



Universidad de San Carlos de Guatemala
Facultad de Ingeniería
Escuela de Ingeniería Química

**SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DEL ETILENGLICOL EN ESTADO
ESTACIONARIO UTILIZANDO EL PROGRAMA ASPEN HYSYS VERSIÓN 8.0**

Vania María López de los Ríos

Asesorado por Ing. Williams Guillermo Álvarez Mejía

Guatemala, febrero de 2017

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA



FACULTAD DE INGENIERÍA

**SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DEL ETILENGLICOL EN ESTADO
ESTACIONARIO UTILIZANDO EL PROGRAMA ASPEN HYSYS VERSIÓN 8.0**

TRABAJO DE GRADUACIÓN

PRESENTADO A LA JUNTA DIRECTIVA DE LA
FACULTAD DE INGENIERÍA
POR

VANIA MARÍA LÓPEZ DE LOS RÍOS

ASESORADA POR EL ING. WILLIAMS GUILLERMO ÁLVAREZ MEJÍA

AL CONFERÍRSELE EL TÍTULO DE

INGENIERA QUÍMICA

GUATEMALA, FEBRERO DE 2017

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA
FACULTAD DE INGENIERÍA



NÓMINA DE JUNTA DIRECTIVA

DECANO	Ing. Pedro Antonio Aguilar Polanco
VOCAL I	Ing. Angel Roberto Sic García
VOCAL II	Ing. Pablo Christian de León Rodríguez
VOCAL III	Ing. José Milton de León Bran
VOCAL IV	Br. Jurgen Andoni Ramírez Ramírez
VOCAL V	Br. Oscar Humberto Galicia Nuñez
SECRETARIA	Inga. Lesbia Magalí Herrera López

TRIBUNAL QUE PRACTICÓ EL EXAMEN GENERAL PRIVADO

DECANO	Ing. Pedro Antonio Aguilar Polanco
EXAMINADORA	Inga. Cinthya Patricia Ortiz Quiroa
EXAMINADORA	Inga. Hilda Piedad Palma Ramos
EXAMINADOR	Ing. Williams Guillermo Álvarez Mejía
SECRETARIA	Inga. Lesbia Magalí Herrera López

HONORABLE TRIBUNAL EXAMINADOR

En cumplimiento con los preceptos que establece la ley de la Universidad de San Carlos de Guatemala, presento a su consideración mi trabajo de graduación titulado:

SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DEL ETILENGLICOL EN ESTADO ESTACIONARIO UTILIZANDO EL PROGRAMA ASPEN HYSYS VERSIÓN 8.0

Tema que me fuera asignado por la Dirección de la Escuela de Ingeniería Química, con fecha 17 de noviembre de 2015.

Vania María López de los Ríos



USAC
TRICENTENARIA
Universidad de San Carlos de Guatemala

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA
FACULTAD DE INGENIERIA
ESCUELA DE INGENIERIA QUIMICA

Edificio T-5, Ciudad Universitaria, Zona 12, Guatemala, Centroamérica
EIQC-REG-SG-001

Guatemala, 04 de octubre del 2016
Ref. WGM. TE. ASE. 00028.2016-10-04

Ingeniero
Carlos Salvador Wong Davi
Director
Escuela de Ingeniería Química
Facultad de Ingeniería
Presente.

Estimado Director:

Atentamente me dirijo a usted para hacer de su conocimiento que he tenido a la vista el informe final del Trabajo de Graduación de la estudiante VANIA MARÍA LÓPEZ DE LOS RÍOS, carné No. 201021069, titulado: **"SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DEL ETILENGLICOL EN ESTADO ESTACIONARIO UTILIZANDO EL PROGRAMA ASPEN HYSYS VERSIÓN 8.0"**, el cual asesoro. Considerando que éste informe final del trabajo de graduación reúne rigor, secuencia y coherencia metodológica lo remito para su consideración para proseguir con los trámites correspondientes.

Agradeciendo la atención a la presente, le saluda respetuosamente,

Ing. Williams Guillermo Álvarez Mejía, M.I.Q; M.I.E; c.Dr.
Profesor Titular XII
Área de Formación Complementaria
Escuela Ingeniería Química

Williams G. Álvarez Mejía
Ingeniero Químico
Magister en Ingeniería Química
Máster en Innovación Educativa
Colegiado 259

C.c: Archivo
WGAM/awgam



ACAAI



Formando Ingenieros Químicos en Guatemala desde 1939



Guatemala, 18 de noviembre de 2016.
Ref. EIQ.TG-IF.065.2016.

Ingeniero
Carlos Salvador Wong Davi
DIRECTOR
Escuela de Ingeniería Química
Facultad de Ingeniería

Estimado Ingeniero Wong:

Como consta en el registro de evaluación del informe final EIQ-PRO-REG-007 correlativo **093-2015** le informo que reunidos los Miembros de la Terna nombrada por la Escuela de Ingeniería Química, se practicó la revisión del:

INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADUACIÓN

Solicitado por la estudiante universitaria: **Vania María López de los Ríos**.
Identificada con número de carné: **2010-21069**.
Previo a optar al título de **INGENIERA QUÍMICA**.

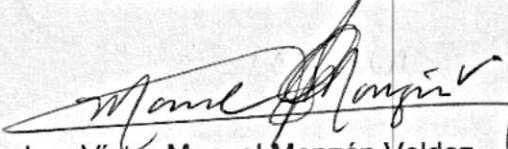
Siguiendo los procedimientos de revisión interna de la Escuela de Ingeniería Química, los Miembros de la Terna han procedido a **APROBARLO** con el siguiente título:

SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DEL ETILENGLICOL EN ESTADO ESTACIONARIO UTILIZANDO EL PROGRAMA ASPEN HYSYS VERSIÓN 8.0

El Trabajo de Graduación ha sido asesorado por el Ingeniero Químico: **Williams Guillermo Álvarez Mejía**.

Habiendo encontrado el referido informe final del trabajo de graduación **SATISFACTORIO**, se autoriza al estudiante, proceder con los trámites requeridos de acuerdo a las normas y procedimientos establecidos por la Facultad para su autorización e impresión.

"ID Y ENSEÑAD A TODOS"


Ing. Víctor Manuel Monzón Valdez
COORDINADOR DE TERNA
Tribunal de Revisión
Trabajo de Graduación



C.c.: archivo



Ref.EIQ.TG.007.2017

El Director de la Escuela de Ingeniería Química de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer el dictamen del Asesor y de los Miembros del Tribunal nombrado por la Escuela de Ingeniería Química para revisar el Informe del Trabajo de Graduación de la estudiante, **VANIA MARÍA LÓPEZ DE LOS RÍOS** titulado: **"SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DEL ETILENGLICOL EN ESTADO ESTACIONARIO UTILIZANDO EL PROGRAMA ASPEN HYSYS VERSIÓN 8.0"**. Procede a la autorización del mismo, ya que reúne el rigor, la secuencia, la pertinencia y la coherencia metodológica requerida.

"Id y Enseñad a Todos"

Ing. Carlos Salvador Wong Davi
Director
Escuela de Ingeniería Química



Guatemala, febrero 2017

Cc: Archivo
CSWD/ale

Universidad de San Carlos
de Guatemala

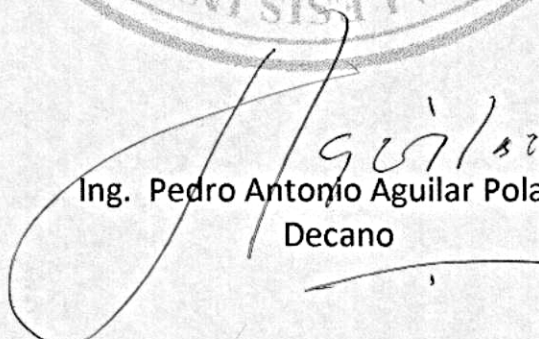


Facultad de Ingeniería
Decanato

DTG. 108.2017

El Decano de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer la aprobación por parte del Director de la Escuela de Ingeniería Química, al Trabajo de Graduación titulado: **SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DEL ETILENGLICOL EN ESTADO ESTACIONARIO UTILIZANDO EL PROGRAMA ASPEN HYSYS VERSIÓN 8.0**, presentado por la estudiante universitaria: **Vania María López de los Ríos**, y después de haber culminado las revisiones previas bajo la responsabilidad de las instancias correspondientes, autoriza la impresión del mismo.

IMPRÍMASE:


Ing. Pedro Antonio Aguilar Polanco
Decano



Guatemala, febrero de 2017

/gdech.

ACTO QUE DEDICO A:

Dios	Por guiarme en mi camino y darme la oportunidad de realizar otro sueño en mi vida.
Mis padres	Roberto Haroldo López y Vania de los Ríos, por el constante apoyo y comprensión que me brindaron durante el transcurso de mi carrera universitaria.
Mis hermanos	Haroldo José y Paola Sucel, con quienes a lo largo de la vida, he compartido conocimientos, apoyo y cariño.
Mis abuelos	César de los Ríos, Clara de de los Ríos, Haroldo López (q. e. p. d.) y Alma vda. de López, por su apoyo, cariño, sabio consejo e interés por mi futuro.
Mi novio	Javier Estuardo Tello, por su amor y apoyo incondicional en cada momento.
Mis padrinos	Juan Carlos Quevedo (q. e. p. d.) y Brenda López, por su apoyo incondicional y su ejemplo de vida personal y profesional.

Tíos y primos

Personas incondicionales con las que siempre he contado, con mucho cariño.

AGRADECIMIENTOS A:

Dios	Porque siempre está a mi lado, es quien me fortalece y me da la sabiduría para alcanzar mis metas.
Universidad de San Carlos de Guatemala	Casa de estudios que me brindó la oportunidad de concretar mis estudios profesionales.
Facultad de ingeniería y Escuela de Ingeniería Química	A todos los catedráticos que por medio de sus conocimientos y experiencias, contribuyeron a mi formación para desempeñarme profesional y éticamente ante las demandas de mi país.
Ing. Williams Guillermo Álvarez	Por asesorarme durante todo el proceso que ha conllevado la realización del presente trabajo, compartir sus conocimientos y motivarme a seguir adelante.
Javier Tello Flores	Por haberme apoyado con sus conocimientos de ingeniería para el desarrollo del presente trabajo.
Mis amigos de la Escuela de Ingeniería Química	A todos mis compañeros con quienes compartí momentos de alegrías, angustias, desvelos y enfados.

ÍNDICE GENERAL

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES.....	VII
LISTA DE SÍMBOLOS	XV
GLOSARIO	XIX
RESUMEN.....	XXVII
OBJETIVOS.....	XXIX
INTRODUCCIÓN.....	XXXI
1. ANTECEDENTES	1
2. MARCO TEÓRICO.....	5
2.1. Diseño de procesos	5
2.1.1. Diseño global de procesos químicos	7
2.1.1.1. Diagrama de cebolla.....	8
2.2. Procesos químicos	9
2.2.1. Diagrama de flujo.....	10
2.2.2. Ecuación general de balance.....	11
2.2.3. Procesos en estado estacionario.....	12
2.3. Materia prima y productos obtenidos del proceso	12
2.3.1. Materia prima.....	12
2.3.1.1. Óxido de etileno.....	12
2.3.1.2. Agua	14
2.3.2. Productos obtenidos	16
2.3.2.1. Etilenglicol.....	16
2.3.2.2. Subproducto obtenido: dietilenglicol	17
2.4. Reacciones involucradas en el proceso	19

2.4.1.	Reacción para la obtención de etilenglicol	19
2.4.2.	Reacción para la obtención de dietilenglicol.....	19
2.5.	Operaciones unitarias utilizadas en el proceso de producción del etilenglicol	20
2.5.1.	Reactor de flujo tapón (PFR).....	20
2.5.1.1.	Velocidades de reacción en las reacciones para la formación de etilenglicol y dietilenglicol	22
2.5.2.	Columna de destilación	24
2.6.	Simulación de procesos	28
2.6.1.	Ventajas y desventajas de la simulación de procesos.....	29
2.6.2.	Herramientas de software para la simulación de procesos.....	30
2.6.3.	Selección de los modelos termodinámicos.....	31
2.6.3.1.	Ecuaciones de estado	32
2.6.3.2.	Coeficientes de actividad.....	36
2.7.	Interactuando con el simulador ASPEN HYSYS	38
2.7.1.	Introducción al entorno del software.....	41
2.7.1.1.	Partes principales de la ventana de inicio	41
2.7.1.2.	Selección de los componentes químicos	47
2.7.1.3.	Selección del paquete de fluidos.....	53
2.7.1.4.	Reacciones químicas involucradas	61
2.7.1.5.	Guardar el trabajo	68
2.7.1.6.	Entorno de simulación.....	69
2.7.1.7.	Ingreso de corrientes en el entorno de simulación	72

2.7.1.8.	Incorporar operaciones unitarias en el entorno de la simulación	79
2.7.1.8.1.	Agregar un mezclador con la función <i>Mixer</i>	79
2.7.1.8.2.	Agregar la operación de un reactor PFR	82
2.7.1.8.3.	Agregar una columna de destilación.....	88
2.7.1.8.4.	Agregar una válvula con la opción <i>Control Valve</i>	93
2.7.1.9.	Operaciones lógicas en Aspen HYSYS	97
2.7.1.9.1.	Operación lógica: SET..	98
3.	SIMULACIÓN DEL PROCESO DE ETILENGLICOL.....	103
3.1.	Descripción del proceso	103
3.2.	Recolección de datos	104
3.2.1.	Condiciones iniciales	104
3.2.2.	Reactor PFR	105
3.2.3.	Cinética de reacción	105
3.2.4.	Columna de destilación	106
3.3.	Simulación del proceso en el software	106
3.3.1.	Iniciando un nuevo caso de simulación en el software	106
3.3.2.	Ingreso de los compuestos involucrados.....	107
3.3.3.	Paquete de fluidos	109

3.3.3.1.	Utilización del asistente para determinar el tipo de paquete de fluidos.....	109
3.3.3.2.	Selección del paquete de fluidos.....	113
3.3.4.	Reacciones químicas	116
3.3.5.	Construcción del proceso en el entorno de simulación	127
3.3.5.1.	Ingreso del mezclador en la simulación	131
3.3.5.2.	Ingreso del reactor PFR al simulador .	133
3.3.5.3.	Ingreso de válvula reductora de presión.....	137
3.3.5.4.	Ingreso de la columna de destilación .	140
3.3.6.	Agregar la operación lógica SET	152
3.3.7.	Opción Case Studies.....	156
3.3.7.1.	Gráfica entre etilenglicol y dietilenglicol en función de los reactivos ingresados al reactor utilizando la función <i>Case Studies</i>	160
3.3.7.2.	Gráfica entre etilenglicol y dietilenglicol en función de la temperatura del reactor utilizando la función <i>Case Studies</i>	162
4.	DISEÑO METODOLÓGICO.....	165
4.1.	Delimitación del campo de estudio.....	165
4.2.	Recursos humanos disponibles	165
4.3.	Recursos materiales disponibles.....	165
4.4.	Técnica cualitativa o cuantitativa.....	166

4.5.	Recolección y ordenamiento de la información	167
5.	RESULTADOS	169
6.	INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS.....	173
6.1.	Utilización y explicación del uso del programa aspen para ingeniería química	173
6.2.	Análisis de los resultados obtenidos en la simulación del proceso.....	174
	CONCLUSIONES	177
	RECOMENDACIONES	179
	BIBLIOGRAFÍA	181
	APÉNDICE.....	185
	ANEXOS.....	187

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

FIGURAS

1.	Descripción de las etapas de síntesis para el diseño.....	6
2.	Diagrama del diseño de un proceso.....	7
3.	Representación del diagrama de cebolla	8
4.	Representación de un diagrama de flujo para el proceso de combustión-condensación.....	10
5.	Estructura molecular del óxido de etileno.....	13
6.	Estructura del agua	15
7.	Estructura molecular del etilenglicol	17
8.	Estructura molecular del dietilenglicol	18
9.	Reactor de flujo tapón	20
10.	Columna de destilación de fraccionamiento continuo	25
11.	Ventana de inicio del software	42
12.	Visualización de la pestaña <i>Start Page</i> en la ventana de inicio	43
13.	Primer cuadro de la pestaña <i>Start Page</i>	44
14.	Cuadro Recent Case de la pestaña <i>Start Page</i>	44
15.	Cuadro Get Started de la pestaña <i>Start Page</i>	45
16.	Cuadro de actualizaciones y novedades del software.....	45
17.	Selección de la opción <i>New</i>	46
18.	Panel de navegación.....	46
19.	Botones de entorno	47
20.	Pestaña de <i>Component Lists</i>	48
21.	Selección de la opción <i>Add</i> de la pestaña <i>Component Lists</i>	48
22.	Pestaña para la selección de los componentes químicos	49

23.	Filtro de búsqueda de componentes químicos	49
24.	Utilización del filtro de búsqueda para el alcohol etílico.....	50
25.	Listado de búsqueda para el alcohol etílico	50
26.	Agregar el compuesto etanol al cuadro izquierdo de la pestaña	51
27.	Compuesto agregado en el lado izquierdo de la pestaña	51
28.	Recuadro de <i>Status</i> de color rojo.....	52
29.	Recuadro de <i>Status</i> de color verde.....	52
30.	Comparación del icono de la pestaña <i>Component Lists</i> al realizar los requerimientos mínimos para la simulación	53
31.	Selección de la opción <i>Fluid Packages</i>	54
32.	Pestaña de la opción <i>Fluid Packages</i>	54
33.	Cuadro para la selección del paquete de fluidos	55
34.	Selección de la opción <i>Methods Assistant</i>	56
35.	Cuadro de diálogo de <i>Assistant Property Package Selection</i>	57
36.	Opción por componente o por proceso para empezar el asistente.....	58
37.	Ejemplo del resultado del asistente para determinar los modelos termodinámicos para un sistema químico a alta presión	58
38.	Pestaña de <i>Binary Coeffs</i>	59
39.	Cálculo de los coeficientes binarios faltantes con la forma matricial A_{ij}	60
40.	Comparación del icono de la pestaña <i>Fluid Packages</i> al realizar los requerimientos mínimos para la simulación	61
41.	Selección de la opción <i>Reactions</i>	62
42.	Pestaña de la opción <i>Reactions</i>	62
43.	Cuadro de la opción Add de la pestaña de <i>Reactions</i>	63
44.	Cuadro de diálogo del botón Add to FP	64
45.	Cuadro de diálogo para escoger el tipo de reacción.....	65
46.	Selección de la carpeta Rxn-1 de la pestaña <i>Reactions</i>	66
47.	Cuadro de Rxn-1 de la pestaña <i>Reactions</i>	67

48.	Pestaña <i>Reactions</i> con sus subdivisiones en el panel de navegación.....	67
49.	Opción <i>Save</i> para guardar el archivo	68
50.	Ventana para guardar el archivo con extensión “.hcs”	69
51.	Ingreso al entorno de simulación	70
52.	Visualización de la pantalla de simulación	70
53.	Paleta de objetos	71
54.	Selección del icono de corriente	72
55.	Vista de la corriente en la pantalla de la simulación.....	73
56.	Ventana de propiedades de la corriente.....	74
57.	Ventana para el ingreso de composición de la corriente.....	75
58.	Ventana para la elección de la base de composición de la corriente ...	76
59.	Escogiendo el ícono de <i>Workbook</i> desde la opción <i>Home</i>	77
60.	Pestaña de Material <i>Streams</i> en la opción <i>Workbook</i>	78
61.	Pestaña de <i>Compositions</i> en la opción <i>Workbook</i>	79
62.	Selección de la opción <i>Mixer</i> en la paleta de objetos.....	80
63.	Ventana de la opción <i>Mixer</i>	82
64.	Selección de la opción <i>Plug Flow Reactor</i> en la paleta de objetos	83
65.	Ventana de la opción PFR	84
66.	Ventana de la opción <i>Rating</i> del reactor PFR	85
67.	Pestaña <i>Reactions</i> de la ventana del reactor PFR.....	86
68.	Pestaña <i>Worksheet</i> de la ventana del reactor PFR	87
69.	Selección de la opción <i>Distillation Column Sub-Flowsheet</i> en la paleta de objetos	88
70.	Página uno de la opción <i>Distillation Column</i>	89
71.	Página dos de la opción <i>Distillation Column</i>	90
72.	Página tres de la opción <i>Distillation Column</i>	91
73.	Página cuatro de la opción <i>Distillation Column</i>	92
74.	Página cinco de la opción <i>Distillation Column</i>	93

75.	Selección de la opción <i>Control Valve</i> en la paleta de objetos.....	94
76.	Ventana de la opción <i>Control Valve</i>	95
77.	Recuadro de la opción <i>Parameters</i> de <i>Control Valve</i>	96
78.	Pestaña de <i>Worksheet</i> de la opción <i>Control Valve</i>	96
79.	Operaciones lógicas en la paleta de objetos	97
80.	Selección de la función SET en la paleta de objetos	98
81.	Modificación de la pestaña <i>Connections</i> de la función SET	99
82.	Selección de la variable en la función <i>Select Var</i>	100
83.	Pestaña <i>Parameters</i> de la función SET	101
84.	Diagrama de flujo del proceso de producción del etilenglicol	103
85.	Selección de la opción <i>New</i>	107
86.	Selección del botón Add de la carpeta <i>Component Lists</i>	108
87.	Selección de los componentes de la carpeta <i>Component Lists</i>	108
88.	Selección de la opción <i>Specify Component Type</i>	109
89.	Selección de la opción <i>Chemical System</i>	110
90.	Selección de la opción “No” para presiones altas	111
91.	Selección de la opción <i>Two Liquid Phases</i>	112
92.	Resultados para escoger el paquete de fluido	113
93.	Selección del botón Add	114
94.	Selección del paquete termodinámico NRTL	115
95.	Pestaña de coeficientes binarios	116
96.	Coeficientes binarios calculados por el software	116
97.	Selección de la opción Add to FP	117
98.	Selección del paquete PP:NRTL-Ideal.....	117
99.	Selección del botón <i>Add Reaction</i>	118
100.	Selección de la opción “Hysys” y “Kinetic”	119
101.	Selección de la primera reacción de la carpeta <i>Reactions</i>	120
102.	Ventana de la primera reacción involucrada en el proceso	121

103.	Configuración de la subventana <i>Stoichiometry and Rate Info</i> para la primera reacción	122
104.	Configuración de la opción <i>Forward Reaction</i> de la primera reacción.....	123
105.	Selección de la segunda reacción de la carpeta <i>Reactions</i>	124
106.	Configuración de la subventana <i>Stoichiometry and Rate Info</i> para la segunda reacción	125
107.	Configuración de la opción <i>Forward Reaction</i> de la segunda reacción.....	126
108.	Configuración de la carpeta <i>Reactions</i>	127
109.	Selección del entorno de simulación	127
110.	Configuración de la corriente inicial de agua.....	128
111.	Ingreso de la fracción molar de la corriente de agua	129
112.	Configuración de la corriente inicial de óxido de etileno.....	130
113.	Ingreso de la fracción molar de la corriente de agua	130
114.	Visualización de la pantalla de simulación con las corrientes de entrada	131
115.	Configuración del mezclador	132
116.	Visualización de la pantalla de simulación con el mezclador	133
117.	Configuración del reactor PFR de la opción <i>Connections</i>	134
118.	Configuración de la opción <i>Parameters</i> del reactor PFR	135
119.	Selección del set de reacciones en la pestaña <i>Reactions</i>	136
120.	Ingreso de la temperatura en la pestaña de <i>Worksheet</i> del reactor PFR	137
121.	Configuración de la válvula reductora de presión	138
122.	Ingreso del cambio de presión en la opción <i>Parameters</i>	139
123.	Construcción del proceso de simulación del etilenglicol.....	140
124.	Configuración de la primera ventana de la columna de destilación ...	141
125.	Configuración de la segunda ventana de la columna de destilación ..	142

126.	Configuración de la tercera ventana de la columna de destilación	143
127.	Configuración de la cuarta ventana de la columna de destilación	144
128.	Configuración de la quinta ventana de la columna de destilación	145
129.	Opción Monitor de la pestaña <i>Design</i>	146
130.	Ventana Add Specs	147
131.	Ventana de la opción <i>Column Temperature</i>	147
132.	Opción monitor de la columna de destilación	148
133.	Opción <i>Summary</i> de la pestaña <i>Performance</i>	149
134.	Construcción de la simulación del proceso de etilenglicol	150
135.	Selección de la opción <i>Show Table</i>	151
136.	Tabla de flujos de materia	152
137.	Pestaña <i>Connections</i> de la opción Set	153
138.	Modificación del botón <i>Select Var.</i>	154
139.	Modificación de la pestaña <i>Parameters</i> de la opción “Set”	155
140.	Simulación del proceso de etilenglicol	155
141.	Selección de la opción <i>Case Studies</i>	156
142.	Selección del botón Add de la pestaña <i>Case Studies</i>	157
143.	Pestaña Set up de la opción Case Studies	157
144.	Ventana de Variable Navigator	158
145.	Lista de variables en la pestaña <i>Set up</i> de la opción <i>Case Studies</i>	159
146.	Pestaña <i>Case Study</i>	160
147.	Modificación de la pestaña <i>Set up</i> para el primer caso	161
148.	Gráfica en la pestaña <i>Plots</i> de la opción <i>Case Studies</i>	162
149.	Modificación de la pestaña <i>Set up</i> para el segundo caso	163
150.	Gráfica en la pestaña <i>Plots</i> de la opción <i>Case Studies</i>	164
151.	Secuencia de operaciones para el diseño del modulador	167
152.	Composición del etilenglicol y dietilenglicol en función de la relación de composición de reactivos ingresados en el reactor PFR	169

153.	Composición del etilenglicol y dietilenglicol en función de la temperatura del reactor PFR.....	170
------	---	-----

TABLAS

I.	Propiedades físicas y químicas del óxido de etileno	13
II.	Propiedades físicas del agua	15
III.	Propiedades físicas y químicas del etilenglicol	16
IV.	Propiedades físicas y químicas del dietilenglicol.....	18
V.	Modelos de propiedades termodinámicas.....	32
VI.	Descripción de los modelos de ecuaciones de estado.....	34
VII.	Ecuaciones de estado con mayor utilidad	35
VIII.	Descripción de los modelos de coeficiente de actividad	37
IX.	Ecuaciones empíricas para la estimación de coeficientes de actividad para mezclas líquidas binarias	38
X.	Descripción general de las operaciones unitarias del software.....	40
XI.	Paquetes de modelos para cálculos térmicos y de transporte disponibles en el software	56
XII.	Condiciones iniciales de las corrientes de entrada al proceso	104
XIII.	Constantes de velocidad con la función de Arrhenius.....	105
XIV.	Especificaciones para el funcionamiento de la columna de destilación	106
XV.	Ecuación y coeficiente de correlación de la figura 153.....	170
XVI.	Ecuación y coeficiente de correlación de la figura 154.....	171
XVII.	Balance de materia del proceso con relación de flujos de entrada al 20 % en óxido de etileno respecto del agua.....	171
XVIII.	Balance de materia del proceso con relación de flujos de entrada al 50 % en óxido de etileno respecto del agua.....	171

XIX.	Balance de materia del proceso con relación de flujos de entrada al 70 % en óxido de etileno respecto del agua	172
XX.	Balance de materia del proceso con relación de flujos de entrada al 90 % en óxido de etileno respecto del agua	172
XXI.	Etilenglicol y dietilenglicol obtenido al final del proceso en base al porcentaje de óxido de etileno en 1000kg/h de agua.....	172

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolo	Significado
H ₂ O	Agua en el software
R ²	Coeficiente de correlación
I	Compuesto intermediario
C _A	Concentración de la especie A
C _B	Concentración de la especie B
[H ₂ O]	Concentración molar de agua
[DEG]	Concentración molar de dietilenglicol
[EG], [C ₂ H ₆ O ₂]	Concentración molar de etilenglicol
[ROH]	Concentración molar de hidroxilos
[EO]	Concentración molar de óxido de etileno
[P5EG]	Concentración molar de pentaetilenglicol
[T4EG]	Concentración molar de tetraetilenglicol
[TEG]	Concentración molar de trietilenglicol
K	Constante de equilibrio químico
K	Constante de velocidad
K _A	Constante de velocidad de la especie A
R	Constante universal de gases
DEG	Dietilenglicol
DEGlycol	Dietilenglicol en el software
dF _j	Diferencial del flujo de salida
DV	Diferencial del volumen
NRTL	Dos líquidos no aleatorios (<i>Non Random two liquid</i>)
EGlycol	Etilenglicol en el software

E	Energía de activación
LLE	Equilibrio líquido
VLE	Equilibrio líquido vapor
EG	Etilenglicol
.hcs	Extensión del archivo
A	Factor preexponencial para la ecuación de Arrhenius
F	Flujo de alimentación
D	Flujo de destilado
F_{j0}	Flujo de entrada
B	Flujo de residuos
F_j	Flujo de salida
Y	Fracción de composición de la fase de vapor
y_{m+1}	Fracción de composición de la fase de vapor de agotamiento
y_{n+1}	Fracción de composición de la fase de vapor de rectificación
X	Fracción de composición de la fase líquida
x_m	Fracción de composición de la fase líquida de agotamiento
x_n	Fracción de composición de la fase líquida de rectificación
x_f	Fracción de composición de la fase líquida del flujo de alimentación
x_D	Fracción de composición de la fase líquida del flujo de destilado
x_B	Fracción de composición de la fase líquida del flujo de residuo
x_F	Fracción molar de alimentación
x_D	Fracción molar de destilado

x_B	Fracción molar de residuo
x_{H_2O}	Fracción molar del compuesto agua.
x_{EG}	Fracción molar del compuesto etilenglicol
x_{OE}	Fracción molar del compuesto óxido de etileno
x_{DEG}	Fracción molar del dietilenglicol
y_{EG}	Fracción molar del etilenglicol
L_m	Línea de operación de agotamiento
L_n	Línea de operación de rectificación
α	Orden de reacción de la especie A
β	Orden de reacción de la especie B
N	Orden de reacción total
C2Oxide	Óxido de etileno en el software
FP	Paquete de fluidos
P	Presión
Q	q-line
Rxn-2	Reacción tipo cinético número dos
Rxn-1	Reacción tipo cinético número uno
PFR	Reactor de flujo pistón
CSTR	Reactor de tanque agitado continuo
T	Temperatura
x_{set}	Valor entre la relación de composiciones de los reactivos
r_j	Velocidad de reacción
R_{DEG}	Velocidad de reacción para el dietilenglicol
R_{EG}	Velocidad de reacción para el etilenglicol
V	Volumen

GLOSARIO

Calor latente de vaporización	Es la energía necesaria por unidad de masa para cambiar de la fase líquida a la fase vapor sin cambios en la temperatura.
Cinética de reacción	Es el estudio de los mecanismos y las velocidades de reacción debido a una o varias reacciones químicas involucradas.
Componente	Es una sustancia formada por la unión de dos o más elementos que pertenecen a la tabla periódica.
Concentración molar	Es la relación entre la cantidad de soluto medido en moles, y la cantidad de disolvente, medido en litros, de una solución.
Condensación	Es un estado de agregación, en donde existe un cambio físico de la fase vapor a la fase líquida de un componente.
Energía de activación	Es la energía mínima necesaria para la iniciación de la reacción química; debido a que debe vencer las fuerzas de repulsión, vibración, traslación, entre otros, que existe entre las moléculas al reaccionar.

Energía libre de Gibbs	Es una función de estado extensiva, en el que indica la condición de equilibrio y de espontaneidad en una reacción química manteniendo la temperatura y presión constantes.
Entalpía	Es una propiedad extensiva en el que su variación indica la cantidad de energía absorbida o cedida en un sistema termodinámico.
Entropía	Es una magnitud física que mide el grado de desorden dentro de un proceso permitiendo la distinción de la energía útil para luego convertirse en trabajo, mientras la energía no utilizable se pierde en el ambiente.
Equilibrio químico	Es el estado de un sistema en el que no hay cambio neto de actividad química o de concentración en una reacción entre los reactivos y productos al transcurrir el tiempo
Evaporación <i>flash</i>	Es una condición en la que un líquido saturado se cambia a fase vapor rápidamente, debido a una disminución en la presión.
Factor preexponencial	Es un índice utilizado en la ecuación de Arrhenius en donde relaciona la frecuencia de colisiones entre las moléculas de reactivos, llamado también factor de frecuencia.

Fluido	Es un conjunto de partículas que se mantienen unidas por medio de fuerzas cohesivas débiles y las paredes de un recipiente. El término se utiliza en líquidos y gases.
Flujo másico	Es una magnitud en la que expresa la variación de masa respecto del tiempo a través de un área específica.
Fracción molar	Es una medida adimensional utilizada para la expresión de concentración de un soluto en una disolución. Se define como el cociente entre moles de soluto y el total de moles de la disolución.
Fuerza intermolecular	Es el conjunto de fuerzas entre moléculas debido a la polaridad que poseen.
Glicol	Es un tipo de compuesto químico que se caracteriza por su estructura molecular con dos grupos hidroxilos.
Hidroxilos	Es un grupo funcional en que su estructura molecular está formada por un átomo de hidrógeno y otro de oxígeno, en el que caracteriza a los alcoholes, fenoles y ácidos carboxílicos.
Intercambiador de calor	Es un dispositivo utilizado para la transferencia de calor entre dos fluidos o entre la superficie de un sólido y un fluido en movimiento.

Intermediario	Es una referencia a una especie química, por lo regular de baja estabilidad que aparece y desaparece en un mecanismo de reacción. No es parte de la reacción global ni de la ecuación de velocidad. Es llamada también intermedio de reacción o especie intermedia
Líquido saturado	Es una sustancia líquida que por sus condiciones de temperatura y presión se encuentra a punto de cambiar a fase vapor
Líquido subenfriado	Es una sustancia que se encuentra en fase líquida, que para su cambio de fase a vapor le falta la adición de calor o cambio en las condiciones de temperatura.
Operación lógica	Es un método de evaluación de estados lógicos y define los parámetros de una búsqueda en una base de datos, en donde una expresión con un operador lógico es verdadera si cualquiera de las variables de la expresión son verdaderas y es falsa si todas las variables son falsas.
Operación unitaria	Es cada una de las acciones para cambiar las condiciones de una determinada cantidad de materia por medio de la modificación de masa o composición, modificación de la cantidad de energía que posee o modificación de su condición de movimiento.

Polaridad	Es una propiedad física de las moléculas en donde hay una acumulación de carga eléctrica en su estructura, en donde existe la tendencia de atracción y repulsión entre ellas.
Presión	Es una magnitud física que se define como fuerza por unidad de área.
Proceso	Es un conjunto de actividades mutuamente relacionadas que al interactuar crean una secuencia de pasos enfocados en lograr algún resultado específico.
Proceso isotérmico	Es un proceso en donde la temperatura se mantiene constante, por lo que el calor cedido es igual al trabajo realizado por el sistema hacia los alrededores.
Propiedad termodinámica	Es cualquier característica observable y medible de un sistema, en el que pueden medirse directamente. Pueden ser extensivas o intensivas, ser una combinación de dos o más propiedades o también ser el producto de una de las leyes de la termodinámica.
Punto crítico	Es el límite en donde las densidades de líquido y vapor son iguales. Por encima de las condiciones de temperatura y presión crítica no es condensable un gas.

Punto de ebullición	Es la temperatura en donde la presión de vapor del líquido es igual a la presión de vapor en el sistema que se encuentran.
Reacción química	Es un cambio o fenómeno químico en donde una o más sustancias llamadas reactivos se transforman, cambiando su estructura molecular en otras sustancias llamadas productos.
Simulación	Es la representación de un proceso o fenómeno mediante otro más simple, permitiendo analizar sus características.
Simulador	Es una aplicación informática que simula el comportamiento y propiedades reales de un producto o sistema y de los elementos que interactúan con él.
Sistema dinámico	Es un sistema cuyas variables de proceso cambian respecto del tiempo debido a la acumulación de energía o de materia en el proceso.
Sistema estacionario	Es un sistema en donde las variables involucradas en el proceso no cambian conforme transcurre el tiempo.

Software	Es un conjunto de programas, instrucciones y reglas informáticas que forma parte de las operaciones de un sistema de cómputo.
Temperatura	Es una magnitud física que mide el nivel térmico de un cuerpo.
Vapor saturado	Es el vapor que se encuentra en equilibrio con su líquido.
Vapor sobrecalentado	Es un vapor que se encuentra por encima de su temperatura crítica pero debajo de la presión crítica.
Volatilidad	Es una medida sobre la facilidad de una sustancia en cambia de fase líquida a vapor.

RESUMEN

El presente trabajo de graduación desarrolla la utilización de la herramienta tecnológica Aspen HYSYS para el entendimiento de su funcionamiento a través del modelado y simulación del proceso de obtención del etilenglicol a partir de la hidratación de los reactantes en estado estacionario. Este consiste en el ingreso de las corrientes de agua y de óxido de etileno en un mezclador, luego entran a un reactor PFR a condición isotérmica, donde finalmente los productos generados entran a la torre de destilación, ingresando a una presión menor con la ayuda de una válvula, separando el componente volátil, en este caso el agua, para obtener el etilenglicol en la corriente inferior de la torre con dietilenglicol como subproducto.

Para la modelación del proceso se realiza primero la recolección de datos necesarios para el funcionamiento de cada equipo, posteriormente, con la ayuda de un computador se modela el proceso y se obtienen los resultados por medio de gráficas y tabla de datos con las funciones del software. Para el entendimiento del lector se presenta una guía de cómo utilizar las herramientas del software para la simulación del proceso y mostrar las ventajas potenciales que tiene la implementación este tipo de herramientas de simulación en los cursos de ingeniería química, para que los estudiantes conozcan y comprendan la importancia de saber utilizar este tipo de tecnologías, debido a que no existe ningún tipo de antecedente investigativo sobre el tema en la escuela.

OBJETIVOS

General

Simular el proceso de producción del etilenglicol a partir de la hidratación del óxido de etileno y agua en estado estacionario para la enseñanza básica del funcionamiento del programa de simulación Aspen HYSYS V8.0

Específicos

1. Establecer datos y cálculos necesarios para cada operación del proceso en estado estacionario para el funcionamiento del programa.
2. Modelar el proceso en el programa Aspen HYSYS V8.0. para explicar el funcionamiento del mismo.
3. Representar gráficamente la obtención del etilenglicol en relación de dietilenglicol generado en el reactor PFR en función de la relación entre los flujos de los reactivos ingresados.
4. Representar gráficamente la obtención del etilenglicol en relación del dietilenglicol generado en función de la temperatura en el reactor PFR.
5. Establecer los balances de masa de cada etapa del proceso.
6. Determinar la cantidad de etilenglicol generado al final del proceso establecido.

INTRODUCCIÓN

La ingeniería química tiene su razón de ser en la transformación de las materias primas en productos con mayor utilidad, en la que combina diferentes ciencias como la matemática y la creación de procesos y sistemas, en la que por medio de la tecnología se ha ido modificando y mejorando la resolución de los cálculos. Debido a la demanda que existe en el manejo de herramientas tecnológicas, se hace necesario que los estudiantes adquieran el conocimiento de esta tecnología para aprovechar estas herramientas en el área profesional. Al estudiar un proceso, no se logra comprender totalmente el comportamiento del mismo, es aquí en donde se hace necesario utilizar un programa de simulación.

Al realizar los diseños de los procesos, se lleva a cabo la modelación y simulación de estos, por lo que una forma de hacerlos es por medio del software Aspen HYSYS, el cual es una herramienta de gran utilidad debido a que permite la evaluación de resultados, viabilidad, posibles mejoras y optimizaciones de un proceso determinado, sin tener que arriesgar una cantidad considerable de recursos y tiempo; lo que supone una gran ventaja para las empresas interesadas.

Este trabajo consiste en el entendimiento de este software, por medio de la realización la simulación del proceso del etilenglicol, mediante la reacción de hidratación de óxido de etileno y agua. Este programa trabaja por medio de dos estados, estacionario y no estacionario. Se utiliza en este trabajo el primero de los mencionados, indicando cómo es el ingreso de las variables, con explicación de las diferentes ventanas que surgen en el programa y la comprensión de los

resultados que genera. De esta forma, se aporta conocimiento a los estudiantes al momento de la búsqueda de información del programa.

1. ANTECEDENTES

En la Escuela de Ingeniería Química no existe ningún antecedente investigativo sobre la utilización de algún programa comercial especializado en simulaciones de procesos; pero sí se encuentra información sobre simulaciones diseñadas a partir de la ayuda del lenguaje de programación Visual Basic.

En antecedentes de investigación internacionales se encuentra la utilización del programa Aspen HYSYS en sus diferentes versiones para la simulación específica de un proceso.

- En 2008, en la Universidad de Sucre, Bolivia, el estudiante Darío Miguel Martínez Amell presenta el proyecto de graduación para optar el título de ingeniero químico denominado *Simulación y diseño de una planta productora de bioetanol a partir de mango hilaza* (*Mangifera indica* L) en el Departamento de Sucre” el cual tiene como objetivo principal la simulación y diseño de la planta productora de bioetanol. Por medio de procedimiento experimental se determina el rendimiento de alcohol etílico a partir de dos diluciones de pulpa de mango con una posterior fermentación bajo la acción de la levadura. En la simulación del proceso a gran escala en la etapa de destilación se emplea el programa HYPROTECH HYSYS V3.1 en estado estacionario, con el modelo propuesto de la planta se determina la cantidad de materia prima necesaria para la obtención de bioetanol requerido con estimado del costo unitario y tasa interna de retorno (TIR).

- En 2010, en la Universidad Nacional de San Agustín de Arequipa de Perú, para la obtención del título de ingeniero químico, se presenta un proyecto titulado *Simulación estacionaria y dinámica de un proceso de producción de dietilenglicol mediante el simulador HYSYS 3.2*; en la cual describe la forma de construcción del proceso en donde se explica el interfaz del programa, la forma de ingresar los valores iniciales, la manera de escoger los componentes involucrados entre otros procedimientos, para la resolución de los balances de masa y energía. El diseño de la cinética de reacción en los reactores, el diseño del mezclador y el diseño de la columna de destilación; en donde se realiza la variación del flujo másico del agua suministrada al inicio del proceso, la presión en los reactores y la temperatura en la alimentación del óxido de etileno, observando los diferentes valores de la composición del dietilenglicol para determinar la eficiencia de la producción en condiciones simuladas y la optimización de las corrientes de entrada y salida en modo estático y dinámico.
- En octubre de 2010, en la Universidad de Oriente de Puerto La Cruz, Venezuela, los estudiantes de ingeniería química Amin Abouchacra Reyes y Jorge Luis Noriega Gil presentaron su trabajo de graduación titulado *Estudio técnico-económico de una planta de control de punto de rocío del gas natural propuesta al norte del estado monagas* en donde realizan un estudio técnico y económico de una planta en la que recibe gas natural y que se encuentra asociado con los yacimientos del petróleo crudo. Con la ayuda del simulador Aspen HYSYS V 3.2, establecen un modelo propuesto de deshidratación del gas natural, en la cual se controla el punto de rocío en la extracción de gas natural y se mantiene la reducción del contenido de agua al momento de la entrega a la planta para la obtención de mayor porcentaje de gas seco; explicando el

procedimiento realizado en el simulador en el ingreso de los valores para la obtención de los resultados de manera gráfica y en tablas, con las cuales se realiza una evaluación técnico-económica utilizando dos indicadores, siendo la tasa interna de retorno (TIR) y valor presente neto (VPN).

- En 2011, la Universidad de Oriente de Barcelona, para la obtención del título de ingeniero químico, se realiza un trabajo de graduación titulado *Desarrollo de ingeniería conceptual para la infraestructura de superficie de un campo costa afuera* realizado por las estudiantes Kelly Karina Montaguth y Montieldhi del Carmen Montilla, el cual tiene como alcance el desarrollo de la ingeniería conceptual en la infraestructura de la superficie de un campo costa afuera de un yacimiento de gas natural, en donde se identifican las variables operacionales del proceso. Se presentan dos etapas de operación para la extracción del gas natural, una a 1280 psi y otra a 850 psi, en donde la mezcla de alimentación saturada se trata con agua. Se utiliza el programa Aspen HYSYS V 7.1 para la detección de condensado de líquidos en las tuberías según las condiciones establecidas. También se evalúa dichos procesos tomando las variables más importantes para la selección del mecanismo de enfriamiento, siendo el caudal de gas de salida, el requerimiento energético en todo el proceso y los barriles de líquidos generados al final del proceso.
- En 2013, en la Universidad Central del Ecuador de la Provincia de Quito, el estudiante Wilson Fabricio Vásquez Romero presenta su trabajo de graduación para optar el título de ingeniero químico titulado *Simulación de la unidad de tratamiento de gas combustible con aminas de la refinería estatal esmeraldas*, donde utiliza el programa de simulación

Aspen HYSYS V7.3 en el proceso de absorción con aminas en modo estacionario y no dinámico para la disminución de ácido sulfhídrico (H_2S). Donde se ingresa las composiciones de las corrientes del proceso, y también las especificaciones del diseño de los equipos establecidos explicando paso a paso el manejo de la información en el programa. Los resultados obtenidos por el simulador se comparan con los manuales establecidos del proceso para validar el modelo propuesto.

2. MARCO TEÓRICO

La simulación ha adquirido importancia en la industria a nivel mundial; se requiere que los estudiantes de ingeniería química tengan el conocimiento y la capacidad de utilizar programas de simulación ya que ayudan a recrear un proceso real en un modelo computacional a partir del ingreso de los valores de entrada y especificando las condiciones de cada operación. Esto proporciona un panorama de resultados aproximados que puede ocurrir en las situaciones iniciales establecidas.

2.1. Diseño de procesos

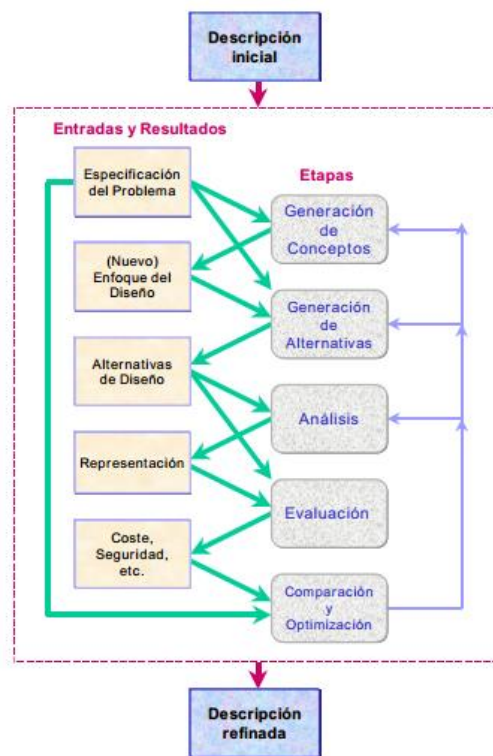
El diseño de procesos no es más que la recreación del diseño abstracto de aquello que se desea. Se realiza por medio de la descripción, construcción y operación de cada etapa del proceso, en las cuales pueden estar involucradas operaciones de separación, enfriamiento, reducción de tamaño, mezcla, calentamiento, entre otros.

Determinado el diseño abstracto, primero se realiza la síntesis de procesos, la cual está definida como “la etapa en donde se crea la estructura básica del diagrama de flujo; esto es, se seleccionan los equipos a ser utilizados, con sus correspondientes interconexiones y se establecen los valores iniciales de las condiciones de operación.”¹ Para lo cual se realiza una serie de etapas, la primera llamada generación del concepto, donde “se

¹ MARTÍNEZ SIFUENTES, Víctor Hugo, y otros. *Simulación de procesos en Ingeniería Química*. p. 96.

identifican las claves principales en que se basará el diseño,”² si se realizará con base a libros, diseños de otros autores, artículos, o bien, es algo nuevo y novedoso. Hecha la generación del concepto, se realiza la siguiente etapa llamada generación de alternativas, que es la búsqueda del sustento teórico del diseño propuesto. Con las dos etapas previas se realiza el análisis de las alternativas que se proponen para, posteriormente, evaluar si es factible en lo económico, ambiental, entre otros. Finalmente, se puede optimizar el diseño.

Figura 1. Descripción de las etapas de síntesis para el diseño

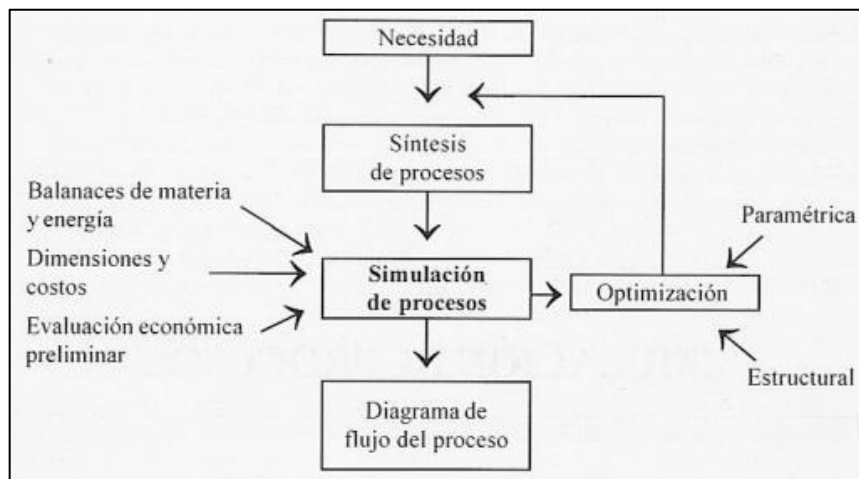


Fuente: LUQUE RODRÍGUEZ, Susana y VEGA GRANDA, Aurelio B. *Simulación y Optimización avanzadas en la Industria Química y de Procesos*. p. 95.

² LUQUE RODRÍGUEZ, Susana y VEGA GRANDA, Aurelio B. *Simulación y Optimización avanzadas en la Industria Química y de Procesos: HYSYS*. 95.

Establecida la síntesis y la simulación del proceso, la última etapa es la optimización, que puede involucrar la modificación de las etapas de síntesis, para realizar una nueva simulación, y así sucesivamente. En la figura 1 se muestra cómo se relacionan las tres etapas para el diseño de procesos. Con base a una necesidad se desarrolla la síntesis del proceso, se conocen los balances de materia y energía, las dimensiones, costo y la evaluación económica; se realiza la simulación del proceso para obtener el diagrama de flujo y se logra la optimización que, posteriormente, se retroalimenta para mejorar el diseño.

Figura 2. **Diagrama del diseño de un proceso**



Fuente: MARTÍNEZ SIFUENTES, Victor Hugo, y otros, *Simulación de Procesos en Ingeniería Química*. p. 122.

2.1.1. **Diseño global de procesos químicos**

Existen diversos diseños para la elaboración de un proceso, a continuación se describe el utilizado frecuentemente en los procesos involucrados con reactores.

2.1.1.1. Diagrama de cebolla

Cuando se realiza el diseño de un proceso, y uno de los equipos por utilizar es un reactor, se diseña con base a este, debido a que posterior a este proceso existen los problemas de separación y de recirculación de los productos generados. También se genera los problemas de energía que necesitan los equipos para realizar dichos procesos, los cuales vienen a partir de los equipos que lo generan. Por lo cual se realiza el diseño con la jerarquía de las capas de cebolla, que inicia desde el centro hacia afuera; a continuación se le representa:

Figura 3. Representación del diagrama de cebolla



Fuente: LUQUE RODRÍGUEZ, Susana y VEGA GRANDA, Aurelio B. *Simulación y Optimización avanzadas en la Industria Química y de Procesos*. p. 101.

Si el proceso no requiere de un reactor, como por ejemplo el refinamiento del petróleo por medio de columnas de destilación, que requiere la separación de los productos generados, basándose en el diagrama de cebolla, la jerarquía se mantiene.

2.2. Procesos químicos

Los procesos químicos transforman la materia prima en productos deseados o en formas de energía superiores; pueden clasificarse en procesos intermitentes, continuos o semicontinuos.

Los procesos intermitentes, también llamados *batch* o por lotes, se dan cuando el flujo que entra a un determinado equipo, permanece en el mismo durante un intervalo de tiempo en el cual no hay transferencia de masa con el exterior, y se retira obteniendo el contenido del equipo. Los procesos continuos no permanecen en el equipo en un intervalo de tiempo, sino que los flujos entran y salen simultáneamente durante el proceso. Los procesos semicontínuos son los que no poseen la característica de un proceso intermitente o contínuo.

Cuando el proceso depende o no del tiempo se clasifica en estado estacionario o no estacionario; siendo el primero independiente del mismo, por lo que las variables dependientes del proceso no cambian, o por lo menos posee fluctuaciones tolerables, conforme pasa el tiempo. El proceso continuo se lleva a cabo, de preferencia, en este estado.

El estado no estacionario, en otros contextos llamado también dinámico, sí depende del tiempo conforme se lleva a cabo el proceso, ya que depende de los cambios en las variables (que son notables) ocurridos en el proceso y en los arranques del mismo. El proceso intermitente y el semicontinuo trabajan en este estado debido a la naturaleza de los mismos.

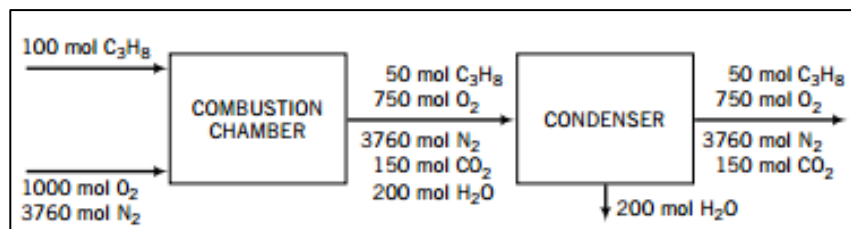
También se clasifica los sistemas con base a la transferencia de masa y energía entre el sistema y los alrededores. Se habla de un sistema abierto

cuando se dan estos dos tipos de transferencia, en cambio cuando solo existe transferencia de energía pero no de masa se dice que es un sistema cerrado. Si no existe ningún tipo de transferencia se le llama sistema aislado.

2.2.1. Diagrama de flujo

Estos procesos se realizan por medio de una serie de operaciones que están interconectadas por corrientes de proceso, representándose por medio de recuadros y otros símbolos donde se figuran las unidades del proceso llamado diagramas de flujos. Estos diagramas ayudan a iniciar los cálculos, los balances de masa y energía; para ello se deben marcar las variables de las corrientes de entrada y salida, tanto las conocidas como las desconocidas, indicando las condiciones en que se trabaja cada operación del proceso (temperatura, presión, entre otros). En la siguiente figura se visualiza la representación de un diagrama de bloques para un proceso de combustión-condensación.

Figura 4. **Representación de un diagrama de flujo para el proceso de combustión-condensación**



Fuente: FELDER, RICHARD M. y ROUSSEAU, RONALD W. *Principios elementales de los procesos químicos*. p. 132.

2.2.2. Ecuación general de balance

Los balances se obtienen del principio de conservación de la materia y de la teoría atómica de la materia ya que: “se deduce que en un sistema abierto en estado estable se conservarán tanto la masa como el número de moléculas, y por lo tanto el número de moles de cada sustancia.”³ Si es un sistema cerrado se establece “en el estado estable sin reacción, cualquiera que sea el proceso que ocurra en el interior del sistema, la masa y las moles totales, así como la masa y moles de cada sustancia y de cada tipo de átomo a la entrada del sistema, serán exactamente iguales a los valores correspondientes a la salida.”³

Con base a que las cantidades de materia que el conservan, se establece la ecuación general de balance, suponiendo que la materia ingresa en el sistema desde los alrededores:

$$\text{Entrada} + \text{generación} - \text{salida} - \text{consumo} = \text{acumulación}$$

[Ec. 1]

Existen dos tipos de balances, los diferenciales y los integrales. Los primeros se utilizan en procesos continuos en donde se relaciona las corrientes con una unidad de tiempo, obteniendo velocidades o flujos, como por ejemplo: moles/h, kg/s, entre otros. El segundo se utiliza en procesos intermitentes y toma dos instantes de tiempo describiendo lo que ocurre con las variables en ese intervalo, se toma valores como unidad, por ejemplo: kg, lb, L, entre otros.

³ REKLAITIS, G. V. y SCHNEIDER, Daniel R. *Balances de materia y energía*. p. 91.

2.2.3. Procesos en estado estacionario

Los procesos en estado estacionario son aquellos en los que las variables dependientes del sistema se mantienen constantes o dentro de un rango de tolerancia aceptable a través del tiempo. Por lo tanto, “si un sistema se encuentra en estado estacionario, establecer que la acumulación es igual a cero, sin importar que se esté balanceando.”⁴ A partir de la ecuación general de balance [Ecuación 1] se obtiene que el balance en estado estacionario es:

$$\textit{Entrada} + \textit{generación} = \textit{salida} + \textit{consumo} \quad [\text{Ec. 2}]$$

2.3. Materia prima y productos obtenidos del proceso

En el proceso de producción de etilenglicol existen entradas de materia prima y salida de productos los cuales se describen a continuación.

2.3.1. Materia prima

Las materias primas utilizados en este proceso son a las siguientes:

2.3.1.1. Óxido de etileno

El óxido de etileno, también llamado epoxietano, es un gas incoloro, inflamable y tóxico que se condensa a baja temperatura. Pertenece a la familia química de los epóxidos. Es miscible en todas las proporciones con agua o alcohol, es muy soluble en éter. Al reaccionar con agua, se descompone lentamente a condiciones estándar convirtiéndose en etilenglicol. Utilizado en

⁴ FELDER, RICHARD M. y ROUSSEAU, RONALD W. *Principios elementales de los procesos químicos*. p. 107.

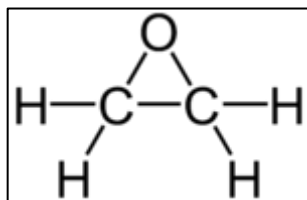
insecticidas, esterilización de equipos abastecimientos médicos y, principalmente, utilizado para fabricar etilenglicol.

Tabla I. **Propiedades físicas y químicas del óxido de etileno**

Fórmula	C_2H_4O
Sinónimo	Epoxietano
Densidad	0,896 g/cm ³
Masa molar	44,05 g/mol
Punto de fusión	161 K
Punto de ebullición	283,5 K
Solubilidad	Miscible en agua y en disolventes orgánicos

Fuente: *Textos científicos*. <http://www.textoscienificos.com/quimica/oxido-etileno>. Consulta: 29 de septiembre de 2015.

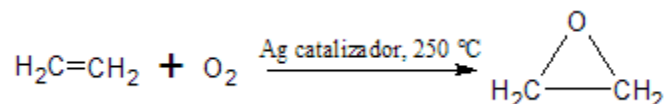
Figura 5. **Estructura molecular del óxido de etileno**



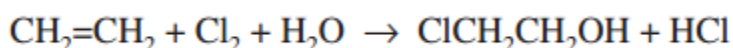
Fuente: *Textos científicos.com*. <http://www.textoscienificos.com/quimica/oxido-etileno>. Consulta: 29 de octubre de 2015.

“El óxido de etileno proviene de la reacción directa de la oxidación del etileno con el oxígeno en presencia de un catalizador de plata”⁵.

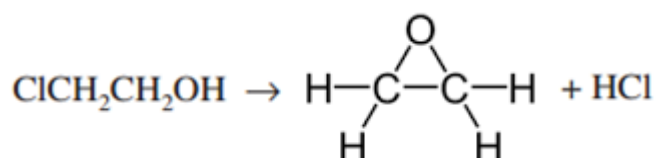
⁵ *Textos científicos.com*. <http://www.textoscienificos.com/quimica/oxido-etileno>. Consulta: 29 de octubre de 2015.



“Antiguamente, se daba con la reacción por medio de la formación de clorhidrina:



Seguido de la deshidrocloración en el epóxido”⁶.



2.3.1.2. Agua

Está conformada por dos átomos de hidrógeno unidos por medio de un enlace covalente al átomo de oxígeno. Por la condición de la polaridad de las moléculas de agua se genera una interacción o enlace llamado puente de hidrógeno. Es un líquido incoloro, inodoro e insípido; se considera el disolvente universal debido a que solubiliza varias sustancias por los puentes de hidrógeno. Conforme aumenta la temperatura, también aumenta la solubilidad de la misma; posee una elevada constante dieléctrica, por lo que es un medio disolvente de compuestos iónicos, sales minerales y compuestos covalentes polares como glúcidos.

⁶ G. SPEIGHT, James. *Chemical and Process Design Handbook*. p. 78.

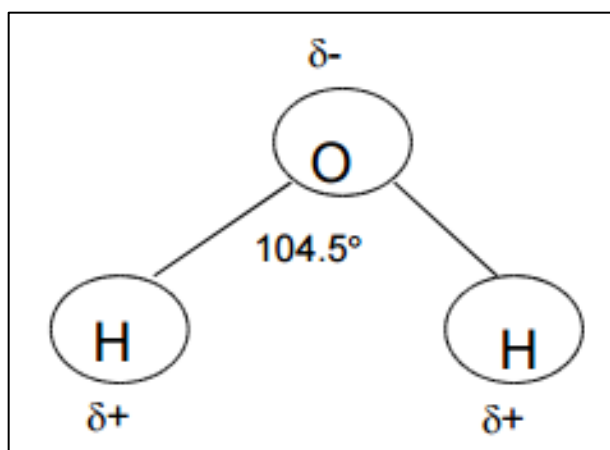
Tabla II. **Propiedades físicas del agua**

Punto de ebullición (1 atm)	100 °C
Punto de fusión	0 °C
Densidad a 4°C	1g/cm ³
Tensión superficial	7,3*10 ⁻² J/m ²
Viscosidad	1*10 ⁻³ kg/m*s
Presión crítica	217,5 atm
Temperatura crítica	374 °C
Conductividad eléctrica	Escasa

Fuente: CONCHA VALENZUELA, Luis. *La Química del agua*.

http://ww2.educarchile.cl/UserFiles/P0001/File/la_quimica_del_agua.pdf. Consulta: 29 de octubre de 2015.

Figura 6. **Estructura del agua**



Fuente: GARCÍA PÉREZ, Águeda. *Estructura e Importancia del agua en el metabolismo celular*.

http://www.fmvz.unam.mx/fmvz/p_estudios/apuntes_bioquimica/Unidad_2.pdf. Consulta: 29 de octubre de 2015.

2.3.2. Productos obtenidos

Los productos obtenidos del proceso se describen a continuación.

2.3.2.1. Etilenglicol

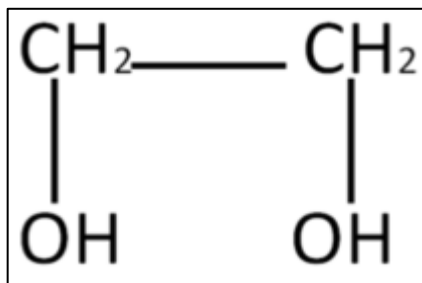
Pertenece al grupo de los dioles, sistemáticamente se denomina 1,2-etanodiol, es también llamado etanodiol, glicol de etileno y glicol. A temperatura ambiente es un líquido transparente, incoloro y levemente inodoro, posee poca volatilidad. Es utilizado para anticongelantes en la refrigeración de circuitos para motores, para la fabricación de poliéster y para disolvente de pinturas y plástico.

Tabla III. **Propiedades físicas y químicas del etilenglicol**

Nombre IUPAC	1,2-etanodiol
Fórmula molecular	$C_2H_6O_2$
Masa atómica	62,068 g/mol
Punto de ebullición	197,6 °C
Densidad	1,1155 g/cm ³
Punto de inflamabilidad	127 °C
Solubilidad	Miscible en agua

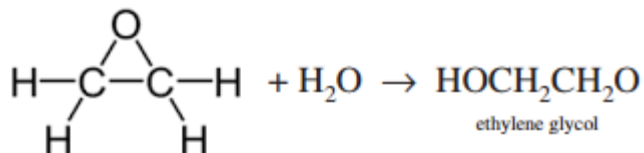
Fuente: GARCÍA PÉREZ, Águeda. *Estructura e Importancia del agua en el metabolismo celular*.
http://www.fmvz.unam.mx/fmvz/p_estudios/apuntes_bioquimica/Unidad_2.pdf. Consulta: 29 de octubre de 2015.

Figura 7. Estructura molecular del etilenglicol



Fuente: G. SPEIGHT, James. *Chemical and Process Design Handbook*. p. 110.

“La reacción para la producción de etilenglicol se produce a partir de la hidratación del óxido de etileno, en donde puede ser catalizada en medio ácido, alcalino o neutro pero en la industria se realiza entre ácido débil a neutro con abundante agua.



En la reacción es utilizado desde 0.5 a 1 % de ácido sulfúrico como catalizador a una temperatura entre 50 a 70 °C durante 30 minutos, o bien, en ausencia del ácido se realiza a una temperatura de 195 °C a 185 psi por una hora para la formación del etilenglicol⁷.

2.3.2.2. Subproducto obtenido: dietilenglicol

Es utilizado para la manufactura de resinas de poliuretano, resinas de poliéster insaturado, mezcla de anticongelante y la obtención del trietilenglicol.

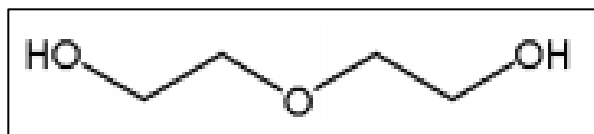
⁷ G. SPEIGHT, James. *Chemical and Process Design Handbook*. p. 110.

Tabla IV. **Propiedades físicas y químicas del dietilenglicol**

Nombre IUPAC	2,2-oxidietanol
Fórmula química	$C_4H_{10}O_3$
Peso molecular	106,12 g/mol
Punto de fusión	-6.5 °C
Densidad específica	1.18 a 20 °C
Solubilidad	Miscible en agua, alcohol, éter, acetona y etilenglicol Inmiscible en benceno y tetracloruro de carbono
Presión de vapor	5,7*10 ⁻³ mm Hg a 25 °C

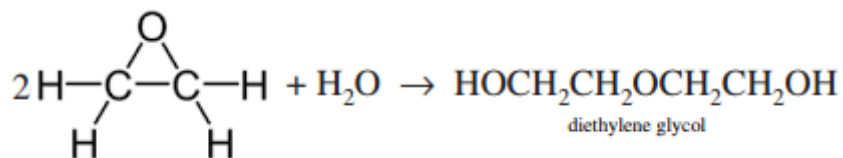
Fuente: Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC). *Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. Gobierno de Estados Unidos Mexicanos*. <http://www2.inecc.gob.mx/sistemas/plaguicidas/pdf/Dietilenglicol.pdf>. Consulta: 29 de octubre de 2015.

Figura 8. **Estructura molecular del dietilenglicol**



Fuente: Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC). *Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. Gobierno de Estados Unidos Mexicanos*. <http://www2.inecc.gob.mx/sistemas/plaguicidas/pdf/Dietilenglicol.pdf>. Consulta: 29 de octubre de 2015.

La reacción para la obtención del dietilenglicol es producida como subproducto de la reacción para la obtención del etilenglicol por medio de la hidratación del óxido de etileno. Estos son separados por medio de la operación de la destilación.

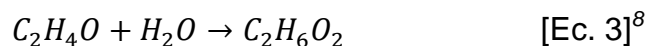


2.4. Reacciones involucradas en el proceso

Existen dos reacciones involucradas en el proceso, descritas a continuación.

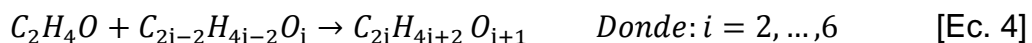
2.4.1. Reacción para la obtención de etilenglicol

El óxido de etileno reacciona con agua en estado líquido para producir etilenglicol tal y como se observa en la siguiente reacción:

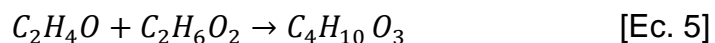


2.4.2. Reacción para la obtención de dietilenglicol

El óxido de etileno reacciona con glicoles para hacer glicoles de mayor orden y poliglicoles, esto ocurre basado en la siguiente expresión:



Para la obtención del dietilenglicol, $i = 2$ en la ecuación 12, se obtiene la siguiente reacción:



⁸ MELHEM, GEORGES A., y otros. *Kinetics of the Reactions of Ethylene Oxide with Water and Ethylene Glycols*. p. 135.

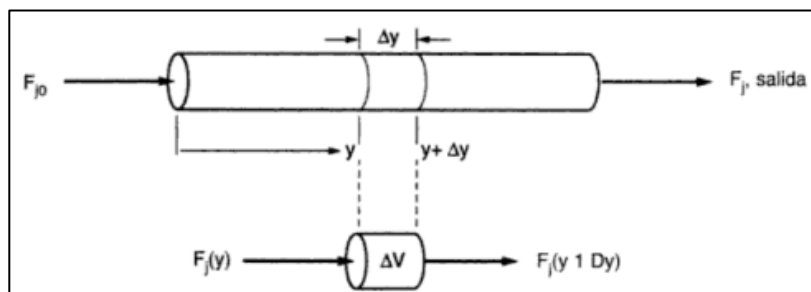
2.5. Operaciones unitarias utilizadas en el proceso de producción del etilenglicol

Las operaciones unitarias utilizadas para la simulación del proceso, se describen a continuación.

2.5.1. Reactor de flujo tapón (PFR)

Los reactores tubulares son sistemas continuos que operan en estado estacionario y que, a diferencia de los tanques agitados, la composición varía en forma continua a medida que fluyen a lo largo del reactor. Según el modelo, se asume que la concentración varía continuamente en forma axial a lo largo del reactor, por lo tanto, la velocidad de reacción depende de la concentración. Un tipo de reactor de este tipo es el de flujo tapón, en donde la velocidad es uniforme como el flujo turbulento y no existe variación radial en la velocidad de reacción. Se emplea fundamentalmente para reacciones en fase gas, aunque también con fluidos y sólidos. Los reactivos se consumen continuamente a lo largo del reactor.

Figura 9. Reactor de flujo tapón



Fuente: FOGLER, H. Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p. 189.

Aplicando la ecuación general de balance [ecuación 1], y la ecuación al operar en estado estacionario [ecuación 2], se obtiene la ecuación de diseño para un PFR:

$$\frac{dF_j}{dV} = r_j \quad [\text{Ec. 6}]$$

Se obtiene la forma diferencial del balance de moles en estado estacionario para un PFR, en donde dF_j es el diferencial de la velocidad de flujos de entrada y de salida (F_{j0} y F_j), dV es el diferencial del volumen y r_j es la velocidad de reacción. La ecuación 6 indica que no depende de la forma del reactor, sino solamente del volumen total.

La ley de velocidad, establece una relación entre la velocidad de reacción y la concentración de las especies involucradas, se obtienen por observación experimental, no están en función del tipo de reactor sino en función de la química de la reacción. Las unidades de $-r_A$ se dan en términos de concentración por unidad de tiempo. Está dada por la siguiente ecuación:

$$-r_A = k_A C_A^\alpha C_B^\beta \quad [\text{Ec. 7}]$$

En donde la velocidad de reacción está en función de la constante de velocidad (k) y las concentraciones de los reactivos (C_A, C_B). Los exponentes de las concentraciones indican las potencias que están elevadas, deduciendo el orden de reacción respecto de la especie A o B. El orden global de reacción (n) es la suma de las potencias de cada especie involucrada, como se muestra a continuación:

$$n = \alpha + \beta \quad [\text{Ec. 8}]$$

Las unidades de medida de la constante de reacción (k) dependen del orden de la reacción y son dependiente de la temperatura, por lo que a partir de la ecuación de Arrhenius se deduce su valor:

$$k_A(T) = Ae^{-E/RT} \quad [\text{Ec. 9}]$$

es A el factor preexponencial o factor de frecuencia, E es la energía de activación, T es la temperatura absoluta y R la constante universal de gases.

2.5.1.1. Velocidades de reacción en las reacciones para la formación de etilenglicol y dietilenglicol

La velocidad de reacción para la formación de etilenglicol y dietilenglicol observado en las reacciones de la ecuación 3 y ecuación 5 está dada en las siguientes expresiones:

$$R_{\text{EG}} = k[EO][H_2O][ROH]^2 \quad [\text{Ec. 10}]^9$$

$$R_{\text{DEG}} = 2k[EO][C_2H_6O_2][ROH]^2 \quad [\text{Ec. 11}]^{10}$$

Donde k es la constante de velocidad que se definió anteriormente, $[EO]$ es la concentración molar del óxido de etileno; $[H_2O]$ es la concentración molar de agua; $[C_2H_6O_2]$ es la concentración molar del etilenglicol y $[ROH]$ es la concentración molar de los hidroxilos presentes en la solución, definido en la siguiente ecuación:

⁹ MELHEM, GEORGES A., y otros. *Kinetics of the Reactions of Ethylene Oxide with Water and Ethylene Glycols*. p. 191.

¹⁰ CONCHA VALENZUELA, Luis. *La Química del agua*. http://ww2.educarchile.cl/UserFiles/P0001/File/la_quimica_del_agua.pdf. Consulta: 29 de octubre de 2015.

$$[ROH] = [H_2O] + 2[EG] + 2[DEG] + 2[TEG] + 2[T4EG] + 2[P5EG] + \dots \quad [\text{Ec. 12}]$$

A partir de la ecuación 12 se obtienen las concentraciones del grupo ROH en la formación de etilenglicol y en la formación de dietilenglicol:

$$[ROH]_{EG} = [H_2O] + 2[EG] \quad [\text{Ec.13}]$$

$$[ROH]_{DEG} = [H_2O] + 2[EG] \quad [\text{Ec.14}]$$

La cinética para las reacciones de formación del etilenglicol y dietilenglicol son consistentes por medio de los siguientes postulados:

- Se asume que el óxido de etileno se asocia rápidamente con dos moléculas de hidroxilo para la formación de un intermediario.



Por lo que alcanza rápidamente el equilibrio químico presentado a continuación:

$$K = \frac{[I]}{[O][ROH]^2} \quad [\text{Ec.16}]^{12}$$

- El intermediario se asume que reacciona lentamente con el agua para la formación de los glicoles en la que se regenera las dos moléculas de ROH.

¹¹ MELHEM, GEORGES A., y otros. *Kinetics of the Reactions of Ethylene Oxide with Water and Ethylene Glycols*. p. 195.

¹² GARCÍA PÉREZ, Águeda. *Estructura e Importancia del agua en el metabolismo celular*. http://www.fmvz.unam.mx/fmvz/p_estudios/apuntes_bioquimica/Unidad_2.pdf. Consulta: 29 de octubre de 2015.



Por lo que la velocidad de reacción implica la velocidad de formación del agua y no evalúa el consumo del etilenglicol en las reacciones subsecuentes.

$$R_{EG} = k_0[I][H_2O] \quad [\text{Ec.18}]^{14}$$

Si el etilenglicol empieza a convertirse en dietilenglicol, la siguiente reacción y la velocidad de reacción son aplicadas, utilizando el intermediario de por medio.



$$R_{DEG} = 2k_0[I][EG] \quad [\text{Ec.20}]^{16}$$

2.5.2. Columna de destilación

La operación unitaria de la destilación consiste en la separación de diferentes componentes de una mezcla por medio de calor. Se calienta la mezcla en estado líquido para que los componentes más volátiles cambien de estado a vapor o gas, luego se condensan por medio de un enfriamiento. El principal objetivo es la separación de los componentes aprovechando la volatilidad relativa y los puntos de ebullición.

¹³ GARCÍA PÉREZ, Águeda. *Estructura e Importancia del agua en el metabolismo celular*. http://www.fmvz.unam.mx/fmvz/p_estudios/apuntes_bioquimica/Unidad_2.pdf. Consulta: 29 de octubre de 2015.

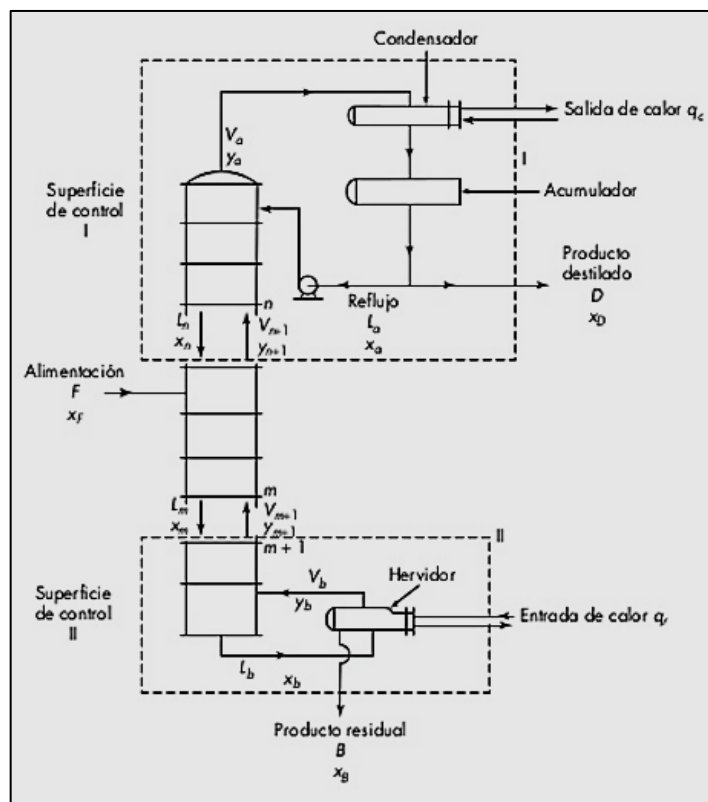
¹⁴ Ibíd.

¹⁵ Ibíd.

¹⁶ Ibíd.

La torre o columna de destilación simple es una unidad que está compuesta por el conjunto de etapas de equilibrio, la cual está dividida por platos que se distribuyen en toda la torre. Su función es el aumento en el contacto de las dos fases presentes, en cada plato se repite la destilación. El líquido caliente baja por los platos en el que condensa el componente no volátil que se encuentra en el vapor y, a la vez, se evapora el componente volátil del líquido. Antes del ingreso de la alimentación existe una válvula en la cual baja la presión, al disminuirla el componente más ligero está más próximo a cambiar de fase a vapor, por lo que al ingresar a la torre, esta se evapora instantáneamente, también se le llama “evaporación flash”.

Figura 10. **Columna de destilación de fraccionamiento continuo**



Fuente: L. MCCABE, Warren, C. SMITH, Julian y HARRIOT, Peter. *Operaciones Unitarias en Ingeniería Química*. p. 211.

La torre se divide en tres secciones principales:

- Sección intermedia: es el plato en donde se introduce la alimentación y parte de la alimentación se vaporiza repentinamente.
- Sección de rectificación: se encuentra por arriba del plato de alimentación y es en donde la concentración de los componentes más ligeros se incrementan.
- Sección de despojamiento o empobrecimiento: son los platos que se encuentran por debajo del plato de alimentación y es en donde los componentes más ligeros son despojados o vaporizados del componente pesado, por lo que hay más concentración del líquido llamándose los fondos.

El vapor con componentes más ligeros sale en la parte superior de la columna de destilación, pasa por un condensador, una parte sale como producto de destilado y la otra regresa a la columna en estado líquido. Este al tener contacto con el vapor, condensa el componente no volátil que se encuentra en el vapor del componente ligero.

Los fondos con el componente pesado salen por debajo de la columna, son calentados por medio de un rehervidor que es un intercambiador de calor, en donde se evapora el componente ligero que se encontraba en el líquido de los fondos. Este vapor y con una parte de los fondos ingresa nuevamente a la torre de destilación, ya que al entrar en contacto con el líquido, ayuda a vaporizar el componente volátil y aporta la energía necesaria para mantener el proceso de destilación, la otra parte sale como residuo.

El balance global de materia para la columna de fraccionamiento de la figura 10, está dada por la ecuación:

$$F = D + B \quad [\text{Ec. 21}]$$

En donde se establece que la alimentación es igual a la masa del destilado más la del residuo.

Realizando el balance con la fracción del componente más ligero de la figura 10, se obtiene:

$$FX_F = DX_D + BX_B \quad [\text{Ec. 22}]$$

Realizando varios balances y despejes se obtiene la línea de operación de rectificación y de agotamiento para la construcción gráfica de equilibrio entre componente ligero y componente pesado:

$$y_{n+1} = \frac{L_n}{L_n + D} x_n + \frac{Dx_D}{L_n + D} \quad [\text{Ec. 23}]$$

$$y_{m+1} = \frac{L_m}{L_m - B} x_m + \frac{Bx_B}{L_m - B} \quad [\text{Ec. 24}]$$

La posición del plato en el ingreso de la alimentación varía según la velocidad del líquido o la de vapor, sino ambos, ya que depende de la condición térmica del mismo. Esta se encuentra en la intersección de las líneas de operación de rectificación y de agotamiento, determinándose como:

$$y = \frac{q}{1-q} x + \frac{x_f}{1-q} \quad [\text{Ec. 25}]$$

Siendo q el valor llamado q -line que determina la calidad de la alimentación, si se encuentra líquido subenfriado, líquido saturado, vapor saturado, o vapor sobrecalentado y lo establece por medio de los calores de

vaporización del vapor saturado, líquido saturado y el calor del líquido a la temperatura de ingreso a la torre.

2.6. Simulación de procesos

La simulación de procesos puede definirse como “técnica para evaluar en forma rápida un proceso con base en una representación del mismo, mediante modelos matemáticos.”¹⁷ Con la ayuda de un simulador, permite entender mejor cómo se puede comportar un proceso, también es una herramienta para los cálculos matemáticos ya que en algunos procesos, las variables pueden llegar a valores difíciles de calcular sin una herramienta computacional. En general, el simulador puede realizar las siguientes actividades:

- Modelar procesos de producción para evaluar y analizar su funcionamiento.
- Optimizar y predecir los cambios de las variables en las operaciones involucradas del proceso.
- Analizar y optimizar el proceso para evitar cambios los estándares de calidad.
- Analizar vías de factibilidad y viabilidad en costos de producción, automatización y de innovación.
- Búsqueda de alternativas para la generación de energía y reducir su consumo.
- Optimización o búsqueda de alternativas para la reducción de residuos generados durante el proceso.

¹⁷ MARTÍNEZ SIFUENTES, Víctor Hugo y otros. *Simulación de Procesos en Ingeniería Química*. p. 189.

2.6.1. Ventajas y desventajas de la simulación de procesos

Algunas ventajas que proporcionan los simuladores se presentan a continuación:

- Permiten el acceso a información sobre datos termodinámicos a la disposición de estudiantes y profesionales; ya que al instalar los paquetes se amplía la base de datos, ahorrando tiempo de búsqueda.
- Proporciona una mayor facilidad para la realización de cálculos simples y complejos.
- Permite optimizar y estimar costos de los procesos comparando alternativas para la selección del que mejor se adecua a las especificaciones.
- Mejora la habilidad con herramientas modernas computacionales para realizar el diseño de procesos; desde balances de materia y energía hasta plantas de procesos químicos.
- Por medio de la visualización del modelo, mejora la comprensión de los procesos, entendiendo el funcionamiento de las operaciones y los fenómenos ocurridos en el proceso químico.
- El costo necesario para la simulación del proceso es menor al que se requiere para implementar un diseño o un rediseño real.
- Es útil para las investigaciones de laboratorio o en planta piloto; ya que permite predecir los resultados de una manera rápida con la comparación de diferentes alternativas.

La gran aceptación de los simuladores en el mundo es debido a la mayoría de ventajas que posee; pero se debe de tomar en cuenta las desventajas, siendo algunas de ellas:

- Sin el conocimiento previo del uso de programas de simulación como los conocimientos de ingeniería, se dificulta la utilización del mismo.
- No existe una interacción real con la utilización del simulador, por lo que algunas veces se realizan suposiciones para la realización de los problemas, que, al compararlo con el proceso real muestra ciertas diferencias en los resultados.
- Si no se está familiarizado o no se tiene conocimiento del programa, los resultados son difíciles de interpretar.

2.6.2. Herramientas de software para la simulación de procesos

Existen varias herramientas de software para la simulación de procesos. Estos programas facilitan el estudio de los procesos por simular, brindando la capacidad de analizar el comportamiento de varios sistemas durante varios escenarios previamente configurados por el usuario. Lo anterior brinda un mejor panorama sobre el funcionamiento, viabilidad y eficiencia de los modelos y procesos analizados, al llevar a cabo comparaciones con otros modelos propuestos, o se puede llegar al cambio de diseño del proceso para lograr así alcanzar los objetivos requeridos.

Algunas de estas herramientas de software capaces de realizar tales simulaciones son:

- Aspen Hysys
- Aspen Plus
- CHEMCAD
- CADSIM Plus
- COMSOL MULTYPHYSICS
- METSIM

2.6.3. Selección de los modelos termodinámicos

En una simulación de un proceso se requiere de diferentes datos que proporcionan las propiedades termodinámicas y fisicoquímicas de los componentes que se encuentran involucrados en los equipos. Para esto se utilizan técnicas de predicción para la estimación de estos valores, ya que la representación precisa de estas propiedades es fundamental para la simulación. Si se utilizan modelos inadecuados puede cambiar radicalmente los resultados y, por lo tanto, perder validez.

Los modelos termodinámicos se han desarrollado para cierto tipo de sustancias, en el cual cada compuesto depende de su naturaleza, en sus cantidades y sus condiciones de temperatura y presión.

Existen interacciones entre los demás compuestos debido a las fuerzas intermoleculares, por lo que no se pueden generalizar los comportamientos de todos los componentes y sus condiciones. Algunas de estas fuerzas son:

- Interacción ión-dipolo: existe una atracción con los iones negativos con el extremo positivo de una molécula polar, o a la inversa, un ion positivo se atrae con el extremo negativo de la molécula. Un ejemplo de esta interacción son los solventes polares que se disuelven con sólidos iónicos.
- Interacción dipolo-dipolo: esta atracción se da por la interacción entre el extremo positivo de la molécula con el extremo negativo de otra. Un ejemplo son los enlaces de hidrógeno con la interacción de átomos muy electronegativos.
- Interacción por inducción dipolo-dipolo (Van der Waals): son fuerzas con atracción débil entre moléculas eléctricamente neutras.

Tabla V. **Modelos de propiedades termodinámicas**

Modelos de Ecuaciones de estado	Modelos de coeficiente de actividad
Ley de gas ideal	Electrolitos NRTL
Lee-Kesler (LK)	Flory-Huggins
Lee-Kesler-Plocker	NRTL
Peng-Robinson (PR)	Uniquac
Peng-Robinson-Stryjek-Vera (PRSV)	Unifac
Redlich-Kwong (RK)	Van Laar
Redlich-Kwong-Soave (RKS)	Wilson
API-Soave-Redlich-Kwong (API-SRK)	Margules
RKS o PR con regla de mezclado	Pitzer
Huron-Vidal-2 Modificada (MHV2)	
RKS o PR con reglas de mezclado	
de Wong-Sandler (WS)	Modelos especiales
RKS o PR con la función alfa	Braun K-10
de Boston-Mathias (BM)	Chao-Seader
RKS Predictor (PRKS)	Grayson-Streed
Sánchez-Lacombe para polímeros	Kent-Eisenberg
Hayden-O'Connell	Aminas
Benedict-Webb-Rubin (BWR)-Lee-Starling	Tablas de vapor
Schwartzentruber-Renon	

Fuente: MARTÍNEZ SIFUENTES, Víctor Hugo y otros. *Simulación de Procesos en Ingeniería Química*. p. 191.

2.6.3.1. Ecuaciones de estado

Las ecuaciones de estado describen el comportamiento, equilibrio termodinámico y las variables involucradas en un sistema determinado. Es una alternativa para la predicción de datos de equilibrio y propiedades termodinámicas. Es aplicable para fase líquida y vapor, funciona bien para fluidos normales como nitrógeno, oxígeno, dióxido de carbono y sustancias de baja polaridad a presiones bajas como altas. La ecuación general tiene la forma siguiente:

$$f(p, V, T) = 0 \quad [\text{Ec. 26}]$$

Algunas ventajas en la utilización de las ecuaciones de estado son la predicción del equilibrio vapor-líquido, porque son continuas en regiones de dos fases y pueden obtenerse una gran variedad de propiedades. Este modelo no requiere especificar parámetros en cada intervalo de la aplicación. Las desventajas que posee el modelo, es que no aplica para todos los compuestos, no aplica para soluciones con compuestos polares, moléculas largas como los polímeros y electrolitos. Las ecuaciones de estado se pueden aplicar para mezclas con la ayuda de reglas de mezclas con las que se utilizan las constantes de las especies puras, pero estos valores dependen de los datos experimentales por su sensibilidad en las interacciones intermoleculares.

En la tabla VI se describen los métodos de ecuaciones de estado con su aplicación utilizados en el simulador Aspen HYSYS.

Tabla VI. Descripción de los modelos de ecuaciones de estado

EOS's	Descripción
GCEO's	Esta opción de modelo permite definir e implementar una ecuación de estado generalizada cubica de dos parámetros, incluyendo las reglas de mezclado y de traslación de volumen
Kabadi Danner	Este modelo es una modificación de la ecuación de estado de Soave-Redlich-Kwong (SRK) original, mejorada para efectuar cálculos de equilibrio de vapor-liquido (VLE) para sistemas hidrocarburos acuosos, particularmente en el rango diluido.
Lee-Kesler Plocker	Este modelo es el método general de mayor precisión para sustancias no polares y mezclas de las mismas.
Peng Robinson	Este es el método ideal para cálculos de EVL como también para cálculos de densidad de liquido de sistemas de hidrocarburos. Se incluyen varias modificaciones y mejoras efectuadas con el fin de extender su rango de aplicabilidad y precisión de predicción para algunos sistemas no ideales. Sin embargo, para algunas situaciones de alta no idealidad encontrada, se recomienda el uso de Modelos de Actividad.
PRSV	Peng-Robinson Stryek Vera es una modificación en dos planos de la EOS Peng Robinson para extender su aplicabilidad a sistemas moderados de no idealidad.
SRK	En muchos casos, la ecuación de estado de Soave-Redlich y Kwong provee resultados comparables a los de PR, pero su rango de aplicabilidad es mucho más limitado. Este método no es nada confiable para sistemas no ideales.
Sour PR	Combina la ecuación de estado PR con el modelo acido de API Wilson para manejo de sistemas acido acuosos.
Sour SRK	Combina la ecuación de estado SRK con el modelo acido de API Wilson para manejo de sistemas acido acuosos
Sudkevitch Joffe	Es una modificación de la ecuación de estado SRK. Esta ecuación ha sido mejorada para desarrollar mejores predicciones del comportamiento de equilibrio vapor-liquido de los sistemas de hidrocarburos halogenados.

Fuente: Software Aspen HYSYS 3.2.

Tabla VII. **Ecuaciones de estado con mayor utilidad**

Nombre	Ecuación	Constantes y funciones
Gas ideal	$P = \frac{RT}{v}$	Ninguna
Generalizada	$P = \frac{ZRT}{v}$	$Z = f(P_r, T_r, Z_c \text{ o } \omega)$
Redlich-Kwong (R-K)	$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2 + bv}$	$b = 0.08664RT_c/P_c$ $a = 0.42748R^2T_c^{2.5}/P_cT^{0.5}$
Soave-Redlich-Kwong (S-R-K o R-K-S)	$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2 + bv}$	$b = 0.08664RT_c/P_c$ $a = 0.42748R^2T_c^2[1 + f_w(1-T_r^{0.5})]^2/P_c$ $f_w = 0.48 + 1.574\omega - 0.176\omega^2$
Peng-Robinson (P-R)	$P = \frac{RT}{v-b} - \frac{a}{v^2 + 2bv - b^2}$	$b = 0.07780RT_c/P_c$ $a = 0.45724R^2T_c^2[1 + f_w(1-T_r^{0.5})]^2/P_c$ $f_w = 0.37464 + 1.54226\omega - 0.26992\omega^2$

Fuente: LUQUE RODRÍGUEZ, Susana y VEGA GRANDA, Aurelio B. *Simulación y Optimización avanzadas en la Industria Química y de Procesos*. p. 254.

En la tabla VII se muestran algunas ecuaciones de estado utilizadas normalmente en ingeniería química. La elección de la ecuación de estado depende de la exactitud y de la capacidad de su uso. La mayoría de los coeficientes de las ecuaciones de estado se deben evaluar para ajustarlos para los diferentes datos experimentales de presión, volumen y temperatura. Hay que tomar en cuenta que las ecuaciones más sencillas, sus valores son menos exactos conforme se acercan al punto crítico.

2.6.3.2. Coeficientes de actividad

Los modelos de coeficiente de actividad representan solamente la fase líquida de un sistema, por lo regular, se usa junto con las ecuaciones de estado para la representación de la fase vapor. Se pueden calcular experimentalmente cuando se conoce el equilibrio líquido-vapor, pero casi siempre se quiere predecir el sistema de un equilibrio multicomponente.

La desventaja que posee es que los parámetros binarios de los modelos son válidos en el intervalo de temperatura y presión que se utilizaron para estimarlos. Solo se puede utilizar para presiones menores a 10 atm. Si es mayor a 10 atm pero menor a 20 atm puede calcularse con la ayuda de las ecuaciones de estado para la representación de la fase vapor.

Con base a la energía libre de Gibbs en exceso se establecieron diferentes métodos o correlaciones que muestran la influencia de la temperatura y de la composición para la obtención de los coeficientes de actividad. La presión afecta en operaciones a alta presión, por lo que se impide el empleo de este modelo.

Algunos modelos empleados son las ecuaciones de Van Laar y Margules, estas describen bien el equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias. Para mezclas multicomponentes se utilizan otros modelos debido a su complejidad, entre estos se encuentra el modelo Scatchard-Hildebrand, este utiliza las propiedades de los componentes puros presentes en la mezcla y se basa en el concepto de disoluciones regulares. Otros modelos empleados son Wilson, NRTL y UNIQUAC, estos modelos utilizan la interacción intermolecular entre los compuestos existentes en la mezcla. En la tabla VIII se describen los modelos de actividad con su aplicación utilizados en el simulador Aspen HYSYS, en la

tabla IX se muestran algunos de los coeficientes mencionados anteriormente; se utilizan para el cálculo de volúmenes, entalpía y entropía en exceso.

Tabla VIII. Descripción de los modelos de coeficiente de actividad

Modelo de Actividad	Descripción
Chien Null	Provee un marco de trabajo consistente para aplicar Modelos de Actividad existentes en una base binaria por binaria para sistemas binarios. Permite seleccionar el mejor modelo de actividad para cada par del caso en simulación.
Extended NRTL	La variación del Modelo NRTL (Non Random Two Liquids), permite ingresar valores de parámetros A_{ij} , B_{ij} , C_{ij} y $Alp2ij$ utilizados en la definición de coeficientes de actividad. Se aplica este modelo a sistemas que:
	<p>parámetros τ y α. Se aplica este modelo a sistemas que:</p> <ul style="list-style-type: none"> • Tengan un amplio rango de punto de ebullición entre componentes. • Requiera de soluciones simultaneas de EVL y ELL y cuando se tenga amplios rangos de puntos de ebullición o de concentración entre componentes
Margules	Esta fue la primera representación desarrollada del Exceso de Energía Gibbs. Esta ecuación no tiene ninguna base teórica, pero es muy útil para estimados rápidos e interpolación de datos.
NRTL	Esta es una extensión de la Ecuación de Wilson. Utiliza mecánica estadística y la teoría de celda líquida para representar la estructura líquida. Es capaz de representar el comportamiento de fases de sistemas de equilibrio vapor líquido, líquido-líquido, y vapor-líquido-líquido (EVL, ELL, EVLL).
UNIQUAC	Utiliza mecánica estadística y la teoría pseudoquímica de Guggenheim para representar la estructura líquida. Esta ecuación es capaz de representar sistemas de equilibrio VL, LL y VLL con mayor precisión que el modelo NRTL, y además sin la necesidad de usar el factor de distribución aleatoria.
Van Laar	Esta ecuación se ajusta a varios sistemas bastante bien, especialmente a la distribución de componentes de equilibrio de LL. Se la puede usar en sistemas que exhiben desviaciones negativas o positivas de la Ley de Raoult. Sin embargo no predice máximos o mínimos en los coeficientes de actividad. Por tanto tiene pobres resultados con sistemas de HC halogenados y alcoholes.
Wilson	Es la primera ecuación de coeficiente de actividad en usar el modelo de composición local para derivar una expresión del Exceso de Energía Gibbs. Ofrece un enfoque termodinámico muy consistente para la predicción de comportamiento de fase de sistemas multicomponentes de data de regresiva de equilibrio binario. Sin embargo, este modelo no se puede aplicar en sistemas de dos fases líquidas.

Fuente: Software Aspen HYSYS 3.2.

Tabla IX. Ecuaciones empíricas para la estimación de coeficientes de actividad para mezclas líquidas binarias

Margules (una constante, simétrica)	$\log \gamma_1 = A x_1^2$	$\log \gamma_2 = A x_1^2$
Margules (dos constantes)	$\log \gamma_1 = x_1^2 [\bar{A}_{12} + 2x_1(\bar{A}_{21} - \bar{A}_{12})]$	$\log \gamma_2 = x_1^2 [\bar{A}_{21} + 2x_2(\bar{A}_{12} - \bar{A}_{21})]$
van Laar (dos constantes)	$\ln \gamma_1 = \frac{A_{12}}{\left[1 + \frac{x_1 A_{12}}{x_2 A_{21}}\right]^2}$	$\ln \gamma_2 = \frac{A_{21}}{\left[1 + \frac{x_2 A_{21}}{x_1 A_{12}}\right]^2}$
Wilson (dos constantes)	$\ln \gamma_1 = -\ln(x_1 + \Lambda_{12}x_2) + x_2 \left[\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12}x_2} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21}x_1 + x_2} \right]$	$\ln \gamma_2 = -\ln(x_2 + \Lambda_{21}x_1) - x_1 \left[\frac{\Lambda_{12}}{x_1 + \Lambda_{12}x_2} - \frac{\Lambda_{21}}{\Lambda_{21}x_1 + x_2} \right]$
NRTL (tres constantes)	$\ln \gamma_1 = x_1^2 \left\{ \frac{\exp(-2\alpha_{12}\tau_{21})}{\tau_{21}[x_1 + x_2 \exp(-\alpha_{12}\tau_{21})]^2} + \tau_{12} \frac{\exp(-\alpha_{12}\tau_{12})}{[x_2 + x_1 \exp(-\alpha_{12}\tau_{12})]^2} \right\}$	$\ln \gamma_2 = x_1^2 \left\{ \frac{\exp(-2\alpha_{12}\tau_{12})}{\tau_{12}[x_2 + x_1 \exp(-\alpha_{12}\tau_{12})]^2} + \tau_{21} \frac{\exp(-\alpha_{12}\tau_{21})}{[x_1 + x_2 \exp(-\alpha_{12}\tau_{21})]^2} \right\}$
UNIQUAC (dos constantes)	$\ln \gamma_1 = \ln \frac{\Psi_1}{x_1} + \frac{\bar{Z}}{2} q_1 \ln \frac{\theta_1}{\Psi_1} + \Psi_2 \left(\ell_1 - \frac{r_1}{r_2} \ell_2 \right) - q_1 \ln(\theta_1 + \theta_2 T_{21}) + \theta_2 q_1 \left(\frac{T_{21}}{\theta_1 + \theta_2 T_{21}} - \frac{T_{12}}{\theta_2 + \theta_1 T_{21}} \right)$	$\ln \gamma_2 = \ln \frac{\Psi_2}{x_2} + \frac{\bar{Z}}{2} q_2 \ln \frac{\theta_2}{\Psi_2} + \Psi_1 \left(\ell_2 - \frac{r_2}{r_1} \ell_1 \right) - q_2 \ln(\theta_2 + \theta_1 T_{12}) + \theta_1 q_2 \left(\frac{T_{12}}{\theta_2 + \theta_1 T_{12}} - \frac{T_{21}}{\theta_1 + \theta_2 T_{21}} \right)$

Fuente: LUQUE RODRÍGUEZ, Susana y VEGA GRANDA, Aurelio B. *Simulación y Optimización avanzadas en la Industria Química y de Procesos*. p. 259.

2.7. Interactuando con el simulador ASPEN HYSYS

El simulador Aspen HYSYS, anteriormente HYSIM, es un software creado por la compañía Hyprotech. Posteriormente obtuvieron sus derechos la compañía de Aspen Technology, Inc. conocida como Aspen Tech, fundada en 1981 en el Instituto de Tecnología de Massachusetts (MIT) y el Departamento de Energías de Estados Unidos. Actualmente la compañía Aspen Tech abarca todos los continentes con varias oficinas a disposición dedicadas a proveer servicios y programas relacionados con industrias de proceso.

Inicialmente el software se desarrolló para modelar en estado estacionario, pero actualmente, con la ayuda de la utilización de controladores e integradores es posible la simulación en estado no estacionario. Se diferencia de los demás simuladores en dos aspectos: la primera es la interpretación de los comandos en el programa, es instantánea y no se necesita que compile los datos; la segunda es que permite la movilidad del ingreso de las variables en cada operación unitaria en el modelo sin ningún orden, por lo que el software sugiere que nuevos datos se pueden calcular y se evita los cálculos iterativos. También permite la descomposición de las operaciones para que funcionen independientemente.

El software permite utilizar gran cantidad de operaciones unitarias en la cual lo divide en subrutinas. En la siguiente tabla se muestran algunas de estas subrutinas en las que indica el tipo de operación, luego como aparece en el software y luego la descripción de la operación.

Tabla X. Descripción general de las operaciones unitarias del software

Mezcladores y divisiones	Mixer Tee	Mezcla de corrientes División de corrientes
Separadores	Component Splitter	Separador de componentes con dos salidas
Separadores flash	Separator 3-Phase separator Tank	Alimentación múltiple, una corriente vapor y una líquida como producto Alimentación múltiple, una corriente vapor y dos líquida como producto Alimentación múltiple, una corriente líquida como producto
Destilación (método abreviado)	Shortcut Column	Diseño con el método Fenske-Underwood
Separación multietapa (simulación basada en datos de equilibrio)	Column	Separación multifásica genérica, incluyendo absorción, desorción, destilación y extracción líquido-líquido. Es posible añadir secciones de columna y recirculaciones adicionales. Todos los modelos (aplicaciones en refinado de petróleo) soportan dos o tres fases así como reacciones químicas.
Intercambio de calor	Cooler/Heater Heat Exchanger Lng	Calentamiento o refrigeración Intercambio de calor entre dos corrientes de proceso Intercambio de calor entre varias corrientes
Reactores	Conversion Reactor Equilibrium Reactor Gibbs Reactor CSTR PFR	Se especifica la conversión Reacción de equilibrio Equilibrio químico multifásico (no se requiere la estequiometría) CSTR PFR
Bombas, compresores y turbinas	Pump Compressor Expander Valve	Bomba o turbina hidráulica Compresor Turbina Válvula adiabática
Tuberías	Pipe Segment	Tubería con flujo monofásico o multifásico con transmisión de calor

Fuente: LUQUE RODRÍGUEZ, Susana y VEGA GRANDA, Aurelio B. *Simulación y Optimización avanzadas en la Industria Química y de Procesos*: p. 242.

2.7.1. Introducción al entorno del software

En los siguientes incisos se describe el entorno de trabajo del software Aspen HYSYS.

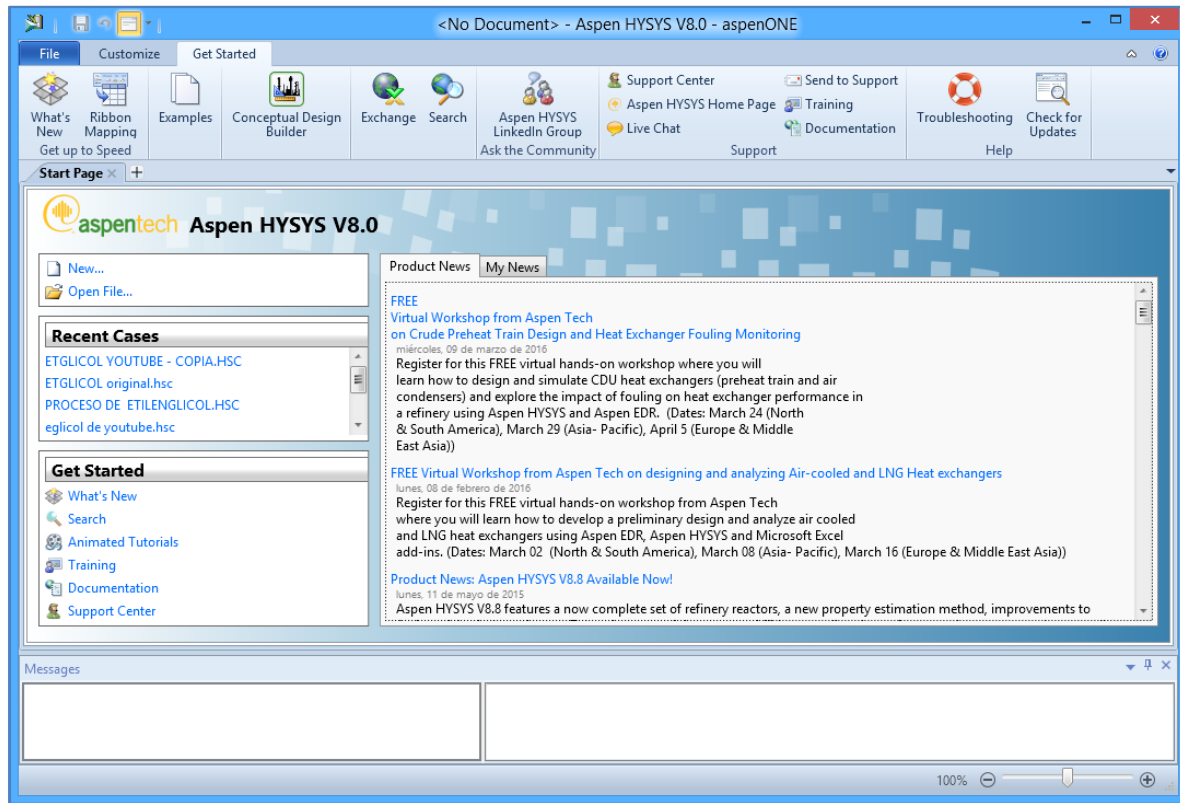
2.7.1.1. Partes principales de la ventana de inicio

Al iniciar la aplicación aparecerá la ventana de inicio del software, mostrado en la figura 12.

La ventana principal está compuesta por tres tipos de barras: la de título, la de menú y la de herramientas.

- La barra de título es horizontal ubicada en la parte superior de la ventana en la que muestra el nombre del archivo y el del software, contiene las opciones de minimizar, maximizar y cerrar la venta.
- La barra de menú es una barra horizontal que se ubica debajo de la barra de titulo, contiene opciones que enlazan a otras opciones o ventanas que activan funciones específicas en el software.
- La barra de herramientas se ubica debajo de la barra de menú, se muestra en forma gráfica, contiene iconos y botones que activan las funciones del software.

Figura 11. Ventana de inicio del software



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Debajo de la barra de herramientas, aparece una pestaña denominada *Start Page*, este divide en dos recuadros principales como se observa en la figura 13.

Figura 12. Visualización de la pestaña *Start Page* en la ventana de inicio



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

En el recuadro izquierdo existen tres subdivisiones; en la figura 14 se observa el primer cuadro con dos opciones, *New* y *Open File*, la primera opción es para la creación de una nueva simulación y la segunda es para abrir un documento que se ha guardado anteriormente.

Figura 13. **Primer cuadro de la pestaña *Start Page***



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

En el cuadro siguiente, denominado *Recent Cases*, se visualizan los documentos que se han utilizado recientemente con acceso directo para limitar el tiempo de búsqueda al encontrar el archivo necesitado.

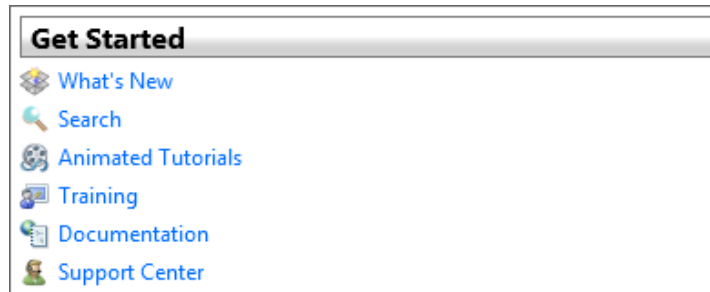
Figura 14. **Cuadro Recent Case de la pestaña *Start Page***



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

El tercer cuadro, denominado *Get Started*, posee diferentes opciones para la ayuda del primer uso del software como también ayuda con las funciones del mismo, tal y como se muestra en la figura 16.

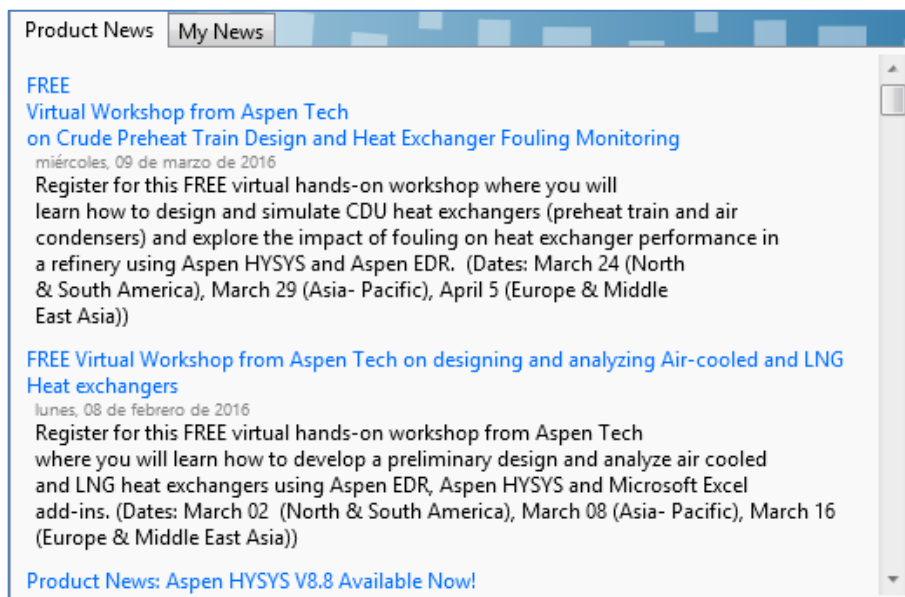
Figura 15. **Cuadro Get Started de la pestaña *Start Page***



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

En el cuadro que se encuentra del lado derecho, visualizado en la figura 17, muestra las nuevas actualizaciones y novedades del software con los *links* de enlace.

Figura 16. **Cuadro de actualizaciones y novedades del software**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

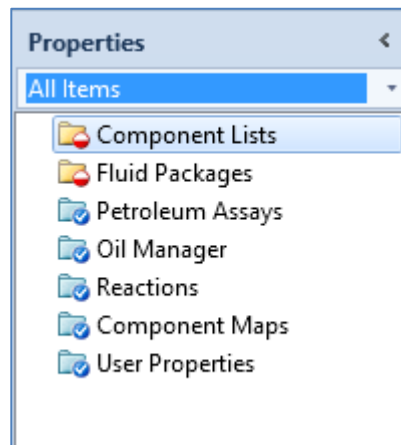
Al crear un nuevo caso en la opción *New*, aparecerá un cuadro del lado izquierdo visualizado en la figura 19 y 20. Se divide en dos zonas, el superior llamado panel de navegación y el inferior llamado botones de entorno.

Figura 17. **Selección de la opción *New***



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

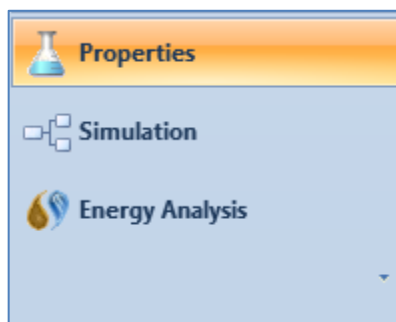
Figura 18. **Panel de navegación**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

En el panel de navegación de la figura 19 aparece una lista de pestañas, que indica los diferentes paquetes que ofrece el programa; algunos son incluidos con la instalación del programa, otros son paquetes externos que se adquieren.

Figura 19. **Botones de entorno**



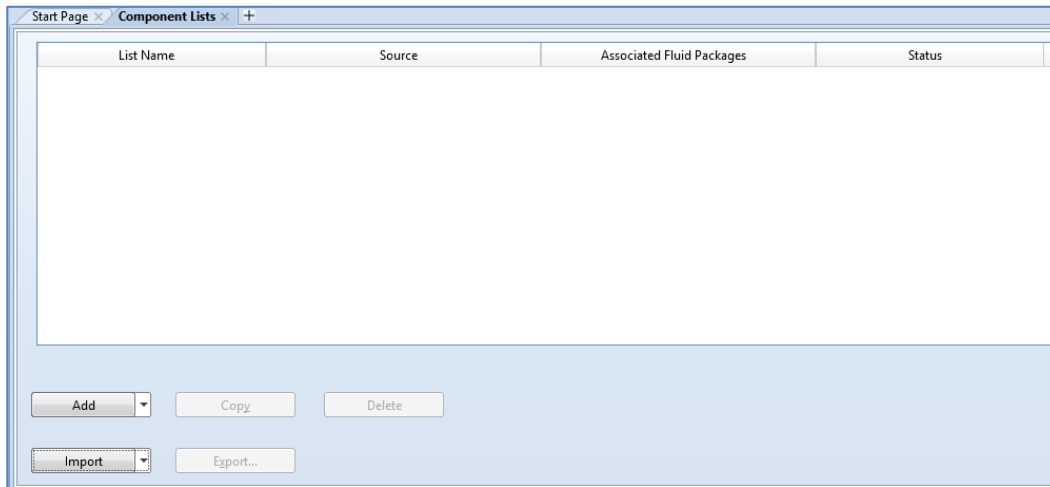
Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Los botones de entorno son diferentes ambientes para interactuar con el programa de simulación. Primero hay que establecer los requerimientos mínimos de la opción *Properties* antes de acceder con las otras dos opciones.

2.7.1.2. Selección de los componentes químicos

Aspen Hysys proporciona una gran base de datos sobre componentes químicos para la realización de una simulación. Al realizar un nuevo caso con la opción *New* visualizado en la figura 18, se escoge la opción *Component Lists* del panel de navegación que se observa en la figura 19. Aparecerá una pestaña como la figura 21, donde se visualiza dos botones activos, el primero llamado *Add*, el cual adiciona los componentes químicos de la base de datos que contiene el software; y el segundo llamado *Import*, en el que la información se obtiene de manera externa y se añade al software.

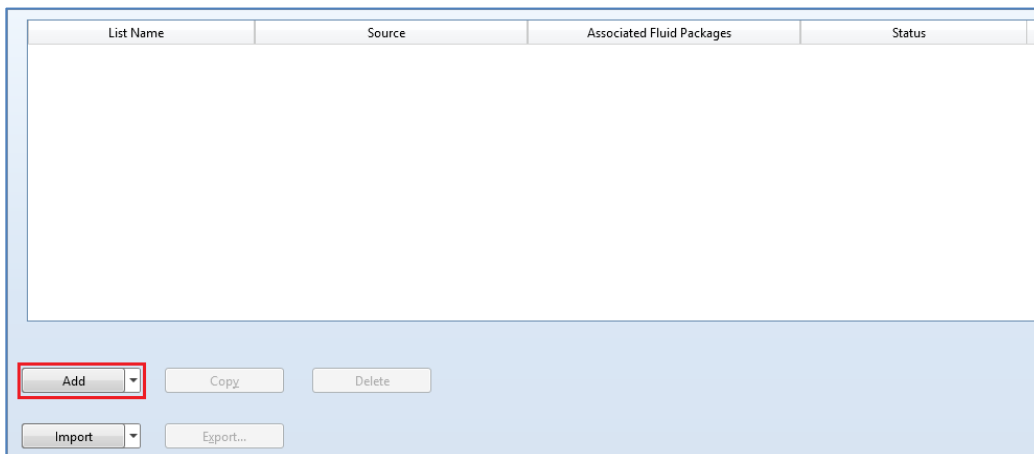
Figura 20. **Pestaña de *Component Lists***



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Al oprimir el botón Add aparecerá una pestaña como en la figura 22, en donde se visualiza dos cuadros.

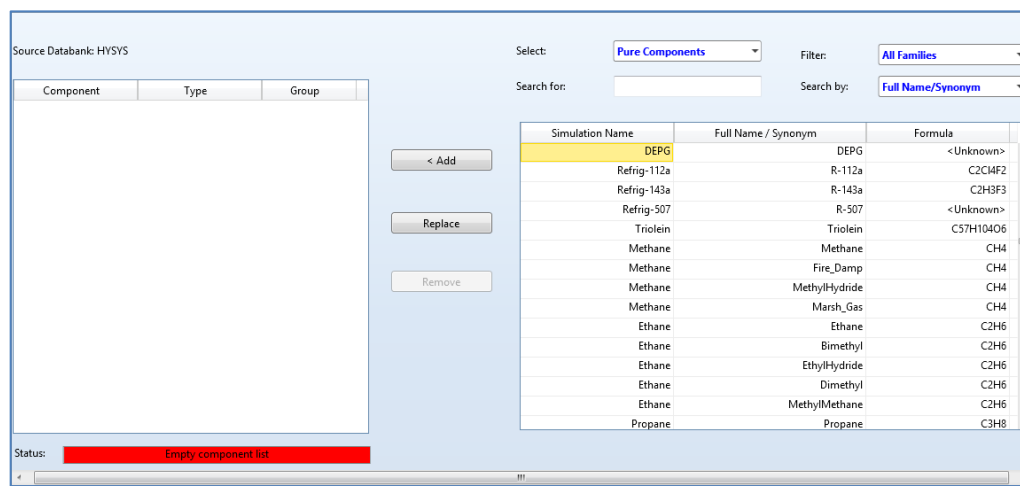
Figura 21. **Selección de la opción Add de la pestaña *Component Lists***



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

El cuadro del lado izquierdo se colocan los componentes que se escogen de la lista que aparece del lado derecho.

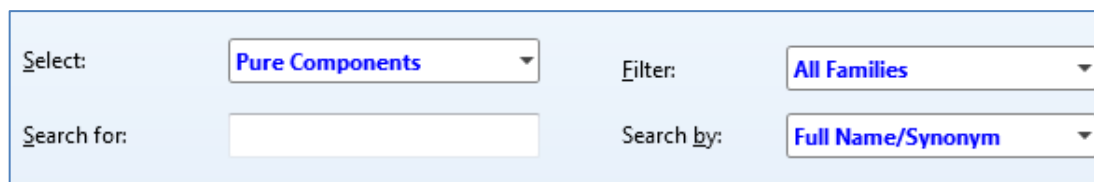
Figura 22. **Pestaña para la selección de los componentes químicos**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

En el cuadro derecho se observa, en la parte superior, filtros de búsqueda según el tipo de familia, fórmula o componente el cual aparece en idioma inglés.

Figura 23. **Filtro de búsqueda de componentes químicos**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Por medio del botón Add, añade los componentes del lado derecho y se colocan del lado izquierdo. Por ejemplo, si se quiere añadir el alcohol etílico para una simulación de un proceso, se coloca en el filtro de búsqueda la palabra *Ethane* en el cuadro *Search for* con las siguientes opciones de búsqueda de los otros cuadros que se presenta a continuación:

Figura 24. Utilización del filtro de búsqueda para el alcohol etílico

Select: Pure Components Filter: Hydrocarbons
 Search for: Ethane Search by: Full Name/Synonym

Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Aparecerá automáticamente una lista de las posibles opciones en la parte inferior del filtro de búsqueda.

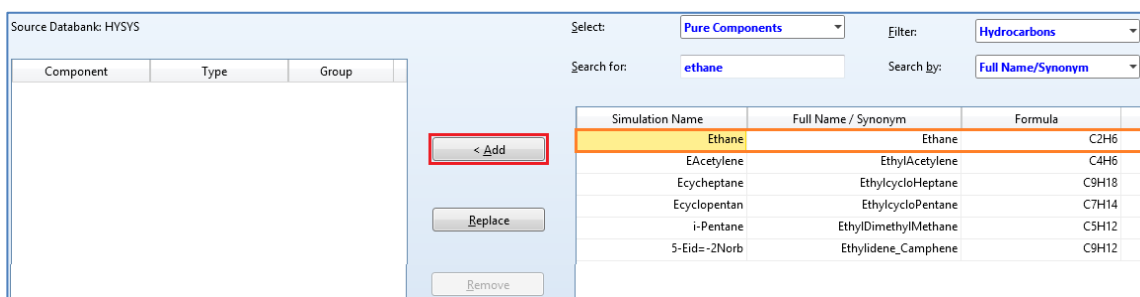
Figura 25. Listado de búsqueda para el alcohol etílico

Simulation Name	Full Name / Synonym	Formula
Ethane	Ethane	C2H6
EAcetylene	EthylAcetylene	C4H6
Ecycheptane	EthylcycloHeptane	C9H18
Ecyclopentan	EthylcycloPentane	C7H14
i-Pentane	EthylDimethylMethane	C5H12
5-Eid=-2Norb	Ethylidene_Camphene	C9H12

Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

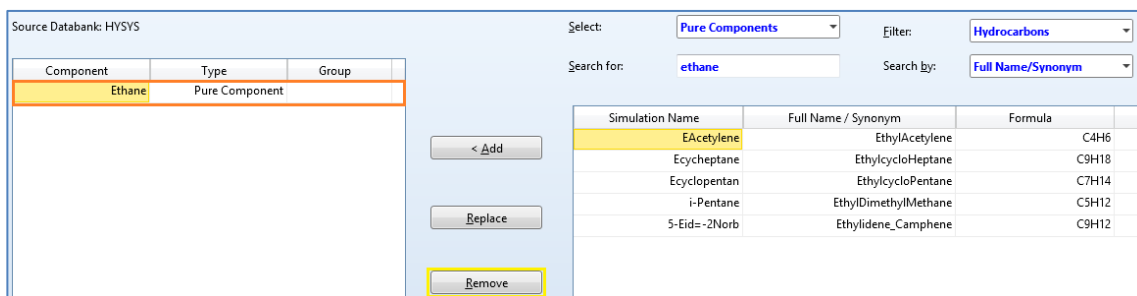
Se selecciona el compuesto requerido, en este ejemplo es el etanol, y por medio del botón Add se adiciona al cuadro de la izquierda visto en la figura 27. Si se requiere remover algún compuesto se hace clic en el botón *Remove*.

Figura 26. **Agregar el compuesto etanol al cuadro izquierdo de la pestaña**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

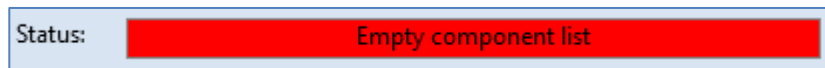
Figura 27. **Compuesto agregado en el lado izquierdo de la pestaña**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

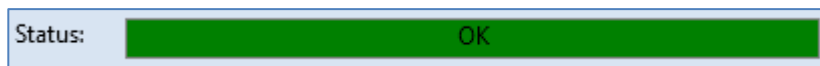
En la parte inferior existe un recuadro con la descripción de Status en el que observa en la figura 29 y 30, este es un indicador para establecer si se puede proseguir para la realización de la simulación. Si está de color rojo, significa que hace falta un dato o algún procedimiento que se ha omitido; si es verde, significa que el procedimiento se ha hecho bien y se puede proseguir.

Figura 28. **Recuadro de *Status* de color rojo**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

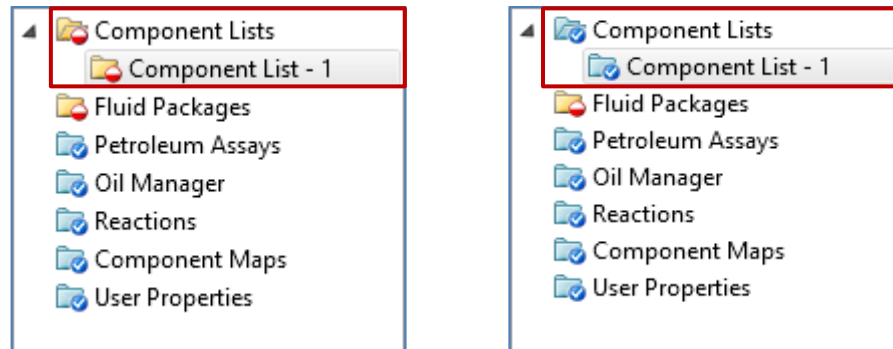
Figura 29. **Recuadro de *Status* de color verde**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Cuando se escoge o escogen los elementos para la realización de la simulación en el panel de navegación cambia el icono de *Component Lists*, a una carpeta con un cheque, significa que se han completado los requerimientos mínimos de esta pestaña.

Figura 30. **Comparación del icono de la pestaña *Component Lists* al realizar los requerimientos mínimos para la simulación**



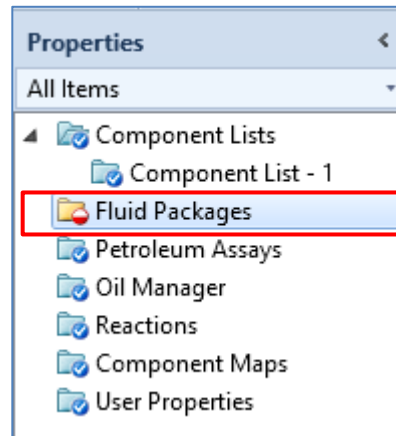
Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

2.7.1.3. Selección del paquete de fluidos

Al haber especificado los componentes implicados, el siguiente paso es especificar el paquete de fluidos. Este ayuda al cálculo de propiedades termodinámicas y de transporte de los componentes y mezclas que están involucradas en la simulación. La decisión del paquete es muy importante, debido a que cada uno tiene información de cómo desarrollar los cálculos para la información que se ingresa y, por lo tanto, los resultados obtenidos.

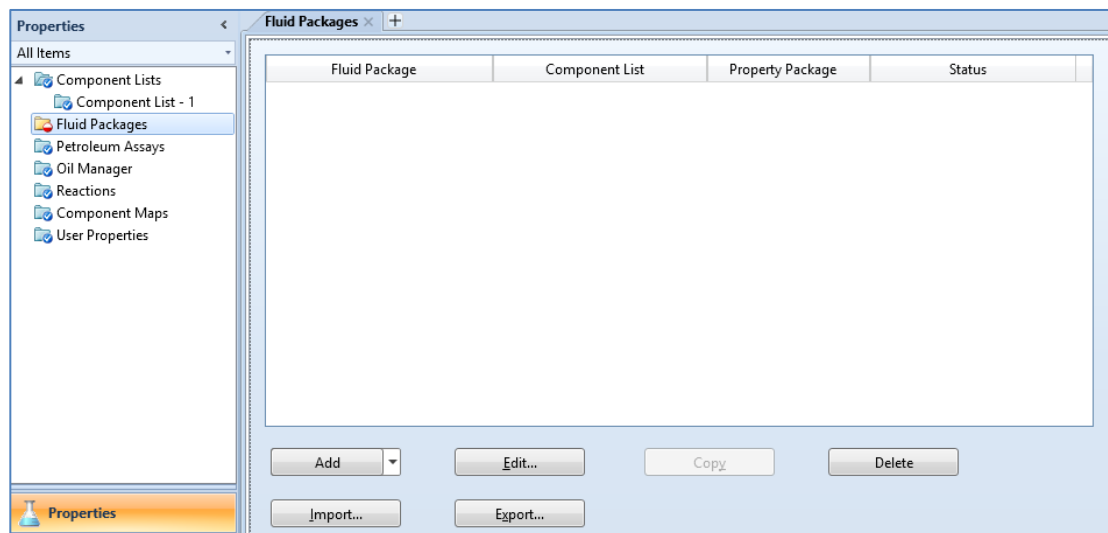
Para seleccionar el paquete de fluidos, debe de hacer “click” en la opción *Fluid Packages* que se encuentra en el panel de navegación mostrado en la figura 32, aparecerá una pestaña como en la figura 33.

Figura 31. Selección de la opción *Fluid Packages*



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Figura 32. Pestaña de la opción *Fluid Packages*



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Existen varios tipos de paquetes de fluidos en la base de datos del software, para agregar uno o varios, seleccionar el botón Add de la pestaña *Fluid Packages* y aparecerá un cuadro como en la figura 34.

Figura 33. **Cuadro para la selección del paquete de fluidos**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

En el cuadro de la figura 34 se puede observar que en la pestaña *Set Up*, una ventana del lado izquierdo, en se encuentra todos los paquetes de los modelos termodinámicos y fisicoquímicos que proporciona el software. La adecuada selección del o de los paquetes es crucial para el cálculo aproximado de la planta simulada.

El software clasifica los distintos modelos dependiendo del proceso que realizará la simulación. Los modelos que contiene en su base de datos son los siguientes:

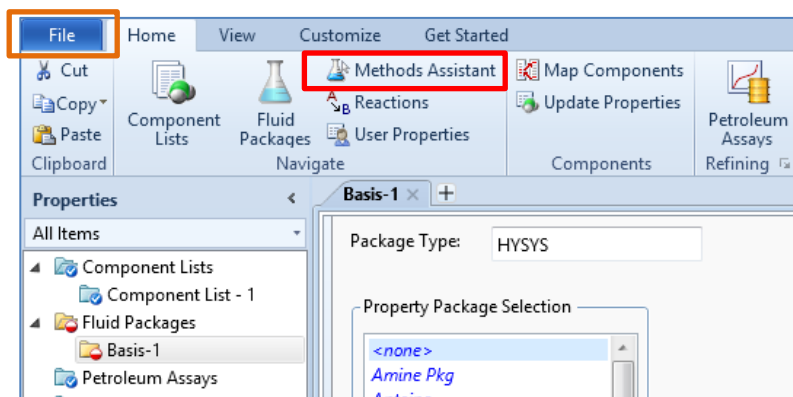
Tabla XI. **Paquetes de modelos para cálculos térmicos y de transporte disponibles en el software**

Ecuaciones de estado	Modelos de actividad	Modelo de Chao Seader & Grayson Streed	Modelos de presión de vapor	Tipos misceláneos
GCEOS	Chien Null	Chao Seader	Antoine	Amine Pkg
Kabadi Danner	Extended NRTL	Grayson Streed	Braun K10	DBR Amine Package
Lee-Kessler Plocker	General NRTL	-	Esso Tabular	ASME Stream
Peng-Robinson	Margules	-	-	Glycol PPkg
PRSV	NRTL	-	-	NBS Stream
Sour PR	UNIQUAC	-	-	MBWR
Sour SRK	Van Laar	-	-	OLI Electrolyte
Zudkevitch Joffee	Wilson	-	-	-
BWRS	-	-	-	-

Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

El software proporciona un asistente de ayuda para definir el modelo adecuado para determinado proceso de simulación. Para utilizarlo se selecciona *Home* en la barra de menú, luego la opción *Methods Assistant*.

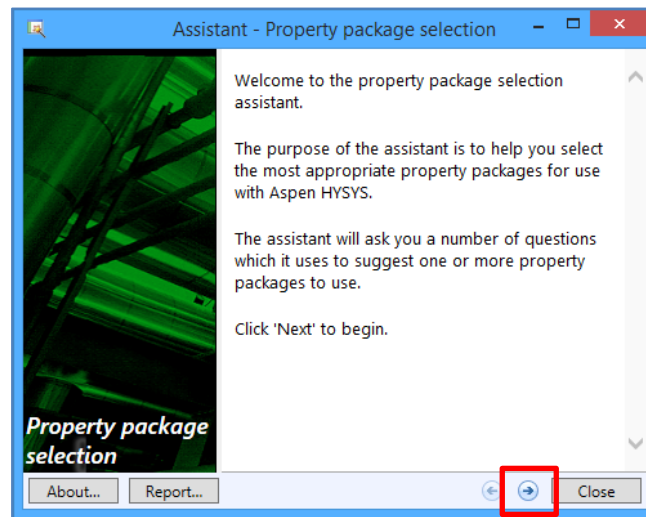
Figura 34. **Selección de la opción *Methods Assistant***



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Aparecerá un cuadro de diálogo como en la figura 36, en el que indica instrucciones breves de la utilización del asistente; para continuar se selecciona la flecha derecha que se encuentra en la parte inferior.

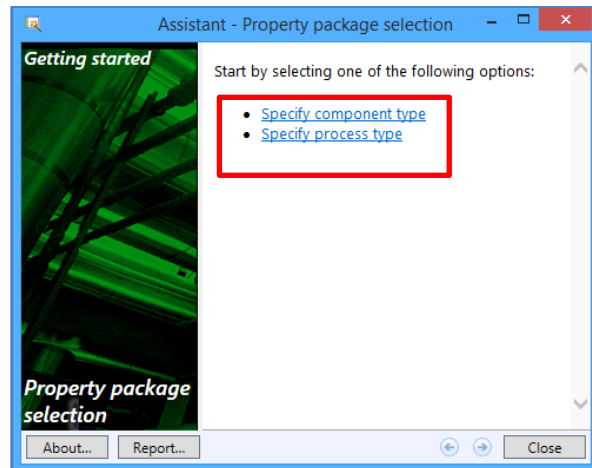
Figura 35. **Cuadro de diálogo de *Assistant Property Package Selection***



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

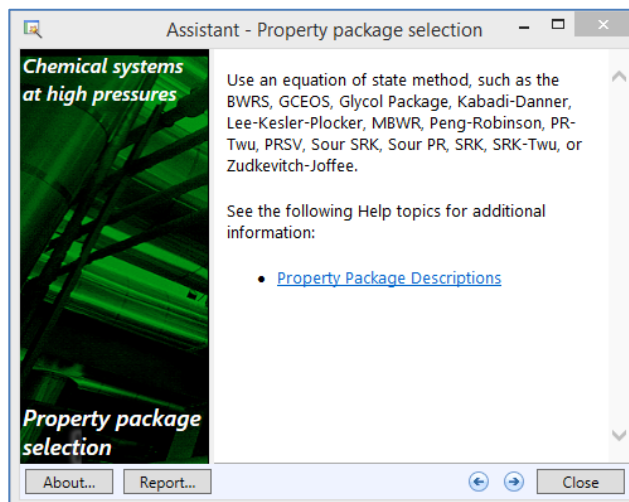
Aparecerán una serie de preguntas en las cuales se escogen los que mejor se adecuen a la situación del proceso por simular. En la figura 37 se muestra dos opciones para empezar, ya sea por medio del tipo específico de componente o por el tipo específico del proceso; según el que se escoja, se realiza un procedimiento específico de preguntas. Al final aparecen las sugerencias para seleccionar el o los modelos requeridos como el de la figura 38.

Figura 36. **Opción por componente o por proceso para empezar el asistente**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Figura 37. **Ejemplo del resultado del asistente para determinar los modelos termodinámicos para un sistema químico a alta presión**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Al haber seleccionado un modelo de la lista de la pestaña *Set Up*, visualizado en la figura 34, se selecciona la pestaña *Binary Coeffs* ubicado a la par de la pestaña *Set Up*. Aparecerá las opciones de las formas matriciales de los coeficientes binarios, también un cuadro con los componentes seleccionados previamente en la pestaña *Component Lists* en la primera columna y en la primera fila, en las demás casillas aparecen los coeficientes binarios.

Figura 38. Pestaña de *Binary Coeffs*

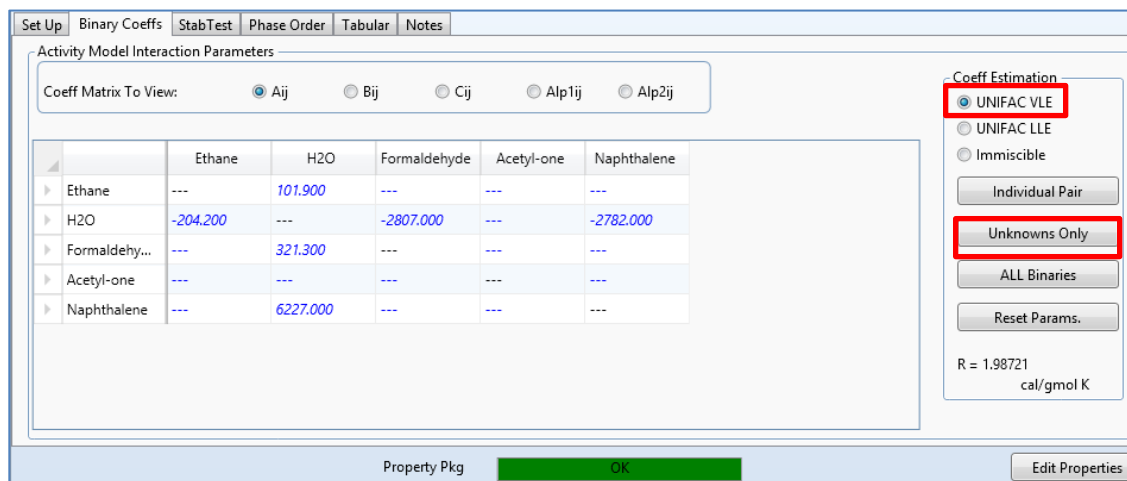
	Ethane	H2O	Formaldehyde	Acetyl-one	Naphthalene
Ethane	---	101.900	---	---	---
H2O	-204.200	---	-2807.000	---	-2782.000
Formaldehy...	---	321.300	---	---	---
Acetyl-one	---	---	---	---	---
Naphthalene	---	6227.000	---	---	---

Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Existen cuadros vacíos en los coeficientes binarios que son necesarios para cálculos posteriores. El software tiene la opción de calcularlo automáticamente; para realizarlo se selecciona el método de estimación, en este caso es UNIFAC VLE que se encuentra al lado derecho de la pestaña y

luego la opción *Unknowns Only*. Este procedimiento se puede realizar con cada forma matricial que aparece en la pestaña.

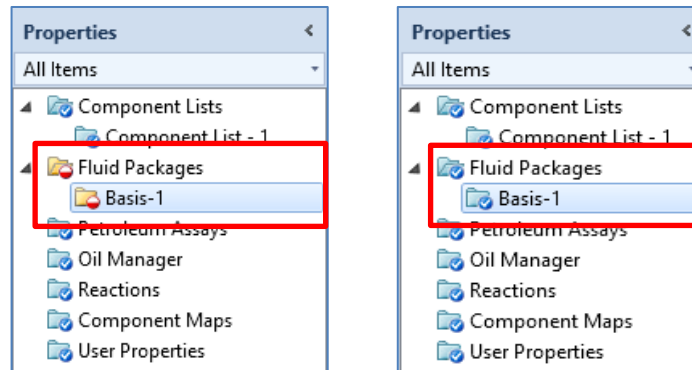
Figura 39. **Cálculo de los coeficientes binarios faltantes con la forma matricial Aij**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

De esta forma en el panel de navegación aparece el cambio de icono sobre la opción *Fluid Packages* indicando que está completo el requerimiento mínimo de esta opción.

Figura 40. **Comparación del icono de la pestaña *Fluid Packages* al realizar los requerimientos mínimos para la simulación**

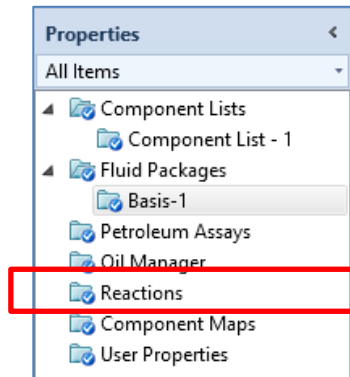


Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

2.7.1.4. Reacciones químicas involucradas

En el software existe la opción de involucrar reacciones químicas por medio de dos tipos básicos de reactores, el CSTR y el PFR, con varios subgrupos. Para realizar esto hay que seleccionar las especies involucradas y el tipo de reacción. Al seleccionar los componentes, con la ayuda de la opción *Component Lists*, y el tipo de paquete de flujos, con la opción *Fluid Packages*, se determina las reacciones que están involucradas en el proceso y que se requieren en la simulación. Se selecciona la pestaña *Reactions* en el panel de navegación mostrada en la figura 42.

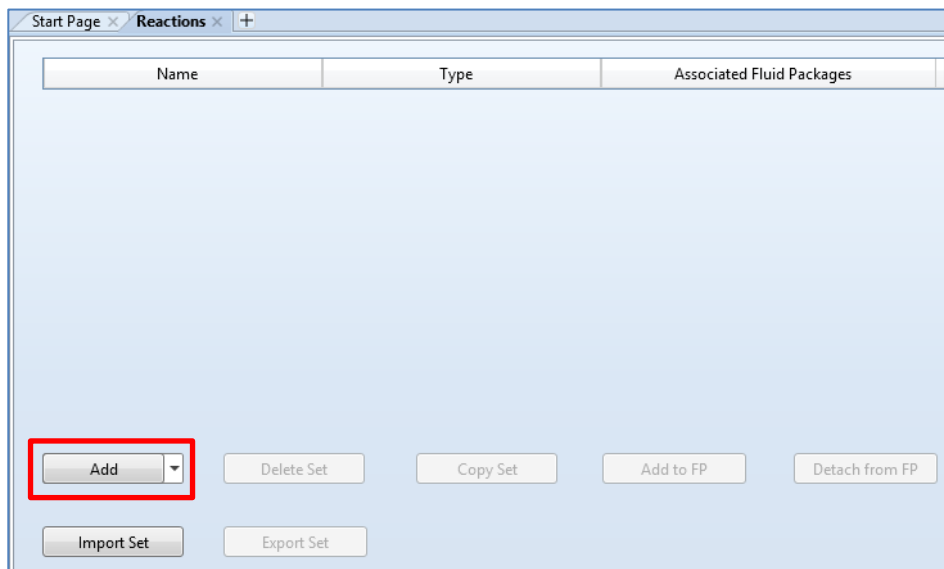
Figura 41. Selección de la opción **Reactions**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Aparecerá una pestaña visualizada en la figura 43, luego debe hacerse clic en el botón Add que se encuentra en la parte inferior.

Figura 42. Pestaña de la opción **Reactions**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Aparecerá un cuadro como en la figura 44.

Figura 43. **Cuadro de la opción Add de la pestaña de *Reactions***

Set Info

Set Type: Unknown

Not Ready

Add to FP

Detach from FP

Advanced...

Active Reactions	Type	Configured	Operations Attached
------------------	------	------------	---------------------

Add Reaction

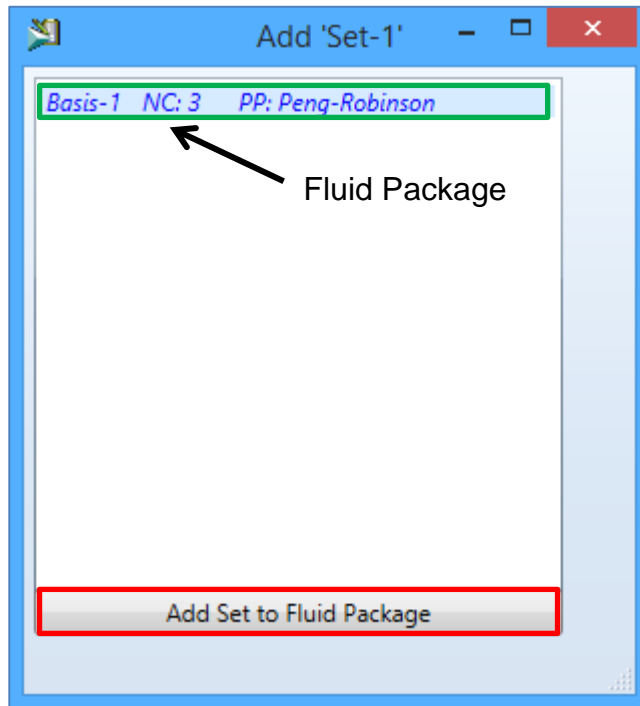
Delete Reaction

Copy Reaction

Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Se selecciona el botón Add to FP que aparece en el lado superior izquierdo de la figura 44 y se selecciona el paquete de fluido escogido anteriormente en la pestaña *Fluid Packages*, luego se hace clic en la opción *Add Set to Fluid Package* como se muestra en la figura 45

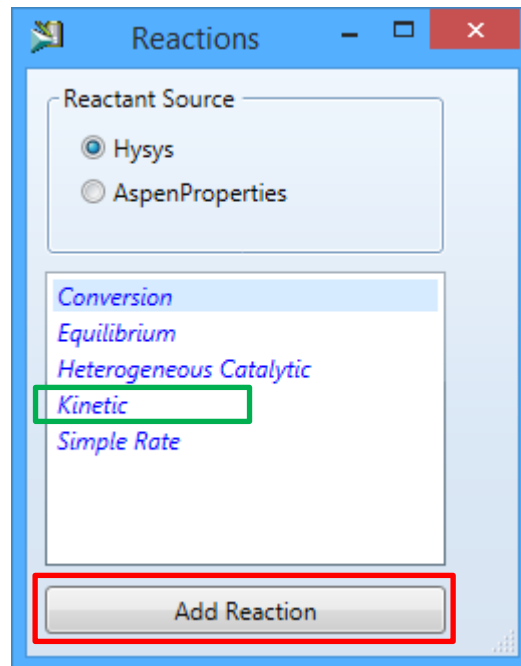
Figura 44. **Cuadro de diálogo del botón Add to FP**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Luego oprimir el botón inferior de la figura 44 con el nombre de Add Reaction, aparecerá otro cuadro de diálogo, en él se escoge el tipo de reacción como se observa en la figura 46.

Figura 45. **Cuadro de diálogo para escoger el tipo de reacción**

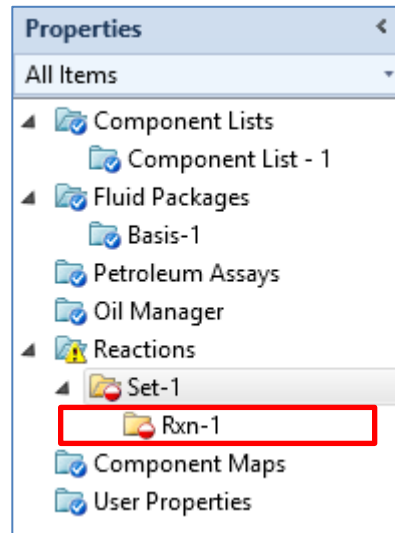


Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Por ejemplo, si la reacción es de tipo cinético, se escoge la opción *Kinetic* y luego hacer uno o varios clic en la opción *Add Reaction* para determinar la cantidad de reacciones de este tipo que existirán en la simulación, luego se oprime la opción cerrar en la parte superior de la ventana.

Aparecerá en el cuadro de la figura 44, la lista de las reacciones que se seleccionaron anteriormente; luego elige la opción *Set-1* que aparece en el panel de navegación, en donde se escoge la carpeta subdividida con el nombre *Rxn-1* como se indica en la figura 47.

Figura 46. Selección de la carpeta Rxn-1 de la pestaña *Reactions*



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Aparece un cuadro como en la figura 48, la primera fila indica diferentes descripciones para el desarrollo de la reacción; en la primera columna existe un recuadro con la descripción ****Add Comp****, en donde se seleccionan los componentes que estén involucrados, se va llenando las columnas conforme se requiera para el desarrollo del mismo como también del lado izquierdo de la pestaña. Al finalizar se debe hacer clic en el botón balance, si es aceptable cambiará la barra roja que se encuentra en la parte inferior de la ventana en color verde y en el panel de navegación cambiará los íconos por las carpetas azules en la pestaña *Reactions* con sus subdivisiones como en la figura 49.

Figura 47. Cuadro de Rxn-1 de la pestaña *Reactions*

Stoichiometry and Rate Info

Component	Mole Wt.	Stoich Coeff	Fwd Order	Rev Order
E-Benzene	106.166	<empty>	<empty>	<empty>

Add Comp

Balance

Balance Error: 0.00000
Reaction Heat (25 C): <empty>

Basis

Basis: Molar Conc
Base Component: <empty>
Rxn Phase: LiquidPhase
Min. Temperature: -273.1 C
Max Temperature: 3000 C

Basis Units: kgmole/m^3
Rate Units: $\text{kgmole/m}^3\text{-s}$

Forward Reaction

A: <empty>
E: <empty>
b: <empty>

Reverse Reaction

A': <empty>
E': <empty>
b': <empty>

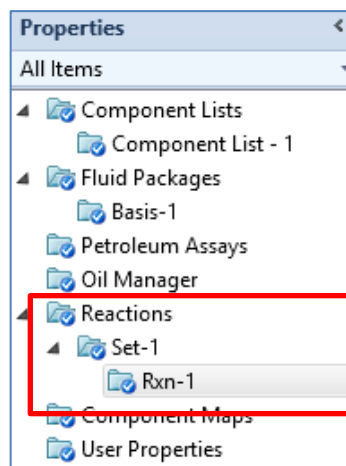
Equation Help

$r = k \cdot f(\text{Basis}) - k' \cdot f'(\text{Basis})$
 $k = A \cdot \exp \{ -E / RT \} \cdot T^b$
 $k' = A' \cdot \exp \{ -E' / RT \} \cdot T^{b'}$
 T in Kelvin

Not Ready

Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Figura 48. Pestaña *Reactions* con sus subdivisiones en el panel de navegación

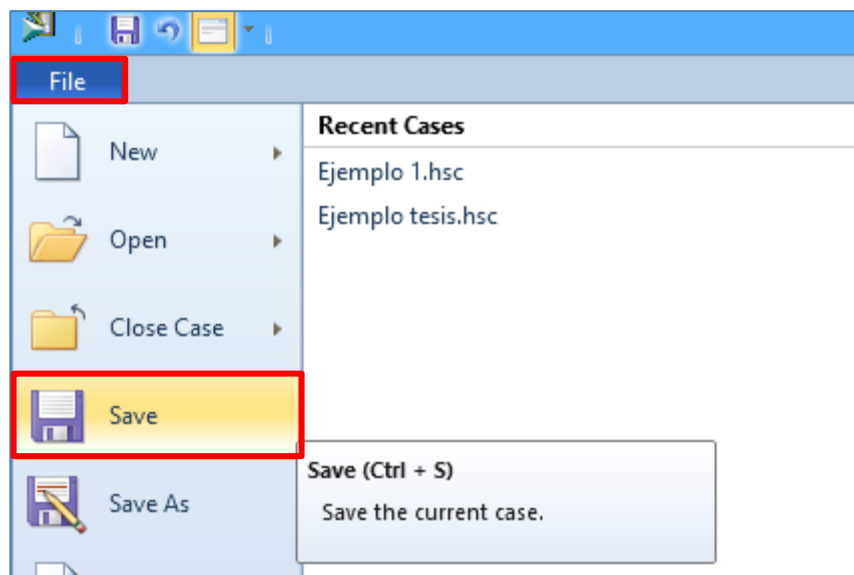


Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

2.7.1.5. Guardar el trabajo

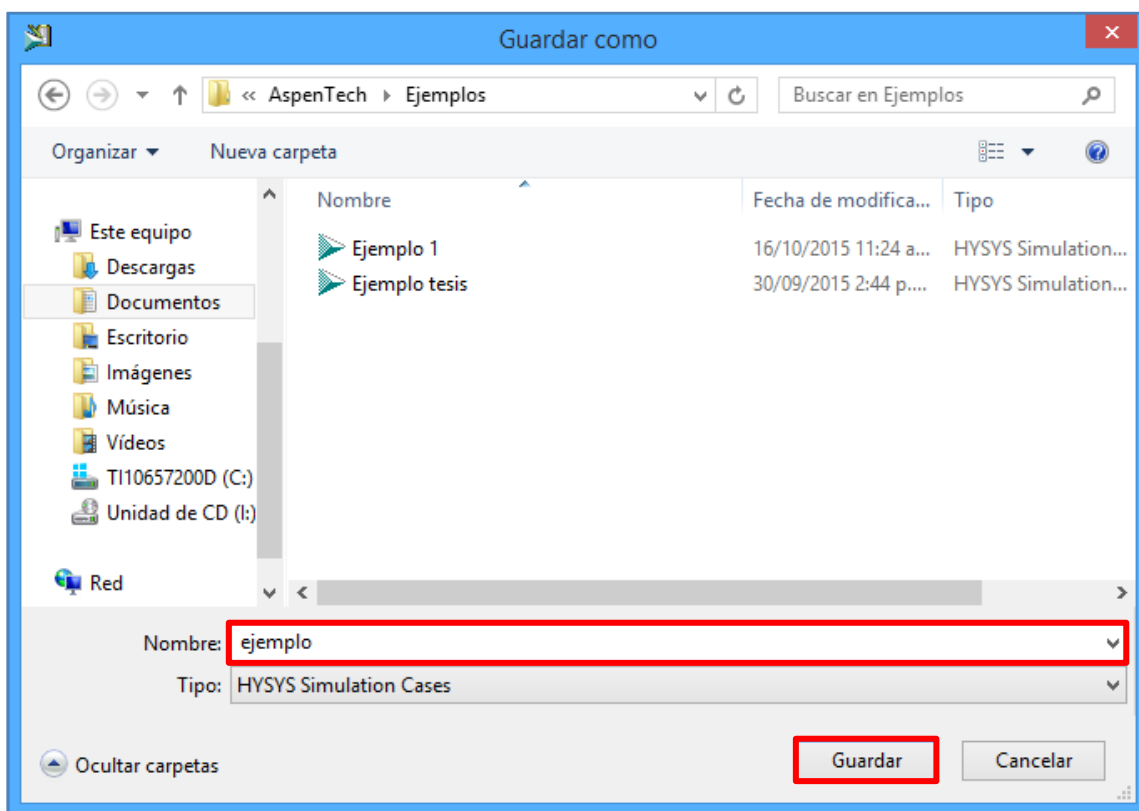
Para guardar el proyecto debe dirigirse en la barra de menú, en la opción *File* y luego hacer clic en la opción *Save* como se presenta en la figura 50. Aparecerá una ventana en donde se escoge la carpeta en donde lo guardará y el nombre del archivo, Hysys lo guardará con la extensión “.hcs”.

Figura 49. Opción **Save** para guardar el archivo



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Figura 50. **Ventana para guardar el archivo con extensión “.hcs”**

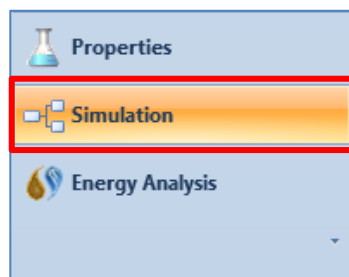


Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

2.7.1.6. Entorno de simulación

Al escoger los componentes químicos y el paquete de fluidos puede ingresarse al entorno de simulación para armar el proceso. Para ingresar, se debe escoger la opción *Simulation* que se ubica en los botones de navegación que se muestra en la figura 52.

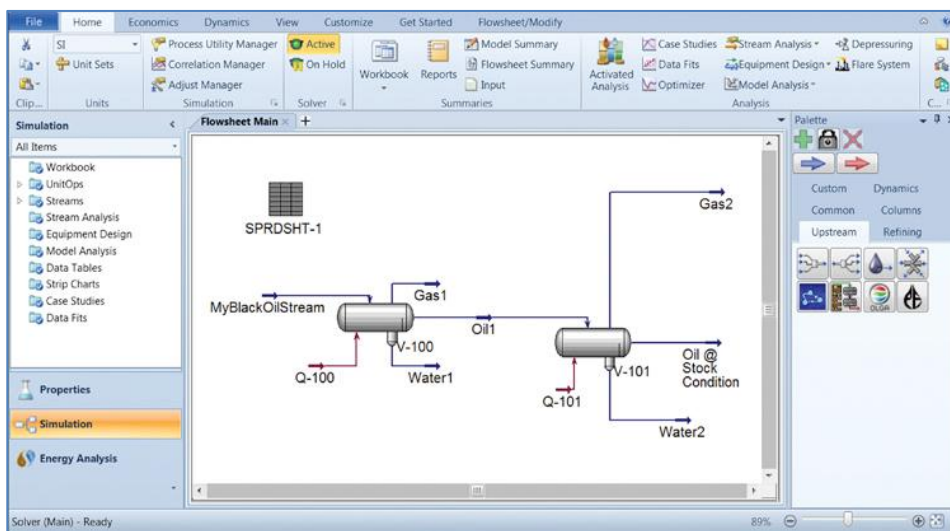
Figura 51. Ingreso al entorno de simulación



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

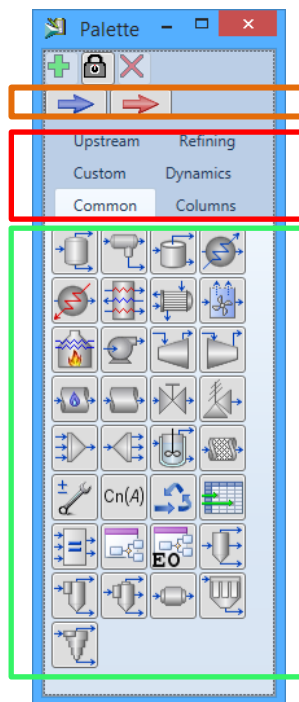
Cambiará el entorno de trabajo en un espacio en blanco, en donde se realiza el proceso de la simulación; también aparecerá una paleta de objetos, en donde se selecciona el equipo o las corrientes que se introducen en la simulación.

Figura 52. Visualización de la pantalla de simulación



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Figura 53. **Paleta de objetos**



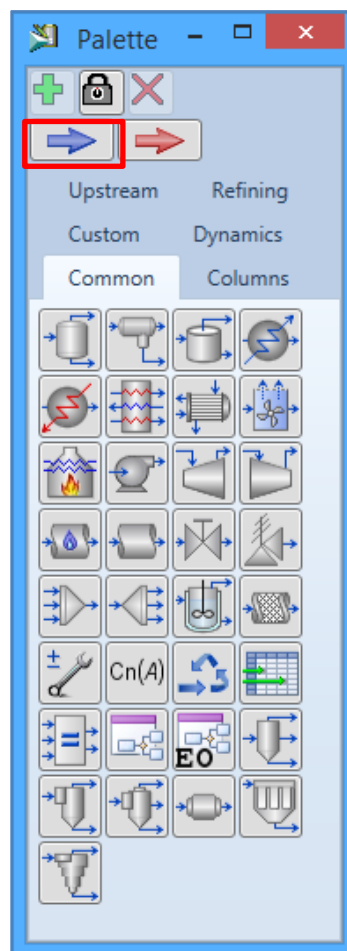
Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

La paleta de objetos se divide en tres partes principales; en la figura 54, se muestra la división por medio de recuadros. En el recuadro amarillo existen dos flechas, una azul y la otra roja, la primera es la corriente de materia y la segunda es la corriente de energía. En el recuadro rojo se presentan seis pestañas, en cada una se presentan diferentes equipos dependiendo del proceso que aparecen en la parte inferior como se muestra en el recuadro verde de la figura 54. Para ocultar la paleta, puede cerrarse y volverse abrir con la tecla F4.

2.7.1.7. Ingreso de corrientes en el entorno de simulación

Para ingresar las corrientes que están involucradas en la simulación, se selecciona la flecha azul que se ubica en la paleta de objetos como se observa en la figura 55.

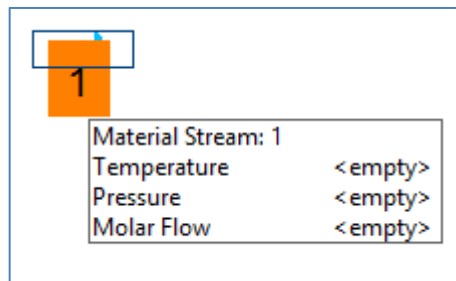
Figura 54. Selección del icono de corriente



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Aparecerá en el puntero del *mouse* un cuadro en donde se coloca en cualquier parte de la pantalla de simulación por medio de un clic, aparecerá un cuadrado de color naranja enumerado, al colocar el cursor encima de la figura aparece información de la corriente, si no se ha ingresado valores aparecerá con la palabra Empty como se muestra en la figura 56.

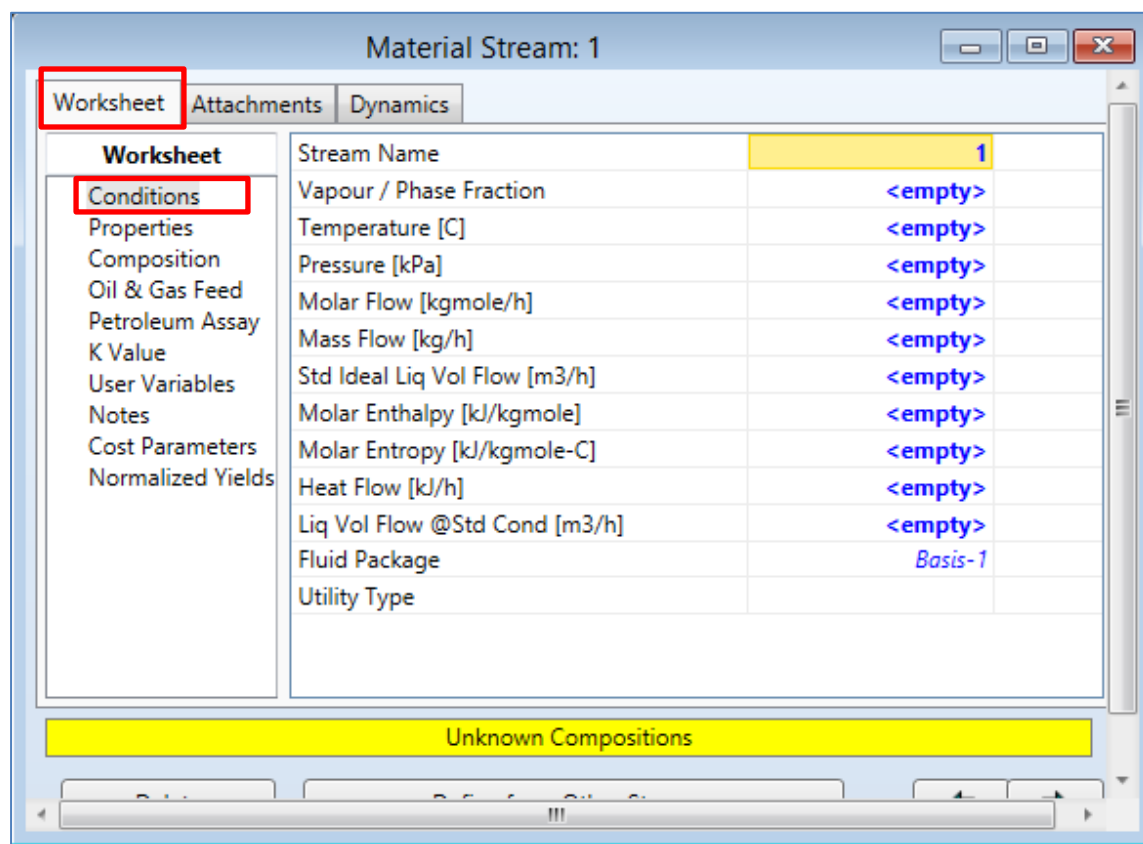
Figura 55. **Vista de la corriente en la pantalla de la simulación**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Para el ingreso de los datos, se hace doble clic encima de la imagen, aparecerá una ventana de diálogo con tres pestañas. En la pestaña de *Worksheet* que se visualiza en la figura 57, aparece una lista en el cuadro izquierdo, al seleccionar uno aparece en el cuadro derecho. Para definir la composición de la corriente se selecciona la opción *Conditions* del lado izquierdo del recuadro.

Figura 56. Ventana de propiedades de la corriente



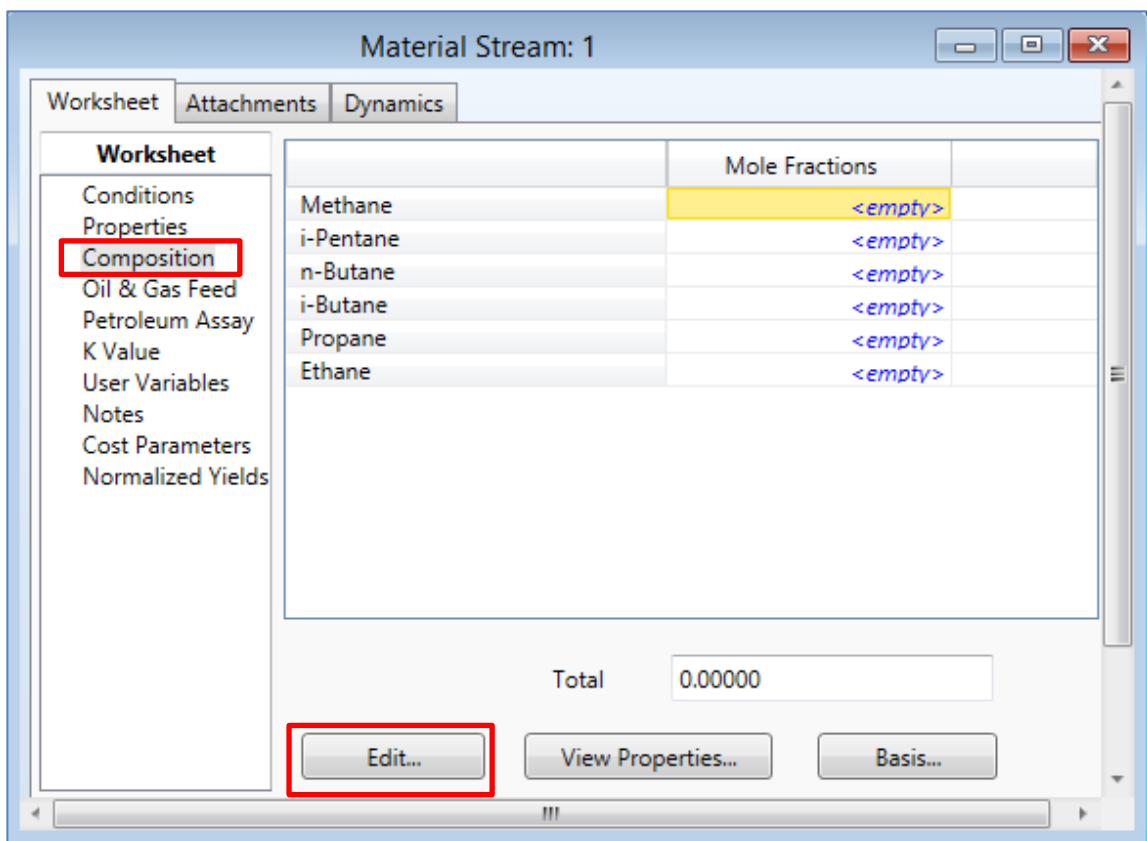
Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Para cambiar el nombre de la corriente, se escribe el nombre en el cuadro que se encuentra a la par de la descripción *Stream Name*, en la figura 57 aparece con el número uno. En esta ventana puede cambiarse las condiciones en las que se encuentra la corriente, al sobrescribir en los recuadros con la descripción *Empty*.

Para ingresar la composición de la corriente, se selecciona la opción *Composition* que se encuentra en el recuadro izquierdo, aparecerá el listado de los componentes que se han escogido anteriormente como se muestra en la

figura 58. En los cuadros que aparecen con la descripción *Empty*, se sobrescribe los valores que se desean en cada flujo, por defecto del software, las composiciones están en fracción molar, pero puede cambiarse por medio de la opción *Edit* que se encuentra en la parte inferior de la ventana de composición, el cual aparecerá una ventana como la figura 59, se selecciona el tipo de composición deseado en el flujo y luego se selecciona el botón *Ok* que se encuentra en la parte inferior de la ventana.

Figura 57. **Ventana para el ingreso de composición de la corriente**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Figura 58. Ventana para la elección de la base de composición de la corriente

	MoleFraction
Methane	<empty>
i-Pentane	<empty>
n-Butane	<empty>
i-Butane	<empty>
Propane	<empty>
Ethane	<empty>

Composition Basis

- ☒ Mole Fractions
- ☐ Mass Fractions
- ☐ Liq Volume Fractions
- ☐ Mole Flows
- ☐ Mass Flows
- ☐ Liq Volume Flows

Composition Controls

Erase

Normalize

Cancel

OK

Equalize Composition

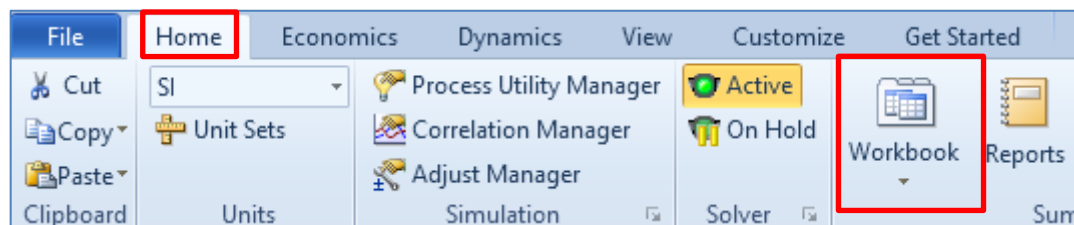
Total 0.0000

Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Aparecerá nuevamente la ventana de la figura 58, en la parte inferior aparece una barra horizontal de color amarillo, si esta cambia a color verde significa que los requerimientos mínimos para el funcionamiento de la corriente están completos por lo que se puede cerrar la ventana.

Existe otra manera para ingresar a la pestaña del *Workbook* sin la necesidad de hacer clic en alguna corriente, se selecciona la opción *Home* de la barra de menú, se hace clic en el icono de *Workbook* que aparece en la barra de herramientas como se observa en la figura 60.

Figura 59. **Escogiendo el ícono de *Workbook* desde la opción *Home***



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Aparecerá una ventana con varias pestañas como se muestra en la figura 61. La primera pestaña con la descripción *Material Stream*, se observa en la primera columna una lista de propiedades, y en la primera fila aparecen los nombres de cada corriente que se ingresa en el simulador. Si se selecciona la pestaña de *Compositions* aparece una lista en la primera columna de la composición de cada componente escogido anteriormente y en la primera fila aparecen los nombres de las corrientes, este se visualiza en la figura 62.

Figura 60. Pestaña de Material *Streams* en la opción *Workbook*

Name	etano	metano	propano	** New **
Vapour Fraction	<empty>	<empty>	<empty>	
Temperature [C]	<empty>	<empty>	<empty>	
Pressure [kPa]	<empty>	<empty>	<empty>	
Molar Flow [kgmole/h]	<empty>	<empty>	<empty>	
Mass Flow [kg/h]	<empty>	<empty>	<empty>	
Liquid Volume Flow [m3/h]	<empty>	<empty>	<empty>	
Heat Flow [kJ/h]	<empty>	<empty>	<empty>	

Material Streams | Compositions | Energy Streams | Unit Ops

ProductBlock_etano
FeederBlock_etano

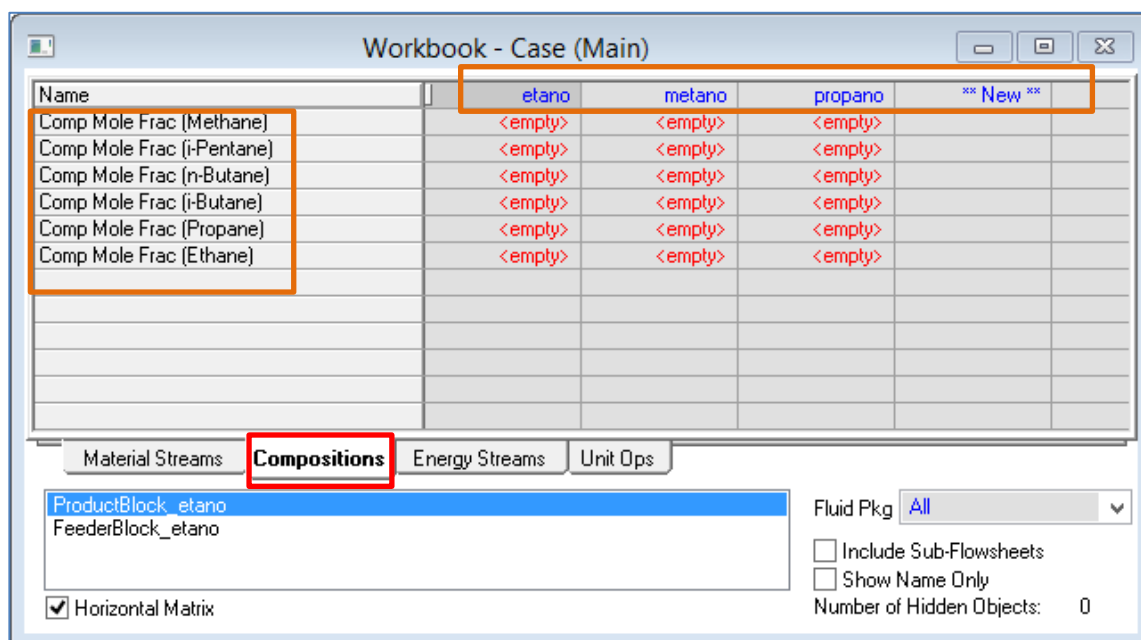
Fluid Pkg: All

☐ Include Sub-Flowsheets
☐ Show Name Only
Number of Hidden Objects: 0

☒ Horizontal Matrix

Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Figura 61. Pestaña de *Compositions* en la opción *Workbook*



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

2.7.1.8. Incorporar operaciones unitarias en el entorno de la simulación

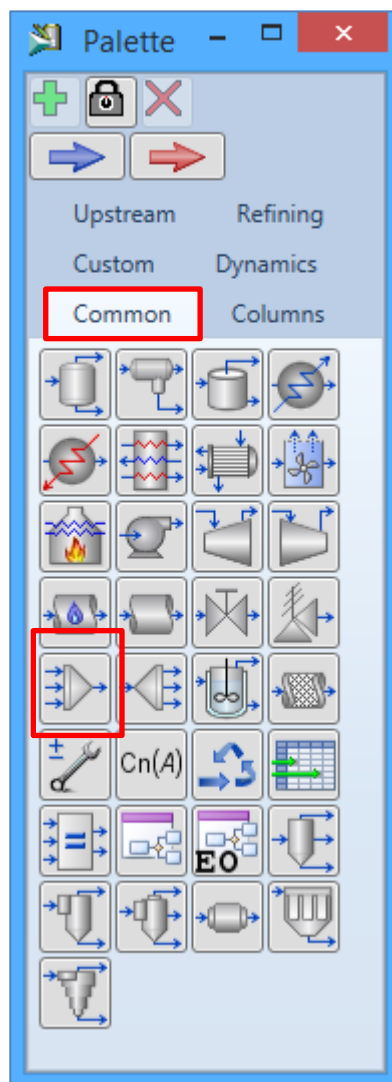
A continuación se explica la incorporación y utilización de las operaciones unitarias en el simulador.

2.7.1.8.1. Agregar un mezclador con la función *Mixer*

Para agregar un mezclador en área de simulación, se selecciona el icono de Mixer ubicado en la paleta de objetos y en la pestaña de *Common* como se

muestra en la figura 63. Luego se hace clic en cualquier parte del entorno de trabajo y aparecerá la imagen del *Mixer*.

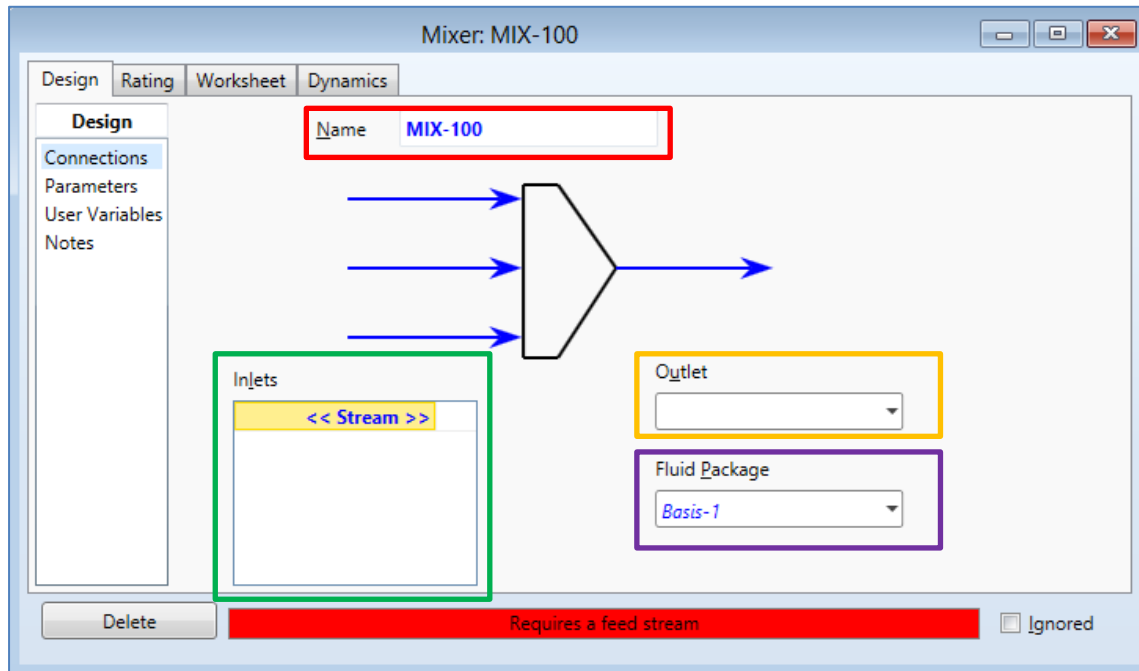
Figura 62. Selección de la opción *Mixer* en la paleta de objetos



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Para añadir las corrientes que ingresan al mezclador, se hace doble clic sobre la imagen del mezclador, aparecerá una ventana en la pestaña *Design* y seleccionado en la opción *Connections* como la figura 64. Para un mejor entendimiento del manejo de la ventana, se selecciona con recuadros de colores en las que se describe a continuación su funcionamiento. Para el cambio del nombre del mezclador, se selecciona el cuadro con la descripción *Name*, seleccionado con el cuadro rojo. Para añadir los componentes que ingresan en el mezclador se selecciona la descripción *Stream*, en el que aparecerá la lista de los componentes que se escogieron previamente; en la figura se encuentra seleccionado con el cuadro verde. Para escoger el componente que sale del mezclador, se hace clic en la flecha que aparece en el cuadro en blanco con la descripción *Outlet*, el cual está seleccionado con el cuadro naranja. El cuadro morado de la figura es para seleccionar el paquete de fluidos en el que se basará el mezclador. El recuadro rojo que aparece en el inferior de la ventana cambiará a color verde cuando los requerimientos mínimos se cumplan.

Figura 63. Ventana de la opción *Mixer*

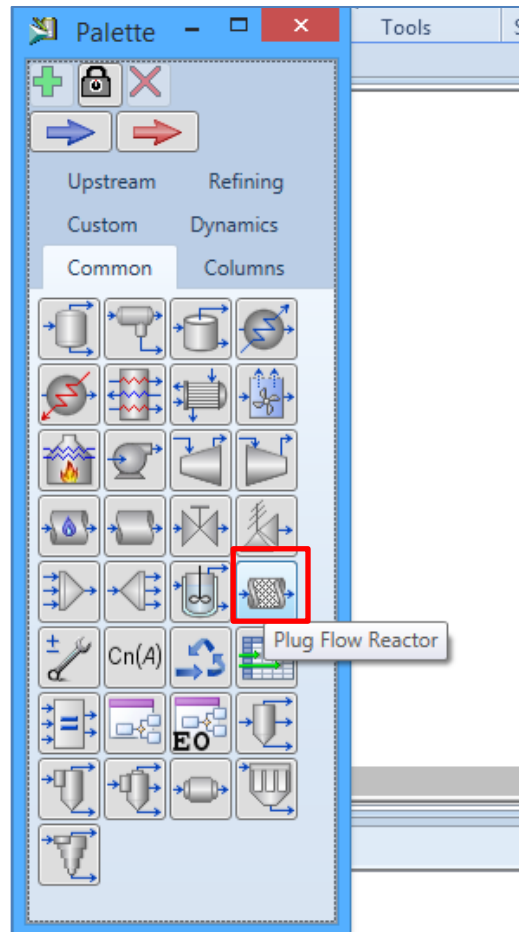


Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

2.7.1.8.2. Agregar la operación de un reactor PFR

Al igual que el mezclador, en la paleta de objetos se selecciona el icono del reactor PFR, el cual tiene la descripción *Plug Flow Reactor*, como se observa en la figura 65, y se coloca en cualquier parte de la pantalla de trabajo.

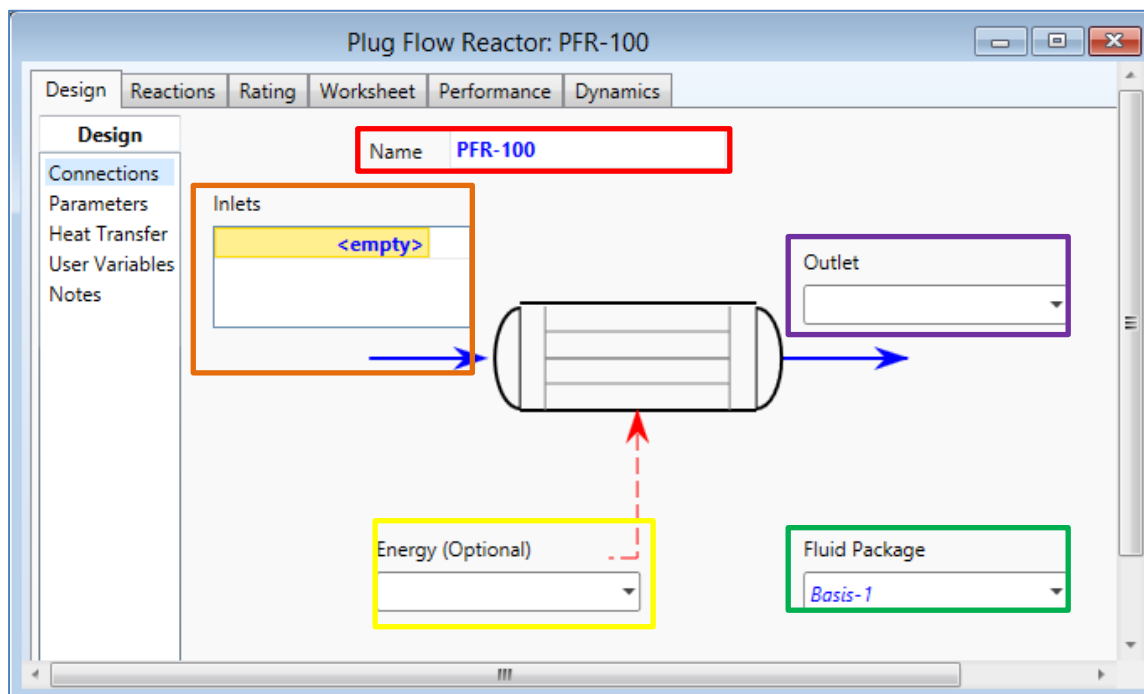
Figura 64. Selección de la opción *Plug Flow Reactor* en la paleta de objetos



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Para el ingreso de los datos, se hace doble clic sobre el icono colocado en la pantalla de simulación, aparecerá una ventana con la pestaña *Design* y la opción *Connections* como se muestra en la figura 66.

Figura 65. Ventana de la opción PFR



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Para un mejor entendimiento de la figura 66, las funciones están señaladas con cuadros de colores. Para el cambio de nombre del reactor, se selecciona el recuadro en blanco con la descripción *Name*, el cual está señalado con un cuadro rojo. Para ingresar las corrientes que entrar al reactor, se selecciona el recuadro con la descripción *Inlets*, este está señalado con un cuadro naranja. Para nombrar las corrientes que salen del reactor es en el recuadro con la descripción *Outlet* indicado con un cuadro morado. El cuadro señalado con amarillo es para el ingreso de la cantidad de energía que se administra el reactor, tiene la descripción de *Energy* y es opcional. Para establecer qué tipo de paquete de fluidos se utilizará en el reactor, se

selecciona el recuadro blanco, este posee la descripción *Fluid Package* que se encuentra seleccionado con verde en la figura.

Al haber establecido las corrientes involucradas en el reactor, se selecciona la pestaña *Rating* visualizado en la figura 67.

Figura 66. Ventana de la opción *Rating* del reactor PFR

Plug Flow Reactor: PFR-100

Design Reactions **Rating** Worksheet Performance Dynamics

Rating
Sizing
Nozzles

Tube Dimensions

Total Volume	<empty>
Length	<empty>
Diameter	<empty>
Number of Tubes	1
Wall Thickness	5.000e-003 m

Tube Packing

Void Fraction	1.000
Void Volume	<empty>

Delete Requires a feed stream

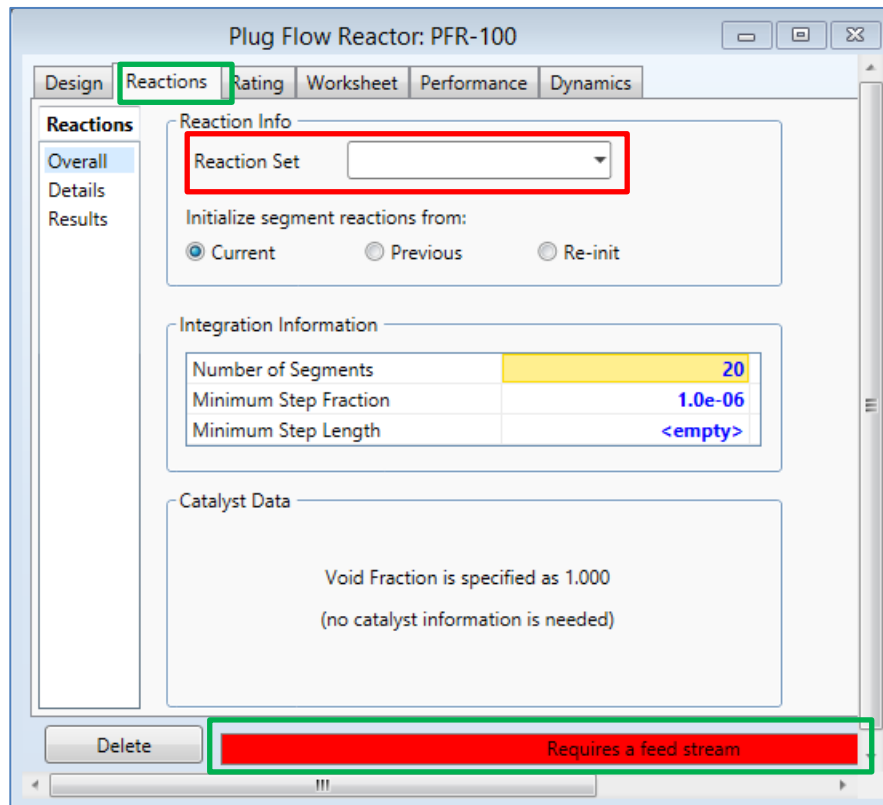
Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

En la figura 67 se señala las funciones de la opción *Sizing* por medio de cuadros. El cuadro de color verde con la descripción *Tube Dimensions* se ingresa el volumen total, la longitud y el diámetro del reactor PFR, también se escribe el número de tubos y el espesor de las paredes de la tubería. Para que el programa funcione con los requisitos mínimos, solo es necesario ingresar los valores del diámetro y longitud. El cuadro naranja con la descripción *Tube*

Packing, en donde se especifica las condiciones de vacío en la tubería, estos valores son opcionales.

Luego se señala la pestaña *Reactions* ubicada en la parte superior de la ventana del reactor PFR, aparecerá un recuadro como la figura 68.

Figura 67. **Pestaña *Reactions* de la ventana del reactor PFR**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Se selecciona el menú desplegable con la descripción *Reaction Set* señalado con un cuadro rojo en la figura 68, el cual se escoge el tipo de reacción en el que anteriormente se ingresa, explicado en la sección 2.6.1.3. El

rectángulo horizontal de color rojo que aparece en la parte inferior de la ventana señalado con un cuadro de color verde, cambiará de color amarillo indicando que no se puede resolver, esto se debe a que el reactor tiene un grado de libertad no establecido, por lo que hay que especificar la temperatura de la corriente de salida o el flujo de energía en el reactor. Tomando en cuenta una reacción isotérmica, se especifica la temperatura de la corriente de salida, para ello se selecciona la pestaña *Worksheet* como se muestra en la figura 69.

Figura 68. **Pestaña *Worksheet* de la ventana del reactor PFR**

Worksheet	Name	Mezcla al reactor	Producto
Vapour	<empty>	<empty>	<empty>
Temperature [C]	<empty>	<empty>	<empty>
Pressure [kPa]	<empty>	<empty>	<empty>
Molar Flow [kgmole/h]	<empty>	<empty>	<empty>
Mass Flow [kg/h]	<empty>	<empty>	<empty>
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	<empty>	<empty>	<empty>
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	<empty>	<empty>	<empty>
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	<empty>	<empty>	<empty>
Heat Flow [kJ/h]	<empty>	<empty>	<empty>

Delete Not Solved

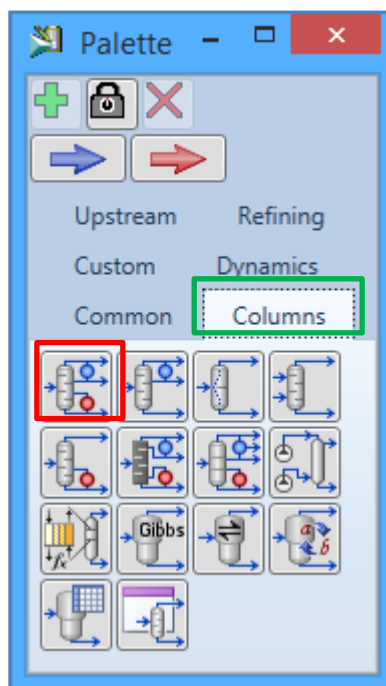
Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

El cuadro de la figura 69 de color verde señalado con una flecha, indica que en esa casilla se escribe la temperatura de la corriente de salida, por lo que el recuadro inferior horizontal cambiará a color verde y puede cerrar la ventana; si no cambia de color debe de verificar que todos los datos se han ingresado.

2.7.1.8.3. Agregar una columna de destilación

Para añadir una columna de destilación en el entorno de la simulación se selecciona la pestaña *Columns* de la paleta de objetos, aparece una serie de íconos para la selección de diferentes torres de destilación, pero se escogerá la opción *Distillation Column Sub-Flowsheet* visualizado en la figura 70.

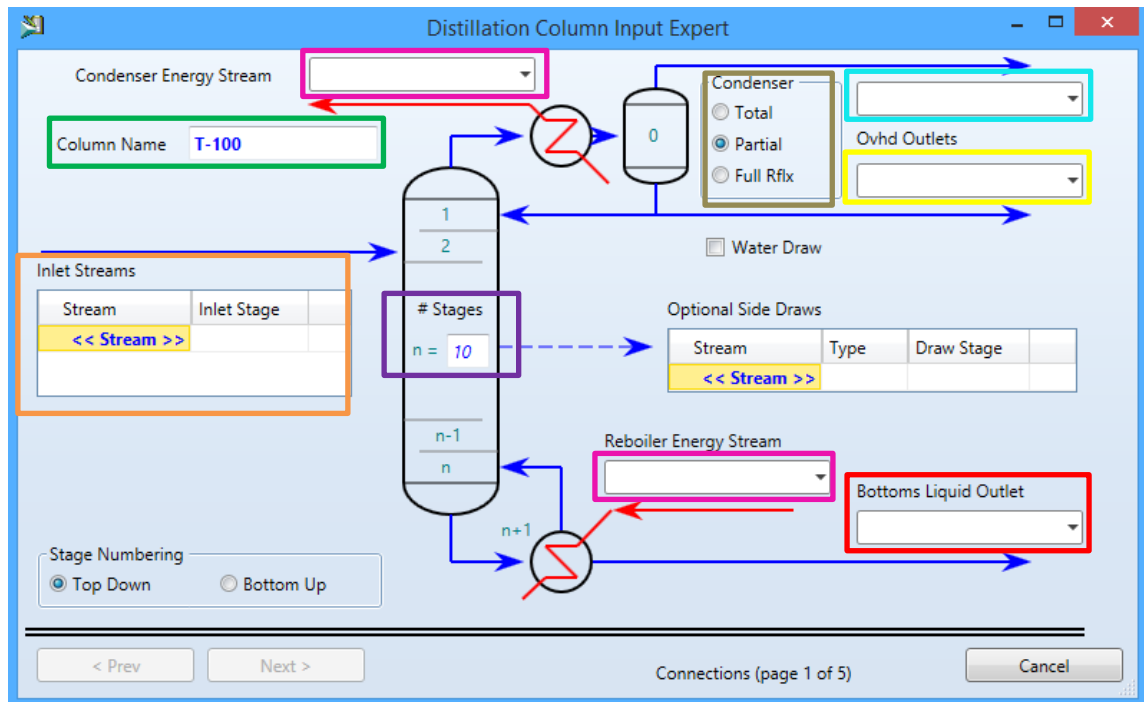
Figura 69. Selección de la opción *Distillation Column Sub-Flowsheet* en la paleta de objetos



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Al seleccionarlo se hace clic en cualquier parte de la pantalla de simulación. Para el ingreso de datos se realiza doble clic sobre la imagen, aparecerá una ventana como la figura 71.

Figura 70. **Página uno de la opción *Distillation Column***



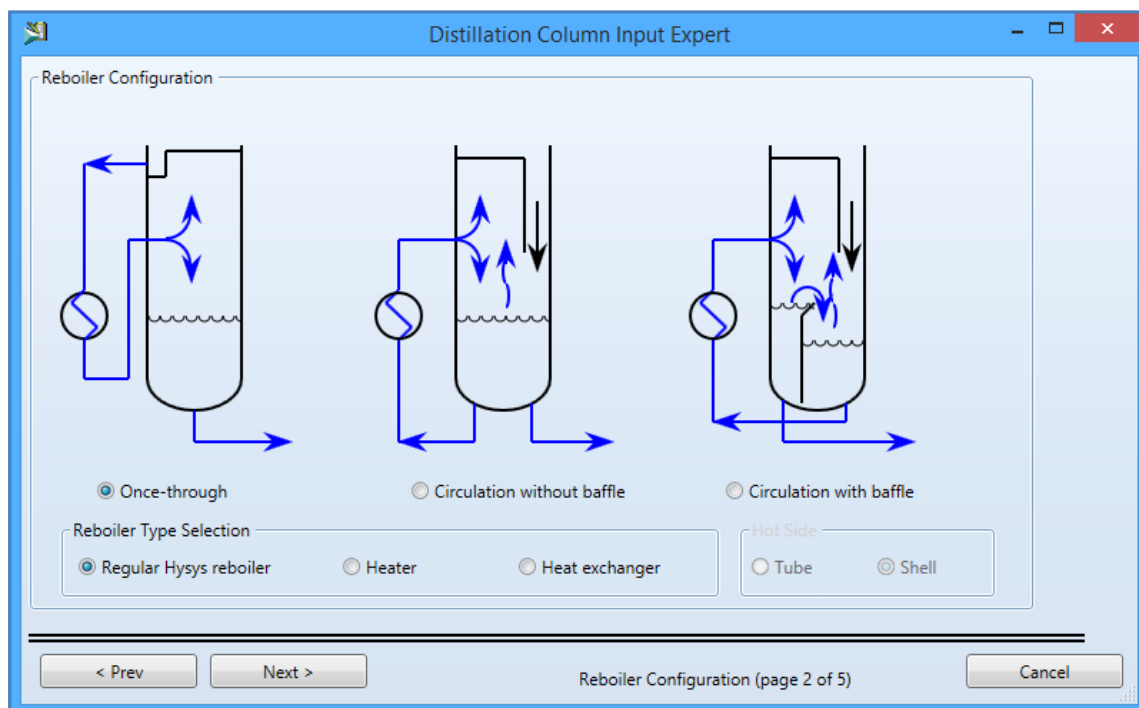
Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

En la figura 71 se señala con cuadros de colores para mejor entendimiento de la ventana. El cuadro de color verde con la descripción *Column Name* es para el cambio del nombre de la columna de destilación; en el cuadro de color naranja con la descripción *Inlet Streams* se selecciona las corrientes de entrada a la torre de destilación; el cuadro de color morado con la descripción *# Stages* indica el número de etapas de la columna. Por defecto, el programa proporciona columnas preconstruidas por lo que indica $n=10$. El cuadro celeste selecciona el nombre la salida de los vapores del condensado; el cuadro amarillo nombra la salida del destilado; el cuadro de color café especifica si el condensado es parcial o total; el cuadro de color rojo especifica el nombre de la salida de los

fondos; los cuadros rosados nombran las corrientes de energía del condensador y del calderín respectivamente.

Al establecer lo anterior se hace clic en el botón inferior con el nombre *Next* para continuar. Aparecerá una ventana como la figura 72. En esta ventana se selecciona el tipo de configuración del rehervidor. Al seleccionar las configuraciones se selecciona el botón *Next*.

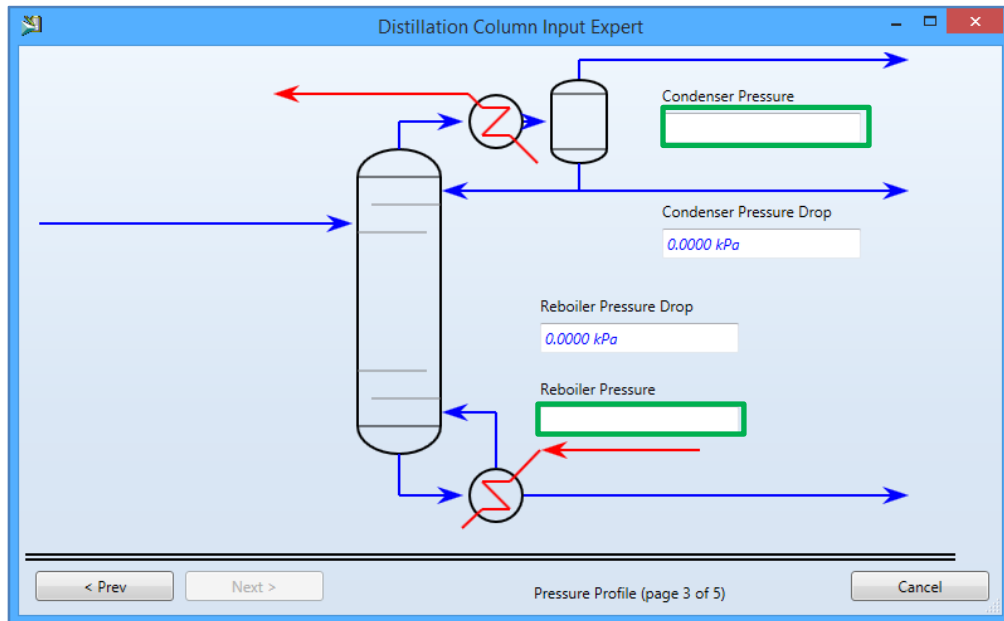
Figura 71. **Página dos de la opción *Distillation Column***



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

En la figura 73, se especifica el perfil de la columna de destilación a través de las presiones del condensador y el calderín señalado con cuadros de color verde. Luego se selecciona el botón *Next* para proseguir.

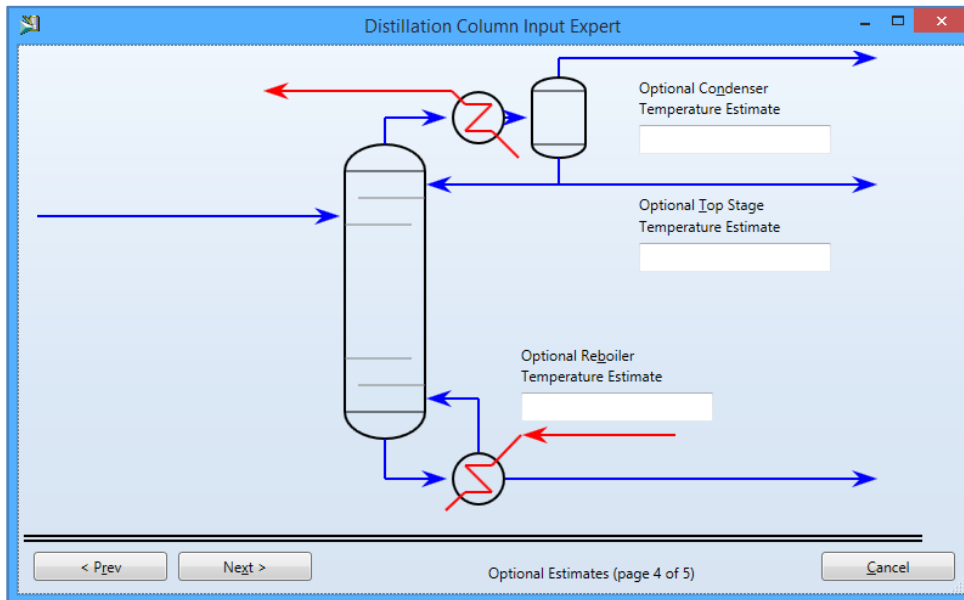
Figura 72. **Página tres de la opción *Distillation Column***



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

En la figura 74 se ingresa las temperaturas para datos de estimación pero son valores opcionales. Para continuar se hace clic en el botón *Next*.

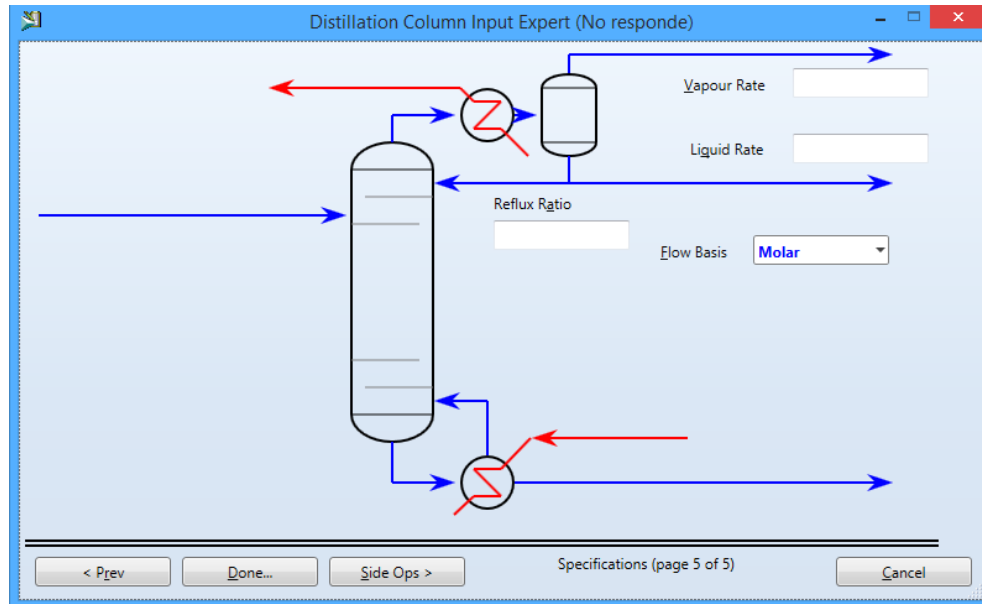
Figura 73. **Página cuatro de la opción *Distillation Column***



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

En la figura 75 se presenta la página final, al escoger una columna con condensador parcial, se obtienen tres grados de libertad y el software requiere dos de las tres variables; siendo las variables el flujo molar de vapor de cabeza, flujo molar del líquido y la relación de reflujo, respectivamente.

Figura 74. **Página cinco de la opción *Distillation Column***

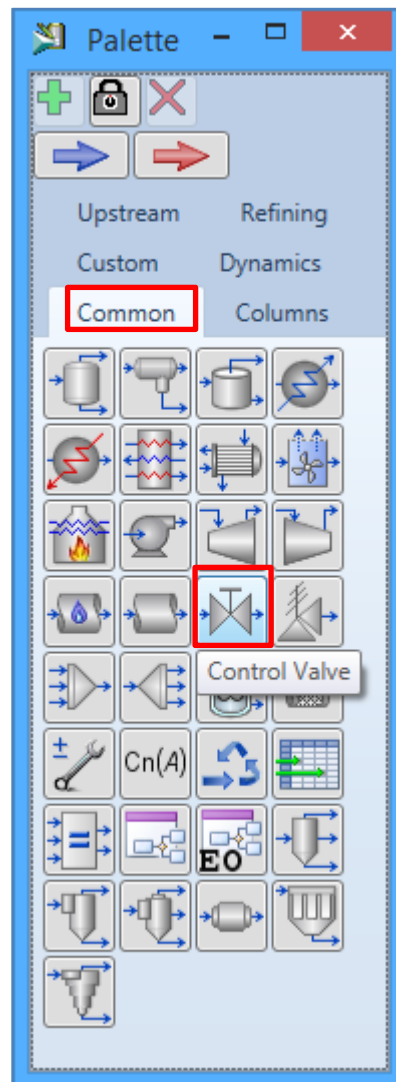


Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

2.7.1.8.4. **Agregar una válvula con la opción *Control Valve***

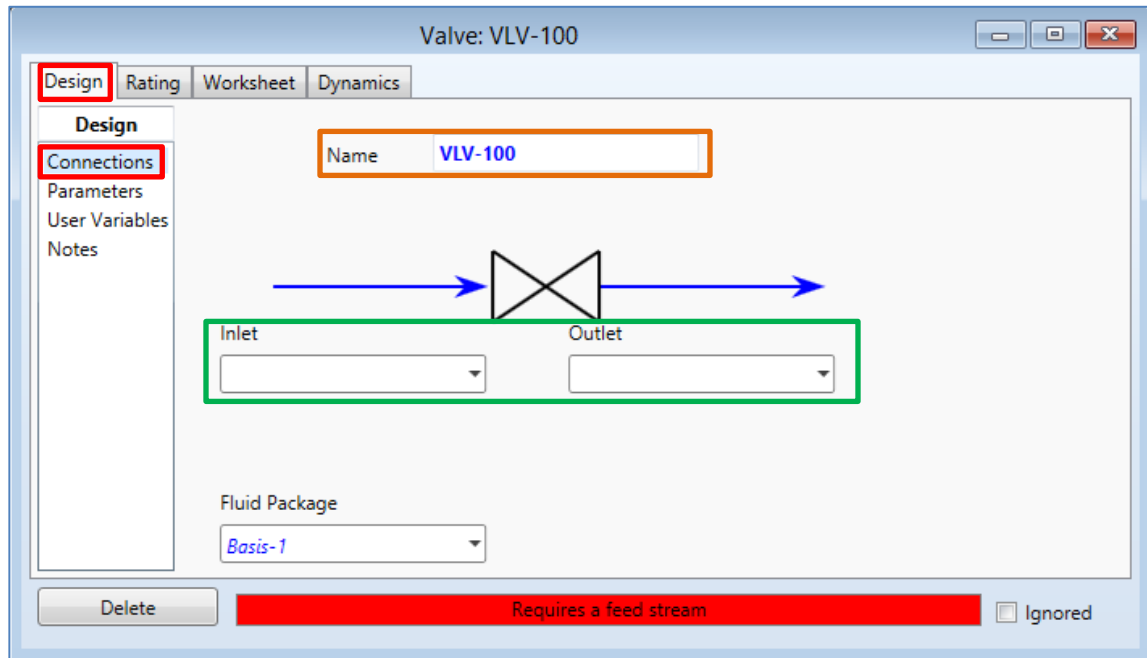
Para colocar una válvula en la simulación, se selecciona el ícono con la descripción *Control Valve* en la paleta de objetos, mostrado en la figura 76. Luego colocarlo en cualquier parte de la pantalla de simulación. Al hacer doble clic sobre la imagen aparecerá la ventana mostrada en la figura 77.

Figura 75. Selección de la opción **Control Valve** en la paleta de objetos



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

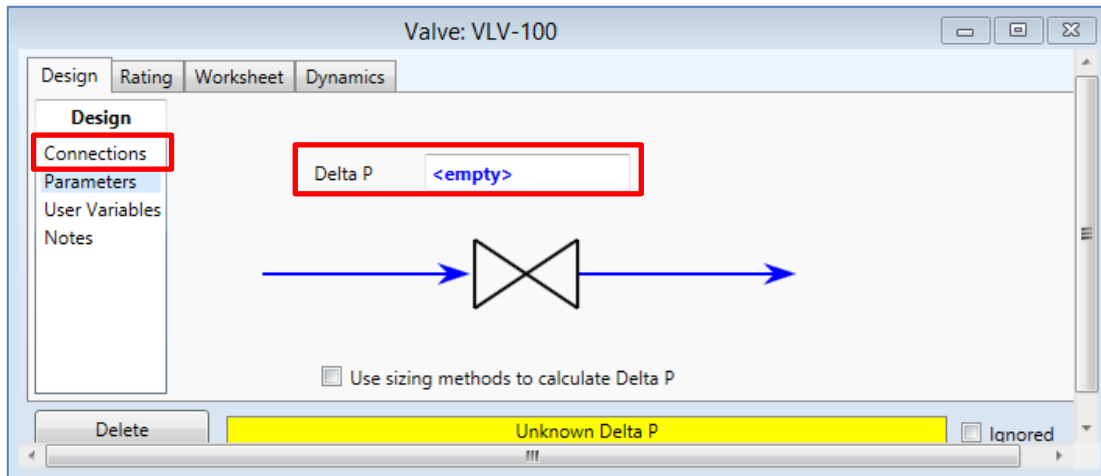
Figura 76. Ventana de la opción **Control Valve**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

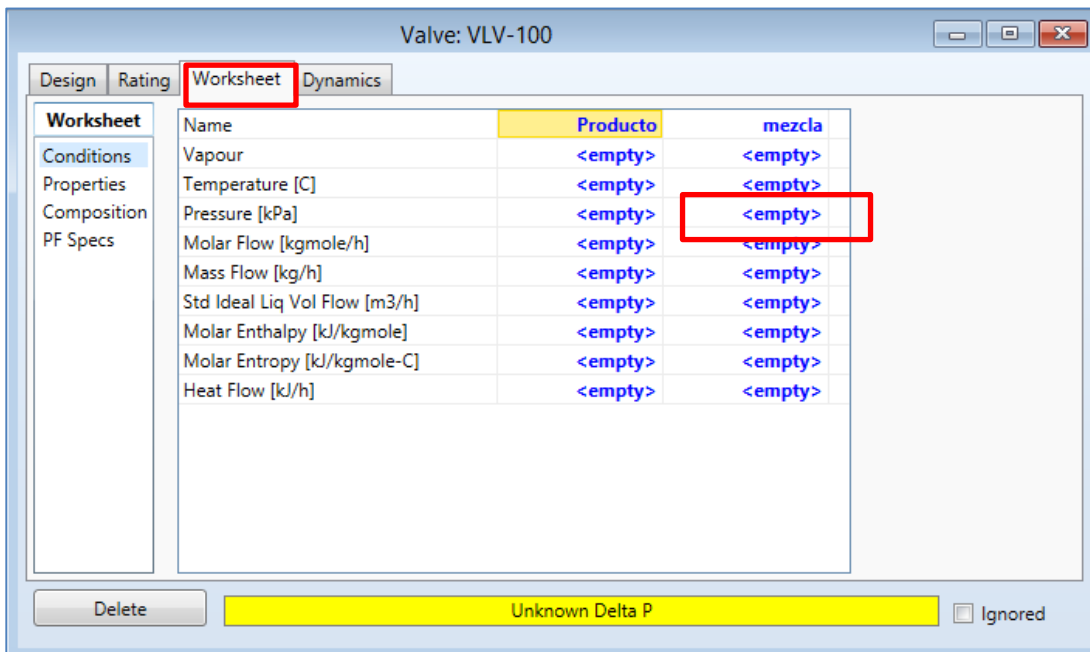
La ventana de la figura 77, se muestra la pestaña *Design* en la opción *Connections*. Para el entendimiento de la figura, se señalan las funciones por medio de recuadros. El recuadro de color naranja con la descripción *Name*, renombra la válvula. El recuadro de color verde ingresa la corriente de entrada y de salida respectivamente. Se requiere la pérdida de carga de presión, por lo que se escoge la opción *Parameters* y en la descripción Delta P se coloca el valor mostrado en la figura 78. Otra opción es hacer clic en la pestaña *Worksheet* y colocar la presión de salida visualizado en la figura 79. La barra horizontal que se encuentra en la parte inferior de la ventana cambiará de color verde, por lo que se puede cerrar la ventana.

Figura 77. Recuadro de la opción *Parameters* de *Control Valve*



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

Figura 78. Pestaña de *Worksheet* de la opción *Control Valve*



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

2.7.1.9. Operaciones lógicas en Aspen HYSYS

El software dispone de diferentes operaciones lógicas, pero cinco funcionan en estado estacionario, siendo los siguientes: SET, ADJUST, BALANCE, RECYCLE y SPREADSHEET. Estas se ubican en la paleta de objetos como se muestra a continuación:

Figura 79. Operaciones lógicas en la paleta de objetos

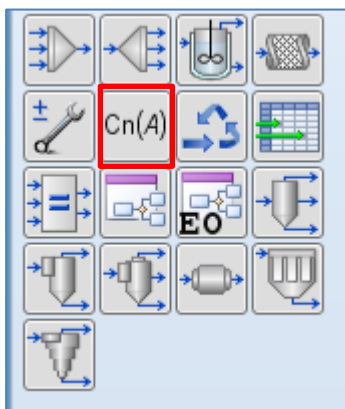


Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

2.7.1.9.1. Operación lógica: SET

La función SET establece una relación entre dos variables del proceso, esta relación debe ser entre dos objetos de un mismo tipo, funciona en estado estacionario y dinámico. Un ejemplo sería la composición de un compuesto en dos corrientes o la temperatura de dos corrientes. Para su utilización se selecciona en la paleta de objetos con la descripción SET mostrada a continuación.

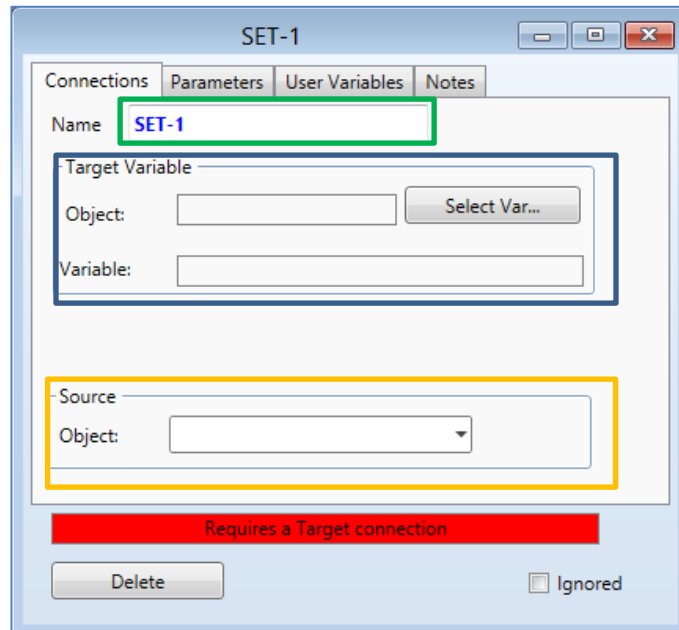
Figura 80. Selección de la función SET en la paleta de objetos



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0.

El ícono se coloca en cualquier parte de la pantalla de simulación, para modificarlo se hace doble clic sobre él. Aparece una ventana como en la figura 82.

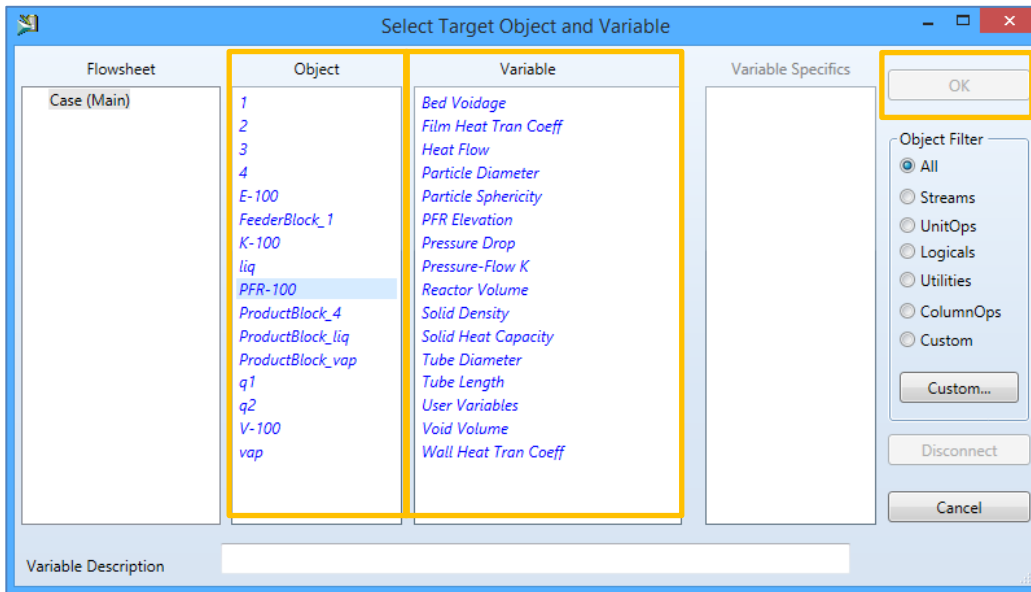
Figura 81. **Modificación de la pestaña *Connections* de la función SET**



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0

En la descripción Name se modifica el nombre mostrado en el cuadro verde; el cuadro de color azul con la descripción Target Variable se escoge la variable en el que se fija con un valor determinado, por lo que se hace clic en el botón Select Var, aparece la ventana siguiente.

Figura 82. Selección de la variable en la función **Select Var**

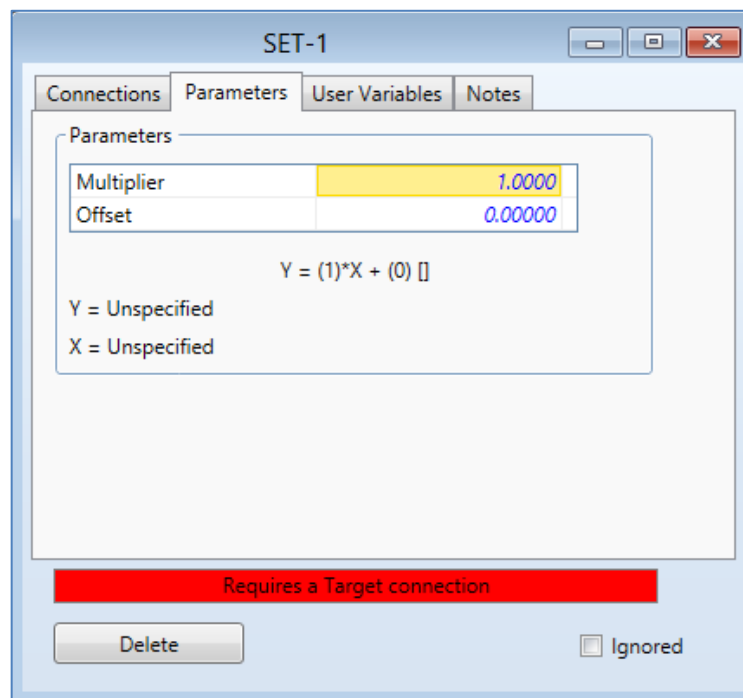


Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0

En la ventana se selecciona el tipo de objeto, luego se selecciona la variable en la lista de la columna “variable”, al terminar se selecciona el botón OK. Nuevamente regresa a la ventana de la figura 82, en la descripción *Source* se selecciona la variable con la que se quiere relacionar a la primera variable.

Luego se selecciona la pestaña *Parameters*, aquí se establece los parámetros de vinculación de las variables, se observa que es una función lineal entre ambas variables por lo que se ingresa el valor de la pendiente de la línea (*Multiplier*) y el intercepto (*Offset*).

Figura 83. Pestaña *Parameters* de la función SET



Fuente: Software Aspen HYSYS 8.0

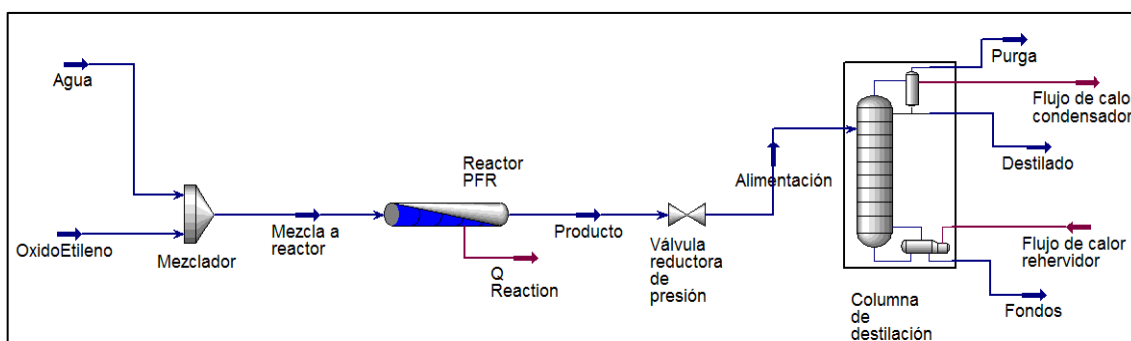
Al cerrar la ventana se observa la conexión entre las dos variables y la función SET en la pantalla de simulación.

3. SIMULACIÓN DEL PROCESO DE ETILENGLICOL

3.1. Descripción del proceso

El modelo por utilizar para representar el proceso de producción de etilenglicol en estado estacionario para la utilización del software Aspen HYSYS, se presenta a continuación:

Figura 84. Diagrama de flujo del proceso de producción del etilenglicol



Fuente: J. BENZ, Sonia y FRANCESCONI, Javier. *Introducción al Uso del Simulador HYSYS*. [en línea].. http://www.modeloingenieria.edu.ar/mei/repositorio/catedras/intIV/apuntes/apunte_introduccion_simulador_hysys.pdf. Consulta: 30 de octubre de 2015.

El proceso consiste en el ingreso de las corrientes de agua y el óxido de etileno en un mezclador donde se obtiene una premezcla con una solución del 20 %¹⁸; posteriormente, se conduce a un reactor PFR con condición isotérmica, para separar los productos generados en el reactor, la corriente pasa a la línea

¹⁸ MAYER, Ludwig. *Métodos de la industria química en esquemas de flujo en colores, una visión panorámica y moderna de los métodos de la industria química*. p. 288.

de alimentación de la columna de destilación, donde previamente se disminuye la presión en 8 atm¹⁹ por medio de una válvula; para finalmente obtener en el destilado mayor porcentaje de agua, en los fondos el etilenglicol y el subproducto no deseado el dietilenglicol.

3.2. Recolección de datos

Los siguientes datos son los mínimos necesarios para el funcionamiento del simulador.

3.2.1. Condiciones iniciales

Con una como base de cálculo 1000 kgmol/h en la corriente de agua y con el porcentaje de la premezcla descrita anteriormente se obtiene la corriente de entrada del óxido de etileno. Las condiciones iniciales se detallan en la tabla XI.

Tabla XII. **Condiciones iniciales de las corrientes de entrada al proceso**

Corriente	Fracción molar	Flujo molar (Kgmol/h)	Temperatura (°C)	Presión (atm)
Óxido de etileno	1	200	25	10
Agua	1	1000	25	10

Fuente: J. BENZ, Sonia y FRANCESCONI, Javier. *Introducción al Uso del Simulador HYSYS*. [en línea].. http://www.modeloingenieria.edu.ar/mei/repositorio/catedras/intIV/apuntes/apunte_introduccion_simulador_hysys.pdf. Consulta: 30 de octubre de 2015.

¹⁹ J. BENZ, Sonia y FRANCESCONI, Javier. *Introducción al uso del simulador HYSYS*. p. 254.

3.2.2. Reactor PFR

Las reacciones involucradas dentro del reactor se muestran en la sección 2.4 del marco teórico, ocurren en fase líquida y no existe caída de presión. La longitud del reactor es de 10m y el diámetro de 2,210m²⁰ “A altas temperaturas, hay una significativa formación de subproducto, mientras que a temperaturas inferiores a 40 °C la reacción no se realiza a velocidad significativa, en consecuencia, se eligió una temperatura de 55 °C,”²¹ operándose isotérmicamente.

3.2.3. Cinética de reacción

La constante de velocidad de reacción (k) utilizada para las velocidades de reacción (r), donde r está en $kmol/m^3h$, según en la sección 2.2.1.6 del marco teórico dependerá solamente de la temperatura; por lo tanto, a partir de la ecuación de Arrhenius se obtiene la constante (k) para el etilenglicol y el dietilenglicol en el que se muestra en la tabla XII.

Tabla XIII. **Constantes de velocidad con la función de Arrhenius**

Constante de velocidad (k) para etilenglicol	Constante de velocidad (k) para dietilenglicol
$k(T) = 1.2E16e^{-\frac{79376}{RT}}X_{H_2O}X_{OE}$	$k(T) = 2.1E16e^{-\frac{79376}{RT}}X_{EG}X_{OE}$
Donde: $A=1.2e^{16}kgmol/m^3h$ $E=79376\text{ kJ/kgmol}$	Donde: $A=2.1e^{16}kgmol/m^3h$ $E=79376\text{ kJ/kgmol}$

Fuente: J. BENZ, Sonia y FRANCESCONI, Javier. *Introducción al Uso del Simulador HYSYS*. [en línea].. http://www.modeloingenieria.edu.ar/mei/repositorio/catedras/intlV/apuntes/apunte_introduccion_simulador_hysys.pdf. Consulta: 30 de octubre de 2015.

²⁰ MELHEM, Georges A., y otros. *Kinetics of the Reactions of Ethylene Oxide with Water and Ethylene Glycols*. p, 289.

²¹ FOGLER, H. Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p, 215.

3.2.4. Columna de destilación

Para la configuración de la columna de destilación se requiere de los siguientes datos mostrados a continuación:

Tabla XIV. **Especificaciones para el funcionamiento de la columna de destilación**

Nombre	Datos
Número de etapas	10
Plato de alimentación	5
Tipo de condensador	parcial
Presión del condensador	100 kpa
Presión en el rehervidor	105 kPa
Caída de presión en el condensador	0 kpa
Relación de reflujo	3,0
Velocidad de vapor	0 kgmol/h
Temperatura del rehervidor	150 °C

Fuente: IKHYUN, Kim. Aspen HYSYS: *Steady states and dynamic simulator (eg plant exercise)*.
http://pssl.snu.ac.kr/korean/files/02_lecture.pdf. Consulta: 25 de abril de 2016.

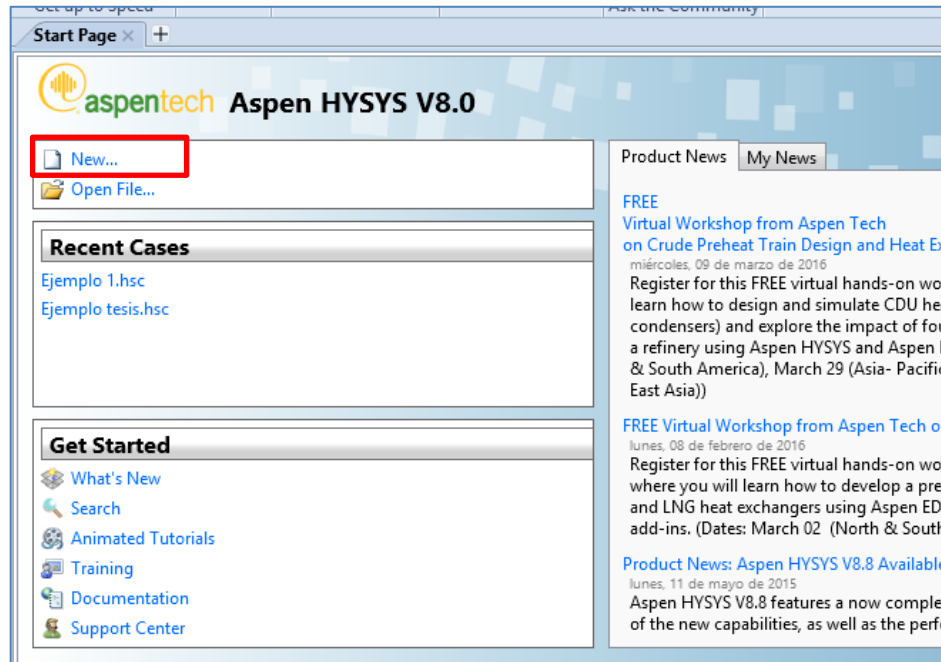
3.3. Simulación del proceso en el software

La descripción del funcionamiento del programa y de la mayoría de funciones utilizadas en la construcción del proceso se explica en la sección 2.6 del marco teórico. En esta sección se explica la construcción del proceso en el simulador para la obtención del etilenglicol.

3.3.1. Iniciando un nuevo caso de simulación en el software

Para empezar la construcción de la simulación, se escoge la opción *New* de la pantalla de inicio.

Figura 85. Selección de la opción **New**

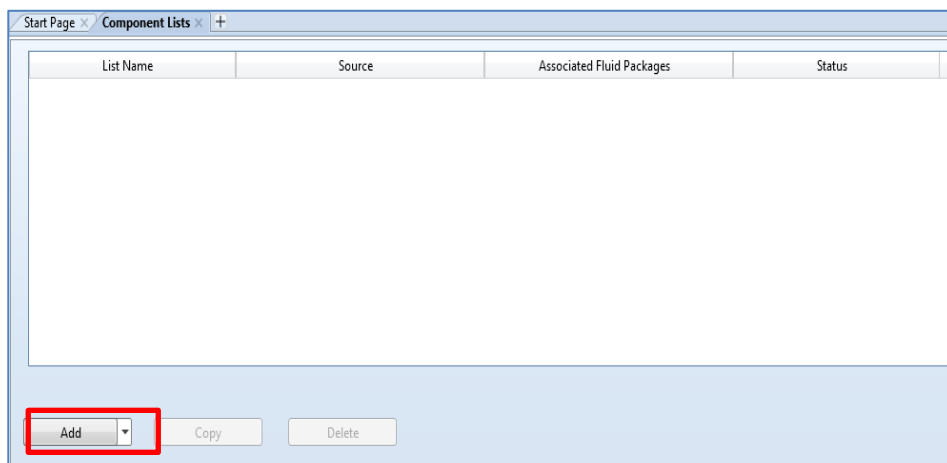


Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

3.3.2. Ingreso de los compuestos involucrados

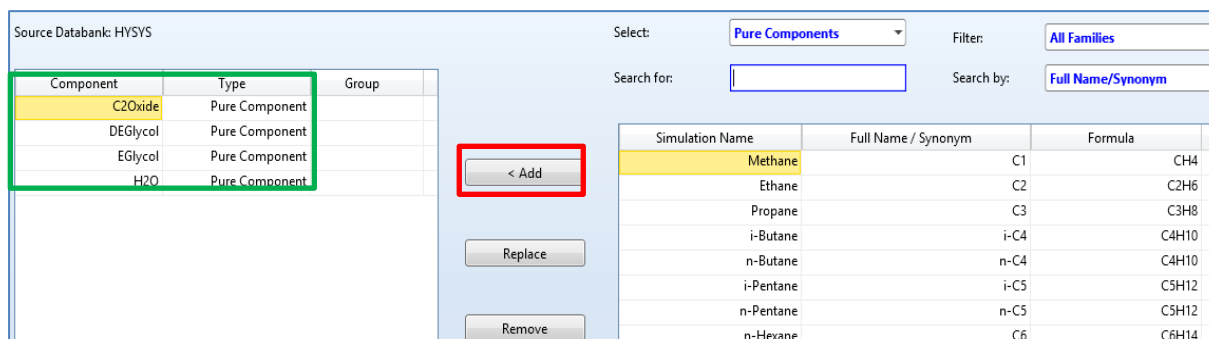
En la carpeta de *Component Lists*, en la ventana de diálogo se escoge la opción Add del botón inferior como en la figura 87. Se buscan los nombres en inglés en la lista de los componentes involucrados, en este caso son el agua (*Water*), óxido de etileno (*EthyleneOxide*), etilenglicol (*ethylene_Alcohol*) y dietilenglicol (*Ethylene_Diglycol*). Al encontrarlos se agregan con el botón Add como en la figura 88.

Figura 86. Selección del botón Add de la carpeta **Component Lists**



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Figura 87. Selección de los componentes de la carpeta **Component Lists**



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

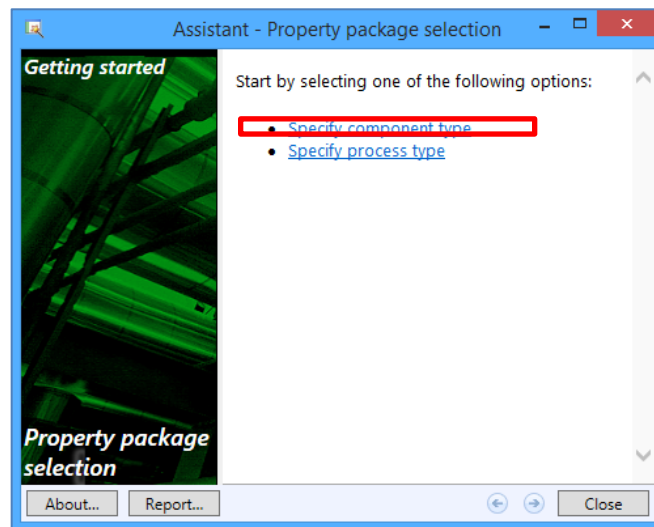
3.3.3. Paquete de fluidos

A continuación se describe la utilización del paquete de fluidos para este proceso.

3.3.3.1. Utilización del asistente para determinar el tipo de paquete de fluidos

Escoger el tipo de paquete de fluidos es una parte esencial, debido que el tipo de paquete establecerá las propiedades termodinámicas que se usarán al momento de la simulación, por lo tanto, se utiliza la opción *Methods Assistant* ubicado en la barra de herramientas. Aparece el cuadro de diálogo como en la figura 89, se le da la opción *Next* en la parte inferior para empezar la serie de preguntas. Para empezar se escogerá la opción *Specify Component Type* para determinar el paquete por medio del tipo de componente por utilizar.

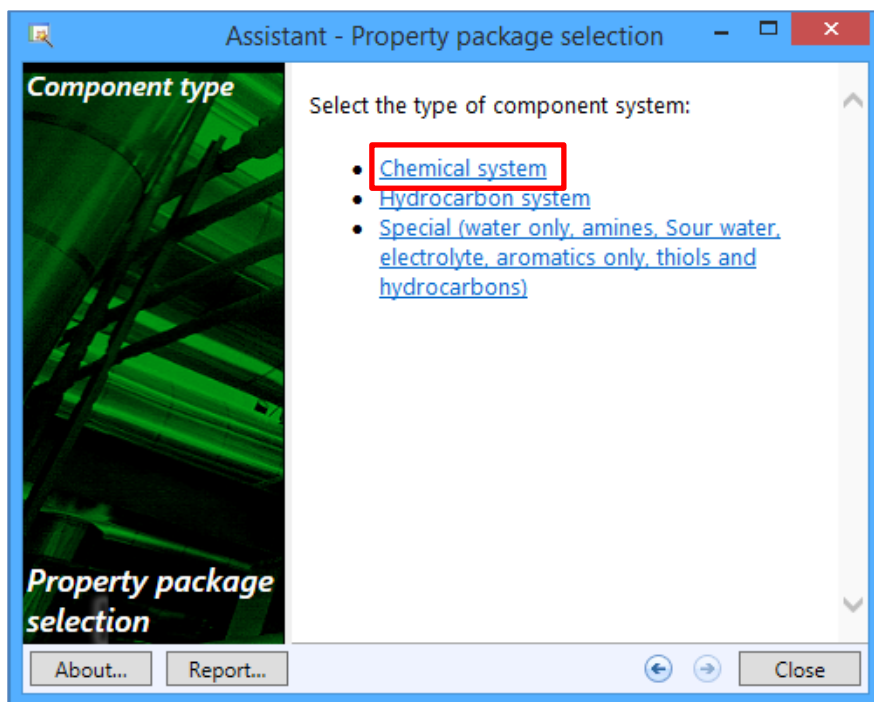
Figura 88. Selección de la opción *Specify Component Type*



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

En la siguiente ventana, se selecciona la opción *Chemical System* para el tipo de sistema de los componentes.

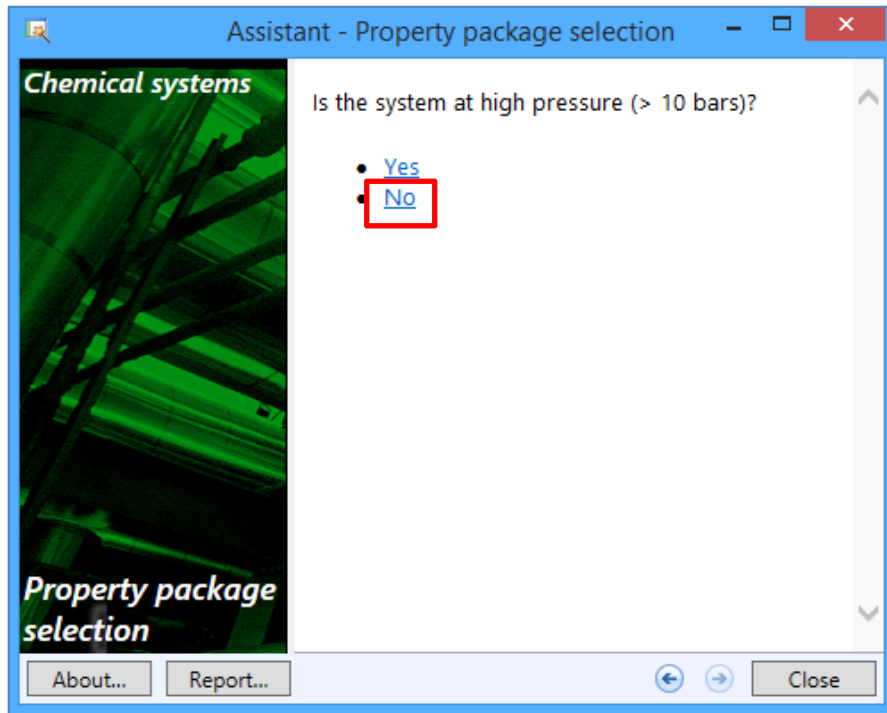
Figura 89. Selección de la opción *Chemical System*



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

En la siguiente ventana se escoge la opción no debido que la presión de operación del proceso es menor a diez bares.

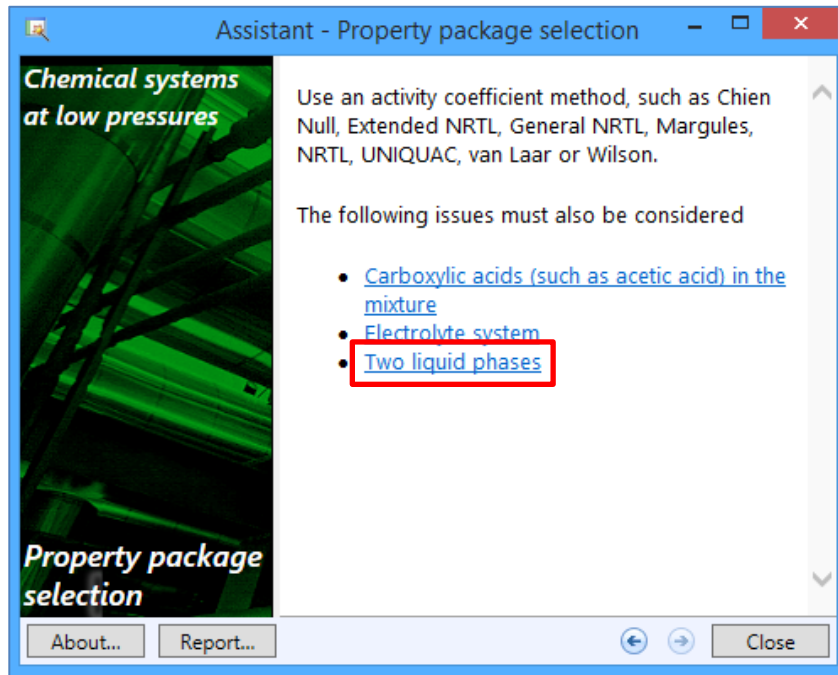
Figura 90. Selección de la opción “No” para presiones altas



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

En la ventana aparece una lista de opciones, considerando los coeficientes de actividad, para especificar más se selecciona la opción *Two Liquid Phases*.

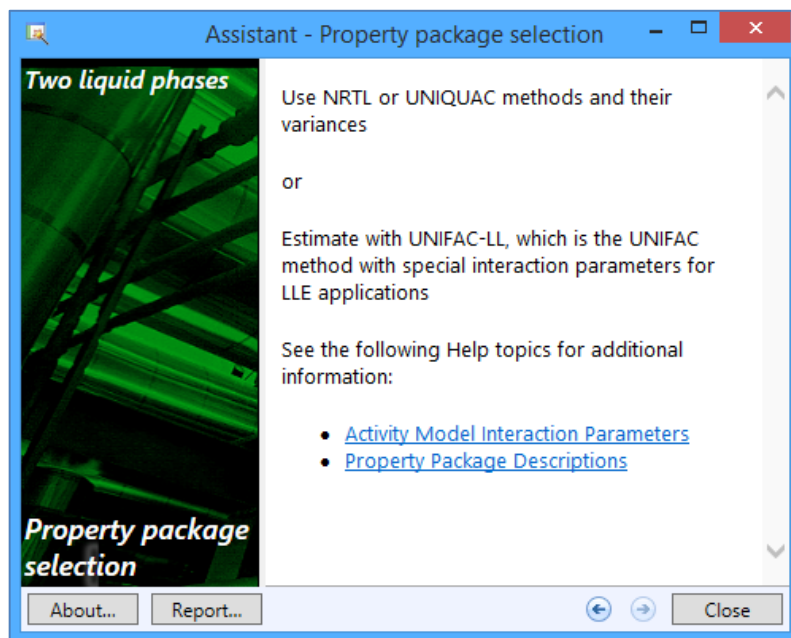
Figura 91. Selección de la opción *Two Liquid Phases*



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

El asistente recomienda dos métodos, el cual se utilizará el método de NRTL para la simulación.

Figura 92. **Resultados para escoger el paquete de fluido**

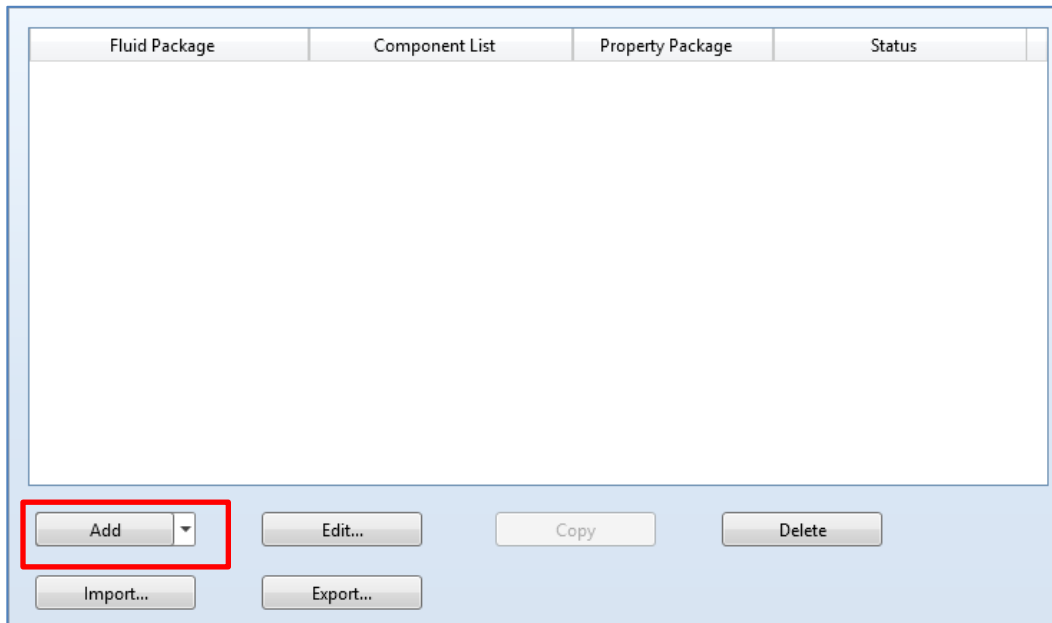


Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

3.3.3.2. Selección del paquete de fluidos

Al seleccionar la carpeta con la descripción *Fluid Packages* del panel de navegación, en la ventana se selecciona el botón Add ubicado en la parte inferior del mismo visualizado en la siguiente figura.

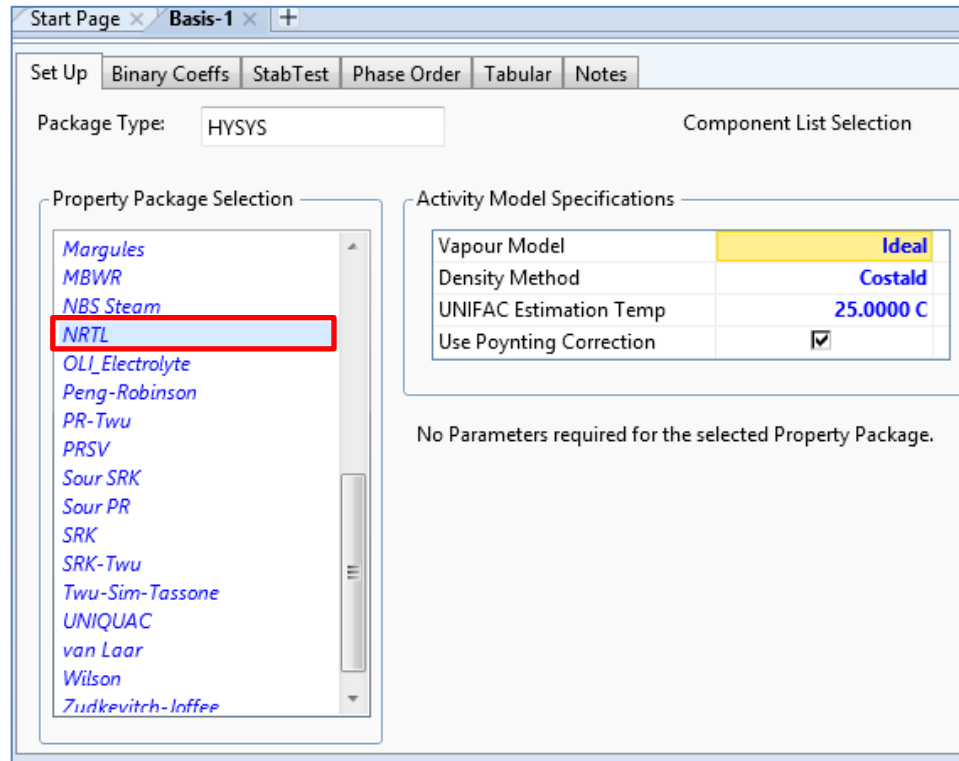
Figura 93. Selección del botón Add



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

En la pestaña Set Up aparece la lista de los paquetes como en la figura 95, en el que se busca el NRTL y se selecciona. Aparece un recuadro con las especificaciones del coeficiente de actividad, por lo que no se cambiarán los valores estándar del método.

Figura 94. Selección del paquete termodinámico NRTL



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Al seleccionar el paquete NRTL, se determinan los coeficientes binarios faltantes para el uso del método, por lo que se selecciona la pestaña *Binary Coeffs* como se observa en la figura 96. La estimación de los coeficientes se realiza con el método de UNIFAC para equilibrio líquido-vapor, por lo que se escoge la opción UNIFAC VLE, luego se hace clic en el botón de *Unknowns Only*. Automáticamente calcula los coeficientes faltantes.

Figura 95. Pestaña de coeficientes binarios

Activity Model Interaction Parameters

Coeff Matrix To View: ☒ Aij ☐ Bij ☐ Alpha_{ij} / C_{ij}

	C2Oxide	DEGlycol	EGlycol	H2O
C2Oxide	---	---	---	540.000
DEGlycol	---	---	---	2556.000
EGlycol	---	---	---	1716.000
H2O	434.000	-219.300	771.700	---

Coeff Estimation

☒ UNIFAC VLE ☐ UNIFAC LLE ☐ Immiscible

Individual Pair

Unknowns Only

ALL Binaries

Reset Params.

R = 1.98721 cal/gmol K

Property Pkg OK Edit Properties

Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Figura 96. Coeficientes binarios calculados por el software

	C2Oxide	DEGlycol	EGlycol	H2O
C2Oxide	---	-769.000	-310.800	540.000
DEGlycol	1791.000	---	929.800	2556.000
EGlycol	898.700	-1165.000	---	1716.000
H2O	434.000	-219.300	771.700	---

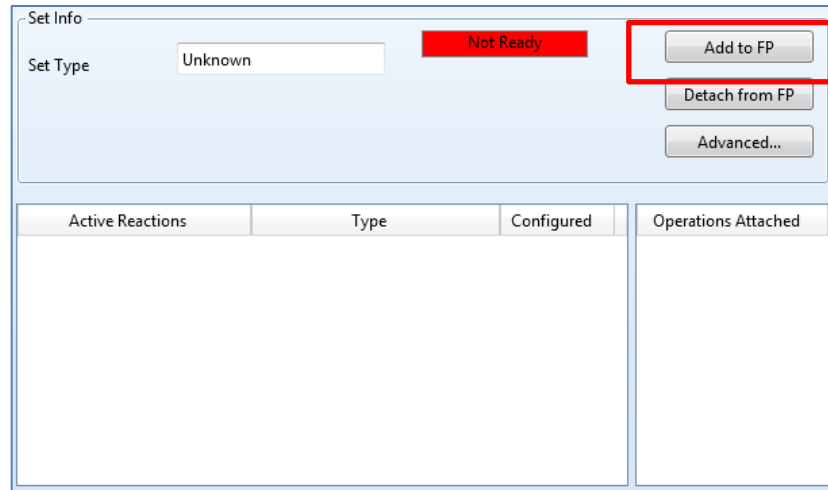
Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

3.3.4. Reacciones químicas

En el proceso existen dos reacciones involucradas dentro del reactor PFR. Se selecciona la carpeta *Reactions* del panel de navegación como en la figura 42. En la ventana se selecciona el botón Add situado en la parte inferior. Aparece una nueva ventana, en el que se selecciona la opción Add to FP de la

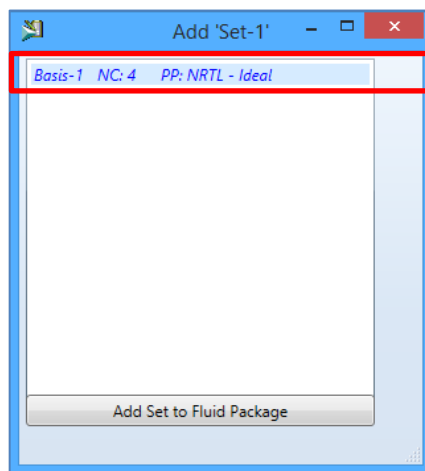
figura 98, en donde se selecciona el paquete y se oprime el botón inferior como en la figura 99.

Figura 97. Selección de la opción Add to FP



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

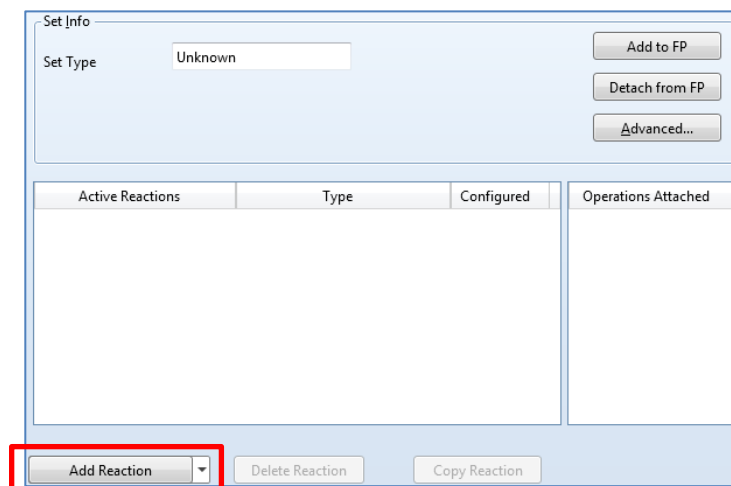
Figura 98. Selección del paquete PP:NRTL-Ideal



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Nuevamente aparece la ventana de *Reactions*, se oprime el botón inferior *Add Reaction* visualizado en la siguiente figura.

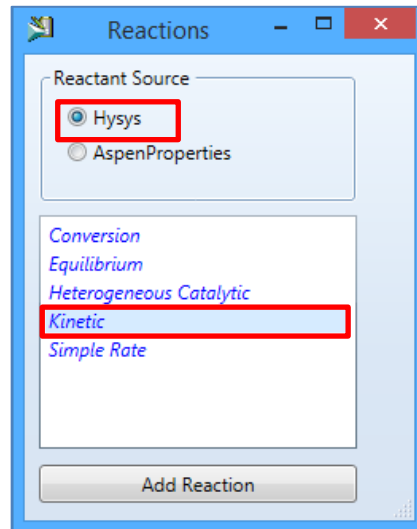
Figura 99. **Selección del botón *Add Reaction***



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Aparece una ventana de diálogo como en la figura 101, en donde se selecciona la opción Hysys para la fuente de los datos; en el proceso existen dos reacciones del tipo cinético por lo que se selecciona la opción Kinetic y luego se oprime dos veces el botón inferior con la descripción Add Reaction. Posteriormente, se cierra la ventana.

Figura 100. Selección de la opción “Hysys” y “Kinetic”



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Nuevamente, aparecerá la ventana de *Reactions* como en la figura 102, en donde se observa en la lista las dos reacciones del tipo cinético, se hace doble clic en la primera reacción (Rxn-1) y aparecerá una nueva ventana.

Figura 101. Selección de la primera reacción de la carpeta *Reactions*

Set Info

Set Type: Kinetic

Solver Method: Auto Selected

Buttons: Add to FP, Detach from FP, Advanced...

Active Reactions	Type	Configured	Operations Attached
Rxn-1	Kinetic	X	
Rxn-2	Kinetic	X	

Buttons: Add Reaction, Delete Reaction, Copy Reaction

Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Figura 102. Ventana de la primera reacción involucrada en el proceso

Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

En la ventana de la figura 103 se colocarán los componentes involucrados en la primera reacción observado en la figura 9 de la sección del marco teórico.

En la subventana con la descripción *Stoichiometry and Rate Info*, visualizado en la figura 104, en el cuadro con el nombre de Add Comp se buscan los componentes agua (H₂O), óxido de etileno (C₂Oxide) y etilenglicol (EGlycol). Para establecer los coeficientes estequiométricos de los reactivos y los productos, en la casilla con el nombre *Stoich Coeff* se coloca en cada componente el número -1 para los reactivos y 1 para los productos.

Figura 103. **Configuración de la subventana *Stoichiometry and Rate Info* para la primera reacción**

Stoichiometry and Rate Info					
Component	Mole Wt.	Stoich Coeff	Fwd Order	Rev Order	
H2O	18.015	-1.000	1.00	0.00	
C2Oxide	44.054	-1.000	1.00	0.00	
EGlycol	62.069	1.000	0.00	1.00	
Add Comp					

Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Los datos cinéticos se escriben en la parte de la subventana con la descripción *Forward Reaction* visualizado en la figura 105, estos valores se obtienen en la tabla XII como constante de velocidad para el etilenglicol. Al ingresar los datos, la barra inferior cambia de color verde por lo que se puede cerrar la ventana.

Figura 104. Configuración de la opción *Forward Reaction* de la primera reacción

Basis	
Basis	Molar Conc
Base Component	C2Oxide
Rxn Phase	CombinedLiquid
Min. Temperature	-273.1 C
Max Temperature	3000 C
Basis Units	kmole/m3
Rate Units	kmole/m3-h

Forward Reaction	
A	1.2000e+016
E	79376
b	<empty>

Reverse Reaction	
A'	<empty>
E'	<empty>
b'	<empty>

Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Aparece nuevamente la ventana de la figura 98, se selecciona la segunda reacción (Rxn-2) como en la figura 106, realizando el mismo procedimiento de la reacción uno (Rxn-1).

Figura 105. Selección de la segunda reacción de la carpeta *Reactions*

Set Info

Set Type: Kinetic

Solver Method: Auto Selected

Buttons: Add to FP, Detach from FP, Advanced...

Active Reactions	Type	Configured	Operations Attached
Rxn-1	Kinetic	✓	
Rxn-2	Kinetic	✗	

Buttons: Add Reaction, Delete Reaction, Copy Reaction

Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Según en la segunda reacción de la figura 9, se agregan en la lista de la reacción el etilenglicol (EGlycol), óxido de etileno (C2Oxide) y el dietilenglicol (DEGlycol). En la reacción se observa que el coeficiente estequiométrico para el etilenglicol es dos y para los otros dos componentes es uno, por lo que se escriben en la casilla con la descripción *Stoich Coeff* como en la siguiente figura.

Figura 106. Configuración de la subventana **Stoichiometry and Rate Info** para la segunda reacción

Stoichiometry and Rate Info					
Component	Mole Wt.	Stoich Coeff	Fwd Order	Rev Order	
EGlycol	62.069	-1.000	1.00	0.00	
C2Oxide	44.054	-1.000	1.00	0.00	
DEGlycol	106.122	1.000	0.00	1.00	
Add Comp					

Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

La constante de velocidad para la formación del dietilenglicol obtenido de la tabla XII se escribe en la parte de la subventana con la descripción *Forward Reaction* visualizado en la figura 108. La velocidad de reacción observada en la ecuación 11 está igualado a un factor dos, por lo que se multiplica el valor de A de la tabla XII por dos, el resultado se coloca en la ventana. Al añadir los datos, se hace clic en el botón inferior izquierda de la ventana con la descripción balance de la figura 103, en donde cambiará de color la barra inferior y se cierra la ventana.

Figura 107. Configuración de la opción *Forward Reaction* de la segunda reacción

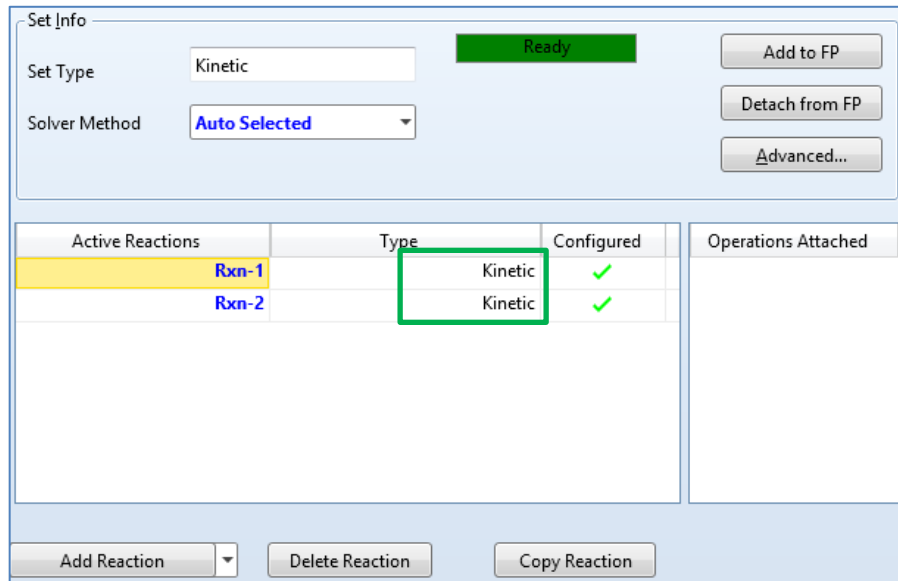
Basis	
Basis	Molar Conc'n
Base Component	EGlycol
Rxn Phase	CombinedLiquid
Min. Temperature	-273.1 C
Max Temperature	3000 C
Basis Units	kmole/m3
Rate Units	kmole/m3-h

Forward Reaction		Reverse Reaction	
A	2.1000e+016	A'	<empty>
E	79376	E'	<empty>
b	<empty>	b'	<empty>

Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

La configuración de las dos reacciones en la carpeta de *Reactions* se muestra con cheques de color verde por lo que indica que se ha configurado correctamente.

Figura 108. Configuración de la carpeta *Reactions*

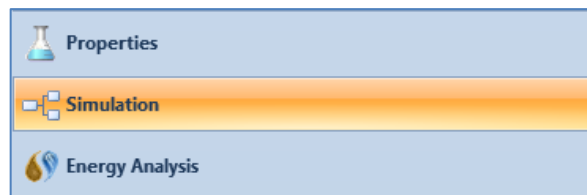


Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

3.3.5. Construcción del proceso en el entorno de simulación

Realizado la configuración en el entorno de propiedades se cambia al entorno de simulación en la parte inferior izquierda del programa visualizado en la figura 110.

Figura 109. Selección del entorno de simulación

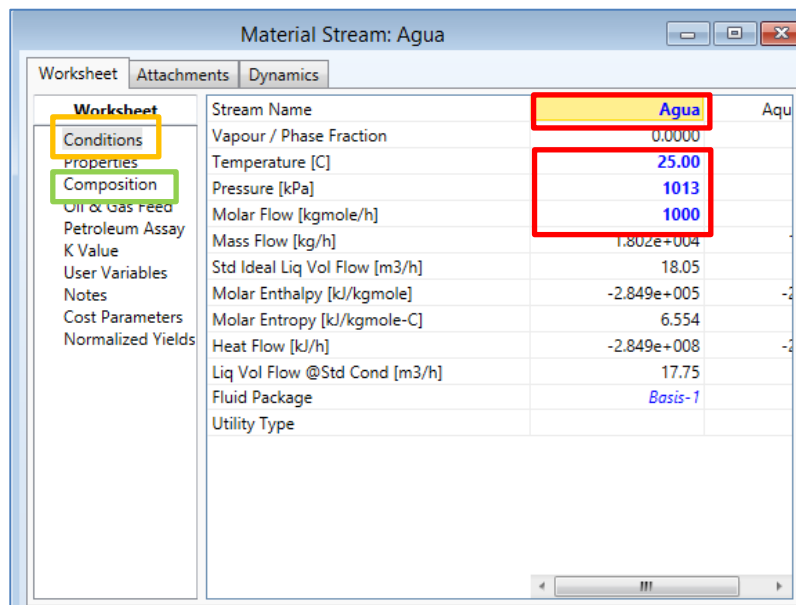


Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Según en la figura 85, existen dos corrientes de entrada al inicio del proceso, el óxido de etileno y el agua. Los datos que se usan para las corrientes de entrada se encuentran en la tabla XI.

En la paleta de objetos (figura 54) se selecciona la flecha de color azul y se coloca en la pantalla en blanco, se hace doble clic sobre la flecha para modificar la corriente. En la pestaña del *Worksheet* con la descripción *Conditions*, se modifica el nombre de la corriente, la temperatura, presión y el flujo molar como se muestra a continuación.

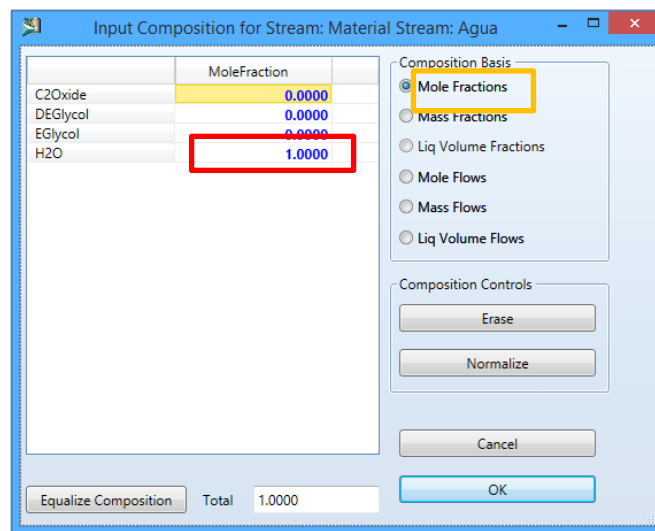
Figura 110. Configuración de la corriente inicial de agua



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Para ingresar la fracción molar, se selecciona en la pestaña del *Worksheet* con la descripción *Compositions* de la figura 111. Para el agua la fracción molar es de 1.

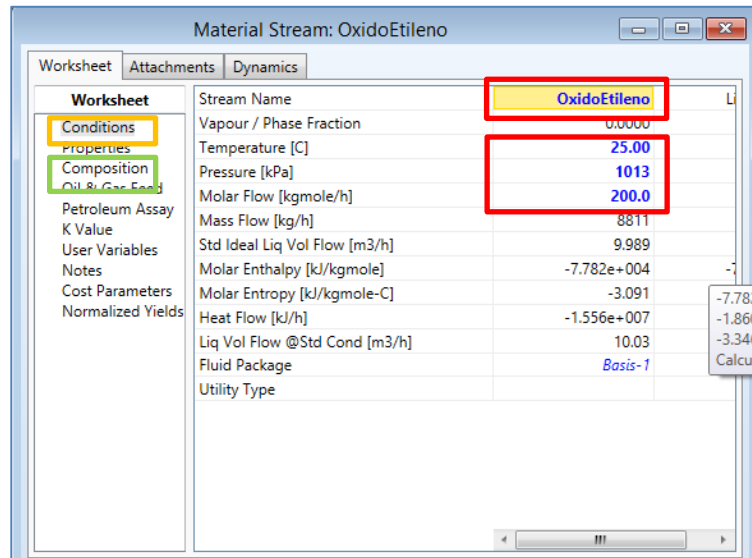
Figura 111. Ingreso de la fracción molar de la corriente de agua



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

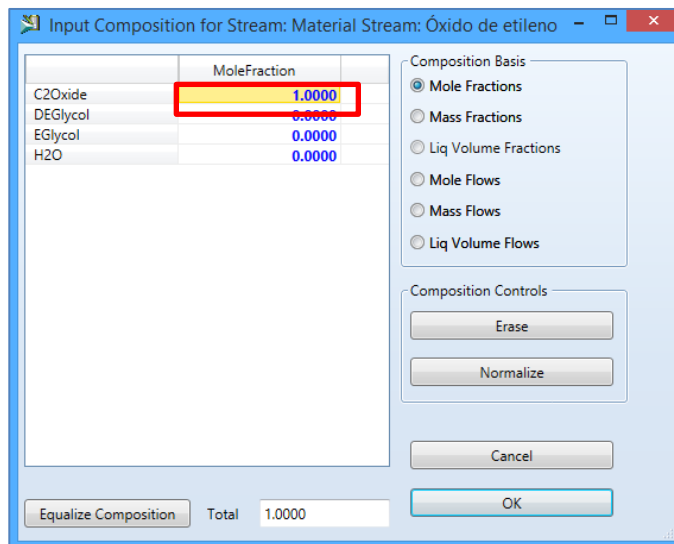
Para la corriente del óxido de etileno, se efectúa el mismo procedimiento por medio de la selección de la flecha de color azul de la paleta de objetos y se coloca en la pantalla de simulación. Se cambia el nombre por óxido de etileno, con la ayuda de la tabla XI se modifica la temperatura, presión, flujo molar y fracción molar como se muestra a continuación.

Figura 112. Configuración de la corriente inicial de óxido de etileno



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

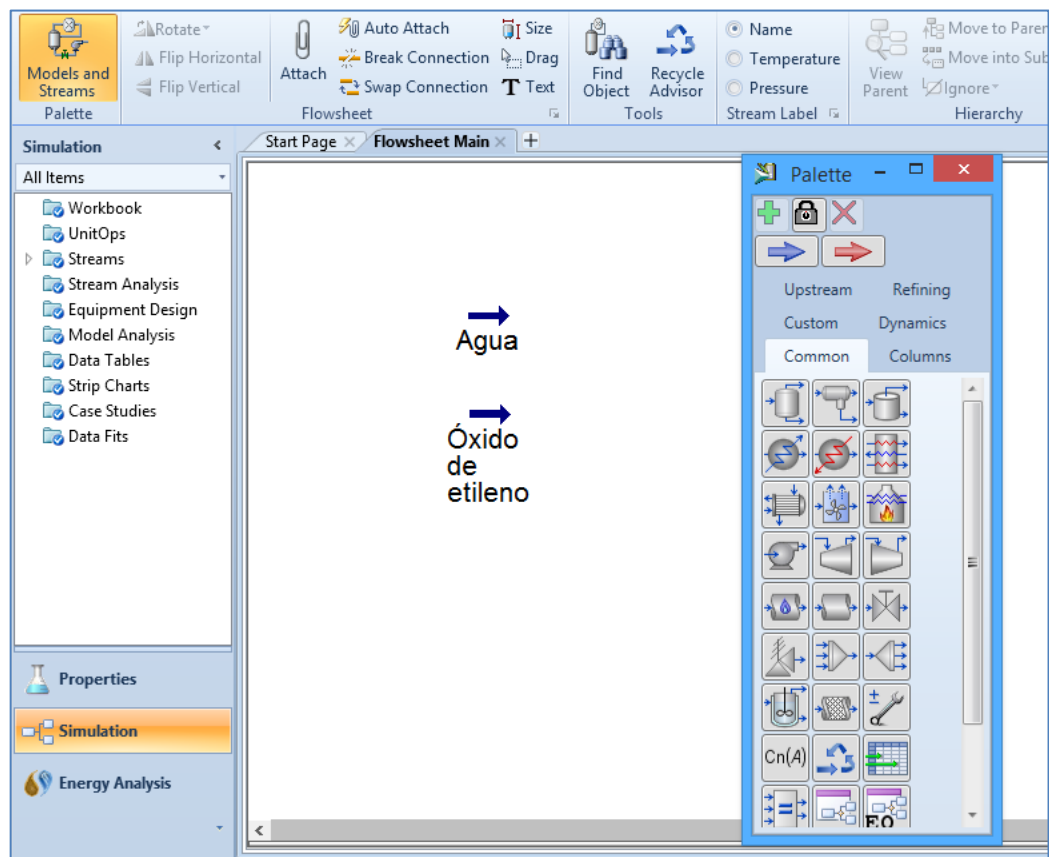
Figura 113. Ingreso de la fracción molar de la corriente de agua



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Con las corrientes ingresadas, la pantalla de simulación se observa como en la siguiente figura.

Figura 114. **Visualización de la pantalla de simulación con las corrientes de entrada**



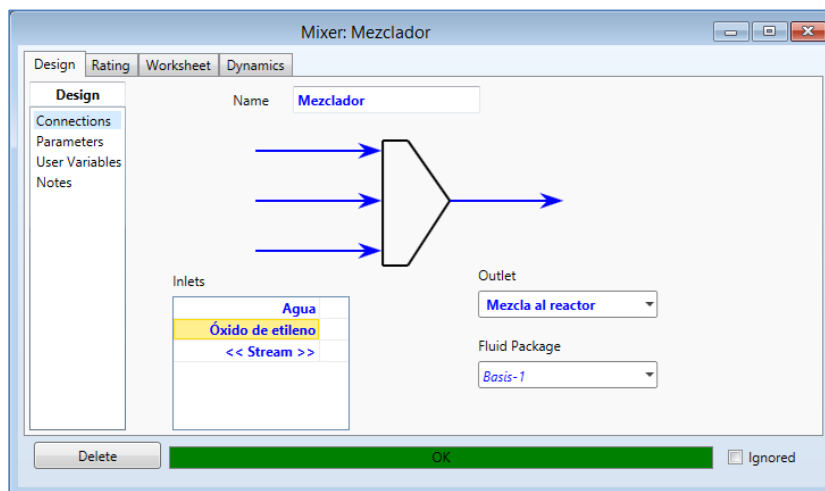
Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

3.3.5.1. Ingreso del mezclador en la simulación

En la figura 85 las corrientes de ingreso entran a un mezclador, por lo que se ingresa uno con la función Mixer. Se selecciona en la paleta de objetos y se coloca en la pantalla de simulación. Para configurarlo se hace doble clic encima

de la figura y aparecerá una ventana de diálogo como el de la figura 116. Se cambia el nombre por mezclador, las corrientes de entrada son el agua y el óxido de etileno y la corriente de salida se denomina como mezcla con reactor.

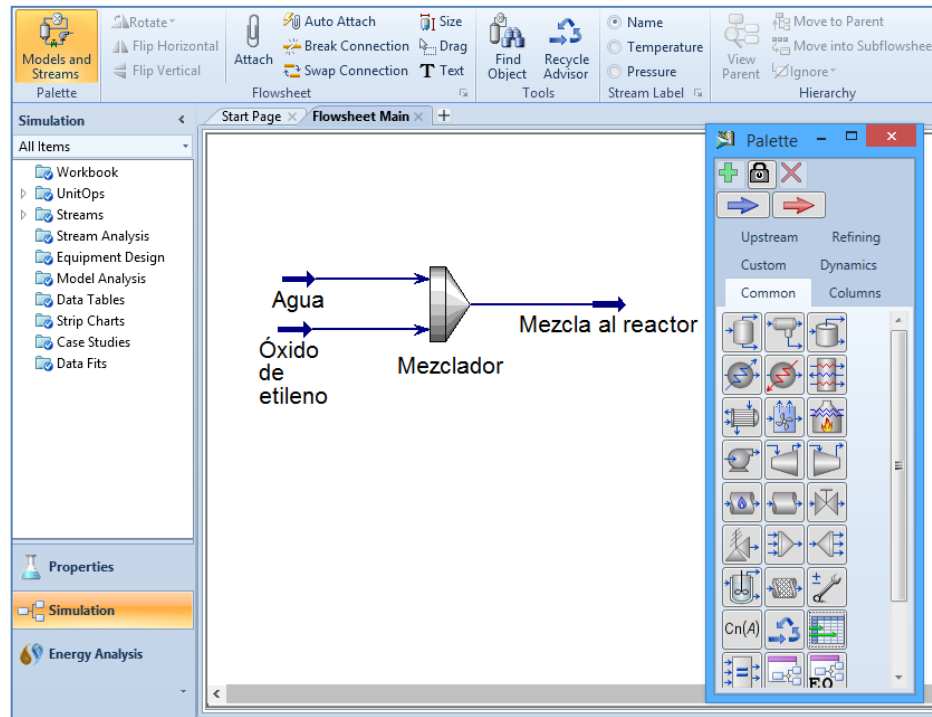
Figura 115. Configuración del mezclador



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Colocado el mezclador en la pantalla de simulación se observa como en la siguiente figura.

Figura 116. Visualización de la pantalla de simulación con el mezclador

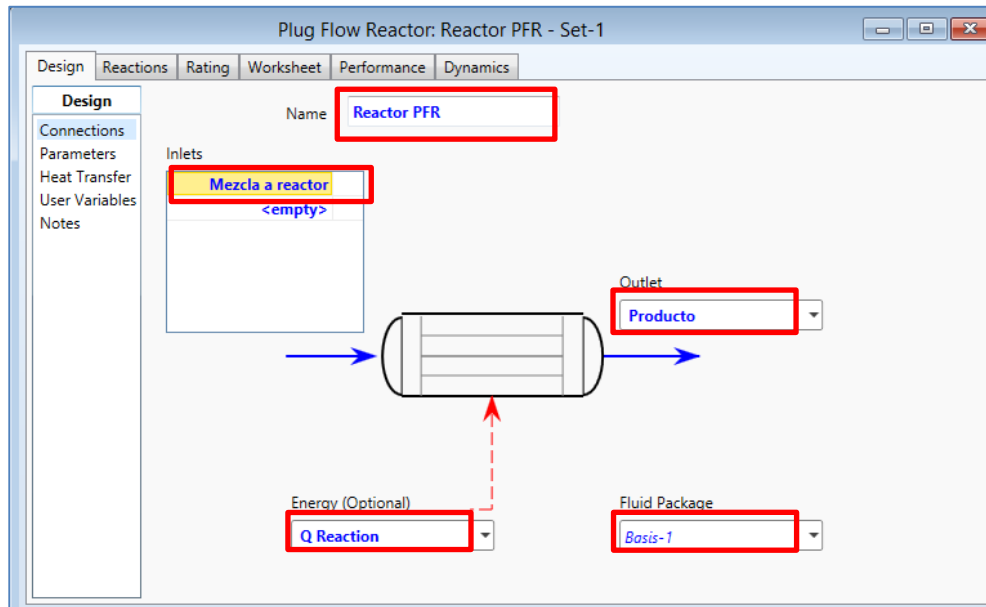


Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

3.3.5.2. Ingreso del reactor PFR al simulador

En la paleta de objetos se escoge el ícono para luego colocarlo en la pantalla de simulación, para configurarlo se realiza doble clic sobre la imagen. En la pestaña *Design*, en la descripción *Connections*, se modifica el nombre por Reactor PFR, se ingresan los nombres de la corriente de entrada y las corrientes de salida como se observa en la imagen siguiente.

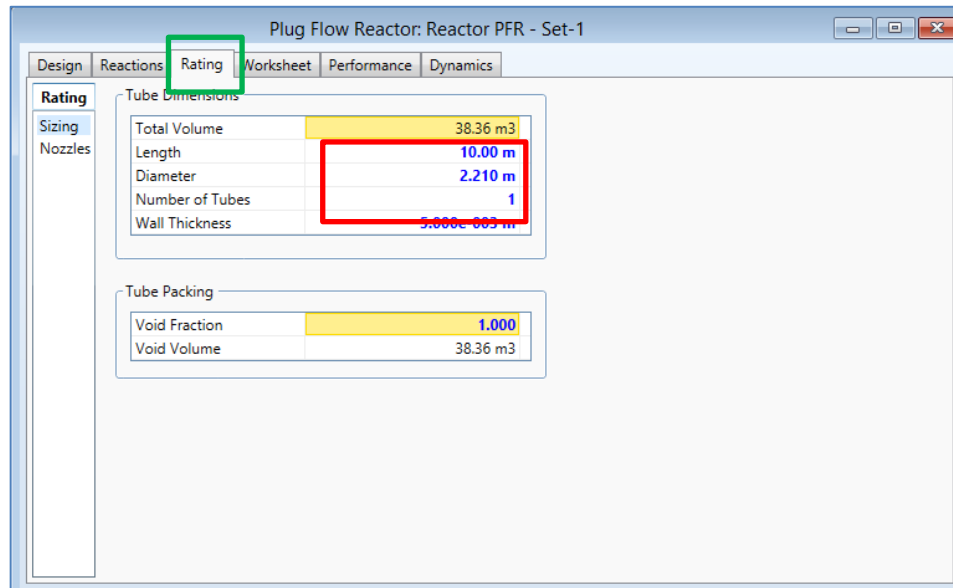
Figura 117. Configuración del reactor PFR de la opción *Connections*



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

En la pestaña *Rating*, en el apartado *Sizing*, se ingresa la longitud, el diámetro del reactor y el número de tubos mostrados en la figura 119. Estos valores se obtienen por medio de la información de la sección 3.2.

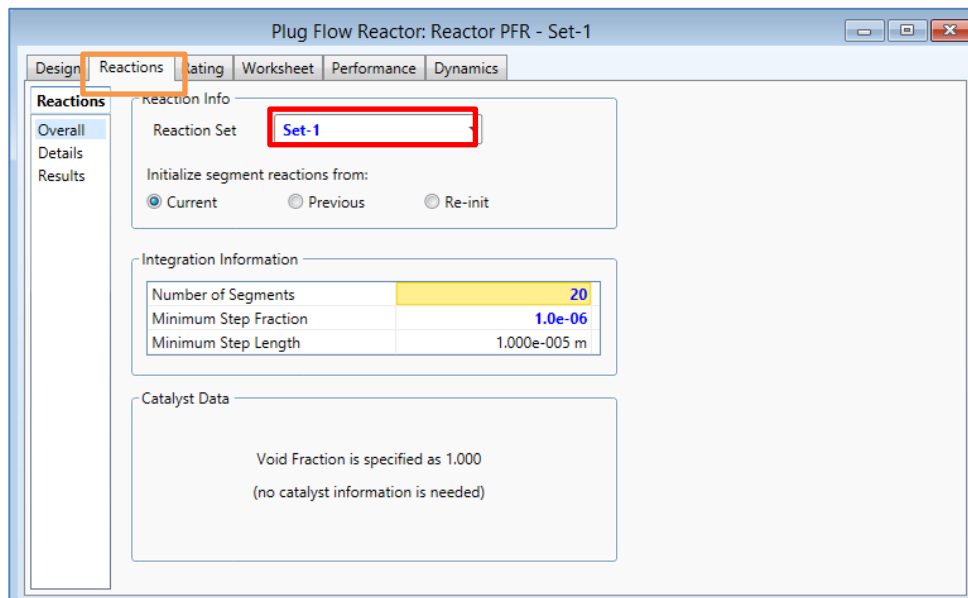
Figura 118. Configuración de la opción *Parameters* del reactor PFR



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Las reacciones involucradas en el proceso se seleccionan en la pestaña *Reactions*, en la lista plegable con la descripción *Reaction Set* se escoge la opción Set-1 mostrada a continuación.

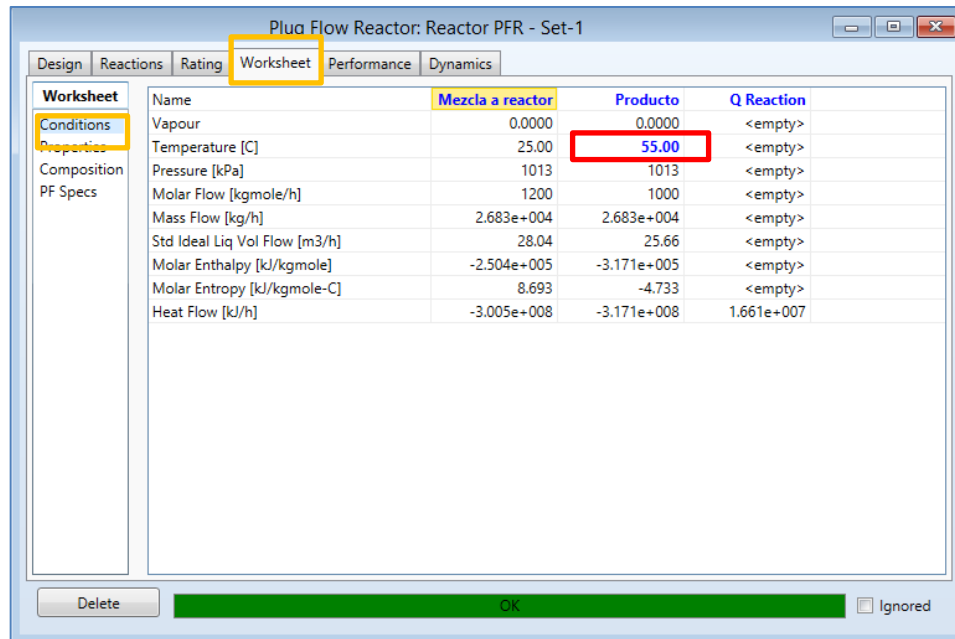
Figura 119. Selección del set de reacciones en la pestaña *Reactions*



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

El reactor opera isotérmicamente por lo que se debe colocar la temperatura del producto obtenido del reactor igual a la temperatura de ingreso al mismo. Se selecciona la pestaña *Worksheet*, se coloca la temperatura de 55°C en el cuadro que se intercepta productos frente a la temperatura mostrado a continuación.

Figura 120. **Ingreso de la temperatura en la pestaña de *Worksheet* del reactor PFR**



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

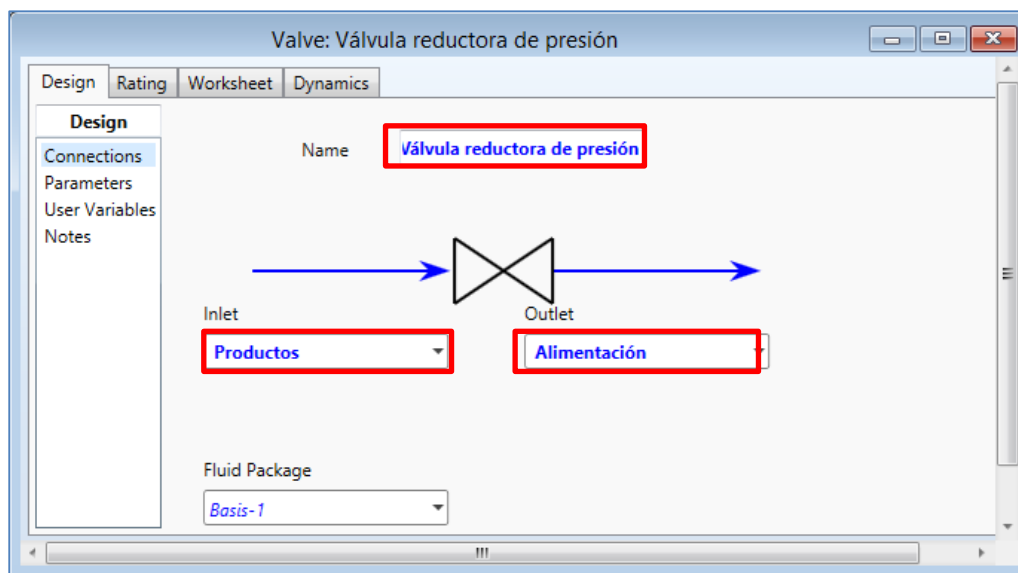
Cambia la barra horizontal de color verde, por lo que se puede cerrar la ventana y continuar como en la figura 121.

3.3.5.3. Ingreso de válvula reductora de presión

Para el ingreso de la corriente de producto hacia la torre de destilación, se realiza una reducción de presión según la figura 85. En el panel de objetos se selecciona el ícono con la descripción *Control Valve* y luego se coloca en la pantalla de simulación. Realizar doble clic sobre la imagen para configurarlo. Se modifica el nombre por válvula reductora de presión, en la corriente de entrada

se selecciona la corriente de productos y se nombra la corriente de salida por alimentación como se muestra a continuación.

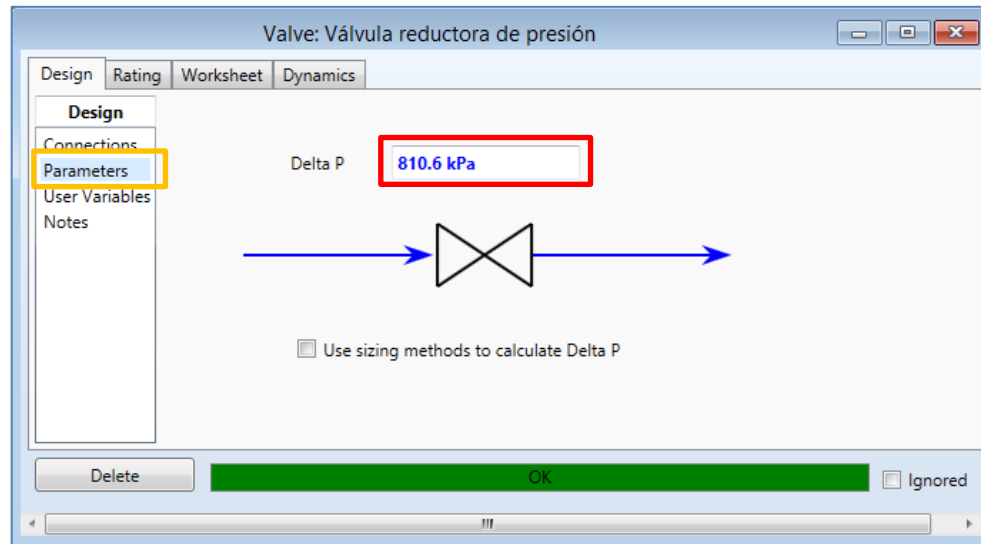
Figura 121. **Configuración de la válvula reductora de presión**



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Luego se selecciona la opción *Parameters* y se ingresa el cambio de presión a 8 atm en la descripción Delta P como se observa en la figura 123.

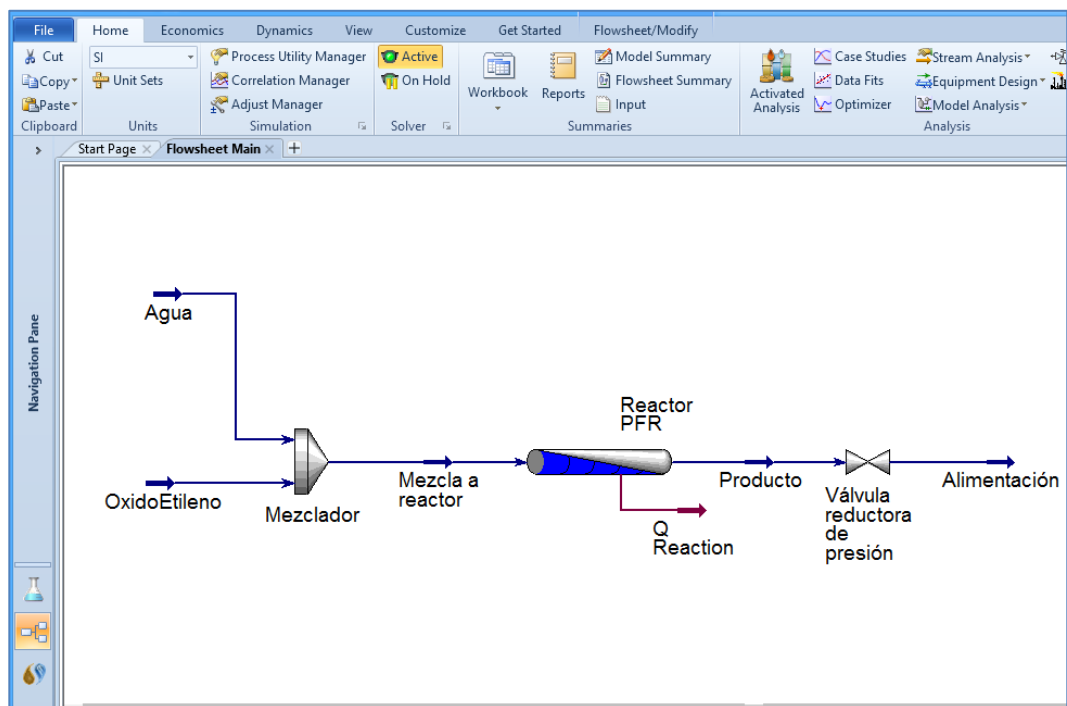
Figura 122. Ingreso del cambio de presión en la opción *Parameters*



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

La construcción del proceso de simulación hasta esta etapa se ve como en la siguiente figura.

Figura 123. Construcción del proceso de simulación del etilenglicol

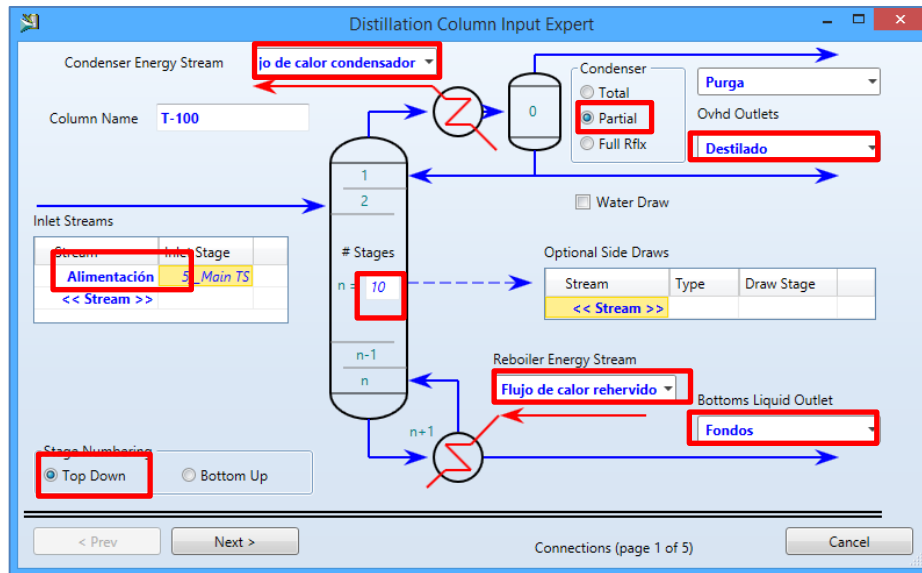


Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

3.3.5.4. Ingreso de la columna de destilación

En la paleta de objetos en la pestaña *Columns*, se selecciona el ícono con la descripción *Distillation Column Sub-Flowsheet* para colocarlo en la pantalla de simulación. Para configurarlo se hace doble clic en la imagen. En la primera ventana se modifica el nombre del equipo por Columna de Destilación, se modifica los nombres de entrada y salida de la columna como en la figura 85 y los datos requeridos basados en la tabla XIII. Esto se visualiza en la siguiente figura.

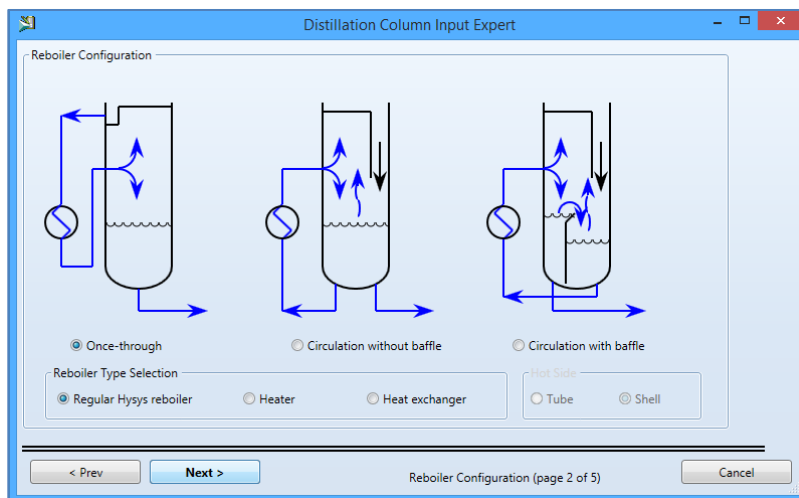
Figura 124. Configuración de la primera ventana de la columna de destilación



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

En la segunda ventana se selecciona el tipo de rehervidor el cual se selecciona el implícito por el software: Regular HYSYS Reboiler de un solo paso (*Once-Through*) del vapor como en la ventana siguiente.

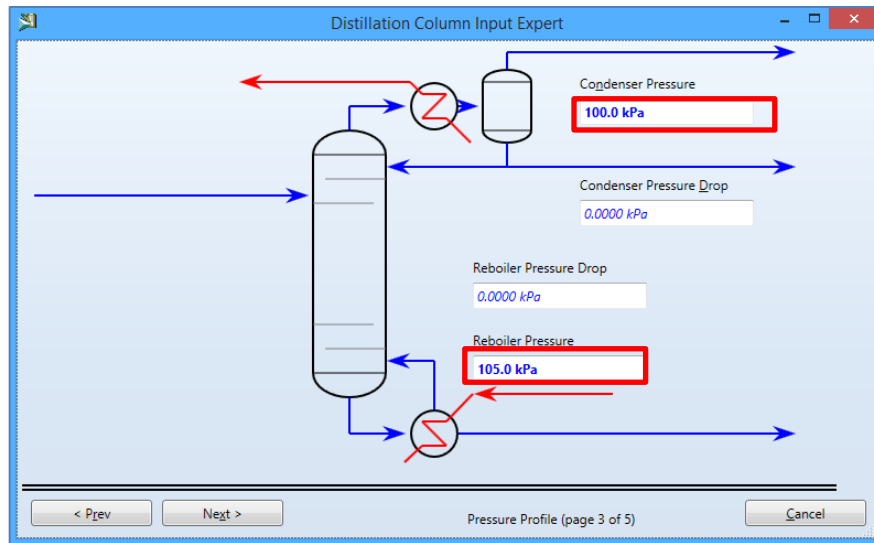
Figura 125. **Configuración de la segunda ventana de la columna de destilación**



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

La tercera ventana se especifica las presiones de operación del rehervidor y del condensador mostrado en la figura 127. Con la información de la tabla XIII se completa la ventana observada a continuación; se asume que no hay caída de presión lo cual está implícito en el software.

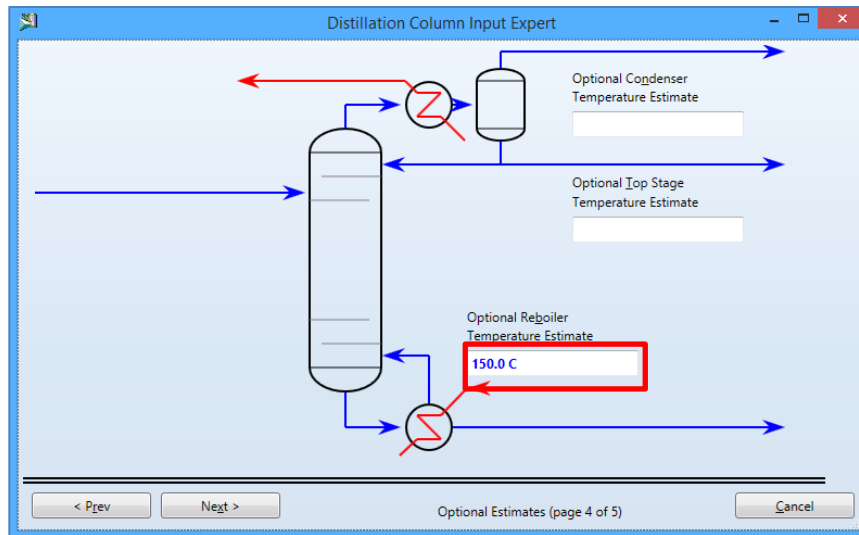
Figura 126. **Configuración de la tercera ventana de la columna de destilación**



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

En la cuarta ventana se realizan estimaciones de temperaturas, en donde se asigna un valor de temperatura en el rehervidor mostrado en la figura 128; luego se continúa a la siguiente ventana.

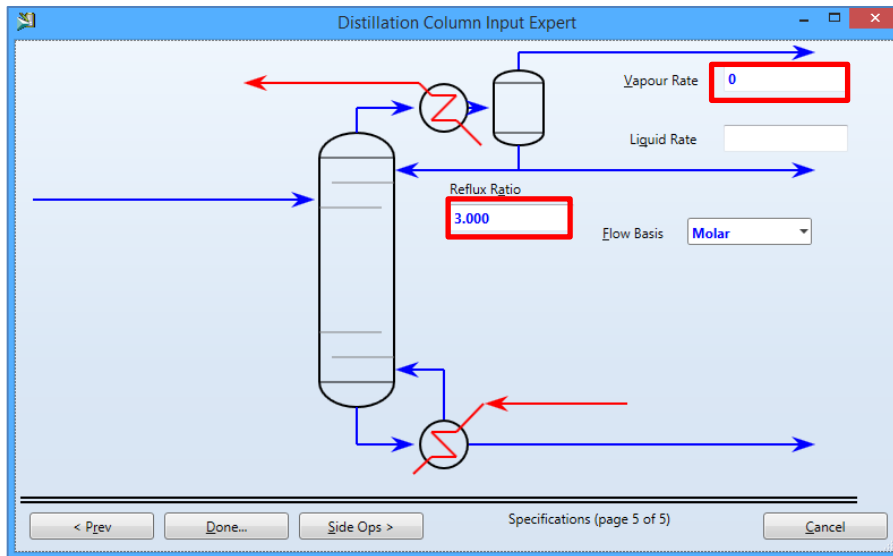
Figura 127. **Configuración de la cuarta ventana de la columna de destilación**



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

En la quinta y última ventana se ingresan especificaciones operativas de la columna visualizadas en la figura 129, con la ayuda de la tabla XIII se complementa la información requerida y puede cerrarse la ventana.

Figura 128. **Configuración de la quinta ventana de la columna de destilación**



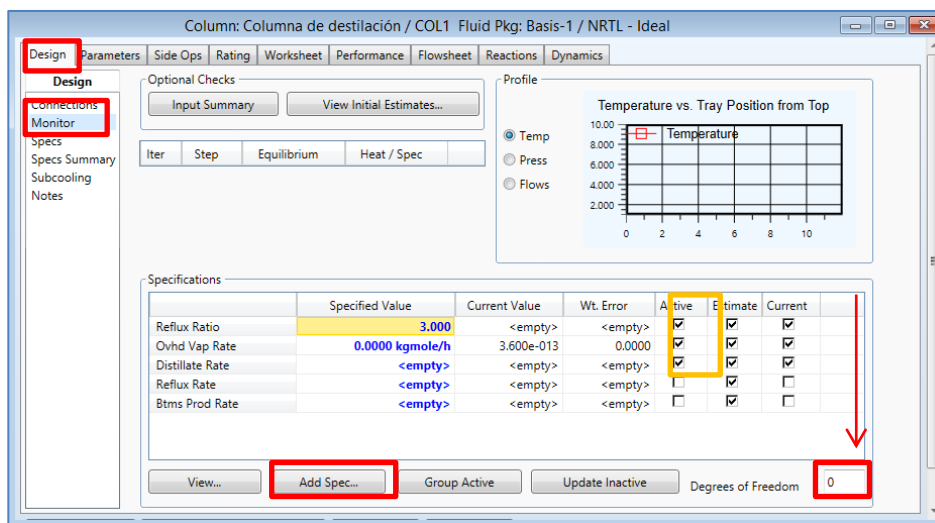
Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Seguidamente aparece una ventana en donde se observa las configuraciones de la columna de destilación; en la parte inferior aparece una barra de color rojo indicando la descripción *Unconverged*. Esto se refiere a que se requiere dos variables para conformar el conjunto de datos que cumplan la condición en la que los grados de libertad sean iguales a cero y pueda converger.

En la pestaña *Design* visualizada en la figura 130, se selecciona la opción Monitor, en la parte inferior con la descripción *Degrees of Freedom* indica los grados de libertad, mientras más o menos variables se asignen aumentarán o disminuirán los mismos, por lo que se debe mantener la condición de cero.

En la lista de *Specifications* de la figura 130, se observa algunas variables involucradas en el funcionamiento de la torre; en la columna *Active* están seleccionadas tres variables, pero la variable *Distillate Rate* no tiene valor por lo que aparece con la descripción *Empty*. Se cambia de variable por la temperatura del rehervidor, por lo que se oprime el botón *Add Spec*.

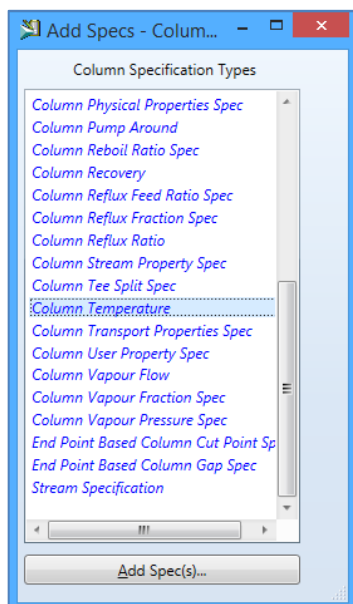
Figura 129. Opción Monitor de la pestaña **Design**



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Se selecciona la opción *Column Temperature* y luego se oprime el botón inferior *Add Spec* como se muestra a continuación.

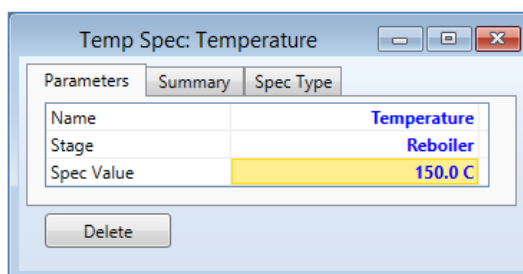
Figura 130. **Ventana Add Specs**



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

En la ventana de la opción *Column Temperature*, se modifica la descripción *Stage* por *Reboiler* y la descripción *Spec Value* por 150°C, como se ve a continuación.

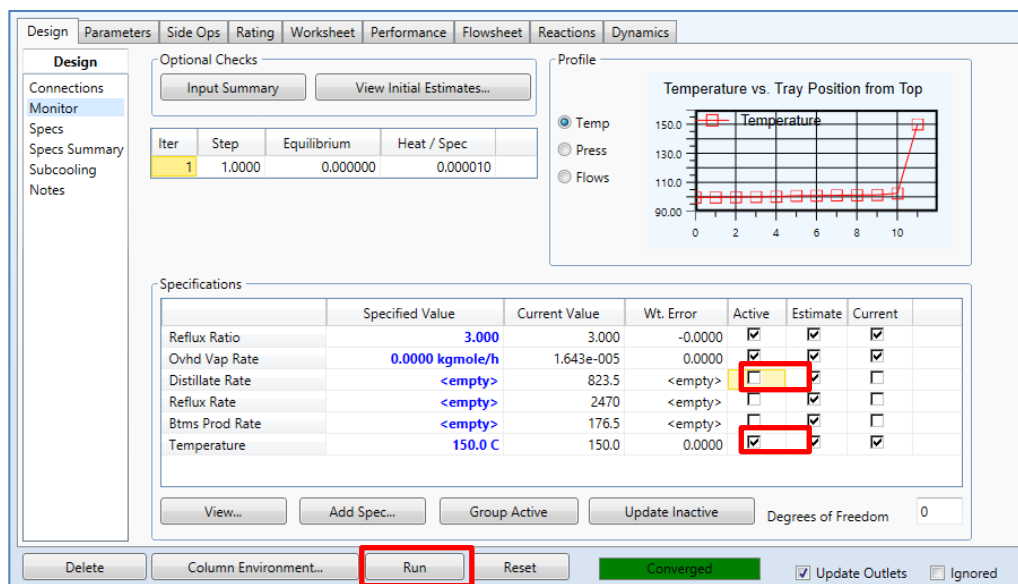
Figura 131. **Ventana de la opción *Column Temperature***



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Al cerrar la ventana aparece nuevamente la ventana de la opción monitor (figura 130), se activa la opción *Temperature* y luego se desactiva la opción *Distillate Rate*, se presiona el botón inferior *Run* por lo que cambia la barra inferior de color verde, indicando que converge los datos como se observa en la siguiente figura.

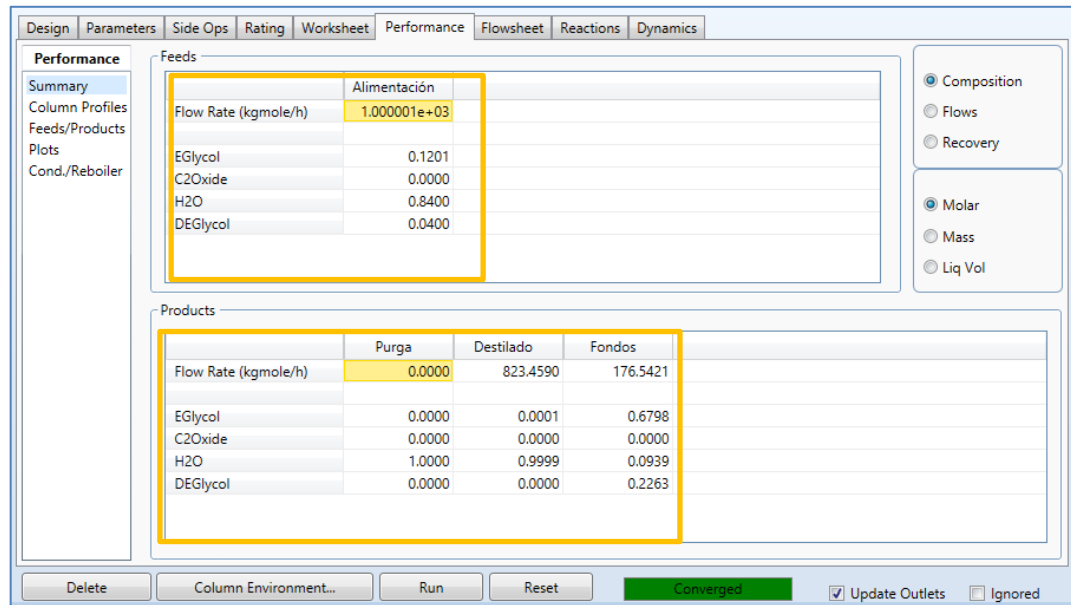
Figura 132. Opción monitor de la columna de destilación



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Para conocer los resultados obtenidos en la columna de destilación se selecciona la pestaña *Performance* y la opción *Summary* visualizada en la figura 134. En la primera ventana aparecen los flujos de alimentación y en la segunda ventana los productos obtenidos en kgmol/h.

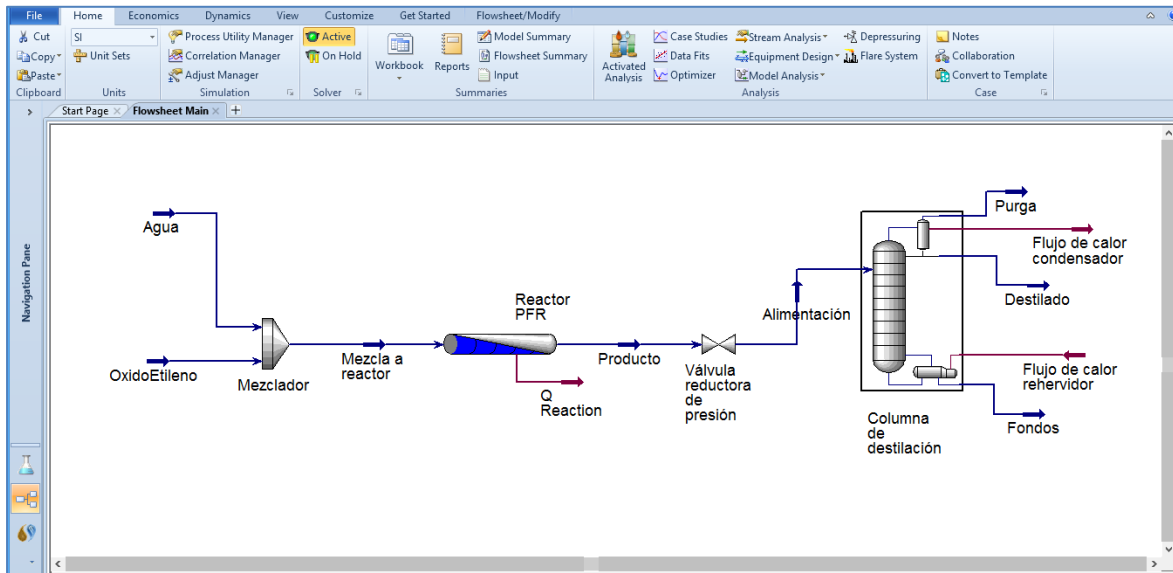
Figura 133. Opción **Summary** de la pestaña **Performance**



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

La construcción del proceso de simulación con esta etapa se ve como en la siguiente figura:

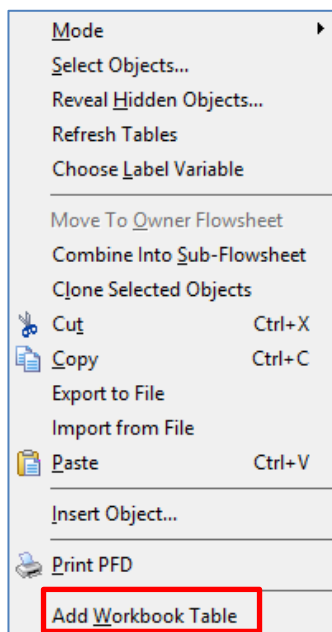
Figura 134. Construcción de la simulación del proceso de etilenglicol



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Para conocer los flujos de masa y molar del proceso, se hace clic derecho en cualquier parte del entorno de la simulación, aparece una ventana en donde se escoge la opción *Add Workbook Table* como se muestra en la siguiente figura.

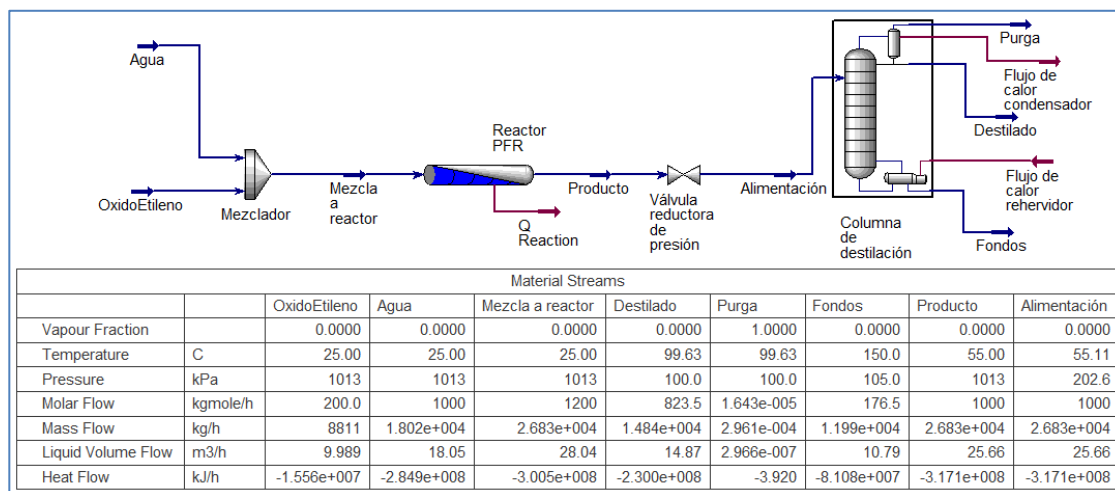
Figura 135. Selección de la opción **Show Table**



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Aparece una tabla en donde se indican tres opciones, se escoge *Material Streams*; aparecerá en el entorno la tabla de los flujos másicos y molares de todas las corrientes del proceso. En la siguiente figura se observa la tabla en el simulador.

Figura 136. **Tabla de flujos de materia**

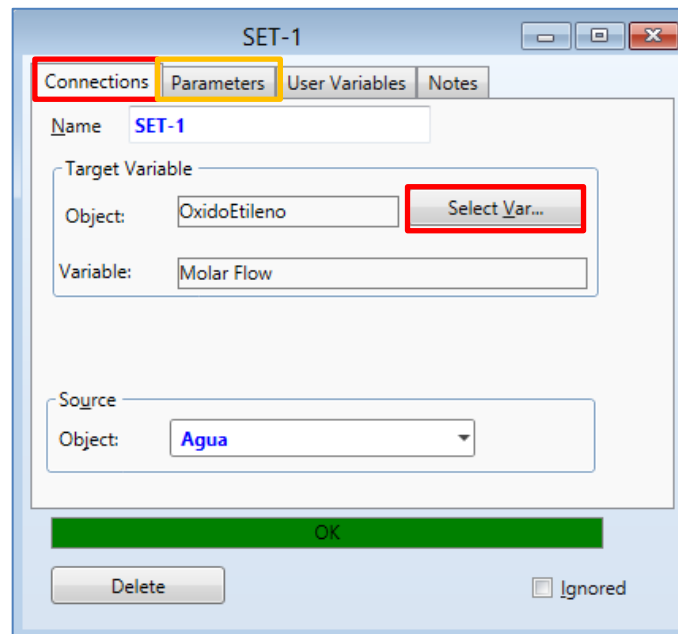


Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

3.3.6. **Agregar la operación lógica SET**

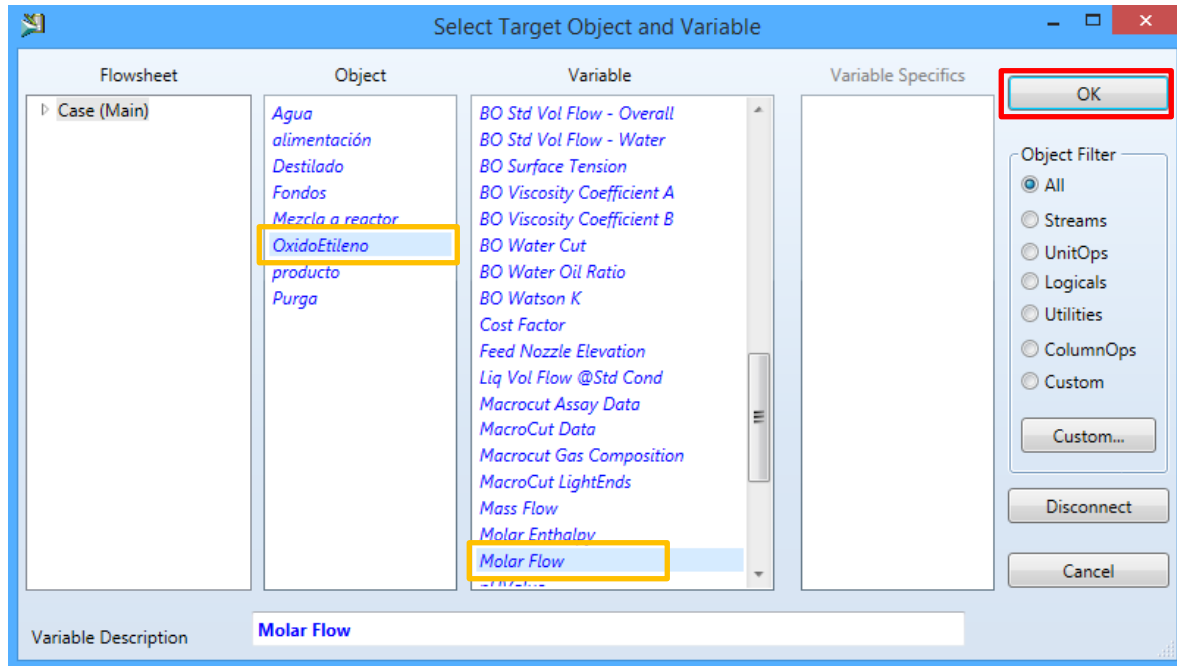
Para establecer la relación entre la composición generada de etilenglicol y dietilenglicol con las corrientes de entrada y la temperatura, se debe relacionar las variables entre corrientes de óxido de etileno y agua. En la paleta de objetos se selecciona el ícono Set (figura 81) para colocarlo en la pantalla del simulador, se modifica al hacer doble clic sobre la imagen. Aparece una ventana en el que se modifica la pestaña *Connections* como se muestra en la figura 138, en la descripción *Target Variable*, para la descripción Object se coloca la opción OxidoEtileno y para la descripción Variable por *Molar Flow*. Luego en la subventana *Source*, en la descripción *Object* se coloca la opción Agua.

Figura 137. Pestaña **Connections** de la opción **Set**



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

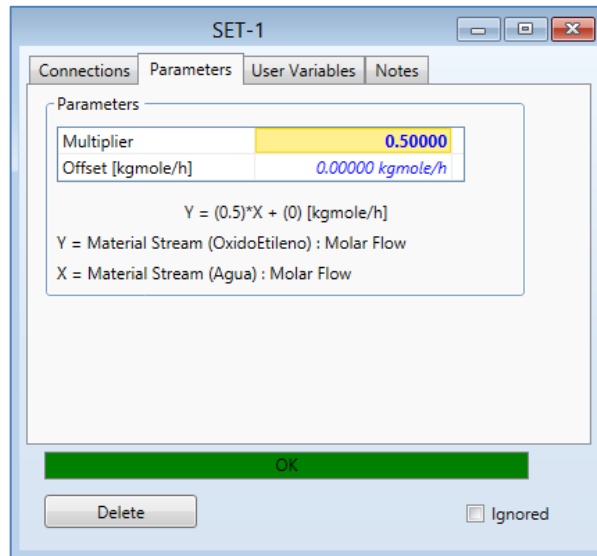
Figura 138. **Modificación del botón *Select Var***



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Luego se selecciona la pestaña *Parameters* de la opción “Set” de la figura 138, en donde se establece la relación entre las corrientes de óxido de etileno (variable dependiente) y agua (variable independiente) por medio de una ecuación lineal. Para motivos didácticos se establece una relación 0.5, por lo que en la opción *multiplier* se coloca el valor 0.5. Cambiará la barra inferior de color verde como se visualiza en la figura 140, por lo que se puede cerrar la ventana.

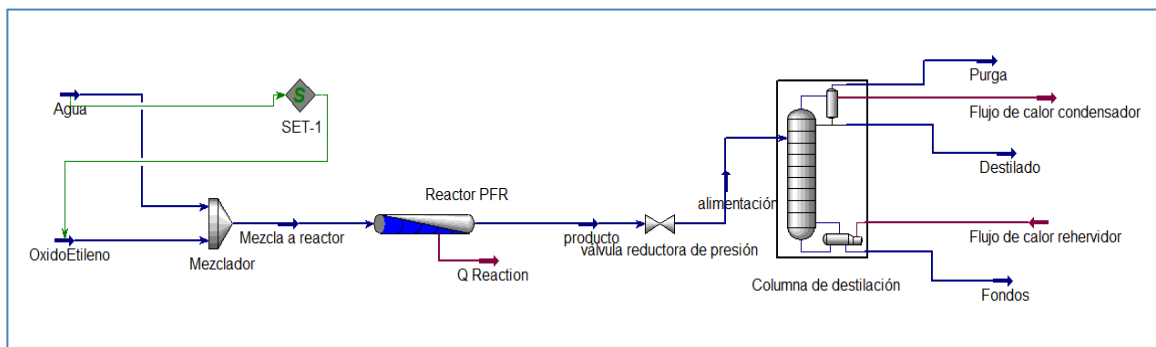
Figura 139. **Modificación de la pestaña *Parameters* de la opción “Set”**



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Al colocar la opción “Set”, la simulación se observa como en la siguiente figura.

Figura 140. **Simulación del proceso de etilenglicol**

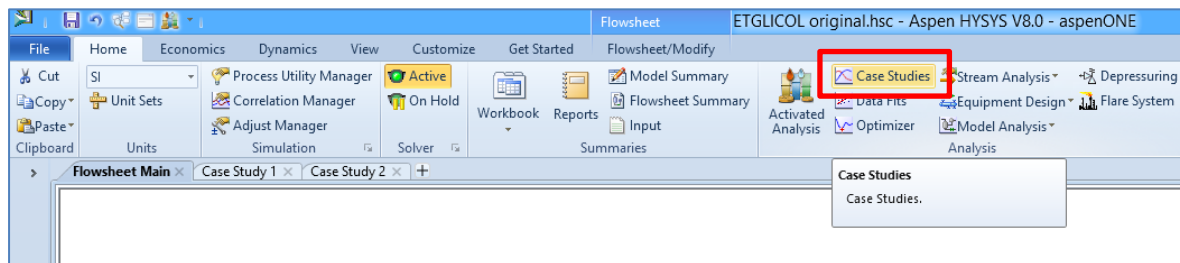


Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

3.3.7. Opción Case Studies

Para conocer el comportamiento gráfico de la relación entre los reactivos y productos generados dentro del reactor como también la variación de la temperatura en el mismo, se utiliza la opción *Case Studies*. En la barra de menú se selecciona la pestaña *Home*, luego en la barra de herramientas se selecciona la opción *Case Studies*.

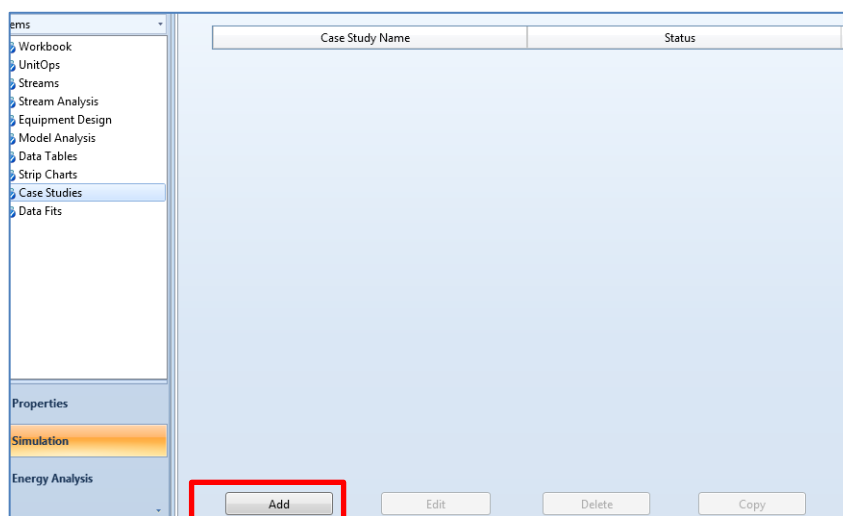
Figura 141. Selección de la opción *Case Studies*



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Se crea una nueva pestaña, para crear un nuevo caso de estudio, se selecciona el botón inferior con la descripción Add como se muestra a continuación.

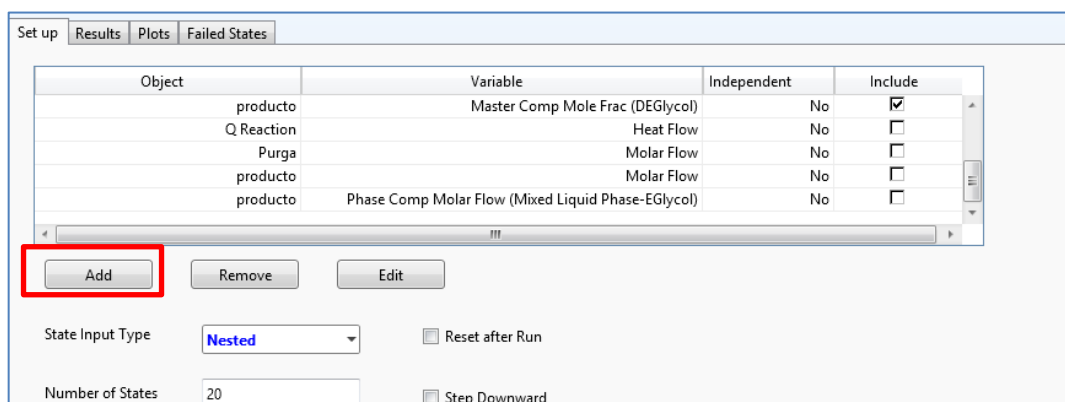
Figura 142. Selección del botón Add de la pestaña *Case Studies*



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Aparece una ventana en la pestaña *Set up*, en donde se selecciona las variables dependientes e independientes; para agregarlos se selecciona el botón Add como en la figura siguiente.

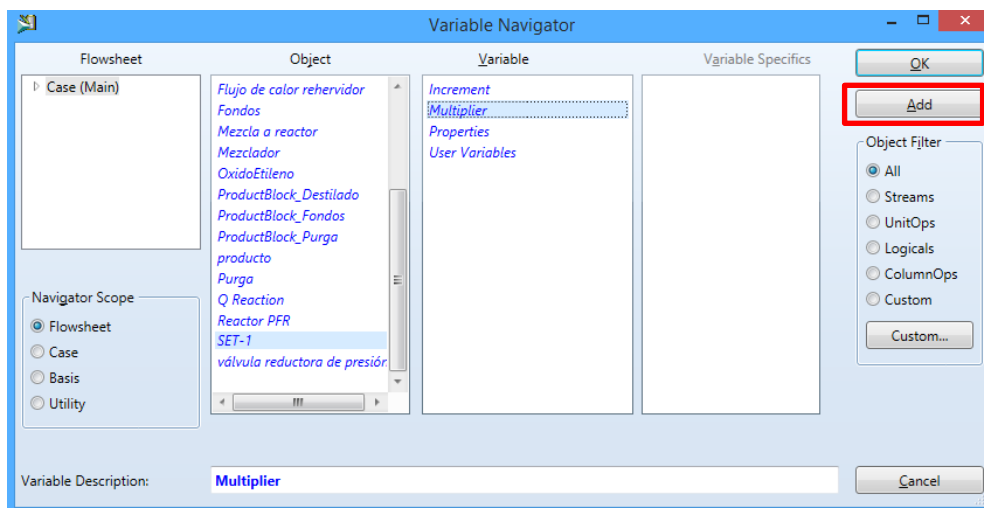
Figura 143. Pestaña *Set up* de la opción *Case Studies*



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

En la ventana existen cuatro cuadros, en cada uno se va escogiendo una opción para especificar el tipo de variables que se analizará; en el cuadro del *Flowsheet* se escoge *Case (Main)*; en el siguiente cuadro con el nombre *Object* se escoge la opción *Set-1* y en el cuadro variable se escoge la opción *Multiplier*, luego se hace clic en el botón *Add*, mostrado a continuación.

Figura 144. **Ventana de Variable Navigator**



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Se realiza el mismo procedimiento para seleccionar las siguientes variables:

- En el cuadro *Object* se selecciona la opción *producto* y en el cuadro *Variable* se selecciona la opción *Temperature*.
- En el cuadro *Object* se selecciona la opción *producto* y en el cuadro *Variable* se seleccionan las siguientes opciones:
 - *Master Comp Mole Frac (EGlycol)*
 - *Master Comp Mole Frac (DEGlycol)*

Al cerrar la ventana nuevamente aparece la pestaña *Set up* con la lista de las variables seleccionadas como se muestra a continuación.

Figura 145. **Lista de variables en la pestaña *Set up* de la opción *Case Studies***

Object	Variable	Independent	Include
SET-1	Multiplier	Yes	<input type="checkbox"/>
producto	Temperature	Yes	<input checked="" type="checkbox"/>
producto	Master Comp Mole Frac (EGlycol)	No	<input checked="" type="checkbox"/>
producto	Master Comp Mole Frac (DEGlycol)	No	<input checked="" type="checkbox"/>

State Input Type: Nested
☐ Reset after Run

Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Se observa que las dos únicas variables independientes son la temperatura de salida del producto del reactor y la relación de los reactivos con la opción SET1. Cada variable independiente se grafica con las variables dependientes que aparecen en la lista. Para esto se selecciona una de las variables independientes en la columna *Include* y se seleccionan todas las variables dependientes. Luego, en la parte inferior aparece un recuadro en donde se selecciona el mínimo y máximo de valores en la gráfica como también la separación entre los números, visualizado en la siguiente figura.

Figura 146. Pestaña *Case Study*

The screenshot shows the 'Set up' tab in Aspen HYSYS 8.0. It contains two main tables and several controls.

Top Table:

Object	Variable	Independent	Include
SET-1	Multiplier	Yes	<input type="checkbox"/>
producto	Temperature	Yes	<input checked="" type="checkbox"/>
producto	Master Comp Mole Frac (EGlycol)	No	<input checked="" type="checkbox"/>
producto	Master Comp Mole Frac (DEGlycol)	No	<input checked="" type="checkbox"/>

Below the table are buttons: Add, Remove, Edit.

State Input Type: **Nested** (dropdown menu). ☐ Reset after Run

Number of States: 20. ☐ Step Downward

Bottom Table (highlighted with a yellow border):

Independent Variable	Low Bound	High Bound	Step Size
producto - Temperature	1.000	100.0	5.000

Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

3.3.7.1. Gráfica entre etilenglicol y dietilenglicol en función de los reactivos ingresados al reactor utilizando la función *Case Studies*

Para graficar la relación entre etilenglicol y dietilenglicol en función de los flujos de reactivos, en la tabla de la pestaña *Set up* se selecciona la variable SET1, y todas las variables dependientes. Luego, en la tabla inferior de la pestaña se coloca 0.001 en *Low Bound*, 1 en *High Bound* y 0.1 en *Step Size*. Después se hace clic en el botón *Run* para que el programa empiece a trabajar, como se observa a continuación.

Figura 147. **Modificación de la pestaña *Set up* para el primer caso**

Object	Variable	Independent	Include
SET-1	Multiplier	Yes	<input checked="" type="checkbox"/>
producto	Master Comp Mole Frac (DEGlycol)	No	<input checked="" type="checkbox"/>
producto	Master Comp Mole Frac (EGlycol)	No	<input checked="" type="checkbox"/>

State Input Type: Nested
☐ Reset after Run

Number of States: 10
☐ Step Downward

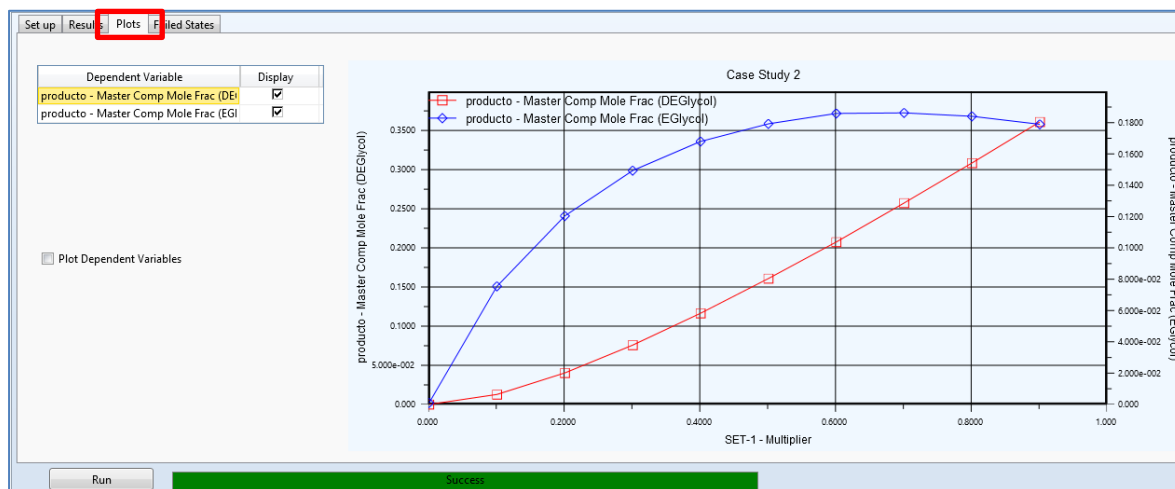
Independent Variable	Low Bound	High Bound	Step Size
SET-1 - Multiplier	1.000e-003	1.000	0.1000

Success

Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Luego se selecciona la pestaña “Plots”, aparecerá la gráfica entre la variable independiente y las variables dependientes como se muestra a continuación.

Figura 148. Gráfica en la pestaña Plots de la opción **Case Studies**



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

3.3.7.2. Gráfica entre etilenglicol y dietilenglicol en función de la temperatura del reactor utilizando la función **Case Studies**

Para graficar la relación entre etilenglicol y dietilenglicol en función de la temperatura, en la tabla de la pestaña *Set up* se selecciona la variable temperatura, y todas las variables dependientes. Luego en la tabla inferior de la pestaña se coloca 1 en *Low Bound*, 160 en *High Bound* y 5 en *Step Size*. Después se hace clic en el botón Run para que el programa empiece a trabajar, como se observa en la figura siguiente.

Figura 149. **Modificación de la pestaña *Set up* para el segundo caso**

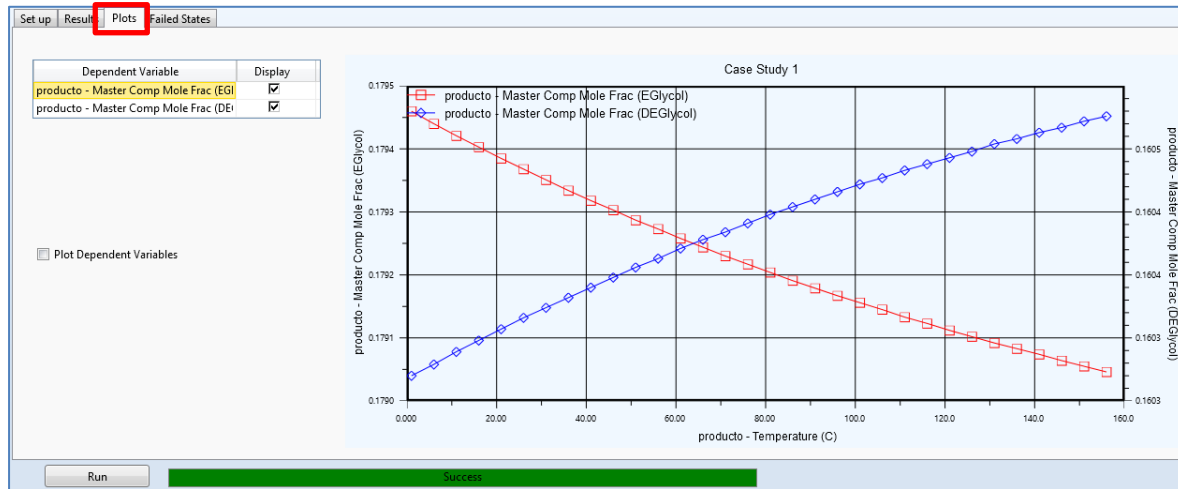
Object	Variable	Independent	Include
SET-1	Multiplier	Yes	<input type="checkbox"/>
producto	Temperature	Yes	<input checked="" type="checkbox"/>
producto	Master Comp Mole Frac (EGlycol)	No	<input checked="" type="checkbox"/>
producto	Master Comp Mole Frac (DEGlycol)	No	<input checked="" type="checkbox"/>

Independent Variable	Low Bound	High Bound	Step Size
producto - Temperature	1.000	160.0	5.000

Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

Luego se selecciona la pestaña *Plots*, aparecerá la gráfica entre la variable independiente y las variables dependientes como se muestra a continuación.

Figura 150. Gráfica en la pestaña *Plots* de la opción *Case Studies*



Fuente: elaboración propia, empleando software Aspen HYSYS 8.0.

4. DISEÑO METODOLÓGICO

4.1. Delimitación del campo de estudio

El presente trabajo de graduación pertenece a la rama de ingeniería química en la línea de estudio de simulación de procesos químicos, para la explicación del uso del software Aspen HYSYS por medio del manejo de las herramientas básicas del software para el diseño de un proceso de etilenglicol, el cual se genera a partir de la reacción por hidratación del óxido de etileno con agua en un reactor PFR. Posteriormente pasa por un proceso de separación en una torre de destilación, en donde se obtiene los balances de masa de cada operación unitaria y el comportamiento del reactor PFR respecto de la temperatura y las relaciones entre las concentraciones de los reactivos respecto de los productos.

4.2. Recursos humanos disponibles

El recurso humano requerido para la elaboración del presente trabajo se presenta a continuación:

- Investigador: Br. Vania María López de los Ríos
- Asesor: Ing. Qco. Williams Guillermo Álvarez Mejía

4.3. Recursos materiales disponibles

- Programa Aspen HYSYS V8.0, obtenido mediante las siguientes formas:

- Descarga de la versión de evaluación del sitio oficial²² para trabajar por un plazo de 30 días.
- Adquirido mediante la página web oficial del fabricante.
- Manual de usuario del programa Aspen, HYSYS V 8.0.
 - Ubicado en el sitio web del fabricante.
- Equipo de computación, con los siguientes requerimientos mínimos²³:
 - Procesador: Intel Core i5 o superior
 - Memoria RAM: 8GB (aunque funciona en equipos con 2GB)
 - Espacio libre en disco: 8GB
- Monitor con una resolución de 1024 x 768 (o superior)
- Libros de consulta y documentos basados de internet
 - Listas en la sección de referencia bibliográfica

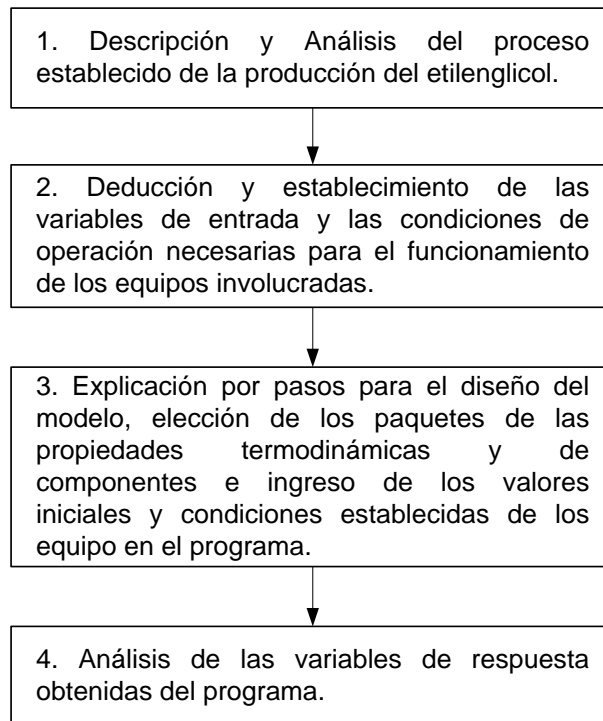
4.4. Técnica cualitativa o cuantitativa

Para el desarrollo de la simulación se utiliza el software para la demostración del funcionamiento y la forma de obtención de los valores numéricos de los balances las operaciones involucradas en el proceso y los comportamientos específicos del reactor PFR para la formación del etilenglicol. Consiste en los siguientes pasos:

²² ASPEN TECHNOLOGY INC. *Aspentech*.

²³ Requerimientos mínimos para la versión de Aspen HYSYS 8.0.

Figura 151. **Secuencia de operaciones para el diseño del modulador**



Fuente: elaboración propia.

4.5. **Recolección y ordenamiento de la información**

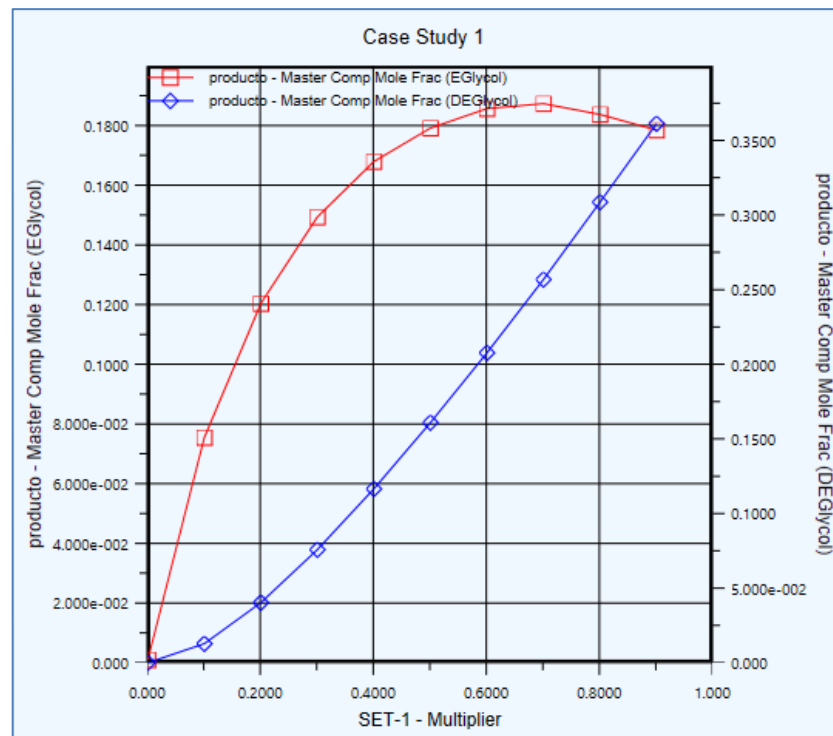
La recolección de datos e información se han buscado en base a fuentes con información sobre el uso de Aspen HYSYS siendo algunos:

- Libros y manuales relacionados con el uso del software
- Videos demostrativos sobre la utilización del software
- Trabajos de graduación con la temática del software
- Información en portales de internet
- Base de datos de universidades que imparten cursos del software

Para la realización de la simulación y entendimiento del manejo del programa; se investigaron diferentes fuentes relacionados con el proceso de elaboración del etilenglicol a nivel laboratorio e industrial como libros especializados, artículos científicos, presentaciones, trabajos de graduación, fuentes de internet e informes.

5. RESULTADOS

Figura 152. Composición del etilenglicol y dietilenglicol en función de la relación de composición de reactivos ingresados en el reactor PFR



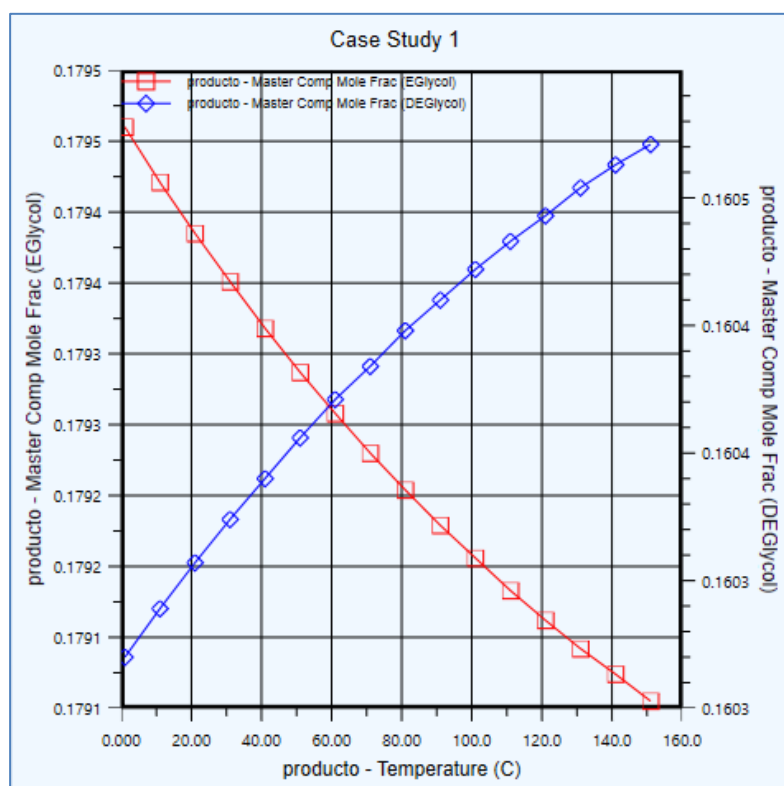
Fuente: resultados obtenidos con la función *Case Studies* del programa Aspen HYSYS.

Tabla XV. Ecuación y coeficiente de correlación de la figura 153

Color	Compuesto	Ecuación	R ²
	Etilenglicol	$Y_{EG} = 9,95 * 10^{-5} + 0,943X_{set} - 2,30X_{set}^2 + 3,50X_{set}^3 - 3,01X_{set}^4 + 1,04X_{set}^5$	0,9999
	Dietilenglicol	$Y_{DEG} = -0,0004 + 0,06X_{set} + 0,85X_{set}^2 - 0,8120X_{set}^3 + 0,32X_{set}^4$	0,9999

Fuente: resultados obtenidos con la función *Case Studies* del programa Aspen HYSYS.

Figura 153. Composición del etilenglicol y dietilenglicol en función de la temperatura del reactor PFR



Fuente: resultados obtenidos con la función *Case Studies* del programa Aspen HYSYS.

Tabla XVI. Ecuación y coeficiente de correlación de la figura 154

Color	Compuesto	Ecuación	R ²
	Etilenglicol	$Y_{EG} = 0.18 - 3.77 * 10^{-6}T + 7.21 * 10^{-9}T^2$	0,9996
	Dietilenglicol	$Y_{DEG} = 0.16 + 1.85 * 10^{-6}T - 3.38 * 10^{-9}T^2$	0,9987

Fuente: resultados obtenidos con la función *Case Studies* del programa Aspen HYSYS.

Tabla XVII. Balance de materia del proceso con relación de flujos de entrada al 20 % en óxido de etileno respecto del agua

Compuesto	Flujo de materia (kgmol/h)							
	Mezclador		Reactor PFR		Columna de destilación			
	Entrada	Salida	Entrada	Salida	Entrada	Salida		
						Purga	Destilado	Fondos
Agua	1000	1000	1000	839,9580	839,9580	1,64E-5	823,3822	16,5758
Óxido de etileno	200	200	200	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Etilenglicol	0,00	0,00	0,00	120,0867	120,0867	0,00	0,0766	120,0102
Dietilenglicol	0,00	0,00	0,00	39,9564	39,9564	0,00	0,00	39,9564

Fuente: resultados obtenidos con la función *Case Studies* del programa Aspen HYSYS.

Tabla XVIII. Balance de materia del proceso con relación de flujos de entrada al 50 % en óxido de etileno respecto del agua

Compuesto	Flujo de materia (kgmol/h)							
	Mezclador		Reactor PFR		Columna de destilación			
	Entrada	Salida	Entrada	Salida	Entrada	Salida		
						Purga	Destilado	Fondos
Agua	1000	1000	1000	660,4183	660,4183	1,90E-5	617,2667	43,1516
Óxido de etileno	500	500	500	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Etilenglicol	0,00	0,00	0,00	179,1676	179,1676	0,00	0,0425	179,1251
Dietilenglicol	0,00	0,00	0,00	160,4162	160,4162	0,00	0,00	160,4162

Fuente: resultados obtenidos con la función *Case Studies* del programa Aspen HYSYS.

Tabla XIX. **Balance de materia del proceso con relación de flujos de entrada al 70 % en óxido de etileno respecto del agua**

Compuesto	Flujo de materia (kgmol/h)							
	Mezclador		Reactor PFR		Columna de destilación			
	Entrada	Salida	Entrada	Salida	Entrada	Salida		
						Purga	Destilado	Fondos
Agua	1000	1000	1000	556,8766	556,8766	1,54E-5	496,6619	60,2146
Óxido de etileno	700	700	700	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Etilenglicol	0,00	0,00	0,00	186,2522	186,2522	0,00	0,0280	186,2242
Dietilenglicol	0,00	0,00	0,00	256,8739	256,8739	0,00	0,00	256,8739

Fuente: resultados obtenidos con la función *Case Studies* del programa Aspen HYSYS.

Tabla XX. **Balance de materia del proceso con relación de flujos de entrada al 90 % en óxido de etileno respecto del agua**

Compuesto	Flujo de materia (kgmol/h)							
	Mezclador		Reactor PFR		Columna de destilación			
	Entrada	Salida	Entrada	Salida	Entrada	Salida		
						Purga	Destilado	Fondos
Agua	1000	1000	1000	460,4840	460,4840	1,17E-5	383,8562	76,6278
Óxido de etileno	900	900	900	0,00	0,00	0,00	0,00	0,00
Etilenglicol	0,00	0,00	0,00	179,0388	179,0388	0,00	0,0187	179,0202
Dietilenglicol	0,00	0,00	0,00	360,4804	360,4804	0,00	0,00	360,4804

Fuente: resultados obtenidos con la función *Case Studies* del programa Aspen HYSYS.

Tabla XXI. **Etilenglicol y dietilenglicol obtenido al final del proceso en base al porcentaje de óxido de etileno en 1000kg/h de agua**

Porcentaje de óxido de etileno en agua (%)	Etilenglicol obtenido (kgmol/h)	Dietilenglicol obtenido (kgmol/h)
20	120,0102	39,9564
50	179,1251	160,4162
70	186,2242	256,8739
90	179,0202	360,4804

Fuente: resultados obtenidos con la función *Case Studies* del programa Aspen HYSYS.

6. INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS

6.1. Utilización y explicación del uso del programa aspen para ingeniería química

El motivo de la explicación de una herramienta de simulación como el programa Aspen Hysys es para la integración de programas de computación a los cursos del pensum de ingeniería química, ya que, cada día la tecnología es una herramienta importante y es indispensable al momento de la realización de una simulación de cualquier proceso industrial u operación unitaria. Por lo anterior, se muestra la utilización del programa por medio del proceso de producción de etilenglicol, que facilita la recreación del proceso, y evita el problema de cálculos extensos y repetitivos para obtener en menor tiempo resultados, para dedicar mayor tiempo al análisis y a la mejora de los diseños de los procesos.

Por medio de las funciones que proporciona el programa es factible modificar las variables de ingreso y las condiciones de trabajo de cada operación para obtener los resultados establecidos como los balances de masa de cada etapa y la obtención de gráficas del comportamiento del reactor. Para esto, se realiza una explicación del manejo del programa a partir del inicio de la aplicación, con conocimiento de los entornos de trabajo, y con las bases iniciales para el funcionamiento del proceso. Por ejemplo, la selección de los compuestos involucrados, los tipos de propiedades termodinámicas, fenómenos transportes implicados y las reacciones involucradas. Al establecer las bases se explica, en general, el entorno de simulación, la selección de los

equipos, corrientes de entradas y salidas, ingreso de variables, asistentes de ayuda, obtención de resultados, entre otros.

6.2. Análisis de los resultados obtenidos en la simulación del proceso

En la simulación del proceso de etilenglicol entran dos corrientes al inicio del proceso, el óxido de etileno y agua, en donde la reacción se lleva a cabo dentro del reactor PFR. Se obtiene como resultado el etilenglicol y subproductos (dietilenglicol) y agua no reaccionante. Con la ayuda de la función Estudio de Casos (*Case Studies*) del software, se grafican las fracciones molares de etilenglicol y dietilenglicol obtenidas en el reactor en función de las relaciones de las dos corrientes de entrada visualizado en la figura 153. Conforme se aumenta la relación de óxido de etileno con el agua, se incrementa la generación de etilenglicol, también incrementa la concentración de dietilenglicol, por lo que a concentraciones bajas de óxido de etileno en agua, se ve favorecida la producción de etilenglicol frente a la del dietilenglicol. El comportamiento de las funciones en las gráficas es de quinto grado para el etilenglicol y de cuarto grado para el dietilenglicol con un coeficiente de determinación aproximado de 0,9999.

También con la función estudio de casos (*Case Studies*) se obtiene la gráfica de las fracciones molares de etilenglicol y dietilenglicol en función de la temperatura en el reactor PFR visualizado en la figura 154, observándose una disminución de la concentración del etilenglicol conforme aumenta la temperatura; caso contrario con el dietilenglicol, en el que aumenta su concentración al aumento de la temperatura, por lo que las temperaturas bajas se ven favorecidas en la operación del reactor, ya que la generación de etilenglicol es mayor que la formación de dietilenglicol. A partir de la figura 154 se obtiene el comportamiento de las funciones en las gráficas, siendo de

segundo grado en ambas funciones con un coeficiente de determinación aproximado de 0.9996 del etilenglicol y 0.9986 del dietilenglicol.

Los balances de materia obtenidos por el simulador de cada operación del proceso de producción se observan en las tablas XVI, XVII, XVIII y XIX en donde se varía el porcentaje de flujo de entrada del óxido de etileno en 20 %, 50 %, 70 % y 90 % respectivamente. En la corriente de los fondos de la columna de destilación se observa que al aumento del flujo de entrada de óxido de etileno al proceso, menor cantidad de etilenglicol en comparación con el dietilenglicol se obtiene, pero aumenta la cantidad de agua no reaccionante. Esto se debe a que las reacciones de la sección 2.4 del marco teórico, conforme aumenta la cantidad de óxido de etileno dentro del reactor, disminuye la interacción con el agua e interactúa con otras moléculas de óxido de etileno con moléculas de etilenglicol formado, con lo cual genera mayor cantidad de dietilenglicol que de etilenglicol al final del proceso²⁴ como se observa en la tabla XX, por lo que al 20 % de óxido de etileno en agua existe mayor cantidad de etilenglicol pero al 90 % existe mayor cantidad de dietilenglicol.

²⁴ MELHEM, Georges A., et. al. *Kinetics of the Reactions of Ethylene Oxide with Water and Ethylene Glycols*. p. 298.

CONCLUSIONES

1. Para la simulación del proceso de producción del etilenglicol en el programa Aspen HYSYS, se debe tener conocimiento previo de las condiciones iniciales del proceso, como también de las operaciones unitarias involucradas, para saber ingresar correctamente los datos mínimos que el programa solicita conforme se avanza en el desarrollo del simulador y obtener los resultados deseados.
2. Por medio del modelamiento del proceso de etilenglicol se explica el funcionamiento general del software, explicando la utilización de cada herramienta requerida para su diseño y obtención de resultados.
3. Al seleccionar las diferentes operaciones unitarias, se requiere de información mínima de diseño como también las condiciones de temperatura y de presión para su funcionamiento en el simulador.
4. La obtención de etilenglicol y dietilenglicol en el simulador aumenta conforme la relación en el ingreso de las corrientes de entrada al proceso de óxido de etileno y agua es mayor; por lo que a relaciones bajas predomina la concentración de etilenglicol en el reactor PFR.
5. En el proceso, las temperaturas mayores de 60°C dentro del reactor PFR existe mayor concentración de dietilenglicol que de etilenglicol, por lo que el reactor al operar a temperatura bajas se obtendrá mayor concentración de etilenglicol en relación de dietilenglicol al final del proceso.

6. Se simula el proceso de obtención de etilenglicol variando el flujo de entrada del óxido de etileno al 20, 50, 70 y 90 por ciento, obteniendo como resultado los balances de materia cada etapa visualizada en el cuaderno de cálculo (función Workbook), obteniendo mayor predominancia de concentración de etilenglicol al 20 por ciento en comparación de los demás porcentajes, siendo de 120.0102 kgmol/h de etilenglicol y 39,9564 kgmol/h de dietilenglicol.
7. Con la ayuda del simulador aspen HYSYS se puede modelar procesos industriales simplificando la resolución de los cálculos y obteniendo resultados aproximados de situaciones reales para los procesos en estado estacionario.

RECOMENDACIONES

1. Darle seguimiento a las investigaciones sobre la utilización del simulador Aspen HYSYS, debido a que puede emplearse para diferentes procesos industriales, ya sea en estado estacionario o dinámico.
2. Proponer la utilización de simuladores en los cursos de la carrera de ingeniería química por medio de cursos de simulación de procesos, con el empleo de equipos de computación y la adquisición de las licencias correspondientes para su uso.
3. Realizar manuales para la utilización del software según el plan de estudio de cada curso debido a que existen múltiples herramientas por lo que los estudiantes pueden confundirse al comenzar a utilizarlo si no se posee conocimiento previo.

BIBLIOGRAFÍA

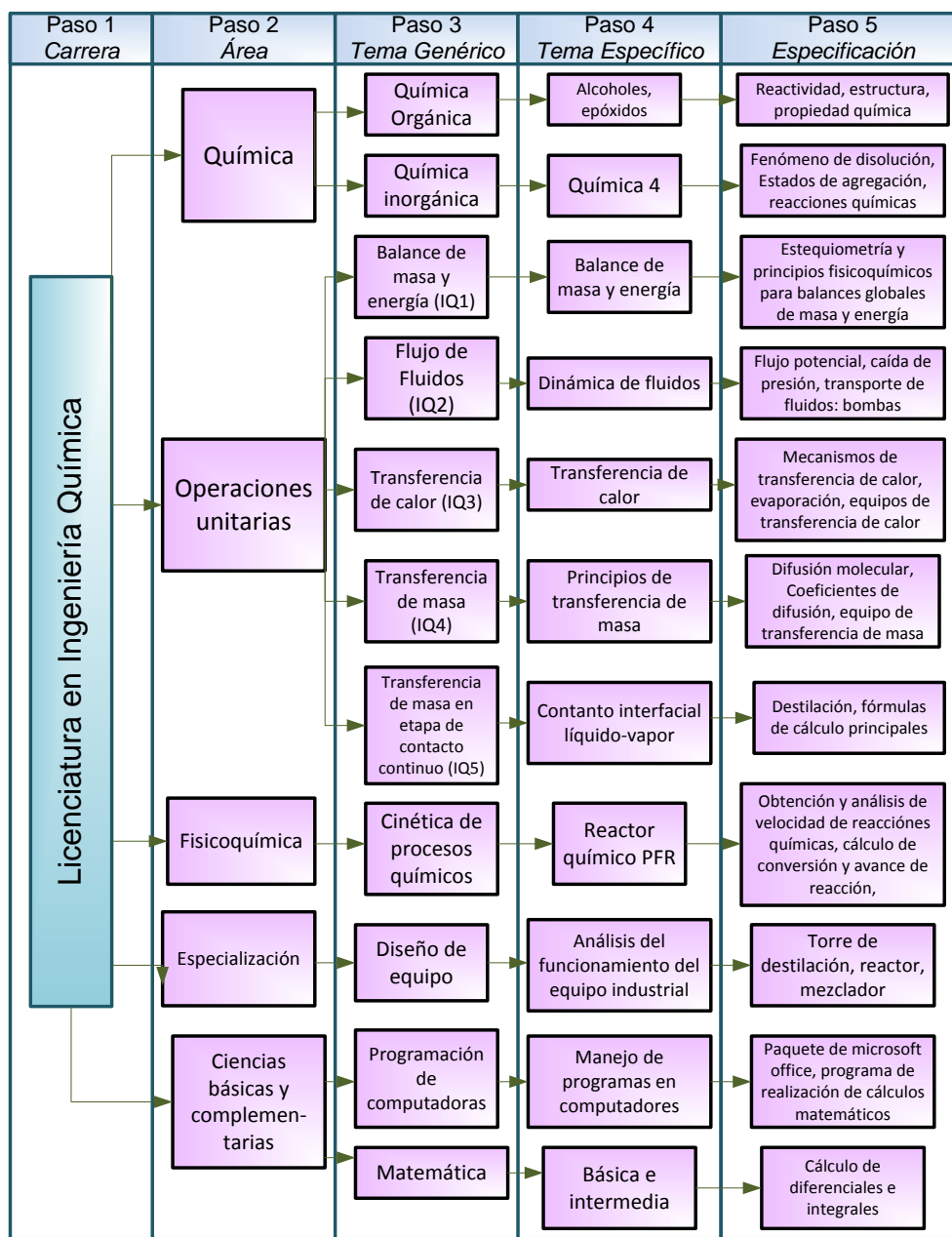
1. ASPEN TECHNOLOGY INC. Aspentech. *Aspentech*. [en línea]. <<http://www.aspentech.com>>. [Consulta: 27 de octubre de 2015].
2. CONCHA VALENZUELA, Luis. *La Química del agua*. [en línea]. <http://w2.educarchile.cl/UserFiles/P0001/File/la_quimica_del_agua.pdf>. [Consulta: 29 de octubre de 2015].
3. FELDER, RICHARD M. y ROUSSEAU, RONALD W. *Principios Elementales de los Procesos Químicos*. 3a. ed. México: Limusa Wiley, 2008. 675 p.
4. FOGLER, H. Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. 4a ed. España: Pearson Education, 2008. 978 p.
5. GARCÍA PÉREZ, Águeda. *Estructura e Importancia del agua en el metabolismo celular*. [en línea]. <http://www.fmvz.unam.mx/fmvz/p_estudios/apuntes_bioquimica/Unidad_2.pdf>. [Consulta: 29 de octubre de 2015].
6. G. SPEIGHT, James. *Chemical and Process Design Handbook*. E.E.U.U. McGraw-Hill, 2002. 337 p.
7. H. PENN, Alexander. *Reactions in HYSYS*. [en línea] <<http://www.owlnet.rice.edu/~ceng403/hysys/reactions.html>>. [Consulta: 25 de abril de 2016].

8. Instituto Nacional de Ecología y Cambio Climático (INECC). *Secretaría de Medio Ambiente y Recursos Naturales. Gobierno de Estados Unidos Mexicanos*. [en línea]. <<http://www2.inecc.gob.mx/sistemas/plaguicidas/pdf/Dietilenglicol.pdf>>. [Consulta: 29 de octubre de 2015].
9. IKHYUN, Kim. *Aspen HYSYS: Steady states and dynamic simulator (eg plant exercise)*. [en línea]. <http://pssl.snu.ac.kr/korean/files/02_lecture.pdf>. [Consulta: 25 de abril de 2016].
10. J. BENZ, Sonia y FRANCESCONI, Javier. Universidad Tecnológica Nacional- Facultad Regional Rosario. *Introducción al Uso del Simulador HYSYS*. [en línea]. <http://www.modeloingenieria.edu.ar/mei/repositorio/catedras/intIV/apuntes/apunte_introduccion_simulador_hysys.pdf>. [Consulta: 30 de octubre de 2015].
11. L. MCCABE, Warren, C. SMITH, Julian y HARRIOT, Peter. *Operaciones Unitarias en Ingeniería Química*. 7a ed México: McGraw-Hill, 2007. 617 p.
12. LUQUE RODRÍGUEZ, Susana y VEGA GRANDA, Aurelio B. *Simulación y Optimización avanzadas en la Industria Química y de Procesos: HYSYS*. 3a ed. Universidad de Oviedo, Oviedo: Los autores, 2005. 315 p.
13. MARTÍNEZ SIFUENTES, Víctor Hugo y otros. *Simulación de Procesos en Ingeniería Química*. México : Plaza y Valdés Editores, febrero del 2000. 378 p.

14. MAYER, LUDWIG. *Métodos de la industria química en esquemas de flujo en colores. Parte 2, Orgánica : una visión panorámica y moderna de los métodos de la industria química*. España: Reverté S. A. 2008. 598 p.
15. MELHEM, Georges A., y otros. *Kinetics of the Reactions of Ethylene Oxide with Water and Ethylene Glycols*. Estados Unidos de: AIChE (American Institute of Chemical Engineers), 2004. 246 p.
16. REKLAITIS, G. V. y SCHNEIDER, Daniel R. *Balances de Materia y Energía*. México: Nueva Editorial Interamericana, 1986. 456 p.
17. SITTLER, Lauren y AJIKUTIRA, Dinu. *Aspen Tech. Jump Start: Aspen HYSYS® V8, A Guide for Getting Started in Aspen HYSYS*. [en línea]. <www.aspentech.com/hysys_jump_start_v8/>. [Consulta: 29 de octubre de 2015].
18. *Textos científicos.com*. [en línea] <<http://www.textoscientificos.com/quimica/oxido-etileno>>. [Consulta: 29 de octubre de 2015].

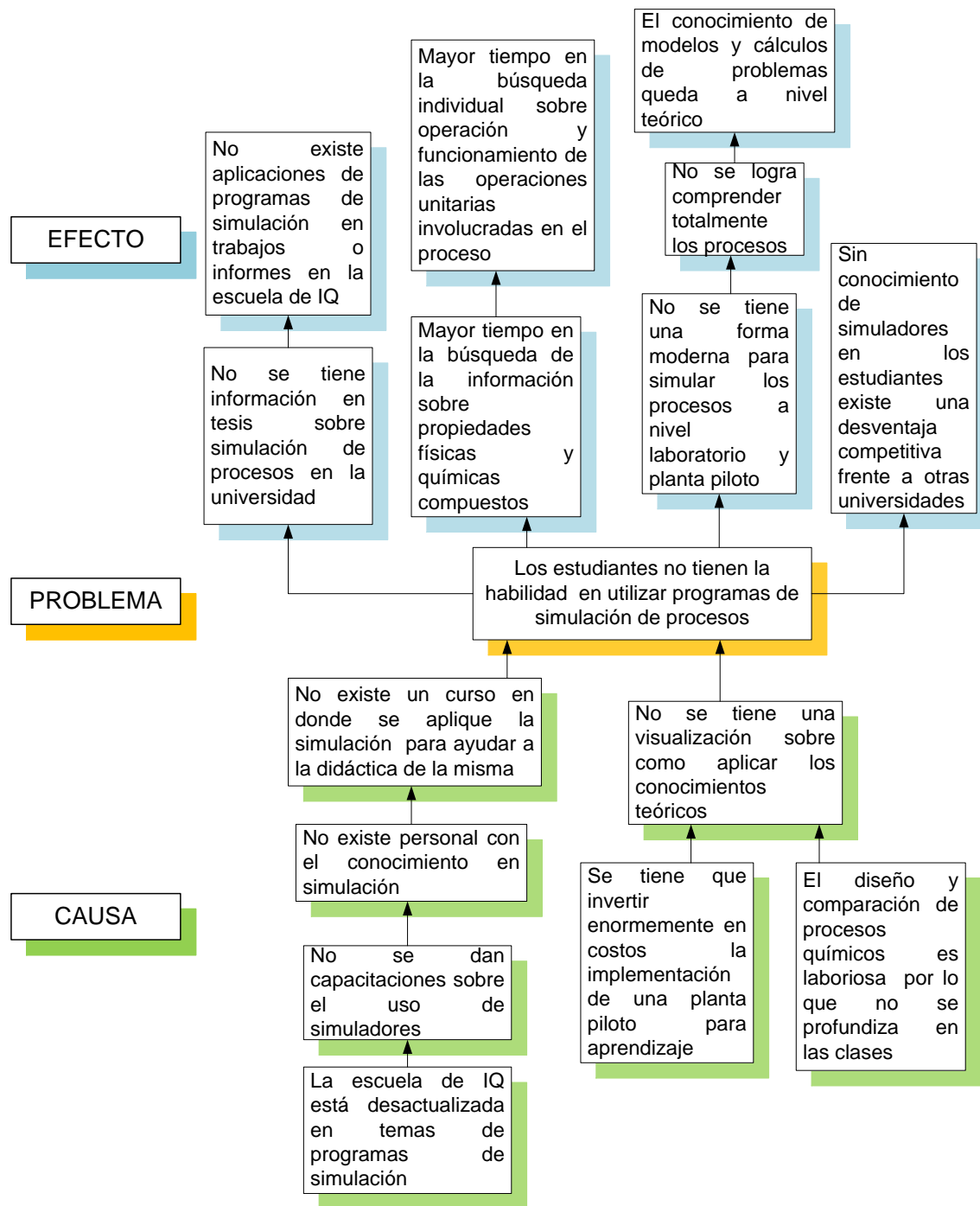
APÉNDICE

Apéndice 1. Requisitos académicos



Fuente: elaboración propia.

Apéndice 2. Árbol de problemas



Fuente: elaboración propia.

ANEXOS

Tablas de resultados obtenidos con la función *case studies* del programa Aspen HYSYS

Anexo 1. Composición del etilenglicol y dietilenglicol en función de la relación de composición de reactivos ingresados en el reactor PFR

	State	SET-1 - Multiplier	producto - Master Comp Mole Frac (EGlycol)	producto - Master Comp Mole Frac (DEGlycol)
▶	State 1	0.001	0.0009971	2.097e-06
▶	State 2	0.101	0.07546	0.01277
▶	State 3	0.201	0.1204	0.04029
▶	State 4	0.301	0.1494	0.07582
▶	State 5	0.401	0.1679	0.1165
▶	State 6	0.501	0.1791	0.1609
▶	State 7	0.601	0.1857	0.2077
▶	State 8	0.701	0.1873	0.2568
▶	State 9	0.801	0.1837	0.3086
▶	State 10	0.901	0.1785	0.3612

Fuente: función *Case Studies*, software Aspen HYSYS 8.0.

Anexo 2. **Composición del etilenglicol y dietilenglicol en función de la temperatura del reactor PFR**

	State	producto - Temperature [C]	producto - Master Comp Mole Frac (EGlycol)	producto - Master Comp Mole Frac (DEGlycol)
▶	State 1	1	0.1802	0.3604
▶	State 2	6	0.1801	0.3604
▶	State 3	11	0.18	0.3605
▶	State 4	16	0.18	0.3605
▶	State 5	21	0.1799	0.3606
▶	State 6	26	0.1798	0.3606
▶	State 7	31	0.1798	0.3606
▶	State 8	36	0.1797	0.3607
▶	State 9	41	0.1796	0.3607
▶	State 10	46	0.1795	0.3607
▶	State 11	51	0.1795	0.3608
▶	State 12	56	0.1794	0.3608
▶	State 13	61	0.1794	0.3608
▶	State 14	66	0.1793	0.3608
▶	State 15	71	0.1792	0.3609
▶	State 16	76	0.1792	0.3609
▶	State 17	81	0.1791	0.3609
▶	State 18	86	0.1791	0.361
▶	State 19	91	0.179	0.361
▶	State 20	96	0.179	0.361

Fuente: función *Case Studies*, software Aspen HYSYS 8.0.

Anexo 3. Flujo de materias de cada etapa al 20 % en óxido de etileno con respecto del agua

Name	OxidoEtileno	Agua	Mezcla a reactivos	producto	Destilado
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Temperature [C]	25.00	25.00	25.00	96.00	99.63
Pressure [kPa]	1013	1013	1013	1013	100.0
Molar Flow [kgmole/h]	200.0	1000	1200	1000	823.4
Mass Flow [kg/h]	8811	1.802e+004	2.683e+004	2.683e+004	1.484e+004
Liquid Volume Flow [m3/h]	9.989	18.05	28.04	25.66	14.87
Heat Flow [kJ/h]	-1.556e+007	-2.849e+008	-3.005e+008	-3.132e+008	-2.300e+008
Name	Purga	Fondos	alimentación	** New **	
Vapour Fraction	1.0000	0.0000	0.0000		
Temperature [C]	99.63	150.0	96.10		
Pressure [kPa]	100.0	105.0	202.6		
Molar Flow [kgmole/h]	2.640e-005	176.6	1000		
Mass Flow [kg/h]	4.755e-004	1.199e+004	2.683e+004		
Liquid Volume Flow [m3/h]	4.765e-007	10.79	25.66		
Heat Flow [kJ/h]	-6.297	-8.109e+007	-3.132e+008		

Fuente: función *Workbook*, software Aspen HYSYS 8.0.

Anexo 4. Fracción molar de los compuestos con respecto de cada etapa del proceso al 20 % en óxido de etileno con respecto del agua

Name	OxidoEtileno	Agua	Mezcla a reactivos	producto	Destilado
Comp Mole Frac (C2Oxide)	1.0000	0.0000	0.1667	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (EGlycol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.1201	0.0001
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	1.0000	0.8333	0.8400	0.9999
Comp Mole Frac (DEGlycol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0400	0.0000
Name	Purga	Fondos	alimentación	** New **	
Comp Mole Frac (C2Oxide)	0.0000	0.0000	0.0000		
Comp Mole Frac (EGlycol)	0.0000	0.6796	0.1201		
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	0.0940	0.8400		
Comp Mole Frac (DEGlycol)	0.0000	0.2264	0.0400		

Fuente: función *Workbook*, software Aspen HYSYS 8.0.

Anexo 5. Flujo de materias de cada etapa al 50 % en óxido de etileno respecto del agua

Name	OxidoEtileno	Agua	Mezcla a reactc	producto	Destilado
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Temperature [C]	25.00	25.00	25.00	96.00	99.63
Pressure [kPa]	1013	1013	1013	1013	100.0
Molar Flow [kgmole/h]	500.0	1000	1500	1000	617.3
Mass Flow [kg/h]	2.203e+004	1.802e+004	4.004e+004	4.004e+004	1.112e+004
Liquid Volume Flow [m3/h]	24.97	18.05	43.02	37.12	11.14
Heat Flow [kJ/h]	-3.891e+007	-2.849e+008	-3.238e+008	-3.652e+008	-1.724e+008
Name	Purga	Fondos	alimentación	xx New xx	
Vapour Fraction	1.0000	0.0000	0.0000		
Temperature [C]	99.63	150.0	96.06		
Pressure [kPa]	100.0	105.0	202.6		
Molar Flow [kgmole/h]	1.990e-005	382.7	1000		
Mass Flow [kg/h]	3.585e-004	2.892e+004	4.004e+004		
Liquid Volume Flow [m3/h]	3.592e-007	25.98	37.12		
Heat Flow [kJ/h]	-4.748	-1.882e+008	-3.652e+008		

Fuente: función *Workbook*, software Aspen HYSYS 8.0.

Anexo 6. Fracción molar de los compuestos con respecto a cada etapa del proceso al 50 % en óxido de etileno con respecto del agua

Name	OxidoEtileno	Agua	Mezcla a reactc	producto	Destilado
Comp Mole Frac (C2Oxide)	1.0000	0.0000	0.3333	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (EGlycol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.1792	0.0001
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	1.0000	0.6667	0.6604	0.9999
Comp Mole Frac (DEGlycol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.1604	0.0000
Name	Purga	Fondos	alimentación	xx New xx	
Comp Mole Frac (C2Oxide)	0.0000	0.0000	0.0000		
Comp Mole Frac (EGlycol)	0.0000	0.4681	0.1792		
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	0.1128	0.6604		
Comp Mole Frac (DEGlycol)	0.0000	0.4192	0.1604		

Fuente: función *Workbook*, software Aspen HYSYS 8.0.

Anexo 7. Flujo de materias de cada etapa al 70 % en óxido de etileno respecto del agua

Name	OxidoEtileno	Agua	Mezcla a react	producto	Destilado
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Temperature [C]	25.00	25.00	25.00	96.00	99.63
Pressure [kPa]	1013	1013	1013	1013	100.0
Molar Flow [kgmole/h]	700.0	1000	1700	1000	496.7
Mass Flow [kg/h]	3.084e+004	1.802e+004	4.885e+004	4.885e+004	8949
Liquid Volume Flow [m3/h]	34.96	18.05	53.01	44.79	8.967
Heat Flow [kJ/h]	-5.447e+007	-2.849e+008	-3.394e+008	-4.002e+008	-1.387e+008
Name	Purga	Fondos	alimentación	** New **	
Vapour Fraction	1.0000	0.0000	0.0000		
Temperature [C]	99.63	150.0	96.04		
Pressure [kPa]	100.0	105.0	202.6		
Molar Flow [kgmole/h]	1.594e-005	503.3	1000		
Mass Flow [kg/h]	2.872e-004	3.990e+004	4.885e+004		
Liquid Volume Flow [m3/h]	2.877e-007	35.82	44.79		
Heat Flow [kJ/h]	-3.803	-2.554e+008	-4.002e+008		

Fuente: función *Workbook*, software Aspen HYSYS 8.0.

Anexo 8. Fracción molar de los compuestos respecto de cada etapa del proceso al 70 % en óxido de etileno con respecto del agua

Name	OxidoEtileno	Agua	Mezcla a react	producto	Destilado
Comp Mole Frac (C2Oxide)	1.0000	0.0000	0.4118	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (EGlycol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.1863	0.0001
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	1.0000	0.5882	0.5569	0.9999
Comp Mole Frac (DEGlycol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.2569	0.0000
Name	Purga	Fondos	alimentación	** New **	
Comp Mole Frac (C2Oxide)	0.0000	0.0000	0.0000		
Comp Mole Frac (EGlycol)	0.0000	0.3700	0.1863		
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	0.1196	0.5569		
Comp Mole Frac (DEGlycol)	0.0000	0.5104	0.2569		

Fuente: función *Workbook*, software Aspen HYSYS 8.0.

Anexo 9. Flujo de materias de cada etapa al 90 % en óxido de etileno respecto del agua

Name	OxidoEtileno	Agua	Mezcla a reactc	producto	Destilado
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Temperature [C]	25.00	25.00	25.00	96.00	99.63
Pressure [kPa]	1013	1013	1013	1013	100.0
Molar Flow [kgmole/h]	900.0	1000	1900	1000	383.9
Mass Flow [kg/h]	3.965e+004	1.802e+004	5.766e+004	5.766e+004	6916
Liquid Volume Flow [m3/h]	44.95	18.05	63.00	52.45	6.930
Heat Flow [kJ/h]	-7.004e+007	-2.849e+008	-3.549e+008	-4.355e+008	-1.072e+008
Name	Purga	Fondos	alimentación	xx New xx	
Vapour Fraction	1.0000	0.0000	0.0000		
Temperature [C]	99.63	150.0	96.03		
Pressure [kPa]	100.0	105.0	202.6		
Molar Flow [kgmole/h]	1.215e-005	616.1	1000		
Mass Flow [kg/h]	2.190e-004	5.075e+004	5.766e+004		
Liquid Volume Flow [m3/h]	2.194e-007	45.52	52.45		
Heat Flow [kJ/h]	-2.900	-3.206e+008	-4.355e+008		

Fuente: función *Workbook*, software Aspen HYSYS 8.0.

Anexo 10. Fracción molar de los compuestos respecto de cada etapa del proceso al 90 % en óxido de etileno con respecto del agua

Name	OxidoEtileno	Agua	Mezcla a reactc	producto	Destilado
Comp Mole Frac (C2Oxide)	1.0000	0.0000	0.4737	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (EGlycol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.1790	0.0000
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	1.0000	0.5263	0.4605	1.0000
Comp Mole Frac (DEGlycol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.3605	0.0000
Name	Purga	Fondos	alimentación	xx New xx	
Comp Mole Frac (C2Oxide)	0.0000	0.0000	0.0000		
Comp Mole Frac (EGlycol)	0.0000	0.2906	0.1790		
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	0.1244	0.4605		
Comp Mole Frac (DEGlycol)	0.0000	0.5851	0.3605		

Fuente: función *Workbook*, software Aspen HYSYS 8.0.