



TECNOLÓGICO  
NACIONAL DE MÉXICO®



**TECNOLÓGICO NACIONAL DE MEXICO**

**INSTITUTO TECNOLÓGICO DE TUXTLA GUTIERREZ**

**INGENIERIA QUIMICA**

“SIMULACIÓN DE PROCESOS DE INGENIERIA QUIMICA APLICADA A PROCESOS  
DE SEPARACIÓN (EXTRACCIÓN SOLIDO-LIQUIDO)”

**REPORTE FINAL DE RESIDENCIA PROFESIONAL**

**PRESENTA:**

**JUAN CARLOS PÉREZ GUZMÁN**

**INGENIERIA QUIMICA**

**TUXTLA GUTIERREZ, CHIAPAS, JUNIO 2023**



## Agradecimientos

En primera instancia doy gracias a Dios por permitirme la dicha de presentar ante ustedes este trabajo, el cual conlleva un gran esfuerzo y dedicación; por el tiempo que me permitió invertir en la residencia profesional, así como de los compañeros que conocí en el transcurso de cursar la carrera de ingeniería química.

A mis padres, quienes, a pesar de no estar día a día a mi lado, siempre tuve su apoyo incondicional y sin ellos no hubiese logrado nada.

A mis familiares, quienes fueron un sustento en mis noches de desvelo y nunca me dieron la espalda, permitiéndome hacerles compañía y dándome un rincón en sus hogares.

A mis compañeros de carrera, pues a su lado compartimos momentos de diversión, estrés y sin uno al lado del otro simplemente hubiese sido el doble de difícil de lo que en si fue.

A la Ingeniero Genesis León Pinacho quien fue mi mas grande apoyo y acompañante en esta etapa de mi vida, siempre ayudándome con todo lo que pudiese y siendo pieza fundamental de mi vida personal, así como de universitario, sacrificando en momentos su tiempo para estar a mi lado.

No tengo palabras para decirles lo realmente agradecido que estoy con todos ustedes, en verdad, gracias.



## Resumen

El presente proyecto ayuda a comprender y a percatarnos de qué manera la simulación nos facilita ciertas tareas que se presentan frecuentemente en Ingeniería Química, específicamente de los procesos de separación sólido líquido. Podremos ver como se llevan a cabo las extracciones de distintos compuestos con distintos métodos, las cuales están plasmadas en documentos de Excel y en el simulador DWSIM.

La finalidad del proyecto es que los alumnos de nuevos semestres de ingeniería química puedan observar y aprender cómo se llevan a cabo dichos procesos, siendo esta una manera interactiva y amigable de tratar con los problemas que se encontraran a lo largo de la carrera, dando paso así a nuevas tecnologías.

## Abstract

This project helps us to understand and realize the way in which simulation facilitates certain tasks that are frequently presented to us in Chemical Engineering, specifically liquid solid separation processes. We will be able to see how the extractions of different compounds are carried out with different methods, which are reflected in Excel documents and in the DWSIM simulator.

The purpose of the project is that students of new semesters of chemical engineering can observe and learn how these processes are carried out, this being an interactive and friendly way to deal with the problems that will be found throughout the career, thus giving way to new technologies.



## Contenido

<b>Introducción .....</b>	<b>7</b>
<b>Capítulo I. Generalidades .....</b>	<b>9</b>
<b>1.1 Descripción de la empresa .....</b>	<b>9</b>
<b>1.1.1 Historia de la empresa .....</b>	<b>9</b>
<b>1.1.2 Misión .....</b>	<b>10</b>
<b>1.1.3 Visión .....</b>	<b>10</b>
<b>1.1.4 Departamento de ingeniería química y bioquímica .....</b>	<b>10</b>
<b>1.1.5 Valores .....</b>	<b>11</b>
<b>1.1.6 Logos .....</b>	<b>11</b>
<b>1.1.7 Eslogan .....</b>	<b>11</b>
<b>1.1.8 Organigrama .....</b>	<b>12</b>
<b>1.1.9 Ubicación .....</b>	<b>13</b>
<b>1.2 Problema a resolver .....</b>	<b>14</b>
<b>1.3 Objetivos .....</b>	<b>15</b>
<b>1.3.1 Objetivo general .....</b>	<b>15</b>
<b>1.3.4 Justificación .....</b>	<b>15</b>
<b>Capítulo II: Fundamento teórico.....</b>	<b>17</b>
<b>2.1 Simulación de procesos .....</b>	<b>17</b>
<b>2.1.1 simulación .....</b>	<b>17</b>
<b>2.1.2 Diseño de procesos .....</b>	<b>17</b>





**2.1.3 Simulación de procesos ..... 18**

**2.1.4 Orígenes de la simulación ..... 18**

**2.1.5 Fundamentos para la simulación ..... 20**

**2.1.6 Aplicaciones de la simulación ..... 21**

**2.1.7 Aplicaciones de la simulación en ingeniería ..... 22**

**2.1.8 Etapas para el desarrollo de la simulación de un proceso químico ..... 24**

**2.2 Extracción ..... 29**

**2.2.1 Extracción ..... 29**

**2.2.2 Extracción sólido líquido ..... 30**

**2.2.3 Mecanismos que facilitan y complementan la extracción sólido-líquido ..... 31**

**2.2.4 Pretratamientos de la materia prima ..... 32**

**2.2.5 Tipos de extracción solido-liquido ..... 32**

**2.2.6 Fundamento de la operación de extracción solido-liquido ..... 33**

**2.2.7 Equilibrio y etapa ideal ..... 34**

**2.2.8 Eficacia individual de la etapa y eficacia global del proceso de extracción ..... 35**

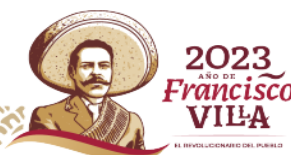
**2.2.9 Factores que afectan la extracción solido-liquido ..... 35**

**Capitulo III: Procedimiento y realización de actividades ..... 37**

**3.1 Procedimiento ..... 37**

**3.2 Actividades realizadas ..... 38**

**3.2.1 Simulador de solubilidades ..... 38**





<b>Capítulo IV: Resultados</b> .....	46
<b>4.1 Simulador de solubilidades</b> .....	46
<b>4.1.2 Comparación de resultados de los simuladores construidos en DWSIM y Excel.</b> ....	48
<b>4.1.3 Evaluación de los simuladores desarrollados</b> .....	48
<b>Capítulo V: Conclusiones y recomendaciones</b> .....	49
<b>5.1 Conclusiones</b> .....	49
<b>5.2 Recomendaciones</b> .....	49
<b>Capítulo VI: Competencias desarrolladas</b> .....	50
<b>Capítulo VII: Referencias bibliograficas</b> .....	51



## Introducción

Una gran parte de los procesos químicos requieren de una purificación de las materias primas empleadas o bien una separación de componentes, esto puede ocurrir al inicio, en puntos intermedios o al final del proceso. En los casos que se mencionaron, las operaciones de transferencia de masa son muy utilizados para llegar a ese fin. Dichos procesos de separación o purificación, los cuales resultan ser costosos con base al grado de separación llamado en este caso pureza requerida, a mayor pureza mayor será el costo que este proceso tendrá.

La mayoría de los problemas de cálculo relacionados con los procesos de transferencia de masa requieren de la implementación y utilización de métodos numéricos, cálculo de funciones las cuales llegan a ser complejas, resolución de ecuaciones y funciones matemáticas para su resolución.

Debido a esto nos resulta importante contar con una herramienta la cual sea rápida, eficiente y confiable, además de que contribuya a la resolución matemática de los problemas planteados anteriormente. Sería una tarea ardua que nos haría gastar mucho tiempo y recursos el tratar de resolver los problemas de transferencia de masa sin contar con una herramienta computacional adecuada.

Con el paso de los años aunado al desarrollo en la informática ha permitido el avance de distintos programas que nos ayudan con distintas tareas, tales como: DWSIM, Matlab, Scilab, GNU Octave, etc. dichos programas cuentan con herramientas que facilitan el análisis de datos, así como el numérico. Dichas herramientas se vuelven un instrumento importante para el Ingeniero Químico a la hora de resolver problemas complejos especialmente aquellos relacionados con los procesos de transferencia de masa.



Durante el desarrollo del presente trabajo de residencias profesionales, se elaboró un simulador de extracción solido-liquido el cual ayudará a la resolución de problemas relacionados con el tema ya mencionado, utilizando variables y la posibilidad de ser utilizados para distintas sustancias.

En una fase inicial se estudiará detalladamente el potencial que tiene DWSIM como entorno para simulaciones, se definirán las ecuaciones relevantes que definan los modelos matemáticos los cuales describen los problemas de transferencia de masa en operaciones tales como la extracción, aunado a ello se analizarán las variables operativas que influyen directamente en el proceso y posteriormente se desarrollarán aplicativos para resolución de distintos problemas relacionados con el tema.

Para verificar la pertinencia y exactitud de los cálculos se compararán con respuestas obtenidas al consultar problemas propuestos en diferentes libros de texto, de este modo se verificará el correcto funcionamiento de los simuladores elaborados.





## Capítulo I. Generalidades

### 1.1 Descripción de la empresa

#### 1.1.1 Historia de la empresa

En la década de 1970 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.

El ITTG tiene el propósito de transformar vidas a través de la educación, formando profesionistas con ética, liderazgo y sensibles a la realidad social que se vive en el país. Profesionistas que generan un impacto positivo en su comunidad.

### **1.1.2 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.

### **1.1.3 Visión**

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

### **1.1.4 Departamento de ingeniería química y bioquímica**

El departamento de ingeniería química y bioquímica está localizado en el edificio “H”, ahí se realizan las actividades administrativas de ambas carreras, el Ingeniero Amín Rodríguez Meneses es el jefe del Departamento.

## 1.1.5 Valores

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

## 1.1.6 Logos



Ilustración 2 Logo del Tecnológico Nacional de México. Disponible en <https://www.tecnm.mx/>  
Fecha de consulta: Junio 2023



Ilustración 1 Logo del Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez. Disponible en <https://www.tuxtla.tecnm.mx/>  
Fecha de consulta: Junio 2023

## 1.1.7 Eslogan

“CIENCIA Y TECNOLOGIA CON SENTIDO HUMANO”

# 1.1.8 Organigrama

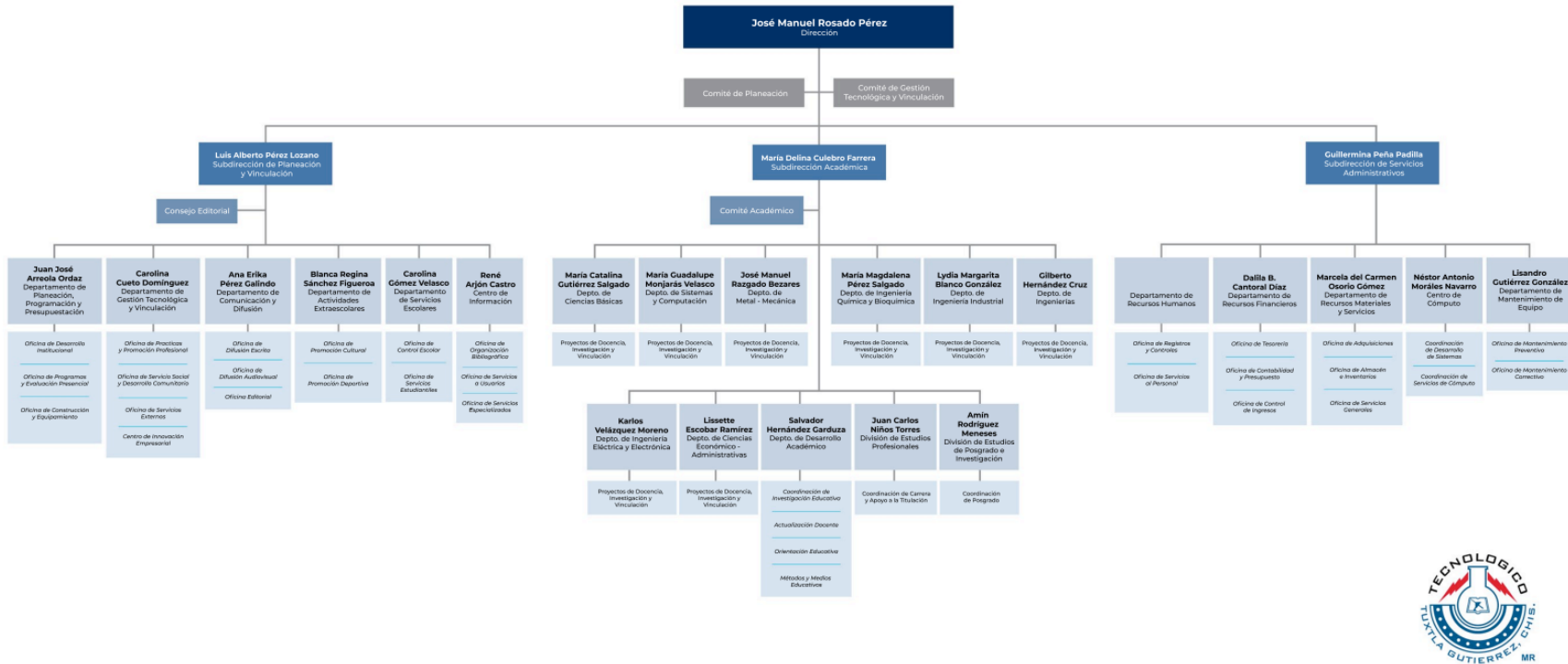


Ilustración 3 Organigrama del Instituto Tecnológico de Tuxtla Gutiérrez. Disponible en [https://www.tuxtla.tecnm.mx/wp-content/uploads/2023/01/OrganigramaTecTuxtla\\_2023-1.pdf](https://www.tuxtla.tecnm.mx/wp-content/uploads/2023/01/OrganigramaTecTuxtla_2023-1.pdf) Fecha de consulta: Junio 2023

### 1.1.9 Ubicación

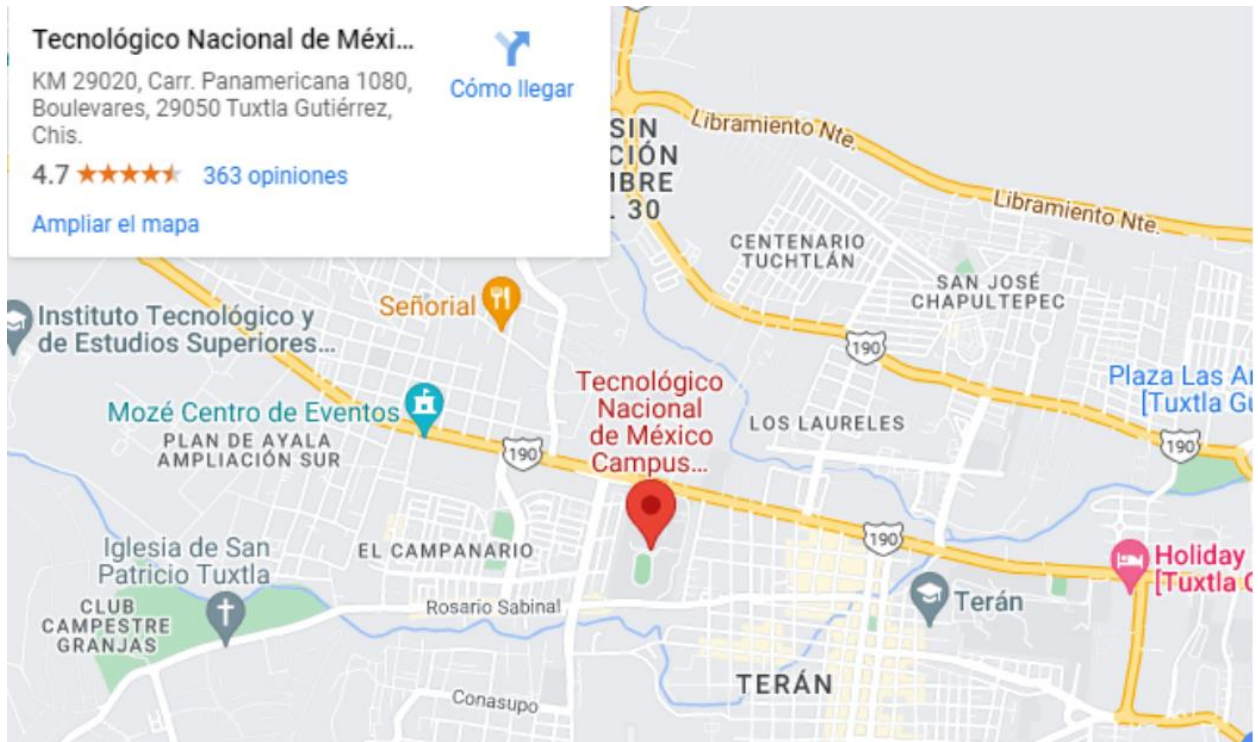


Ilustración 4 Ubicación del Instituto tecnológico de Tuxtla Gutiérrez. Disponible en <https://goo.gl/maps/8RgYzXcUMw5WdWGDA>

## 1.2 Problema a resolver

Los estudiantes de ingeniería química que asisten al Tecnológico Nacional Campus Tuxtla Gutiérrez afrontan dificultades respecto a los equipos especializados de procesos químicos, debido a ello, se dificulta el aprendizaje y enseñanza que se presentan en laboratorio, dichas prácticas proporcionan un vistazo más de cerca a los métodos realizados con equipos de laboratorio y en industrias profesionales. Es necesaria la implementación de nuevas herramientas tecnológicas las cuales proporcionan un acercamiento a procedimientos realizados en equipos de laboratorio o bien, en industrias profesionales, estas tecnologías proporcionan versatilidad al manipular variables deseadas.

### 1.2.1 Alcances y limitaciones

En este trabajo de residencia se construyó un simulador, el cuales ayudará a llevar a cabo procesos de extracción. Dicho simulador se describe y evalúa en este reporte. De igual manera constituyen un punto de partida para que en dicho ámbito puedan elaborarse simuladores de cada unidad del programa.

Sin embargo, para desarrollar otro prototipo, es conveniente tomar en cuenta las siguientes limitaciones:

- La falta de destreza en el manejo de EXCEL en los alumnos;
- Escasa habilidad lógica para construir los modelos matemáticos; y
- Falta de experiencia para desarrollar los algoritmos de programación.

## 1.3 Objetivos

### 1.3.1 Objetivo general

Construir un simulador en EXCEL para desarrollar análisis de sensibilidad y verificar su validez en DWSIM

#### OBJETIVOS ESPECIFICOS:

- I. Establecer un modelo matemático para describir el proceso de extracción sólido-líquido basado en las propiedades fisicoquímicas de los componentes.
- II. Desarrollar una interfaz gráfica de usuario amigable para el simulador, que permita a los usuarios introducir y visualizar los parámetros del proceso.
- III. Validar el simulador mediante la comparación de los resultados obtenidos mediante simulación con datos experimentales previamente publicados.
- IV. Realizar pruebas de sensibilidad para identificar los factores más influyentes en la eficiencia de la extracción, lo que permitirá a los usuarios entender mejor cómo ajustar las condiciones de operación para optimizar la extracción.

### 1.3.4 Justificación

Al cursar una licenciatura en ingeniería química tenemos una idea premeditada la cual dice que los alumnos aprenderán a utilizar herramientas computacionales que ayuden a simular procesos de ingeniería química, dicha tarea es ardua ya que para llevarla a cabo debemos contar con paquetes desarrollados por firmas reconocidas, ya sean ASPEN, HYSYS o PAPEPHASE, el único inconveniente que existe es que dichos programas son paquetes con licencias y generalmente caros. A respuesta de esto, utilizamos EXCEL, la cual es una aplicación amigable y con lógica sencilla de programación y accesibilidad económica de bajo costo.

Las distintas herramientas de programación generalmente incluyen funciones que permiten realizar procesos de cálculo en periodos de tiempo sumamente cortos, normalmente tomaría mucho tiempo realizar los distintos cálculos uno a uno. Al hacer uso de estos programas nos ahorramos tiempo extra y acortamos esfuerzos, con ello economizamos recursos y teniendo resultados de una manera más rápida, eficaz y facilita el análisis por parte del usuario.

DWSIM es un simulador de procesos químicos de código abierto y descarga libre que cumple con el estándar de ingeniería que permite la interoperabilidad de soluciones, proporciona al usuario la opción de combinar interfaces de modelamiento de diferentes software o programas entre sí, siendo el primer software de código abierto en utilizar el estándar Cape-Open, el cual es ampliamente utilizado por simuladores de procesos comerciales.

Este software cuenta con una interfaz gráfica la cual es bastante completa y fácil de utilizar, por lo que no tiene nada que envidiar a opciones comerciales, como Hysys o Pipephase. Esta desarrollado a partir de macros de VBA de Excel que implementaban PR EOS y un algoritmo básico de flash. A partir de allí, se le adicionó una superficie de dibujo para crear el diseñador de dibujo de la hoja de procesos del simulador.

Cabe recalcar que en el Tecnológico Nacional de México campus Tuxtla Gutiérrez, en el plan de estudios de Ingeniería Química presenta un enfoque a la utilización de distintas herramientas computacionales como las que se han mencionado con anterioridad, esto hace que los alumnos egresados cuenten con este tipo de conocimientos.



## Capítulo II: Fundamento teórico

### 2.1 Simulación de procesos

#### 2.1.1 simulación

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

#### 2.1.2 Diseño de procesos

El diseño de procesos está constituido por las siguientes tres etapas:

- Síntesis de procesos es la etapa en la cual se crea la estructura básica del diagrama de flujo; esto es, seleccionar los equipos a utilizar, con sus correspondientes interconexiones, y se establecen los valores iniciales de las condiciones de operación.
- Simulación de procesos es la etapa en la cual se requiere solucionar balances de materia y energía para un proceso en estado estacionario, calculo de dimensiones y costos de los equipos y efectuar una evaluación económica preliminar del proceso.
- La optimización puede ser paramétrica, modificando parámetros tales como presión o temperatura, o estructural cuando se hacen modificaciones al diagrama de flujo involucrado a los equipos y/o sus interconexiones.

El resultado de estas tres etapas es el diagrama de flujo del proceso en una forma no definitiva puesto que se continuará con lo que se conoce como ingeniería de detalle.

### 2.1.3 Simulación de procesos

La simulación es la utilización de un modelo de sistemas, que trata de acercarse más a las características de la realidad, a fin de reproducir la esencia de las operaciones reales. Asimismo, es la una representación de un proceso real, mediante el empleo de un modelo o sistema que reaccione de la manera similar a la que reaccionaría uno real, en un conjunto de condiciones dadas, (Shannon, 2003)

Basándonos en los conceptos mencionados anteriormente podemos decir que la simulación, es una técnica que imita el funcionamiento de sistemas reales, al crear un conjunto de hipótesis acerca del funcionamiento del sistema, expresándolo en relaciones matemáticas o lógicas.

### 2.1.4 Orígenes de la simulación

Los orígenes de la simulación se remontan a la segunda guerra mundial cuando dos matemáticos de la época, J.V. Neumann y S. Ulam, tenían como reto la resolución de problemas relacionados con el comportamiento de los neutrones. Los experimentos basados en evidencia experimental y/o empírica resultaban de elevado costo y en muchas ocasiones el problema era demasiado complejo para ser abordado por técnicas analíticas. Donde el primer despliegue a gran escala de una simulación fue el proyecto Manhattan, en el año de 1945, para la recreación de una detonación nuclear.

Durante la guerra fría (1947 – 1985) se intensificó el uso de la simulación para la resolución de problemas de carácter militar, trayectorias de satélites, guías de misiles, etc. Muchos de estos problemas requirieron de soluciones mediante el uso de ecuaciones diferenciales de alto grado de

dificultad. Para, resolver esta situación se utilizaron computadoras analógicas para la resolución de los modelos matemáticos antes mencionados.

Durante los años 80 la simulación se potenció gracias a la aparición de computadores personales, además, el uso de los simuladores se generalizó en prácticamente todos los ámbitos de la ciencia e ingeniería.

La madurez de la simulación se dio en los años 90, ya que muchas empresas comenzaron a utilizar la simulación en etapas tempranas de sus proyectos para predicción de lugares que presentaban un mayor impacto en sus actividades, esto unido con la llegada de procesadores de alta velocidad favoreció el desarrollo y la utilización de aplicaciones informáticas destinadas a la simulación.

En la actualidad la simulación se realiza mediante computadoras y software diseñados específicamente para tal fin, siendo una poderosa técnica de resolución a problemas reales, experimentando y utilizando modelos matemáticos, de tal forma que con los resultados obtenidos se pueda obtener una buena estimación de las características y comportamientos reales del sistema.

Para la aplicación a problemas reales se realizan una serie de simplificaciones que toman la forma de relaciones matemáticas o lógicas, constituyendo un modelo que se usa para comprender el comportamiento del sistema real. Se trata de trasladar la realidad palpable a reglas matemáticas que representen de forma más fidedigna el fenómeno a estudiar.

Los modelos matemáticos que rigen los fenómenos reales resultan ser en muchas ocasiones simples, siendo posible utilizar métodos matemáticos para obtener información exacta sobre su comportamiento. Tratan de generar una muestra de escenarios representativos para un modelo en el que una relación completa de todos los estados posibles. Sin embargo, la mayoría de los

problemas en el mundo real no pueden representarse fácilmente utilizando modelos analíticos y se procede a estudiar los modelos mediante la simulación. (M. Ferreiro, 2011).

## 2.1.5 Fundamentos para la simulación

La simulación inicia con la identificación y establecimiento de un proceso real de cualquier naturaleza para reproducir artificialmente un fenómeno, mediante algoritmos matemáticos por lo que estas reproducciones para la experimentación, tienen factores que la determinan que son:

- Restricciones: de manera general se puede decir que las restricciones son relaciones entre las variables de decisión y magnitudes que dan sentido a la solución del problema y las acotan a valores factibles, asimismo la construcción de herramientas matemáticas que lo restrinjan o los modelen.

Las restricciones son las limitaciones de operaciones que son impuestas a unas variables, en un solo sentido, sin afectar los límites del sistema. Estas pueden ser impuestas por el diseñador o la naturaleza del sistema.

- Variables: son las decisiones que afecta el objetivo del sistema, de manera directa a la optimización del sistema, por lo que sobre ellas se tiene que manejar alternativas.

Para la formulación de un modelo de simulación, es necesario especificar las relaciones entre las variables que afectan el sistema. Los modelos de simulación incluyen variables de decisión, variables incontrolables y variables dependientes.

Las variables de decisión están controladas por la persona que toma la decisión y suelen cambiar entre una y otra simulación, las variables incontrolables son eventos fortuitos que escapan del control de quienes toman las decisiones y las variables

dependientes reflejan los valores de las variables de decisión y los de las variables incontrolables.

- **Modelo:** el modelo es una representación simplificada de la realidad, diseñada para representar, conocer y predecir propiedades del objeto real.

Los modelos de simulación se suelen clasificar de distintos tipos de acuerdo con criterios: continuos, discretos, dinámicos, estáticos, determinísticos y probabilísticos.

### 2.1.6 Aplicaciones de la simulación

Aun conociéndose los enormes beneficios de la simulación como: proporcionar muchos tipos de alternativas a evaluar, reducir costos o dar un control total sobre el tiempo debido a que un fenómeno se puede acelerar, entre otros. Tomó tiempo que las empresas llegarán a utilizar la simulación como herramienta para la toma de decisiones reales, ya era muy difícil y costoso la validación del modelo matemático. Desde su aparición, la técnica de simulación ha ocupado un lugar de privilegio entre las herramientas de investigaciones de operaciones.

En general se puede hablar de tres tipos de aplicaciones de la simulación

- I. **Experimentación:** el cual es un modelo que es necesario cuando la experimentación directa sobre el sistema real es muy costosa y cuando el objetivo es el diseño de un nuevo sistema, dado que el modelo puede ir modificándose fácilmente hasta obtener el comportamiento deseado.
- II. **Predicción:** el modelo se puede usar para pronosticar el comportamiento real bajo ciertos estímulos.

III. Enseñanza: el cual ayuda en la enseñanza-aprendizaje en temas donde realizar una experimentación es difícil por costos elevados.

### 2.1.7 Aplicaciones de la simulación en ingeniería

Las áreas de aplicación de la simulación son muy diversas, basta mencionar solo algunas de ellas:

- Análisis de factibilidad y viabilidad de nuevos procesos.
- Análisis de impacto ambiental
- Capacitación en el área de operaciones
- Detección de cuellos de botella en la producción.
- Predicción de los efectos de cambios en las condiciones de operación y capacidad de la planta.
- Optimización de las variables de operación.
- Optimización del proceso cuando cambian las características de los insumos y/o las condiciones económicas del mercado.
- Evaluación de alternativas de proceso para reducir el consumo de energía.
- Análisis de condiciones críticas de operación.
- Investigación de la factibilidad de automatización de un proceso, entre otras.

La simulación puede ser utilizada en las diferentes etapas de diseño, realización y mejora de procesos, llegándose con esto a predecir el comportamiento del sistema al modificar sus variables. La simulación de procesos puede usarse en las siguientes etapas de desarrollo de un proyecto industrial:

- Investigación y desarrollo. Una simulación sencilla se puede usar para probar la factibilidad técnica y económica del proyecto.
- Etapa crítica en la toma de decisiones. Se prueban diferentes alternativas de proceso y condiciones de operación y se toman decisiones. Cuando un proceso es económicamente atractivo, se deben probar diferentes alternativas de tamaño y localización de la planta industrial y determinar condiciones de operación óptimas.
- Planta piloto. Simulación con modelos más sofisticados para obtener mejores estimaciones de las condiciones de operación a escala industrial.
- Diseño. La simulación proporciona todos los datos de proceso requeridos para el diseño detallado de los diferentes equipos.
- Simulación de plantas existentes. Puede ser muy útil cuando es necesario cambiar las condiciones de operación, o cuando se quieren sustituir materias primas.

Hay tres tipos de problemas que pueden resolverse por medio de Simulación de procesos.

- I. En la simulación de un problema (análisis), deben especificarse las variables asociadas con las corrientes de alimentación y las variables de diseño de los módulos unitarios. Es decir, se conocen las alimentaciones y los parámetros de los equipos, y las incógnitas son las condiciones de las corrientes de salida.
- II. El problema de diseño es similar al problema de simulación. excepto que algunas de las variables de diseño no están especificadas y se imponen restricciones a algunas variables de las corrientes (regularmente sólo restricciones de igualdad). El número de restricciones es igual al número de variables de diseño sin especificar. En el diseño se conocen las alimentaciones y las condiciones principales de las

corrientes de salida, y las incógnitas son las dimensiones y especificaciones de algunos parámetros de los equipos.

- III. En el problema de optimización, las variables asociadas con las corrientes de alimentación y las variables de diseño pueden no estar especificadas, entonces es necesario agregar una función de costo al modelo. Las variables sin especificar se determinan de modo que se minimiza la función objetivo. En este caso, se pueden especificar restricciones de igualdad y desigualdad.

### 2.1.8 Etapas para el desarrollo de la simulación de un proceso químico

En la preparación de la simulación de un proceso químico existen ciertos pasos a seguir en pequeña o gran escala. Los cuales podemos se puede apreciar a continuación, véase Ilustración 5.

1	• Identificación y formulación del problema
2	• Definición del sistema.
3	• Formulación del modelo.
4	• Localizar los datos necesarios.
5	• Seleccionar el paquete de simulación.
6	• Adquisición de los recursos computacionales.
7	• Experimentación.
8	• Interpretación.
9	• Implementación.
10	• Documentación para el uso apropiado de las herramientas seleccionadas.

Ilustración 5. Etapas para el desarrollo de simulación. (Chemical Engineering, 1994).

- a) **Identificación y formulación del problema:** en este paso debe quedar perfectamente establecido el objeto de la simulación. Implicando la recopilación de



datos que describen las diferentes variables de entrada e identificación de sus límites. Habrá entonces que escoger algo que hará la diferencia en términos de ganar nuevas percepciones o de ofrecer mejoras importantes a los problemas que serán sometidos a simulación.

- b) **Definición del sistema:** el sistema en el cual se va a realizar la simulación debe estar perfectamente definido, identificando dónde estará la frontera del sistema a estudiar y las interacciones con el exterior que serán consideradas.
- c) **Formulación del modelo:** comienza con el desarrollo de un modelo simple que captura los aspectos relevantes del sistema real, en los que éstos dependen de la formulación del problema.

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

- d) **Localizar los datos necesarios:** el diseño y simulación de procesos químicos necesita de datos de propiedades físicas, termodinámicas, cinéticos y de transporte, los cuales se calculan a partir de modelos de propiedades con base teórica o empíricos.

La representación precisa de las propiedades es fundamental para la simulación de procesos. El usuario debe seleccionar un modelo para representar las propiedades,

el uso de un modelo inadecuado puede cambiar los resultados de la simulación y perder validez.

Los errores en la simulación por una mala selección del modelo de propiedades físicas no se pueden detectar o prevenir fácilmente, los resultados parecen correctos, pero son erróneos, (Carlson, 1996).

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

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

- e) **Seleccionar el paquete de simulación:** la simulación es implementada utilizando algún lenguaje de computación. Existen lenguajes específicos de simulación que facilitan esta tarea; también, existen programas que ya cuentan con modelos implementados para casos especiales.

Los simuladores de procesos en estado estacionario pueden ser fácilmente incorporados en los procesos que se desarrollan a nivel de las operaciones unitarias, así como también en cálculos diversos en reactores químicos. Además, contienen paquetes termodinámicos capaces de representar el comportamiento de sistemas en equilibrio termodinámico, así como de diferentes equipos utilizados. Las opciones para uso de simuladores de procesos dinámicos son limitados, debido a las siguientes razones:

- Incorporación de técnicas de simulación robustas para calcular la respuesta de los procesos en función del tiempo tienden a ser complejos.
  - Es difícil diseñar e implementar simuladores dinámicos para uso general debido a variables específicas para cada equipo.
  - Existe una carencia de apreciación del valor de la simulación dinámica (Sistema que permite conocer los cambios o alteraciones de variables en el tiempo).
- f) **Adquisición de los recursos computacionales:** el paquete de simulación seleccionado en la etapa anterior determinará los recursos computacionales, o en ciertos casos requerimientos de sistema en relación con el software y hardware seleccionados. Algunos paquetes requerirán una amplia gama de recursos, tales como estaciones de trabajo complejas, mientras que otros tan solo requerimientos generales de una computadora personal.
- El recurso informático seleccionado para el desarrollo del simulador es DWSIM, el cual posee extensas herramientas de aplicación en ingeniería, lo facilita la incorporación de los modelos de simulación y su representación e interfaz gráfica con el usuario.
- g) **Experimentación:** en esta etapa se realizan las simulaciones de acuerdo con el diseño previo. Los resultados obtenidos son debidamente recolectados y procesados.
- h) **Interpretación:** se analiza la sensibilidad que tiene el modelo con respecto a los parámetros que tienen asociados la mayor incertidumbre. El modelo será sensible a determinados parámetros si para pequeños cambios en los valores de estos las

respuestas varían notablemente. Si es así, se deberán recolectar datos adicionales para refinar la estimación de parámetros críticos.

- i) **Implementación:** el manejo de los simuladores desarrollados debe ser amigable, de tal forma que permita una fácil implementación y un uso adecuado, así como el aprendizaje y reconocimiento de las señales de error cuando las cosas no andan bien, ya que se corre el peligro debido al desconocimiento de las limitaciones y alcances del simulador utilizado, evitando sobrepasar los límites para los cuales ha sido diseñado. Para los programas de computación (simulación) comerciales el entrenamiento para la implementación de softwares de simulación es impartido mediante un curso desarrollado por la compañía que lo ha vendido, acompañado por un manual de usuario, tutoriales, soporte técnico y actualizaciones de algunas aplicaciones.
- j) **Documentación para el uso apropiado de las herramientas seleccionadas):** incluye la elaboración de la documentación técnica y manuales de uso de los equipos o programas desarrollados. La documentación técnica debe contener una descripción detallada del modelo desarrollado y de los datos requeridos para operatividad el modelo; también se debe incluir los cambios implementados en las etapas del desarrollo. Esta documentación será posteriormente de utilidad para futuros problemas que se presenten y de mejoramientos al proceso. Para la simulación de procesos existe una clasificación de distintas técnicas acorde a ciertos criterios generales y particularidades el sistema en estudio, las cuales se presentan en el siguiente apartado.

## 2.2 Extracción

### 2.2.1 Extracción

La *extracción* es un procedimiento de separación de una sustancia que puede disolverse en dos disolventes no miscibles entre sí, con distinto grado de solubilidad y que están en contacto a través de una interfase. La relación de las concentraciones de dicha sustancia en cada uno de los disolventes, a una temperatura determinada, es constante. Esta constante se denomina coeficiente de reparto y puede expresarse como:

$$K = \frac{(sustancia)_1}{(sustancia)_2}$$

Donde:

$(sustancia)_1$ : es la concentración de la sustancia que se pretende extraer, en el primer disolvente y, análogamente.

$(sustancia)_2$ : la concentración de la misma sustancia en el otro disolvente.

Si tenemos una sustancia soluble en un disolvente, pero más soluble en un segundo disolvente no miscible con el anterior, puede extraerse del primero, añadiéndole el segundo, agitando la mezcla, y separando las dos fases.

A nivel de laboratorio el proceso se desarrolla en un embudo de decantación. Como es esperable, la extracción nunca es total, pero se obtiene más eficacia cuando la cantidad del segundo disolvente se divide en varias fracciones y se hacen sucesivas extracciones que cuando se añade todo de una vez y se hace una única extracción.

## 2.2.2 Extracción sólido líquido

La operación de extracción sólido-líquido es una operación básica de recuperación o extracción mediante la cual uno o varios componentes de una fase sólida desestructurada, denominada alimento ( $R_0$ ), se transfiere a una fase líquida, disolvente ( $E_0$ ). Cuando tiene lugar en una única etapa, esta consiste en mezclar durante un tiempo el disolvente y el alimento para que se produzca un transporte de materia entre ambos. El componente o componentes que son solubles en el disolvente empleado y se transfieren de una fase a otra se conoce como soluto y la matriz sólida insoluble inerte.

El sentido de la transferencia es siempre desde el sólido hacia el líquido. Transcurrido el tiempo establecido para que se alcance el equilibrio entre ambas fases, se procede a la separación de la parte sólida (impregnada de disolvente), conocida como refinado ( $R_1$ ), de la disolución (disolvente más solutos extraídos), conocida como extracto ( $E_1$ ). En la Figura 1 se presenta un esquema con las corrientes involucradas en una etapa de extracción.

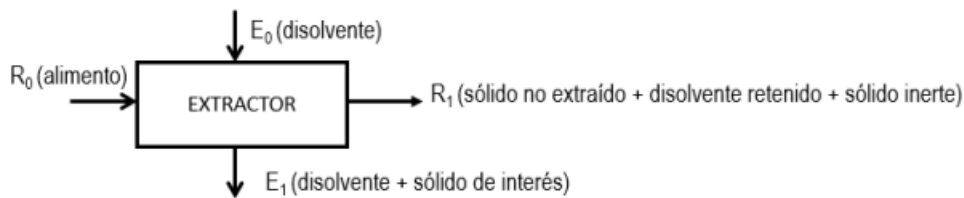


Ilustración 6 Esquema de una etapa de extracción sólido líquido

Es importante manejar la nomenclatura utilizada en esta operación. Por ello, a continuación, se muestran la terminología con la que se trabaja en esta operación.

Tabla 1 Nomenclatura de la operación de extracción sólido-líquido

<b>CORRIENTES</b>	<b>Extracto:</b> $E_i$ (kg/h). Corriente líquida (disolvente solo o disolvente+sólido). El extracto inicial ( $E_0$ ) también recibe el nombre de disolvente).
	<b>Refinado:</b> $R_i$ (kg/h). Corriente sólida (sólido inicial o sólido+disolución retenida). El refinado inicial ( $R_0$ ) también recibe el nombre de alimento.
<b>COMPONENTES</b>	<b>Sólido (S):</b> Componente/s solubles a extraer
	<b>Disolvente (D):</b> Componente selectivo capaz de disolver el sólido
	<b>Inerte (I):</b> matriz sólida insoluble
<b>CONCENTRACIONES</b>	$y_j$ : fracción másica de componente $j$ en el extracto o disolvente inicial
	$x_j$ : fracción másica de componente $j$ en el refinado o el alimento inicial

Donde  $i$  indica el número de etapa de la que procede la corriente y  $j$  indica el componente, que puede ser sólido, disolvente o inerte

### 2.2.3 Mecanismos que facilitan y complementan la extracción sólido-líquido

Frecuentemente, se aplican pretratamientos a la materia prima de la que se quiere obtener el componente de interés para mejorar la extracción. Asimismo, para recuperar el componente final, se requiere de otras etapas que puedan ayudar a concentrar, purificar o estabilizar el producto. Básicamente, estas etapas se pueden clasificar como a continuación se presenta:

- I. Pretratamiento de materia prima
  - Deshidratación
  - Desestructuración (mecánica, térmica...)
  - Re-estructuración (laminas, “pellets”...)
- II. Extracción

- III. Desolventación (eliminación del disolvente para su reutilización tanto del refinado como del extracto)
- IV. Envasado, almacenamiento y distribución de productos.

### 2.2.4 Pretratamientos de la materia prima

Estos tratamientos son necesarios por distintos motivos. Por ejemplo, cuando se emplean disolventes orgánicos para la extracción, es necesario deshidratar la materia prima antes de proceder a la extracción. Por otro lado, la desestructuración o reducción del tamaño de partícula consigue eliminar barreras estructurales a la transferencia de materia, lo que favorece la difusión del disolvente a través del sólido para acceder al soluto, aumentando a su vez la velocidad de flujo por los poros del material. Por último, la reestructuración, también se aplica en ciertos casos para facilitar el manejo y evitar el apelmazamiento del sólido que dificultaría la extracción.

### 2.2.5 Tipos de extracción sólido-líquido

Esta extracción se lleva a cabo por diferentes procedimientos de contacto, entre los que destacan los siguientes:

- La percolación, que consiste en la pulverización del disolvente sobre el lecho de sólido.
- La inmersión completa del sólido en el líquido
- El llenado y vaciado intermitente del lecho sólido



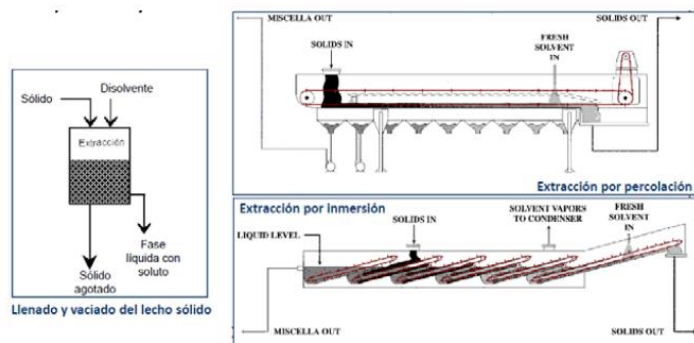


Ilustración 7 Tipos de contacto en la extracción sólido-líquido

## 2.2.6 Fundamento de la operación de extracción sólido-líquido

La extracción sólido-líquida se realiza en equipos denominados extractores en los que se producen a su vez dos subetapas. En primer lugar, se mezclan los sólidos con el disolvente y después se procede a la separación de la fase líquida en la que se ha trasladado el componente de interés, de la fase sólida “agotada” o residuo. En la siguiente figura se pueden apreciar ambas subetapas. La línea discontinua representa la unidad básica del extractor

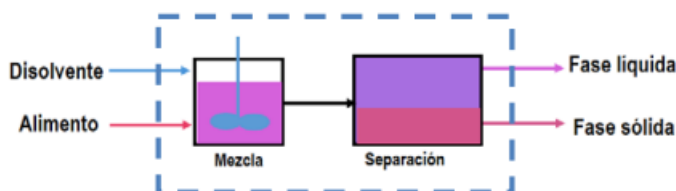


Ilustración 8 Subetapas de un extractor

Por tanto, la etapa de extracción se considera una unidad de equipo en la que se ponen en contacto las fases durante un tiempo determinado, de forma que se realiza la transferencia de materia entre los componentes de las fases y van aproximándose al equilibrio a medida que transcurre el tiempo.

Las fases en las que se lleva a cabo la extracción se pueden desglosar en las siguientes:

- Primera: Penetración del disolvente y cambio de fase de sólido soluble
- Segunda: Difusión del soluto a través del disolvente contenido en los poros del sólido hasta la interfase
- Tercera: Transferencia de soluto desde la superficie de las partículas del sólido al seno del líquido

## 2.2.7 Equilibrio y etapa ideal

Se define el equilibrio de la extracción sólido-líquido cuando se da alguna de las siguientes situaciones:

- I. Cuando todo el soluto ha pasado a la disolución y está disuelto en ésta 2.
- II. Cuando se satura el disolvente, es decir, cuando la cantidad de soluto en el alimento/refinado supere la solubilidad de éste en el disolvente empleado.

Una vez alcanzado el equilibrio, las fases se separan, obteniéndose:

- Extracto (E), flujo superior o miscela: Fase constituida por soluto y disolvente
- Refinado (R) o flujo inferior: Mezcla formada por el sólido no soluble y una cierta cantidad de disolución retenida en él. Esta disolución, si se ha alcanzado el equilibrio, tendrá la misma concentración en soluto que el extracto. Si la disolución está saturada, el refinado contendrá además soluto sin disolver

Así, se define la “etapa ideal, teórica o de equilibrio” como la etapa de contacto en la que la disolución que se obtiene (fase líquida) tiene la misma composición que la disolución retenida por el sólido, lo cual se ve representado en la siguiente ecuación:

$$\frac{x_s}{y_s} = \frac{x_d}{y_d} \quad (\text{ecuación 1})$$

### 2.2.8 Eficacia individual de la etapa y eficacia global del proceso de extracción

Es importante tener presente el concepto de eficacia individual ( $\epsilon_i$ ), que es el cociente entre el cambio en la composición que se logra realmente en una etapa real ( $i$ ) y la que habría tenido lugar en una situación de equilibrio ideal (ecuación 2).

$$\epsilon_G = \frac{\text{Solute extraído real}}{\text{Solute extraído ideal}} \quad 0 < \epsilon < 1 \quad (\text{ecuación 2})$$

Por otra parte, se define la eficacia global ( $\epsilon_G$ ) como el cociente entre el número de etapas ideales requeridas para alcanzar una determinada concentración de soluto en la corriente de extracto final y el número de etapas que realmente serán necesarias (ecuación 3).

$$\epsilon_G = \frac{\text{Número de etapas ideales}}{\text{Número de etapas reales}} \quad 0 < \epsilon < 1 \quad (\text{ecuación 3})$$

### 2.2.9 Factores que afectan la extracción sólido-líquido

La velocidad de la separación del soluto de la fase portadora, por lo general, queda afectada por cuatro factores principales, que son los siguientes:

- **Agitación**

Una buena agitación fomenta la transferencia, al facilitar la difusión del soluto hacia el disolvente, evitando sedimentación y apelmazamiento de partículas.

- **Disolvente**

Este elemento es fundamental en la extracción sólido-líquido. Debe ser poco viscoso y lo más selectivo posible. La polaridad de éste debe ser muy similar a la del soluto a separar, y lo más distinta posible a la polaridad de las impurezas que puedan presentarse. De este modo, elevaremos su selectividad.

- **Tamaño de partícula**

La lixiviación tiende a ser mucho más eficiente cuando la interacción entre las fases es mayor. Es por esta razón, que se trata de hacer más pequeñas a las partículas del material de extracción, para que pueda aumentar la interacción entre las fases, haciendo más eficiente la separación. Cabe destacar, que hay que llegar a un equilibrio en el tamaño de las partículas, ya que si son muy pequeñas, aparecerán suspensiones coloidales que dificultarán la extracción.

- **Temperatura**

A mayor temperatura, más eficiente será la solubilidad y por lo tanto, la extracción será más eficiente. El límite superior para la temperatura se fija generalmente al punto de ebullición del disolvente. A temperaturas cercanas al punto de ebullición, el disolvente tiende a evaporarse, llevando al soluto nuevamente a su fase sólida.

## Capítulo III: Procedimiento y realización de actividades

### 3.1 Procedimiento

- I. Análisis del programa vigente de la asignatura Simulación de procesos químicos
- II. Elaboración un simulador de solubilidades.
- III. Desarrollo de la investigación documental, enfocándose en el marco teórico y la construcción de simuladores

Para la construcción del simulador de solubilidades se realizaron las siguientes actividades.

- I. Elaboración del diagrama de flujo en la operación de mezclado
- II. Construcción del modelo matemático, definiendo funciones y variables para definir los datos de entrada y los valores de salida
- III. Definición de los solutos a considerar usando como solvente el agua
- IV. Ajustando datos experimentales a una función cuadrática con EXCEL, se calculan las concentraciones de saturación en función de la temperatura, para obtener la base de datos del simulador
- V. Elaboración del algoritmo de cálculo en función del modelo matemático
- VI. Tomando como base el algoritmo se desarrollan todos los módulos del simulador, se integran y se correlacionan

### 3.2 Actividades realizadas

#### 3.2.1 Simulador de solubilidades

Para la elaboración del simulador de solubilidades se realizaron una serie de actividades, a continuación, se muestra la interfaz del usuario en la cual se presentan los resultados finales de un tanque de mezclado utilizado para calcular la masa del precipitado y la concentración de la solución.

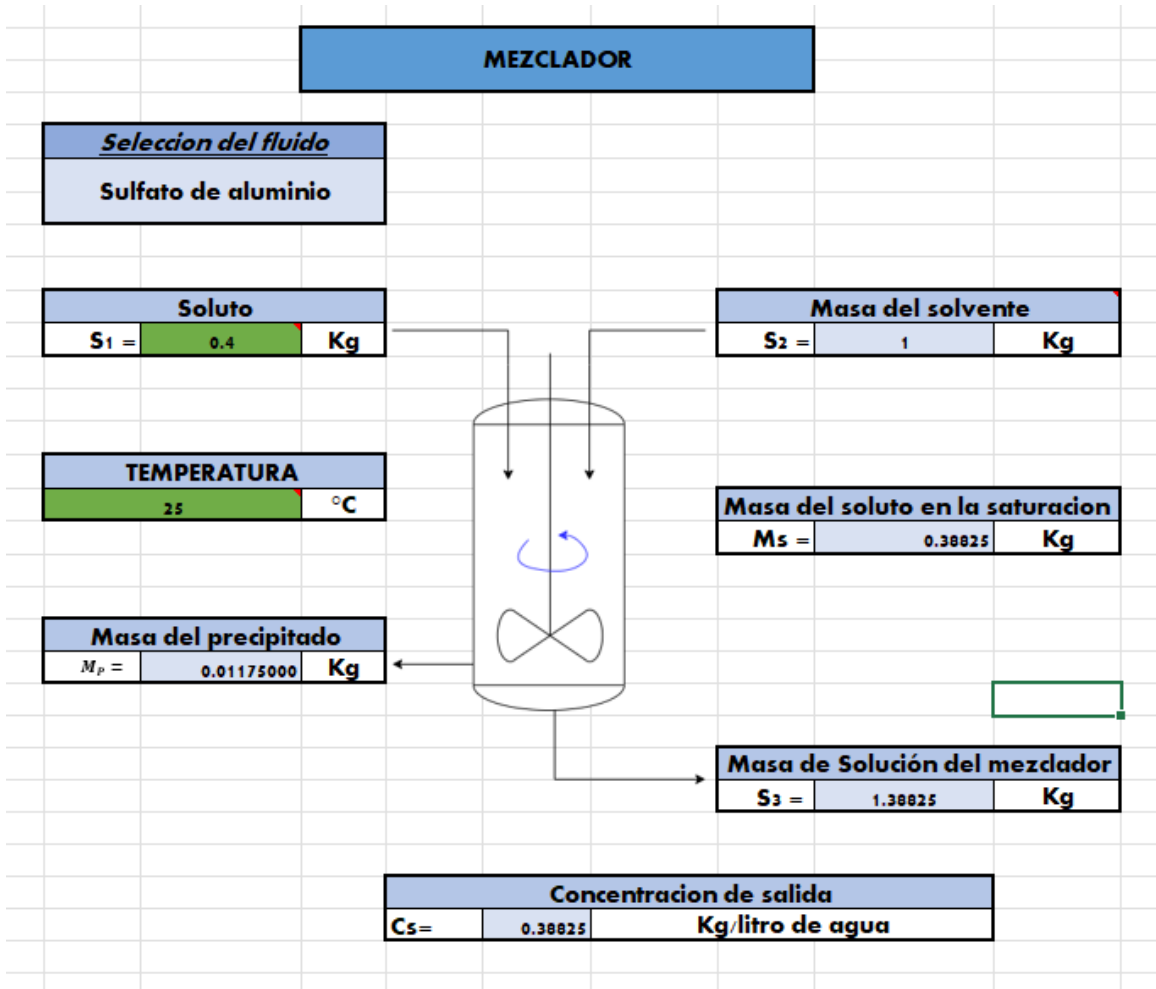


Ilustración 9 Interfaz de usuario del simulador de solubilidades

En la ilustración podemos apreciar el mezclador diseñado, el cual muestra tanto entradas, así como salidas, en el cual podemos seleccionar de una lista de solutos que se han agregado a una

base de datos que veremos a continuación, de igual manera podemos ingresar algunos datos de entrada (casillas de color verde).

Dicho simulador tiene la capacidad de calcular lo siguiente:

- La masa del soluto en el punto de saturación
- La masa de la solución en el mezclador
- La concentración de solución en el mezclador
- La masa del precipitado (en caso de existir)

El presente simulador opera bajo un modelo matemático que consiste en lo siguiente:

MODELO MATEMATICO	
El modelo matemático de este simulador tiene una ecuación para calcular la concentración de saturación a la temperatura de mezclado y tres ecuaciones de balance de materia:	
<p><b>Concentración de la saturación.</b></p> $C_s = AT^2 + BT + C$ <p>Donde: <b>A, B y C</b> son coeficientes que resultan del ajuste de datos de solubilidades a diferentes temperaturas.</p>	<p><b>Balance de materia.</b></p> <p><math>S_1 + S_2 = S_3</math>; Cuando la solución esta antes y en el punto de saturación. <math>M_p = S_1 + S_3</math>; Masa del precipitado despues del punto de saturación. <math>C_{Sol} = \frac{S_3}{L_{agua}}</math>; Concentración de la solución antes y despues del punto de saturacion. <math>M_p=0</math>; Masa del precipitado despues del punto de saturación.</p> <p>Donde: <math>S_1</math>: Masa del Sóluto. <math>S_2</math>: Masa del solvente. <math>S_3</math>: Masa de la solución. <math>M_p</math>: Masa del precipitado. <math>C_{Sol}</math>: Concentración de la solución.</p> <p>Área de trazado</p>

Ilustración 10 Modelo matemático empleado

En la Ilustración 10 se muestran las ecuaciones que se emplearon para encontrar la concentración de saturación en función de la temperatura, así como balances de materia que se llevan a cabo a lo largo del proceso.

## Algoritmo de solución

Para la construcción de este simulador se siguieron las siguientes etapas

1. Se elaboró un diagrama de flujo de la operación de mezclado en la hoja nombrada "Simulador"
2. Se analizó el modelo matemático para definir así las celdas de entrada de datos
3. Se definió la lista de solutos a considerar
4. Se realizaron ajustes de datos experimentales de solubilidad para encontrar los coeficientes A, B y C.
5. Se calcularon las concentraciones de saturación usando la siguiente fórmula:  
$$C_s = AT^2 + BT + C$$
6. Se compara la cantidad de soluto agregado con la cantidad presente del soluto en la concentración de saturación
7. Como resultado de la comparación se decide que ecuación de balance del modelo matemático se usará
8. Se enlazan las siguientes páginas del paquete
9. Se reproducen los resultados de los cálculos que se deben presentar en la pestaña del simulador

Ilustración 11 Algoritmo de solución del simulador de solubilidades

En la ilustración 11, se muestra una pequeña guía para comprender la manera en la que se llevó a cabo el simulador de solubilidades.



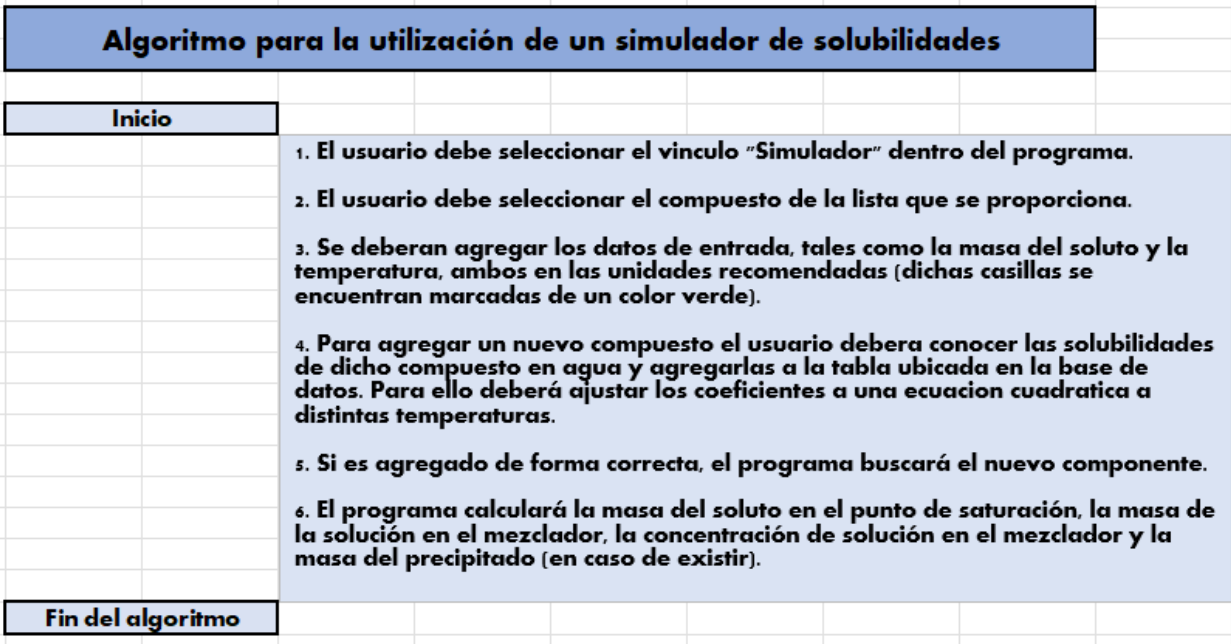


Ilustración 12 Algoritmo para la utilización de un simulador de solubilidades

En la ilustración 12 podemos apreciar el algoritmo bajo el cual el usuario podrá interactuar con el simulador de una manera correcta.

CALCULOS				
<b>Temperatura °C =</b>	<b>25</b>	<b>Coefficientes de la ecuación del soluto seleccionado</b>		
<b>Fluido =</b>	<b>Sulfato de aluminio</b>	<b>A</b>	<b>B</b>	<b>C</b>
$C_{Sol} =$	0.38825	0.00003	0.003	0.2945
$S_1 =$	0.4			
$M_s =$	0.38825			
$S_1 - M_s =$	0.01175			
$M_p =$	0.01175			

Ilustración 13 Interfaz de cálculos correspondientes del simulador de solubilidades

En la Ilustración 13 se muestran los cálculos de los coeficientes A, B y C, obtenidos de la base de datos que determinan la masa de soluto en la concentración de saturación, la masa entre el soluto añadido y la masa en la concentración de saturación, así como el cálculo de la masa del precipitado.

A continuación, se muestra la base de datos del simulador, de esta se extraen los compuestos que el usuario decida utilizar, el simulador cuenta con distintas soluciones para la resolución del simulador. En esta podemos ver los modelos ajustados de solubilidad de gramos de soluto en un litro de agua. Los coeficientes A, B y C, se obtienen ajustando los datos presentados en las ilustraciones 15-25, dichos coeficientes se calculan a distintas temperaturas.

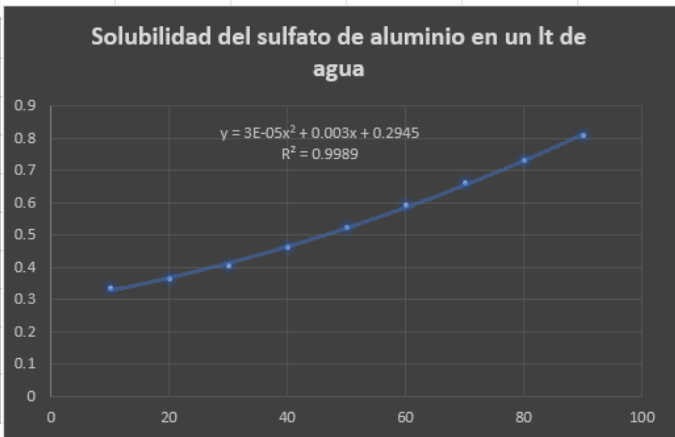
BASE DE DATOS				
	Soluto	A	B	C
<i>Modelos ajustados de solubilidades de sales en agua</i>	Sulfato de aluminio	0.00003	0.003	0.2945
	Nitrato de sodio	0.000004	0.0006	0.0741
	Cloruro de amonio	0.00001	0.0035	0.2967
	Cloruro de sodio	0.0000003	0.000008	0.0356
	Cloruro de bario	0.000006	0.0022	0.3102
	Bicarbonato de sodio	0.000006	0.0012	0.0691
	Sulfato de amonio	0.00001	0.0019	0.686
	Permanganato de potasio	0.00004	0.0006	0.0342
	Acido bórico	0.00004	-0.0005	0.0429
	Nitrato de potasio	0.00002	0.0006	0.0123
	Cromato de potasio	0.0000005	0.0017	0.5831

Ilustración 14 Base de datos del simulador de solubilidades

Se graficó la temperatura con los kg de soluto, posteriormente se le agregó una línea de tendencia para determinar la ecuación cuadrática la cual nos indicará los valores pertinentes para A, B y C.

## COEFICIENTES DE AJUSTE A UNA FUNCION CUADRATICA (A DISTINTAS TEMPERATURAS)

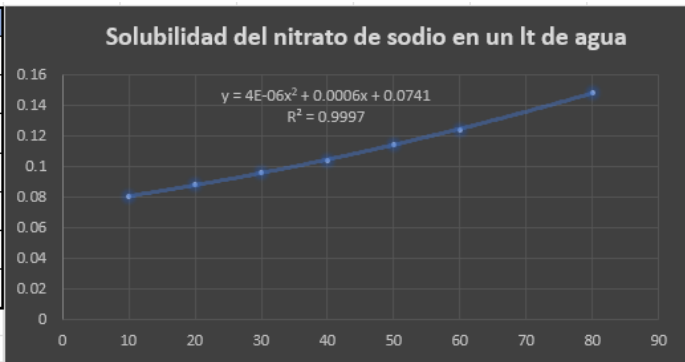
T °C	Kg soluto
10	0.335
20	0.364
30	0.404
40	0.461
50	0.522
60	0.592
70	0.661
80	0.73
90	0.808



<b>A</b>	<b>0.00003</b>
<b>B</b>	<b>0.003</b>
<b>C</b>	<b>0.2945</b>

Ilustración 15 Ajuste de solubilidades del Sulfato de aluminio

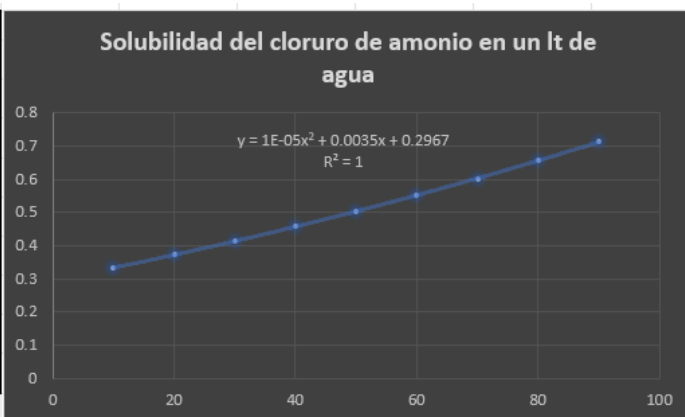
T °C	Kg soluto
10	0.08
20	0.088
30	0.096
40	0.104
50	0.114
60	0.124
80	0.148



<b>A</b>	<b>0.000004</b>
<b>B</b>	<b>0.0006</b>
<b>C</b>	<b>0.0741</b>

Ilustración 16 Ajuste de solubilidades del nitrato de sodio

T °C	Kg soluto
10	0.333
20	0.372
30	0.414
40	0.458
50	0.504
60	0.552
70	0.602
80	0.656
90	0.713



<b>A</b>	<b>0.00001</b>
<b>B</b>	<b>0.0035</b>
<b>C</b>	<b>0.2967</b>

Ilustración 17 Ajuste de solubilidades del cloruro de amonio

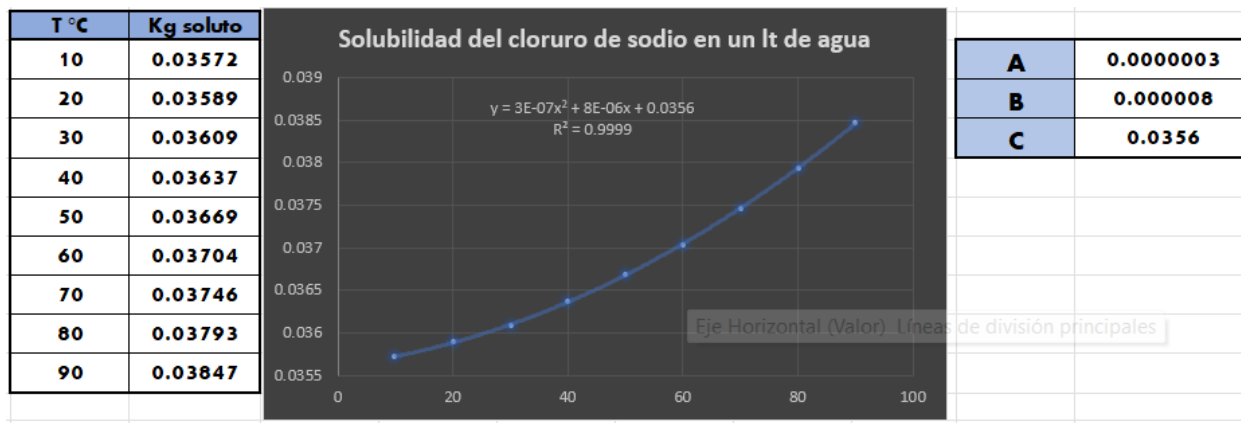


Ilustración 18 Ajuste de solubilidades del cloruro de sodio

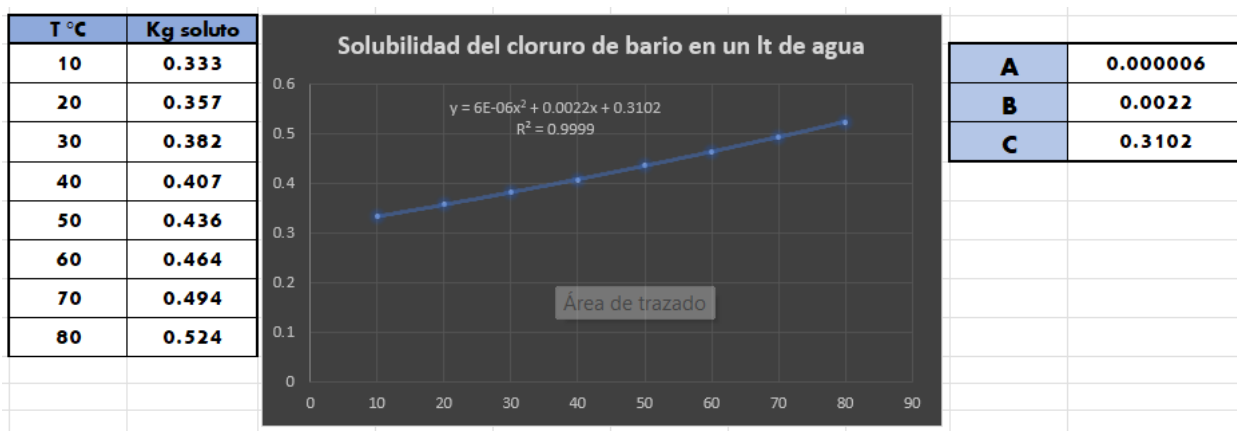


Ilustración 19 Ajuste de solubilidades del cloruro de bario

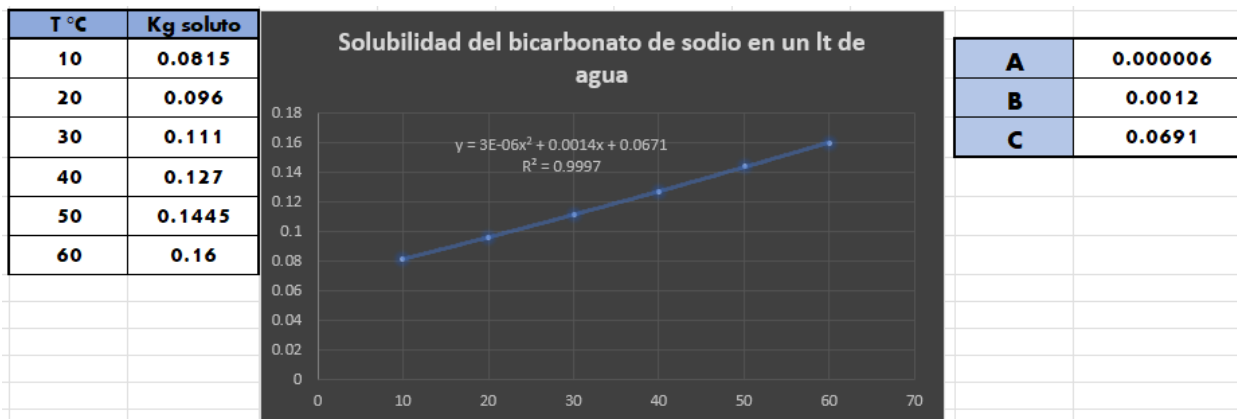


Ilustración 20 Ajuste de solubilidades del bicarbonato de sodio

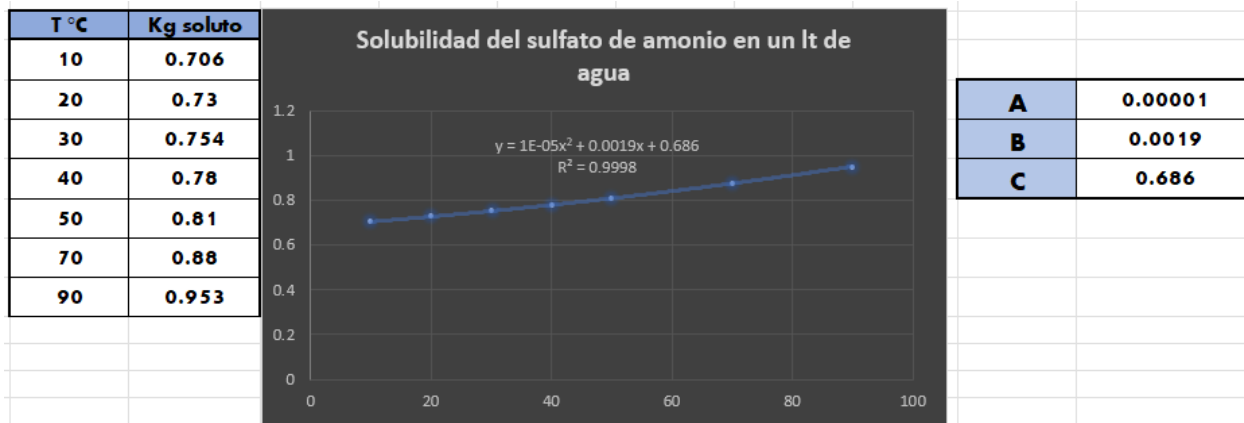


Ilustración 21 Ajuste de solubilidades del sulfato de amonio

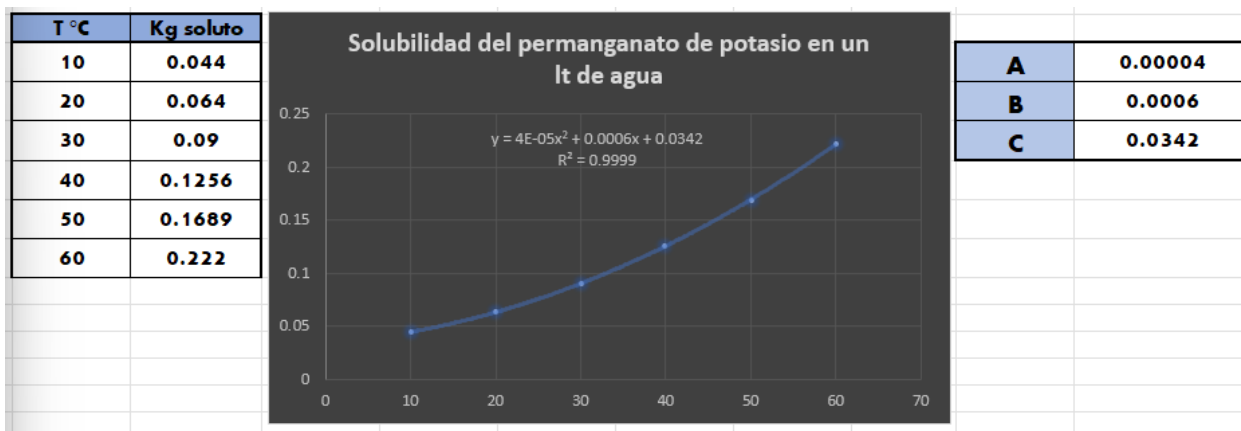


Ilustración 22 Ajuste de solubilidades del permanganato de potasio

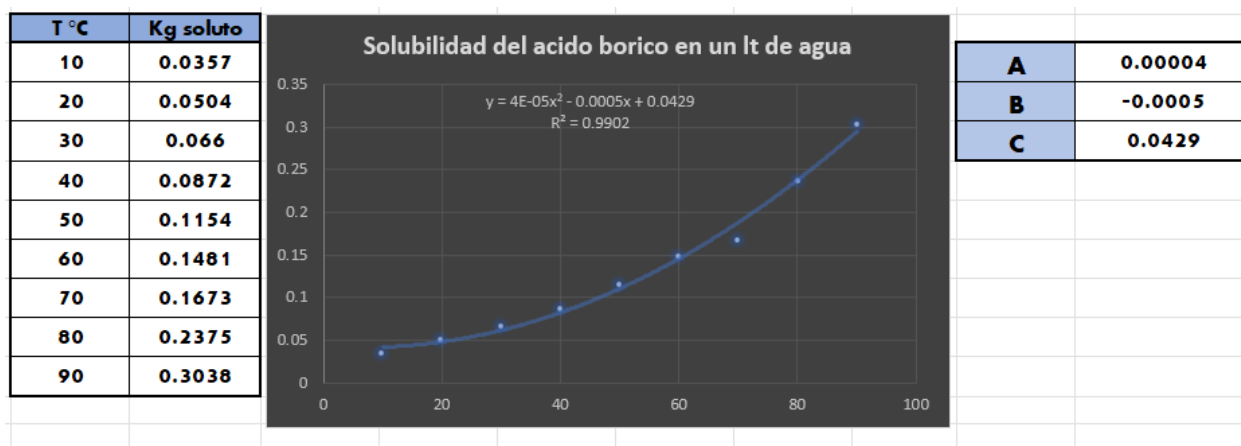


Ilustración 23 Ajuste de solubilidades del ácido bórico

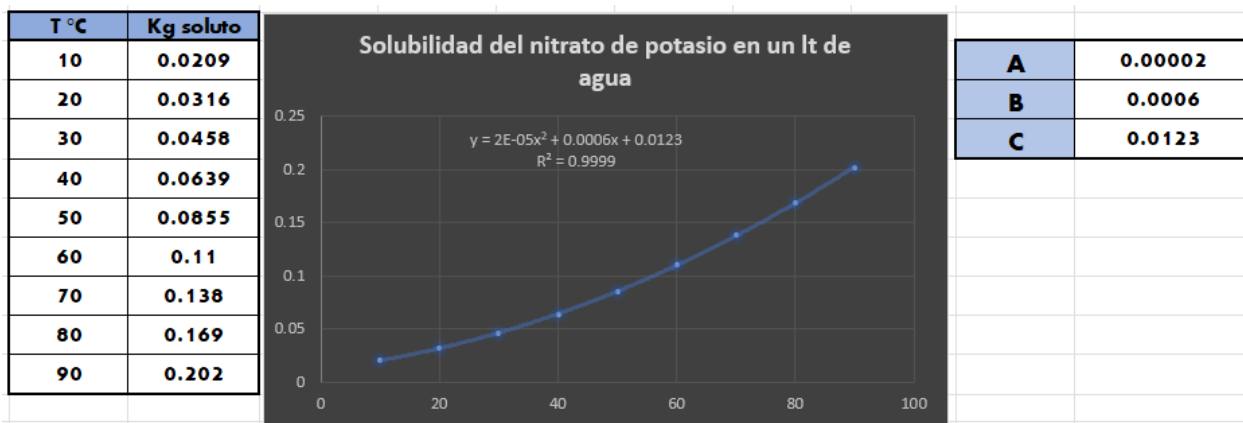


Ilustración 24 Ajuste de solubilidades del nitrato de potasio

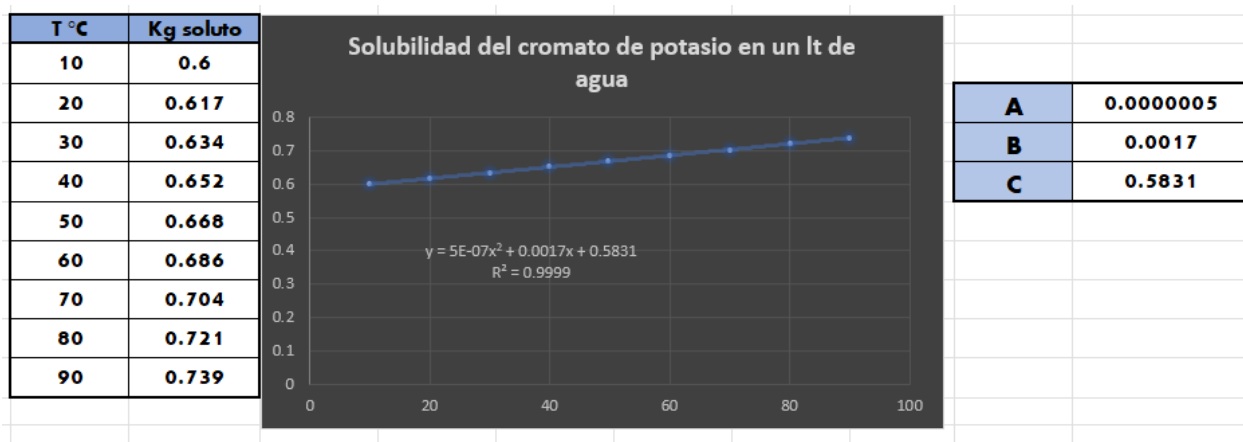


Ilustración 25 Ajuste de solubilidades del cromato de potasio

## Capítulo IV: Resultados

### 4.1 Simulador de solubilidades

Para los resultados en este simulador nos encontramos con el cálculo de la concentración de la solución y la masa del precipitado.

Para este caso se tomaron los mismos datos y condiciones de operación que en el programa de Excel mostrado anteriormente, llegando así a los mismos parámetros, misma concentración de la solución y masa del precipitado.

Se construyó el siguiente simulador en DWSIM:

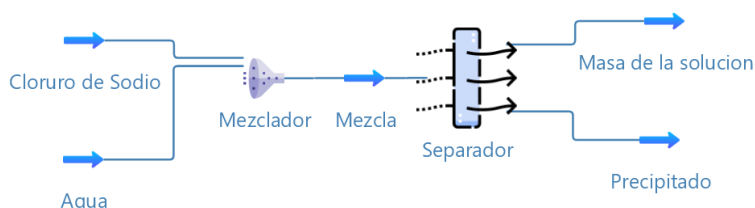


Ilustración 26. Diseño del simulador construido en DWSIM

En la hoja de calculo que proporciona DWSIM insertamos los datos de las solubilidades de sales en agua a utilizar, las cuales previamente han sido calculadas.

Soluto	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O
Sulfato de aluminio	3E-05	0.003	0.2945												
Nitrato de sodio	4E-06	0.0006	0.0741												
Cloruro de amonio	1E-05	0.0035	0.2967												
Cloruro de sodio	3E-07	8E-06	0.0356												

Ilustración 27. Base de datos en DWSIM

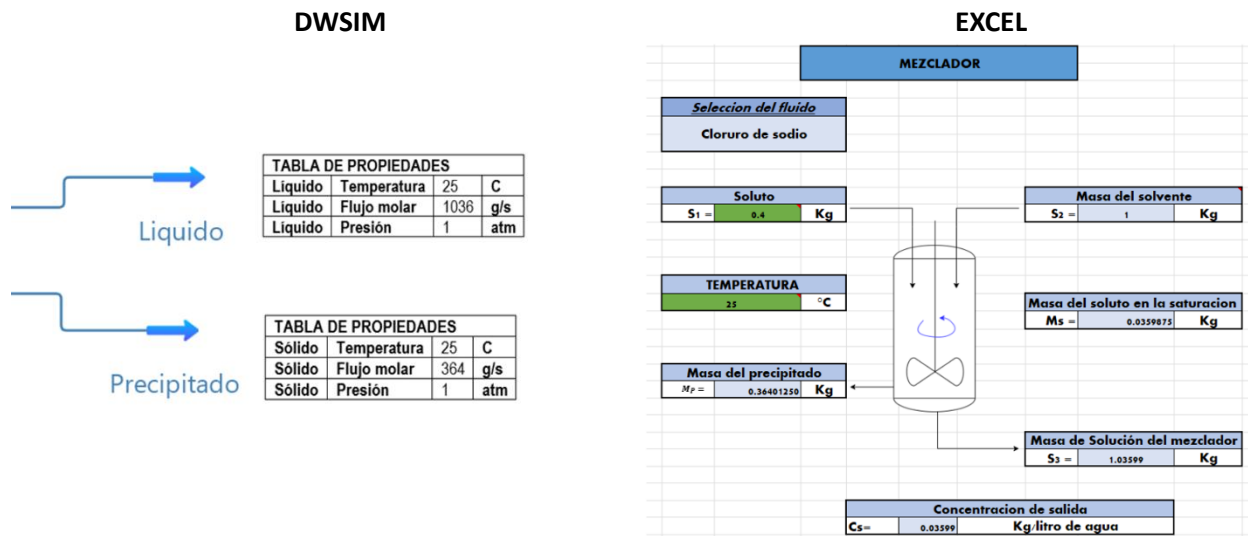
Se preestablecieron corrientes de entrada idénticas a las de el simulador en Excel, obteniendo los siguientes resultados.



Ilustración 28. Concentraciones de la solución y masa del precipitado obtenidas en DWSIM.

### 4.1.2 Comparación de resultados de los simuladores construidos en DWSIM y Excel.

Una vez finalizados los simuladores se corroboran los resultados que se obtuvieron en cada uno.



### 4.1.3 Evaluación de los simuladores desarrollados

La evaluación de los simuladores se realizó través de diferentes corridas empleando el programa para simulaciones de ingeniería química DWSIM, esto se lleva a cabo bajo distintas condiciones de operación y comparando los distintos resultados simulados en el programa de Excel en los resultados obtenidos en el programa de simulación antes mencionado.



Para tener resultados asertivos, tomaremos las mismas condiciones y datos iniciales de operación que se utilizaron en el programa de solubilidades realizado en Excel, así tendremos los mismos parámetros, las mismas concentraciones, así como la masa del precipitado.

## Capítulo V: Conclusiones y recomendaciones

### 5.1 Conclusiones

Una vez finalizados los simuladores pertinentes, sabemos que es factible el construir simuladores para ingeniería química utilizando Excel, aun siendo una tarea ardua y compleja, el desarrollo de estos simuladores nos incita a adentrarnos a su área de aplicación, y por supuesto, nos facilitan en gran medida tareas que son demandantes y complicadas. Las actividades realizadas en el transcurso, aunque difíciles, dan resultados bastante satisfactorios.

Es de suma importancia para el Tecnológico Nacional de México campus Tuxtla Gutiérrez el desarrollo de simuladores como el que se presenta, de este modo los alumnos pueden tener un acercamiento y guía en este ámbito, facilitando de cierta manera las simulaciones que ellos en un futuro podrán realizar.

### 5.2 Recomendaciones

Las herramientas tecnológicas se vuelven más utilizadas día a día, y por consiguiente la actualización de los métodos de aprendizaje no está para nada lejos, los simuladores se utilizan cada vez más, aunque es complicado poder encontrar simuladores específicos navegando por internet, por ello es de gran importancia tener conocimiento acerca de esto, podemos lograrlo haciendo una revisión bibliográfica para saber bien sobre que hablamos y al validar esta información, podemos obtener un resultado óptimo y en caso de encontrar simuladores con deficiencias, podríamos corregirlos y mejorarlos sin mucha dificultad.



## Capítulo VI: Competencias desarrolladas

A lo largo de este proyecto reafirmé y recordé conocimientos que había adquirido a lo largo de la carrera, con la realización de los simuladores demostré la capacidad que tenemos de avanzar sin importar dificultades, pude afirmar mis capacidades para diseñar así como implementar soluciones a problemáticas que se dieron a lo largo del proyecto de elaboración de simuladores.

De la misma manera, mantuve y mejoré las habilidades de manejo de software, más que nada de aplicaciones de ofimática, llámese Excel, Word, Drawio, y por supuesto DWSIM, aplicando estos conocimientos en los procesos químicos y optimizándolos.

## Capítulo VII: Referencias bibliográficas

Martínez Sifuentes, Victor Hugo, y col “Simulación de Procesos en Ingeniería Química” (2000); Plaza y Valdés Editores, México, Tamaulipas.

Robert E. Shannon, citado en Coss Bú, Raúl, “Simulación: un enfoque práctico”, Limusa, México, 2003

Glasscock, David, “Process Simulation: The Art and Science of Modeling”, (Noviembre, 1994), Chemical Engineering.

Carlson, Eric C., “Don’t Gamble With Physical Properties For Simulations”, (Octubre, 1996), Chemical Engineering Progress.

Aguado, J., Calles, J., Cañizares, P., López, B., Santos, A., Serrano, D., & Rodríguez, F. (2010). Ingeniería de la Industria Alimentaria Volumen II. Ed. Síntesis

Ibarz, A., & Barbosa-Cánovas (2005). Operaciones unitarias en la ingeniería de alimentos. Ed. Mundi-Prensa Libros