*. Obtenido de Yacimientos Petrolíferos Fiscales: <https://www.ypf.com/productosyservicios/Descargas/Ciclohexano.pdf>

