



Universidad Nacional
SAN LUIS GONZAGA



Reconocimiento-CompartirIgual 4.0 Internacional

Esta licencia permite a otras combinar, retocar, y crear a partir de su obra, incluso con fines comerciales, siempre y cuando den crédito y licencia a las nuevas creaciones bajo los mismos términos. Esta licencia suele ser comparada con las licencias copyleft de software libre y de código abierto. Todas las nuevas obras basadas en la suya portarán la misma licencia, así que cualesquiera obras derivadas permitirán también uso comercial.

<http://creativecommons.org/licenses/by-sa/4.0/>



Universidad Nacional "San Luis Gonzaga"

Software Antiplagio



INFORME DE REVISIÓN

Se ha realizado el análisis con el software antiplagio de la Universidad Nacional "San Luis Gonzaga", por parte de los docentes reponsables, al documento cuyo título es:

INTEGRACIÓN ENERGÉTICA EN LA SIMULACIÓN DEL PROCESO PRODUCTIVO DEL NEGRO DE HUMO

presentado por:

**Marco Antonio Aguirre Muñoz
Jesús Alberto Yñoñan Tercero**

del nivel **PREGRADO** de la facultad de **INGENIERIA QUIMICA Y PETROQUIMICA** obteniéndose como resultado una coincidencia de **23.14%** otorgándosele el calificativo de:

APROBADO

Se adjunta al presenta el reporte de evaluación del software antiplagio.

Observaciones:

El trabajo fue APROBADO con un 23.1% de coincidencias.

Ica, **24 de Agosto de 2020**


SANTOS HUMBERTO OLIVERA MACHADO
COORDINADOR
SOFTWARE ANTIPLAGIO
FACULTAD DE INGENIERIA QUIMICA Y
PETROQUIMICA


RAUL GERARDO AVILA MEZA
ASESOR
SOFTWARE ANTIPLAGIO
FACULTAD DE INGENIERIA QUIMICA Y
PETROQUIMICA

UNIVERSIDAD NACIONAL SAN LUIS GONZAGA DE ICA
FACULTAD DE INGENIERÍA QUÍMICA Y PETROQUÍMICA



***"INTEGRACIÓN ENERGÉTICA EN LA SIMULACIÓN DEL PROCESO
PRODUCTIVO DEL NEGRO DE HUMO"***

TESIS PARA OPTAR AL TÍTULO DE
INGENIERO QUÍMICO

PRESENTADO POR:

Bach. JESÚS ALBERTO YNOÑAN TERCERO

Bach. MARCO ANTONIO AGUIRRE MUÑOZ

ICA – PERÚ

2018

CONTENIDO

INTRODUCCIÓN	5
CAPÍTULO I: ASPECTOS GENERALES	10
1.1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA	10
1.2. IMPORTANCIA	10
1.3. OBJETIVOS DEL PROYECTO.....	12
1.3.1. Objetivo general.....	12
1.3.2. Objetivos específicos	12
1.4. HIPÓTESIS	12
1.5. VARIABLES	13
1.5.1. Variable independiente	13
1.5.2. Variable dependiente	13
1.6. JUSTIFICACIÓN.....	13
CAPÍTULO II: MARCO TEÓRICO	14
2.1. SIMULACIÓN DE PROCESOS EN INGENIERÍA QUÍMICA	14
2.1.1. Evolución de la simulación de procesos.....	16
2.1.2. Etapas del desarrollo de la simulación de un proceso químico	18
2.1.3. Clasificación de las técnicas de simulación	21
2.1.4. Aplicaciones de la Simulación de Procesos en Ingeniería Química	23

2.1.5.	Metodología del modelamiento matemático.....	25
2.1.6.	Leyes fundamentales del modelamiento de procesos químicos	27
2.1.7.	Métodos de simulación en base a modelos	29
2.1.8.	Análisis estructural y desarrollo algorítmico de los procesos.....	32
2.2.	EL NEGRO DE HUMO (7).....	34
2.2.1.	Procesos de fabricación del negro de humo.....	36
2.2.1.1.	Proceso de canal (8)	37
2.2.1.2.	Proceso acetileno (8)	38
2.2.1.3.	Proceso térmico (8)	39
2.2.1.4.	Proceso de horno (8)	40
CAPÍTULO III: TRABAJO EXPERIMENTAL Y METODOLOGÍAS.....		43
3.1.	PROCESO POR CABOT CORPORATION (10)	43
3.2.	PROCESO POR COLUMBIAN CHEMICALS COMPANY (11).....	45
3.3.	PROCESO SELECCIONADO PARA LA SIMULACIÓN	47
3.4.	SIMULACIÓN DEL PROCESO.....	50
3.4.1.	Selección del simulador	56
3.4.2.	Inicialización de la simulación.....	57
3.4.3.	Selección de los componentes	58
3.4.4.	Selección del Fluid Package (Termodinámica)	59
3.4.5.	Definición de las Reacciones	60

3.4.6. El entorno de simulación	65
3.4.7. Simulación con integración energética	74
CAPÍTULO IV: RESULTADOS.....	85
4.1. RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN	85
CONCLUSIONES	89
RECOMENDACIONES	90
BIBLIOGRAFÍA.....	91

INDICE DE TABLAS

Tabla 1. Clasificación de las técnicas de simulación de procesos	22
Tabla 2. Aplicaciones de la simulación de procesos en las etapas de un proyecto	24
Tabla 3. Composición de las corrientes a lo largo del proceso sin integración energética	86
Tabla 4. Balance de masa de las corrientes del proceso sin integración energética	86
Tabla 5. Balance de energía en los calentadores y enfriadores del proceso sin integración energética.	87
Tabla 6. Composiciones de las corrientes de proceso con integración energética.....	87
Tabla 7. Balance de materia en las corrientes del proceso con integración energética.....	88
Tabla 8. Balance de energía a través de los calentadores, enfriadores y expansores del proceso con integración energética.	88

INDICE DE ILUSTRACIONES

Ilustración 1. Etapas de diseño de procesos	14
Ilustración 2. Un simulador de procesos juega diferentes roles en la variedad de fases del ciclo de vida de un proceso.....	26
Ilustración 3. Diagrama de flujo de proceso (DFP)	33
Ilustración 4. Diagrama de flujo de Información (DFI)	33
Ilustración 5. Diagrama de flujo del Proceso Canal.....	38
Ilustración 6. Proceso típico de Producción de Negro Térmico (9)	40
Ilustración 7. Proceso de Horno para fabricar negro de humo (9)	42
Ilustración 8. Diagrama de flujo de producción de negro de humo	49
Ilustración 9. Diagrama de flujo del desarrollo de la Simulación.....	51
Ilustración 10. Árbol de decisiones para seleccionar el modelo termodinámico	52
Ilustración 11. Selección de métodos de propiedades físicas.	53
Ilustración 12. Selección de modelo para componentes polares y no electrolitos.	54
Ilustración 13. Opciones para cálculos de vapor de fase y modelos de coeficientes de actividad.....	55
Ilustración 14. Interfase de inicio del Aspen Hysys.....	58
Ilustración 15. Selección de los componentes que intervienen.....	59
Ilustración 16. Selección del paquete termodinámico (Fluid Package)	60
Ilustración 17. Definición de las reacciones y la estequiometria	61
Ilustración 18. Definición de las reacciones y la estequiometria	61
Ilustración 19. Definición de los reactantes, productos y balanceo.	62

Ilustración 20. Declaración de la eficiencia de conversión.	63
Ilustración 21. Adjuntar la reacción declarada al Fluid Package.	64
Ilustración 22. Adjuntar la reacción declarada al Fluid Package.	64
Ilustración 23. Declarar las tres corrientes de alimentación.	65
Ilustración 24. Declarar las composiciones de tres corrientes.	66
Ilustración 25. Declarar las variables de las tres corrientes de alimentación.	66
Ilustración 26. Selección de la Operación SET.	67
Ilustración 27. Configuración de la Operación SET.	67
Ilustración 28. Definir relación de corrientes.	68
Ilustración 29. Mezcla de alimentaciones	69
Ilustración 30. Agregando calentador a la mezcla	69
Ilustración 31. Colocando variables a la mezcla	70
Ilustración 32. Agregando calentador al oxígeno	70
Ilustración 33. Colocando variables al oxígeno	71
Ilustración 34. Añadiendo el reactor	71
Ilustración 35. Añadiendo la reacción al reactor.	72
Ilustración 36. Simulación sin Integración Energética	73
Ilustración 37. Resultados de la simulación	73
Ilustración 38. Agregando intercambiador de calor al proceso.	74
Ilustración 39. Colocando corrientes.	75
Ilustración 40. Corriente de mezcla a condiciones.	75
Ilustración 41. Variables para la corriente a condiciones	76
Ilustración 42. Intercambiador para el oxígeno.	76

Ilustración 43. Corriente de oxígeno a condiciones	77
Ilustración 44. Variables del oxígeno a condiciones.....	78
Ilustración 45. Añadiendo corrientes a condiciones al reactor.....	78
Ilustración 46. Agregando reacción	79
Ilustración 47. Añadiendo corriente de vapor de agua al intercambiador 1.....	80
Ilustración 48. Añadiendo corriente de vapor de agua al intercambiador 2.....	81
Ilustración 49. Añadiendo expansor	82
Ilustración 50. Variables para las corrientes de vapor de agua	82
Ilustración 51. Simulación sin obtención del producto a condiciones	83
Ilustración 52. Variables para la corriente del producto a condiciones	83
Ilustración 53. Simulación con Integración Energética	84

INTRODUCCIÓN

El negro de humo u hollín es conocido a nivel mundial como un carbono químicamente puro; este producto es utilizado como materia prima para distintos fines de producción entre los que se resaltan: la producción de pinturas, llantas neumáticas, tintas chinas o para bolígrafos; es también utilizado para la producción de plásticos y compuestos, además de que posee aplicaciones especiales en la producción de adhesivos, sellantes, asfaltos, cuero, textiles, metalurgia y siderurgia.

A través de la historia han existido distintas formas de obtener negro de humo. En la actualidad se utilizan 3 distintos métodos para su producción: Proceso de canal, proceso de horno y proceso térmico. La diferencia básica entre los dos primeros procesos y el último es que los procesos de canal y de horno obtienen los productos quemando parcialmente los materiales usados como materia prima, mientras que el proceso térmico consiste en descomponer los productos por medio de calor (1).

Las materias primas para hacer negro de humo pueden incluir desde gas natural hasta aceites pesados con alto contenido de poliaromáticos, como los productos de la torre de vacío. (1)

Según lo mencionado anteriormente, es importante resaltar las diferentes aplicaciones y los beneficios que presenta este producto para diferentes empresas. Teniendo en cuenta que en la actualidad existen en Perú pocas empresas encargadas de producir negro de humo, es importante realizar un análisis técnico de los procesos de producción de esta sustancia mediante la realización de la simulación del proceso con el fin de establecer sugerencias que permitan el aumento en la producción.

Es importante destacar que el negro de humo no solo es una materia prima indispensable para la creación de nuevos productos sino también necesita de otras materias primas específicas para su obtención, entre las cuales se encuentran hidrocarburos pesados tales como el tolueno, benceno, naftaleno, antraceno, acetileno, entre otros, provenientes de las refinerías de petróleo.

CAPÍTULO I: ASPECTOS GENERALES

1.1. PLANTEAMIENTO DEL PROBLEMA

La necesidad de aumentar con la información especificada y obtenida en la simulación del flujo de energía a través de cada uno de los procesos de producción del negro de humo, las condiciones de las corrientes y los flujos de materia a lo largo de los procesos, tanto el que tiene integración energética como el que no la tiene, es posible plantear el problema principal.

El problema fundamental consiste básicamente en que la puesta en marcha de nuevas opciones industriales, esto viene siempre afectado por los factores tanto técnico, económico como social.

El problema se plantea mediante la pregunta: **¿Cómo integrar la energía en la simulación del proceso productivo del negro de humo?**

1.2. IMPORTANCIA

De acuerdo con las últimas proyecciones de varias empresas consultoras, se espera que el mercado del negro de humo sobrepase los 25 billones de dólares en 2020, impulsado principalmente por una mayor demanda de la industria de llantas, además del crecimiento de los sectores de construcción y manufactura. El mercado global del negro de humo es altamente competitivo y todos los principales productores están invirtiendo intensamente en I+D para mejorar la calidad de sus productos. Los 3 mayores jugadores en el mercado son Birla Carbon, Cabot Corporation y Orion Engineered Carbons. En términos de regiones, se encuentra dominado por Asia – Pacífico, donde la mayoría emana de China e India, soportado por la expansión de las plantas de neumáticos y el crecimiento del sector de la construcción. La región Asia – Pacífico mantendrá su dominio en el mercado aún hasta el 2020.

La fortuna de la industria del negro de humo está correlacionada positivamente con la fortuna de la industria de neumáticos, ya que esta consume alrededor del 70% del total de

la producción y constituye más del 10% del gasto total en materia prima de las compañías de llantas.

La industria automotriz se movió en los últimos años hacia Asia y Europa del Este, y con ella se movió también la demanda de negro de humo. Esto ocurrió aunado a leyes ambientales más fuertes en las regiones más desarrolladas que forzaron el cierre de algunas plantas antiguas de negro de humo. Los estimados de la industria indican que Norte América y Europa Occidental, que producían el 48% del negro de humo del mundo en 1998, actualmente representan sólo el 23% de la producción global, mientras que Asia – Pacífico, ha crecido del 36% al 57% en el mismo período.

Para 2015, la industria norteamericana se encuentra en su mayor tasa de utilización en los últimos 15 años: 87%. Esto representa una capacidad efectiva de 1,866 KT.

La industria de neumáticos en Estados Unidos sufrirá una escasez de negro de humo a principios de 2016, debido principalmente a las cada vez mayores regulaciones ambientales. Esto sucederá sobre todo si se realizan las expansiones de las plantas de llantas de las que tanto se ha hablado. Esta carencia de será remediada principalmente por las importaciones de negro de humo chino.

La capacidad de producción instalada en Estados Unidos y México es de 4.63 billones de libras por año. Sin embargo, las regulaciones ambientales de la Agencia de Protección Ambiental (EPA de sus siglas en inglés) para controlar las emisiones en las plantas de negro de humo harán que esta capacidad baje a 4.11 billones para el 2020, de acuerdo a proyecciones de Sid Richardson.

Por su parte, Orion Engineered Carbons ve oportunidades definidas de crecimiento en la industria del negro de humo. Ellos afirman y citan estudios que muestran que el mercado crecerá de 4 a 5% anual en los próximos cuatro años. Y cerca del 90% del negro de humo será usado en la industria del caucho (con un 70% que va directamente a las llantas). También piensan que hay tendencias a cambiar de los grados commodities hacia grados más especializados.

Pero este cambio hacia otros grados de negro de humo está más relacionado con otros aspectos. Hablando de llantas, dado que tanto en Estados Unidos como en Europa existen mayores regulaciones en torno a la resistencia al rodamiento, esto podría llevar a un

cambio en las compras de los fabricantes de autos. Por lo que los productores de negro de humo están trabajando desde hace tiempo en este tipo de aplicaciones.

En el caso de artículos técnicos de caucho, hay demandas más exigentes sobre todo de los llamados “grados limpios” para el mercado de MRG.

Se espera que el crecimiento de la demanda sea fuerte en Estados Unidos, Europa y Asia, pero solamente estable en Brasil y Sudáfrica. Dos países que verán un nuevo impulso en la producción de carros durante la actual recuperación, serán México y Canadá. Pasando de producir 3.2 millones de vehículos a 5.8 millones en 2014, de los que 3.4 millones se produjeron en México, que ya sobrepasó a Canadá y Brasil como el mayor centro de producción de autos. Esto ya se está trasladando al sector de otros artículos de caucho.

1.3. OBJETIVOS DEL PROYECTO

1.3.1. Objetivo general

Determinar la integración energética en la simulación del proceso productivo del negro de humo.

1.3.2. Objetivos específicos

- ✓ Determinar la carga energética óptima para los procesos de producción de negro de humo.
- ✓ Determinar los parámetros de trabajo que se deberían mantener para el mejor aprovechamiento de la energía.
- ✓ Maximizar la capacidad de tratamiento de la planta con los equipos en operación.

1.4. HIPÓTESIS

Determinación de la integración energética en la simulación del proceso productivo del negro de humo.

1.5. VARIABLES

1.5.1. Variable independiente

V1 = Integración energética en la simulación

1.5.2. Variable dependiente

V2 = Proceso productivo del negro de humo.

1.6. JUSTIFICACIÓN

Las partículas de materias primas pasan por muchos cambios a través del proceso de la producción del negro de humo.

La instalación de una planta de producción siempre trae consigo las ventajas de la modernización y elevación del estatus de una localidad, además de incidir en la preparación académica de sus pobladores tanto a nivel técnico como profesional. Además, la puesta en marcha de una nueva instalación industrial viene siempre afectada por los factores tanto económico como social. Por tanto, se van a crear y modificar los indicadores económicos de la zona: creación de puestos de trabajo directos e indirectos, mayor riqueza de la región, aumento de la utilización de recursos (investigación por parte de la universidad, empresas de servicios auxiliares), aceptación social, etc. Por estas consideraciones la elaboración del presente estudio encuentra una justificación, tanto práctica como teórica.

CAPÍTULO II: MARCO TEÓRICO

2.1. SIMULACIÓN DE PROCESOS EN INGENIERÍA QUÍMICA

La simulación se define como una técnica para evaluar en forma rápida un proceso con base en una representación del mismo, mediante modelos matemáticos. La solución de éstos se lleva a cabo por medio de programas de computadora y permite tener un mejor conocimiento del comportamiento del proceso, (1).

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

La estrategia general del diseño de procesos químicos puede considerarse constituido por tres etapas: Síntesis de procesos, Simulación de procesos y Optimización, (ver Ilustración 1).

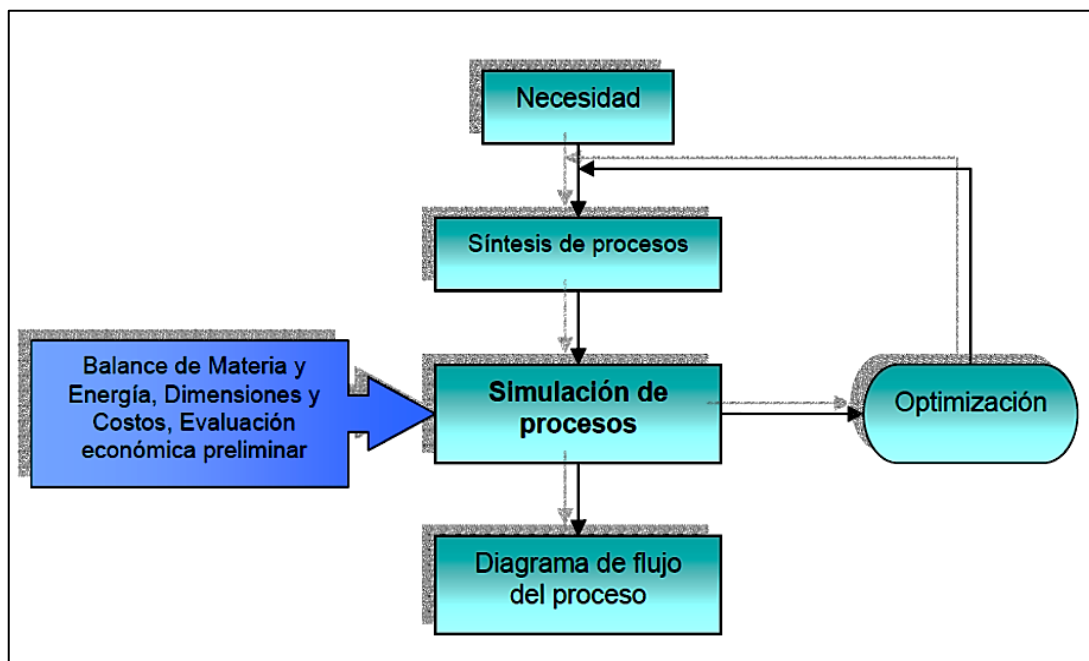


Ilustración 1. Etapas de diseño de procesos

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

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

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

La simulación de procesos puede plantearse de tres formas distintas:

- a) El desarrollo de un programa específico de un proceso determinado en que las variables están especificadas de antemano, o bien el programa pregunta sus valores antes de cada ejecución. El programa es flexible, pero requiere de un gran tiempo de desarrollo, siendo solo apto para el proceso en particular de que se trate, es decir, no puede crecer ni aplicarse a otros procesos, aunque sean similares, y cada nueva simulación requerirá un tiempo de desarrollo comparable.
- b) El desarrollo de un conjunto de subprogramas organizados en bloques que unidos entre sí representan el proceso completo. En este caso, se dispone de una biblioteca de subprogramas que le permiten simular las unidades individuales de su proceso. Por ejemplo, pueden combinar fácilmente una unidad de control de presión con una unidad de intercambio de calor para simular el calentamiento de un producto con vapor de agua cuya presión está controlada mediante un controlador de presión. Por otro lado, también puede seleccionar los datos de propiedades termodinámicas de los productos

y el método de convergencia de cálculo más rápido que dé una solución aceptable. De este modo el trabajo de programación es menor, pero la flexibilidad para un proceso determinado se reduce, ya que no se pueden modificar las unidades individuales con las que se trabaja.

- c) Los programas ejecutivos, que son programas de carácter general que simulan una clase particular de procesos y seleccionan la técnica numérica más adecuada para la resolución rápida de las ecuaciones de la simulación. Este programa presenta la ventaja que es la solución más sencilla, pero queda restringido al proceso para el que fue diseñado. Los modelos de simulación desarrollados en el presente proyecto corresponden a este tipo de simulador de procesos.

2.1.1. Evolución de la simulación de procesos

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

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

La teoría de sistemas nos muestra que diversos principios físicos tienen asociados modelos matemáticos equivalentes o isomórficos. Por ejemplo, ciertos circuitos eléctricos, circuitos hidráulicos, procesos de transferencia tanto de materia como energía y cantidad de movimiento, son descritos por el mismo conjunto de ecuaciones diferenciales.

Consecuentemente, podría resultar conveniente analizar (simular analógicamente) el comportamiento de un sistema (proceso químico) observando la evolución de las variables

"equivalentes" en un circuito eléctrico (cuyo modelo sea equivalente al proceso estudiado), ya que son fácilmente cuantificables. (2).

Posteriormente, a partir del uso masivo de la computadora digital, y de la revolución que implica la informática en todos los campos de la ingeniería, se evolucionó lentamente de la simulación analógica a la digital, habiendo prácticamente desaparecido la simulación digital en muchas aplicaciones.

Con la aparición de los microprocesadores a partir de la década de los setenta, cuya consecuencia inmediata resultó ser la masificación de las computadoras, al introducirse comercialmente en los ochenta las computadoras personales (PC's), se produce una revolución "informática", en el sentido de tener acceso prácticamente a bajo costo; tanto los profesionales como los estudiantes y docentes, a una computadora relativamente eficiente, hecho que anteriormente solo estaba permitido a pocas personas con acceso a centros de cómputos, cuyo costo de mantenimiento era elevado. En la actualidad los sistemas multimedia, las supercomputadoras y las "autopistas informáticas" representan el avance logrado, (2).

Como consecuencia de estos sucesos, se comienza a cubrir la brecha entre los métodos pre-computadora y los algoritmos numéricos programados aplicados a la ingeniería química. En el año 1974 aparece el primer simulador de procesos químicos, el FLOWTRAN, (2).

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

Ejemplos de estos simuladores de procesos de propósitos generales son: Aspen Plus y Speedup (de Aspen Technology, USA), Pro II (de Simulations Sciences, USA), Hysys (de Hyprotech, Canada), Chemcad (de Chemstations, USA), etc. Aspen Plus, Pro II y Chemcad son simuladores de procesos en estado estable, Speedup es un simulador de procesos dinámico y Hysys es útil para los dos tipos de simulación, (1).

Un aspecto muy importante en los simuladores de procesos, es la disponibilidad de propiedades termodinámicas y de transporte de las corrientes del proceso, estas

propiedades son fundamentales para efectuar los balances de materia y energía al grado de que, si tenemos buenos datos o buenas correlaciones para las propiedades, entonces los resultados de la simulación serán altamente confiables.

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

- a) Gases a baja y alta presión.
- b) Soluciones líquidas con componentes no polares, polares y electrolitos a baja y alta presión.
- c) Sólidos en suspensión o finamente divididos. (1)

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

2.1.2. Etapas del desarrollo de la simulación de un proceso químico

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

a) Identificar y formular el problema

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

b) Definición del sistema

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

c) Formulación del modelo

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

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

d) Localizar los datos necesarios

El diseño y simulación de procesos químicos necesita de datos de propiedades físicas, termodinámicas, cinéticos y de transporte, los cuales se calculan a partir de modelos de propiedades con base teórica o empíricos. La representación precisa de las propiedades es fundamental para la simulación de procesos. El usuario debe seleccionar un modelo para representar las propiedades, el uso de un modelo inadecuado puede cambiar los resultados de la simulación y perder validez.

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

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

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

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

e) Seleccionar el paquete de modelamiento

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

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

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

- ✓ Incorporación de técnicas de simulación robustas para calcular la respuesta de los procesos en función del tiempo tienden a ser complejos.
- ✓ Es difícil diseñar e implementar simuladores dinámicos para uso general debido a variables específicas para cada equipo.
- ✓ Existe una carencia de apreciación del valor de la simulación dinámica. (Chemical Engineering, nov. 1994)

f) Adquirir los recursos computacionales

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

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

g) Experimentación

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

h) Interpretación

Se analiza la sensibilidad que tiene el modelo con respecto a los parámetros que tienen asociados la mayor incertidumbre. El modelo será sensible a determinados parámetros si para pequeños cambios en los valores de los mismos las respuestas varían notablemente. Si

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

i) Implementación

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

j) Documentación

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

Para la simulación de procesos existe una clasificación de distintas técnicas acorde a ciertos criterios generales y particularidades el sistema en estudio.

2.1.3. Clasificación de las técnicas de simulación

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

Las técnicas de simulación pueden clasificarse según diversos criterios, por ejemplo, según el tipo de procesos (continuo o discontinuo), si involucra el tiempo (estacionario o dinámico), las técnicas a emplearse en los módulos para la simulación de procesos termodinámicos son en su mayoría del tipo en estado estacionario, así mismo los utilizados para la simulación de la cinética de la reacción son del tipo de simulación dinámica. En la Tabla 1 se presenta un detalle de la clasificación.

Tabla 1. Clasificación de las técnicas de simulación de procesos

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

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

2.1.4. Aplicaciones de la Simulación de Procesos en Ingeniería Química

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

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

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

- Detección de cuellos de botella en la producción.

- Predicción de los efectos de cambios en las condiciones de operación y capacidad de la planta.
- Optimización del proceso cuando cambian las características de los insumos y/o las condiciones económicas del mercado.
- Evaluación de alternativas de proceso para reducir el consumo de energía.
- Análisis de condiciones críticas de operación.
- Transformación de un proceso para desarrollar otras materias primas.
- Análisis de factibilidad y viabilidad de nuevos procesos.
- Optimización del proceso para minimizar la producción de desechos y contaminantes.
- Entrenamiento de operadores e ingenieros de proceso.
- Investigación de la factibilidad de automatización de un proceso. (1)

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

En las diferentes etapas de un proyecto, puede haber necesidad de realizar simulaciones con diferentes niveles de sofisticación, tal como se describe a continuación en la Tabla 2:

Tabla 2. Aplicaciones de la simulación de procesos en las etapas de un proyecto

ETAPAS DEL PROYECTO	APLICACIONES DE LA SIMULACIÓN
Investigación y desarrollo	Prueba de factibilidad técnica y económica del proyecto.
Etapla crítica en la toma de decisiones	Evaluación de diferentes alternativas de proceso y condiciones de operación y se toman decisiones.
Planta Piloto	Obtener mejores estimaciones de las condiciones de operación a escala industrial.
Diseño	Proporciona todos los datos de proceso requeridos para el diseño detallado de los diferentes equipos.
Simulación de plantas existentes	Cuando es necesario cambiar las condiciones de operación, o cuando se quieren sustituir materias primas.

2.1.5. Metodología del modelamiento matemático

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

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

La modelización de los procesos requiere el desarrollo de un modelo matemático de un sistema, con las simplificaciones adecuadas para simular el núcleo del proceso. Estas simplificaciones deben ser lo más leves posible, dentro de las limitaciones que puedan imponer las herramientas informáticas empleadas (memoria, tipo de ordenador...), para que la simulación sea lo más real posible. (3)

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

La utilidad que tiene el modelo en la simulación está principalmente en el diseño de una planta nueva (en cuanto a su viabilidad) y el análisis de plantas en operación.

Mediante los cuales es posible determinar la sensibilidad de la planta a la variación de los parámetros claves del proceso. Esto permite determinar los cambios que va a sufrir el sistema si se modifican las condiciones de operación del proceso o de la planta, o bien si se cambian las condiciones de proyecto de la planta.

El modelo del proceso también se presta al ensayo de varias configuraciones de control que permitan optimizar el control del proceso, incluyendo el ahorro de energía, la mejora de los rendimientos de fabricación y la conexión de los equipos con los sistemas de control avanzado de la planta, (3).

Tradicionalmente el modelamiento de procesos ha sido usado para el diseño de diagramas de flujo y para especificar sólo los parámetros importantes del equipo. Mientras tanto, otras áreas de aplicación han venido incrementando importancia acorde con las

etapas del ciclo de vida de los procesos, desde síntesis a diseño, construcción, inicio, modificación y retiro, tal como se muestra en la Figura 2, (Chemical Engineering, nov., 1994)

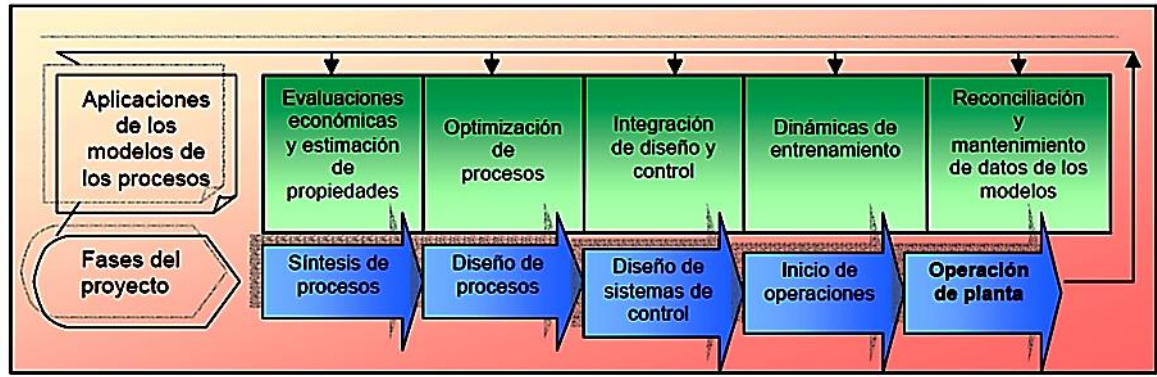


Ilustración 2. Un simulador de procesos juega diferentes roles en la variedad de fases del ciclo de vida de un proceso.

Dentro de los principios básicos más importantes del modelado de los procesos químicos están:

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

Los pasos para encarar la construcción de un modelo son, (4).

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

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

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

2.1.6. Leyes fundamentales del modelamiento de procesos químicos

Las leyes fundamentales que gobiernan a los procesos químicos son:

a) Balance de masas

Según el principio de conservación de masas, el flujo de masa que entra en el sistema menos el flujo de masa que sale del sistema es igual a la velocidad de cambio de masa dentro del sistema, (Solé, 1989). Los primeros pasos para definir el balance de materia incluyen seleccionar las fronteras del sistema, identificar todas las corrientes de entrada y salida, es decir todos los flujos de materia que atraviesen las fronteras del sistema, e identificar las sustancias químicas que contiene cada corriente. (12)

b) Balance de componentes

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

c) Conservación de la energía o balance de energía

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

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

Las variables físicamente significativas, tales como composición, fase, presión y temperatura, deben primero convertirse a contenido de energía. Entonces, es posible balancear los contenidos de energía de las diversas corrientes, y finalmente, deberá traducirse el contenido de energía de las corrientes previamente desconocidas, a variables físicamente significativas. (12).

d) Transferencia de materia, energía y momentum

Las ecuaciones de transporte permiten calcular la rapidez con que una propiedad (masa, energía y momentum) se transfieren de un punto del sistema a otro). Esta rapidez de transferencia se expresa como un flujo de la propiedad por unidad de área y es

directamente proporcional a un gradiente de la propiedad en una o varias coordenadas espaciales, (1).

2.1.7. Métodos de simulación en base a modelos

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

a) Método modular secuencial

El sistema de simulación modular responde a la división de los procesos químicos en unidades de transformación, donde se realizan las transformaciones físicas o químicas de las materias (reactores, secaderos, mezcladores, intercambiadores de calor, evaporadores, columnas de destilación, etc.) y en unidades de transporte donde una red de tuberías conecta los diversos equipos entre sí para que las materias primas y las intermedias circulen por la planta, así como los fluidos de energía (el vapor, el agua, el aire comprimido, etc.), (3).

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

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

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

Los simuladores modulares secuenciales siguen la misma filosofía que las operaciones unitarias, es decir, cada equipo: bomba, válvula, intercambiadores, etc.; son modelados a través de modelos específicos para los mismos y además, el sentido de la información coincide con el flujo físico en la planta. Esto representa una ventaja ya que cada sistema de ecuaciones es resuelto con una metodología que resulte adecuada para el mismo, ya que es posible analizar bajo todas las circunstancias

posibles, el comportamiento del método de resolución propuesto, esto es sistemas ideales, no ideales, geometrías del equipo, distintas variantes, etc., (2).

Las principales características de los simuladores modulares secuenciales son, (2):

- Biblioteca de módulos (equipos).
- Flowsheet: equivale a un grafo orientado o dígrafo.
- Orden de resolución fijo (iteraciones)
- Tres niveles de iteración (se incorpora otro si se desea optimizar)
 - ✓ Cálculos fisicoquímicos.
 - ✓ Módulos en sí. (ej.: flash, columna, etc.)
 - ✓ Variables de iteración (reciclo).
 - ✓ Optimización
- Módulos individuales resueltos eficientemente.
- Fácilmente comprendido por ingenieros no especialistas en simulación.
- La información ingresada por el usuario (relacionada con equipo o corrientes) resulta fácilmente evaluada e interpretable.
- Los problemas de diseño (selección de parámetros) son más fáciles de resolver.
- Se incrementa la dificultad cuando se plante un problema de optimización (funcionan como cajas negras).
- Poco versátiles, pero muy flexibles, muy confiables y bastante robustos.

b) Método orientado a ecuaciones

Mediante este método, se plantea el modelo matemático que representa al proceso construyendo un gran sistema de ecuaciones algebraicas que representa a todo el conjunto o planta a simular. De esta forma el problema se traduce en resolver un gran sistema de ecuaciones algebraicas, por lo general no lineales. (2).

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

El método de ecuaciones se ha utilizado ampliamente en la modelización de unidades individuales por sus ventajas de rápida convergencia en la solución, tales como columnas de destilación, la cual fue una de sus primeras aplicaciones. Sin embargo, las desventajas que presenta de dificultad de diagnóstico por parte del usuario en caso de error que produzca la falta de convergencia de la solución, y de precisar valores adecuados de arranque, así como de no aprovechar las investigaciones realizadas mundialmente en base al método modular secuencial, hacen que el método no sea empleado como rutina general en simulaciones de procesos industriales, (3).

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

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

Las principales características de los simuladores orientados a ecuaciones, se presentan a continuación, (2).

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

c. Método modular simultáneo

Es posible plantear el desarrollo de simuladores combinando la estrategia modular y la orientada a ecuaciones de forma tal de aprovechar los aspectos positivos de ambas

metodologías lo máximo posible. Para ello se selecciona un grupo de variables sobre las cuales se procederá según la metodología orientada a ecuaciones, esto es, se las resolverá simultáneamente, mientras que para el resto se mantiene la metodología modular, es decir, se trata de encontrar una secuencia acíclica, que provea por su cálculo, en cada iteración, los valores de las variables a resolverse simultáneamente.

Es por ello que a esta filosofía también se la conoce como two-tear o de dos niveles jerárquicos, ya que se trabaja en uno con las variables tratadas simultáneamente, y en el otro secuencialmente. (2).

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

2.1.8. Análisis estructural y desarrollo algorítmico de los procesos

El resultado del planteamiento del problema es el diseño de un algoritmo para resolver el problema. Un algoritmo se puede considerar como el conjunto de instrucciones que conducen a la solución de un problema determinado. Dichas instrucciones deben tener una secuencia lógica para poder llegar a la solución real. El algoritmo se puede expresar de diversas maneras. Mediante símbolos, utilizando un lenguaje determinado para hablar la solución, describir sintéticamente dicha solución o simplemente escribiéndolo en cualquier código válido para algún lenguaje de programación. La última forma de describir el algoritmo es a lo que se le denomina PROGRAMA. (5)

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

La representación del diagrama de flujo del proceso puede traducirse a un diagrama, llamado diagrama de flujo de información (DFI). Este diagrama matemáticamente es un dígrafo, en el cual los nodos son los módulos de equipos conectados uno a uno a través de las corrientes que los vinculan, las cuales se representan como arcos dirigidos. Estas

corrientes de información por lo general coinciden con las corrientes físicas del proceso, pero no necesariamente en todos los casos. Lo mismo sucede con los equipos (nodos del dígrafo), (2).

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

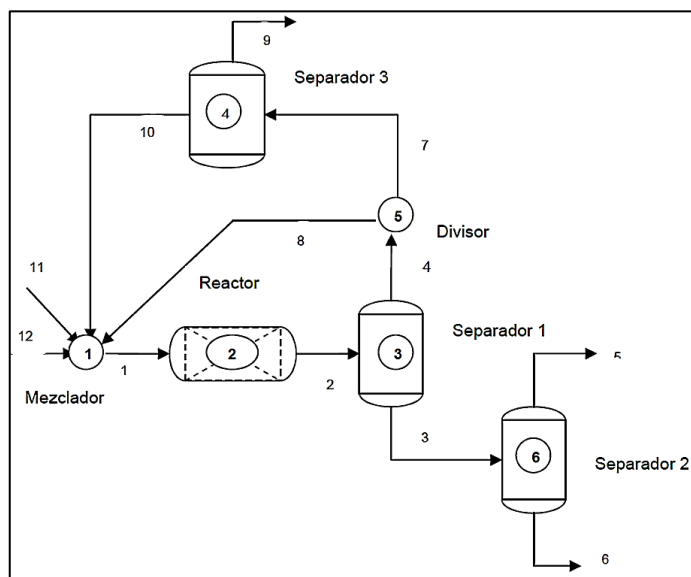


Ilustración 3. Diagrama de flujo de proceso (DFP)

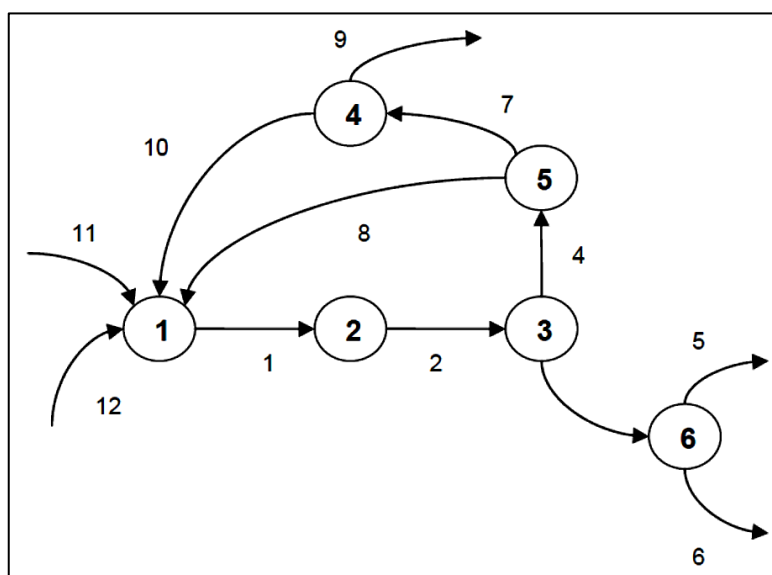


Ilustración 4. Diagrama de flujo de Información (DFI)

2.2. EL NEGRO DE HUMO (7)

El negro de humo es otra materia petroquímica. Básicamente es carbón puro con una estructura muy semejante a la del grafito.

El tamaño de las partículas en el negro de humo es lo que determina su valor. Entre más pequeñas sean, más caro será el producto. Varían desde 10 hasta 500 nm (milésima parte de una micra que a su vez es la milésima parte de un milímetro).

Existen tres procesos generales para fabricar industrialmente el negro de humo, que son los siguientes; proceso de canal, proceso de horno y proceso térmico.

Las materias primas para hacer negro de humo pueden incluir desde gas natural hasta aceites pesados con alto contenido de poliaromáticos, como los productos de la torre de vacío descrita en el artículo anterior.

La diferencia básica entre los dos primeros procesos y el último es que los procesos de canal y de horno obtienen los productos quemando parcialmente los materiales usados como materia prima, mientras que el proceso térmico consiste en descomponer los productos por medio de calor.

Antes de 1945, el negro de humo se fabricaba a partir del gas natural usando cualquiera de los tres procesos mencionados. Después de esta fecha se modificó el proceso de horno para de esta forma poder usar hidrocarburos líquidos como materia prima, y actualmente es el que más se usa.

Los hidrocarburos que se utilizan como carga son desde gasóleos hasta residuos pesados. En general, estas cargas deben tener un alto porcentaje de aromáticos pesados o poliaromáticos, y un bajo contenido de azufre. Además, deben producir un mínimo de ceniza mineral.

El negro de humo contiene de 88 a 99.3% de carbono, 0.4-0.8% de hidrógeno, y 0.3 a 17% de oxígeno.

El hidrógeno es un remanente de las moléculas de hidrocarburo originales, y por eso forma parte de la estructura gráfica. Por otro lado, como el oxígeno se absorbe en la superficie, se le puede incorporar en cantidades variables mediante tratamientos posteriores.

Las variedades de negro de humo comercial tienen una amplia gama de propiedades físicas y químicas, similares a las del grafito; pero como contiene grupos superficiales, las características de los productos finales en donde se usan son diferentes.

El negro de humo se usa en el hule de las llantas, en la fabricación de tintas, lacas, pinturas y en cierto tipo de polietileno. También se emplea el negro de humo para la fabricación de diamantes artificiales y para sembrar las nubes a fin de provocar lluvia.

El negro de humo se presenta normalmente en forma de pellets para facilitar su manipulación y dispersión en las mezclas, con una densidad aparente cercana a 0,35 kg/dm³. Aunque estos pellets poseen una dureza variable en función del tipo de negro, en la mayoría de los casos su fragilidad es un inconveniente a tener en cuenta. La rotura de los pellets y por consiguiente los finos creados, ocasionan graves problemas de proceso además de poder variar las condiciones técnicas de las mezclas.

Específicamente para el área que nos interesa en estos momentos que es el de las tuberías de polietileno, una vez integrado en las mezclas para la producción de la tubería, el negro de humo aporta al polietileno diferentes cualidades que éste por sí solo no posee: resistencia a la abrasión, resistencia a la tensión y disipación de calor, entre otras. Por ello, no es casual que la mayoría de las tuberías de polietileno que vemos en nuestro entorno sean negras.

Para una mezcla de calidad en la producción de tubería de polietileno, se agrega de un 2% a 3% de este estabilizador para la protección de los dañinos rayos UV (ultra violeta). Con esto la tubería es capaz de resistir por tiempo prolongado a la intemperie y a los cambios climáticos, así como las bajas temperaturas sin sufrir degradación o daños en su superficie y estructura. (7).

El negro de carbón [Nº CAS 1333-86-4] es carbón elemental virtualmente puro en forma de partículas coloidales que son producidas por la combustión parcial o la descomposición térmica de hidrocarburos gaseosos o líquidos en condiciones controladas. Su apariencia física es la de un polvo negro o gránulos negros finamente divididos. Se lo utiliza en neumáticos, productos de caucho y plástico, tintas de impresión y pinturas, y está relacionado con las propiedades de una superficie específica, tamaño y estructura de sus partículas, conductividad y color. La producción mundial en el año 2012 fue de alrededor de 24 mil millones de libras [11 millones de toneladas métricas]. Aproximadamente 90%

del negro de carbón se utiliza en aplicaciones de caucho, en tanto el resto se utiliza como componente esencial en cientos de diversas aplicaciones tales como plásticos, pigmentos y recubrimientos.

Los productos de negro de carbón modernos son descendientes directos de los primeros “negros de humo”, producidos por primera vez por los chinos hace más de 3.500 años. Estos primeros negros de humo de lámparas no eran muy puros y diferían mucho en su composición química a partir de los actuales negros de carbón. Desde mediados del siglo 20, la mayor parte del negro de carbón ha sido producida por los procesos de hornos de aceite, a menudo denominados negro de horno.

2.2.1. Procesos de fabricación del negro de humo

Dos procesos de fabricación de negro de carbón (negro de horno y negro de carbón) producen casi todos los negros de carbón del mundo, siendo el más común el proceso de negro de horno.

El proceso de negro de carbón utiliza aceites aromáticos pesados como materia prima. Los hornos de producción utilizan boquillas de atomización en un reactor cerrado con el fin de pirolizar el aceite material de alimentación bajo condiciones cuidadosamente controladas (principalmente temperatura y presión). La materia prima se introduce en una corriente de gas caliente en la que tal material de alimentación se vaporiza y luego se piroliza para formar partículas microscópicas de carbón. En la mayoría de los reactores de horno, la velocidad de reacción es controlada con chorros por vapor o agua. El negro de carbón fluye desde el reactor a través de intercambiadores de calor, es enfriado y colectado en filtros de bolsa en un proceso continuo.

El negro de carbón que sale puede luego ser procesado para eliminar las impurezas. Después de los filtros de bolsa, el negro de carbón es granulado (pelletizado), secado, analizado y preparado para su despacho. El gas residual o gas de cola, desde un reactor de horno, incluye una variedad de gases tales como monóxido de carbón e hidrógeno. La mayoría de las plantas de negro de horno utilizan una parte de este gas residual para producir calor, vapor o energía eléctrica.

El proceso de negro térmico utiliza gas natural y consta principalmente de metano como materia prima. El proceso utiliza un par de hornos que alternan aproximadamente cada

cinco minutos entre precalentamiento y producción de negro de carbón. El gas natural es inyectado en el horno caliente con material refractario y, en ausencia de aire, el calor del material refractario descompone el gas natural en negro de carbón e hidrógeno. El torrente de material de aerosol es extinguido con chorros de agua y filtrado en un filtro de bolsa. El negro de carbón que sale puede luego ser procesado para eliminar las impurezas, ser peletizado, evaluado, y luego empaquetado para su despacho. El gas sin hidrógeno se quema en aire para precalentar el segundo horno. El calor residual puede ser usado para generar energía eléctrica. (9)

En este ítem se describirán los procesos más importantes que se utilizan en la fabricación del negro de humo y que tienen relevancia industrial.

2.2.1.1. Proceso de canal (8)

Hasta antes de emplear el proceso de horno en la década de los 40*s, el proceso de canal fue usado para suministrar la casi totalidad de los requerimientos de negro de humo de la industria hulera mundial.

En este proceso se emplea gas natural como materia prima, el cual sufre una combustión incompleta y carbonización en una cámara de reacción donde se producen cientos de pequeñas flamas humeantes que se hacen incidir contra canales de acero donde se deposita negro de humo como partículas sólidas de carbón finamente divididas de diferentes diámetros de partículas.

La reacción es compleja y dentro de los componentes de la mezcla, producto de la reacción se han detectado principalmente: CO, CO₂, H₂O_(g) y trazas de componentes sulfurados, según la composición del gas natural alimentado.

Los canales de acero se desplazan lentamente hacia unas rasquetas estacionarias cuya función es remover el negro de humo depositado en los canales haciéndolo caer sobre una tolva y de ésta a transportadores que lo conducen a separadores de impurezas.

Posteriormente el negro de humo es llevado a separadores neumáticos con el objeto de separar las partículas de (Cs) se suspenden en una corriente fluidizada sólido-gas.

El negro de humo separado es alimentado a los pulverizadores y enseguida a los peletizadores.

Una vez efectuado el peletizado el negro de humo es almacenado en silos, de los cuales puede ser tomado para envasarse o enviarse a granel.

Los negros de humo de canal imparten buenas propiedades reforzantes a los artículos de hule, buen funcionamiento dinámico, alta resistencia al desgarre y buena adhesión del hule a fibras y metales. También son excelentes pigmentos empleados en la fabricación de tintas y lacas.

Los tamaños de partículas obtenidos por este método oscilan entre 7 y 30 milimicras.

El rendimiento del proceso de canal es bajo, ya que solamente el 5% del contenido de carbón del gas es convertido en negro de humo, lo cual lo hace un proceso caro. En adición a lo anterior este proceso produce una alta contaminación al medio ambiente, por lo que tiende a desaparecer.

En la siguiente figura se muestra un diagrama simplificado de este proceso.

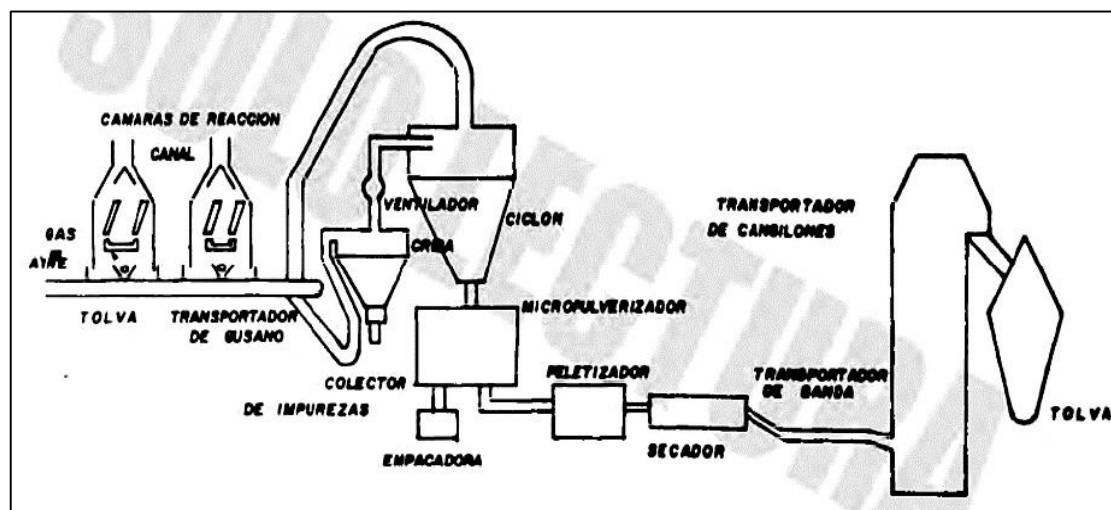


Ilustración 5. Diagrama de flujo del Proceso Canal

2.2.1.2. Proceso acetileno (8)

El negro de humo de acetileno se obtiene por la descomposición exotérmica del acetileno en una cámara cubierta de refractario. Debido a que el calor liberado por la pirólisis del acetileno gaseoso es suficiente para mantener la reacción a temperaturas elevadas, la cámara solamente necesita un precalentamiento al inicio de la reacción, el acetileno se alimenta y se transforma a carbón e hidrógeno en forma continua.

El negro de humo producido se recolecta junto con los gases de salida y se separa de ellos por medio de filtración sólido-gas en filtros denominados de bolsa. Los gases de salida son oxidados para convertir el hidrógeno en agua.

La alta temperatura de reacción, el alto contenido de carbón del acetileno y el relativamente alto tiempo de residencia produce un tipo único de negro de humo, ya que posee una estructura altamente desarrollada comparada con los otros tipos comerciales.

El negro de humo de acetileno se usa principalmente en las pilas secas debido a su alta capacidad de absorción y a su excelente conductividad eléctrica.

2.2.1.3. Proceso térmico (8)

Este proceso, así como el proceso de acetileno depende de la descomposición térmica de hidrocarburos en estado gaseoso en ausencia de aire o flamas. Industrialmente estas relaciones de pirólisis se denominan "cracking".

El gas natural se descompone en carbón e hidrógeno durante su paso a través de grandes hornos cilíndricos cubiertos de material refractario a una temperatura promedio de 1300°C.

En este proceso se emplean dos reactores, ya que mientras se produce negro de humo en un reactor, un segundo reactor de idéntico diseño se calienta con una mezcla estequiométrica de aire y gas. Cuando el refractario del primer reactor se enfría por debajo de la temperatura óptima de desintegración, la unidad es puesta en ciclo de calentamiento y el otro reactor es puesto en ciclo de operación.

Los negros de humos térmicos poseen los tamaños de partículas más grandes y la más baja estructura de todos los tipos comerciales.

Tienen amplia aplicación como cargas reforzantes en productos de hule.

El rendimiento de este proceso varía entre el 40 y 50% de conversión del contenido de carbón del gas a negro de humo.

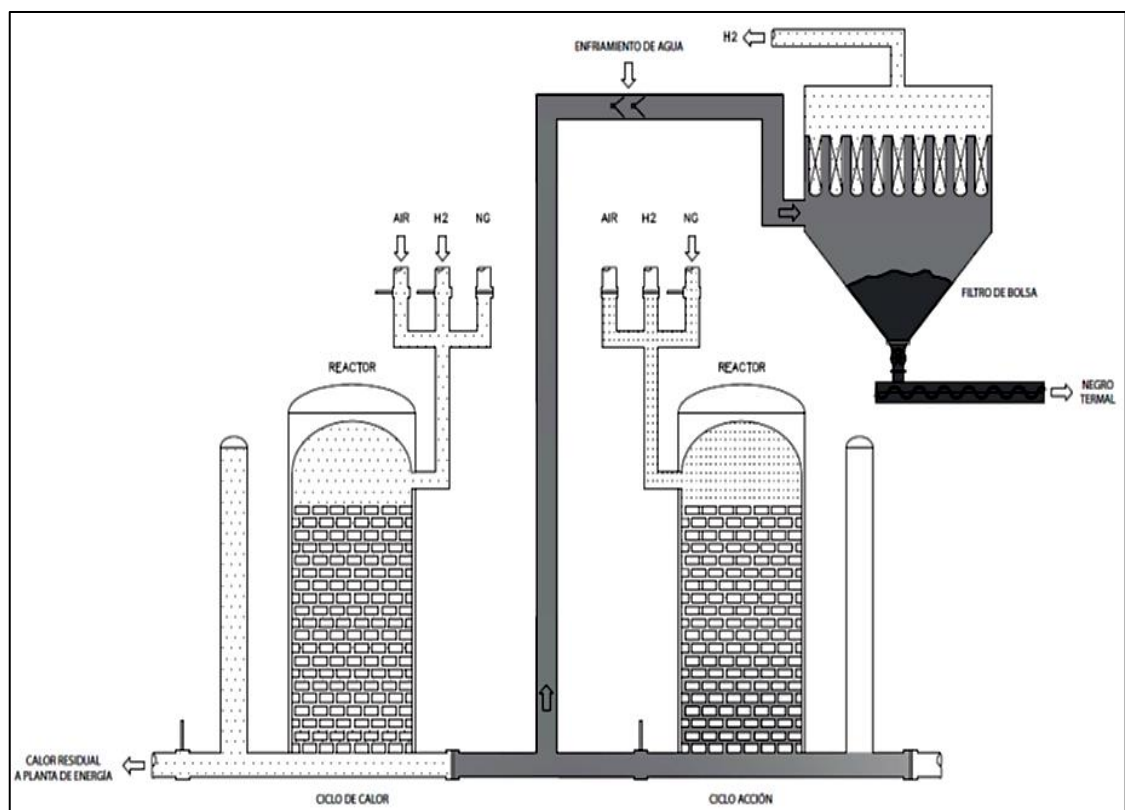


Ilustración 6. Proceso típico de Producción de Negro Térmico (9)

2.2.1.4. Proceso de horno (8)

El proceso de horno es el más eficiente y versátil de todos. Prácticamente el 98% de los tipos de negro de humo empleados en la industria hulera mundial se fabrican por el proceso de horno.

En este proceso se utiliza como materia prima de alimentación un aceite proveniente de los residuos aromáticos de la refinación del petróleo o de operaciones petroquímicas.

El reactor es un cilindro de acero recubierto en su interior con ladrillo refractario para protección de las altas temperaturas.

El aceite es inyectado por medio de un atomizador al reactor junto con una corriente de gases de combustión de alta velocidad producidos al quemar un combustible auxiliar, que generalmente es gas natural, en presencia de aire en exceso. Una porción del aceite se quema para mantener la temperatura de flama, pero la mayoría es pirolizado para formar negro de humo e hidrogeno.

El rendimiento de este proceso está comprendido entre el 50 y 70% dependiendo principalmente del área superficial del producto. A mayor área superficial, menor es el rendimiento debido a las temperaturas de reacción. La estructura de los negros de humo se ajusta mediante la adición de pequeñas cantidades de sales de metales alcalinos a la zona de flama.

El reactor está dividido en tres zonas, a saber:

- **Zona de combustión:** Donde el combustible en este caso gas natural y aire se introducen para mezclarse y quemarse alcanzando temperaturas de flama que van de 1200 a 1700 °C dependiendo del negro de humo que se va a producir.
- **Zona de Extinción:** en esta zona la reacción es detenida bruscamente mediante unas boquillas aspersoras de agua de enfriamiento que abasten la temperatura a 700°C aproximadamente.
- **Zona de Reacción:** aquí se lleva a cabo la desintegración y fragmentación de las moléculas del aceite produciendo átomos de carbón, los cuales se aglomeran formando partículas de negro de humo.

Los productos del reactor pasan por intercambiadores de calor usados para precalentar el aire de combustión y el aceite, al mismo tiempo que se enfrían los productos.

El resto del equipo tiene como finalidad separar al negro de humo de los gases de combustión y prepararlo adecuadamente para el usuario.

Las operaciones involucradas son fundamentalmente:

- ✓ Filtración sólido-gas.
- ✓ Molienda.
- ✓ Peletizado.
- ✓ Secado.
- ✓ Envasado.

Según se muestra en el siguiente diagrama de flujo simplificado.

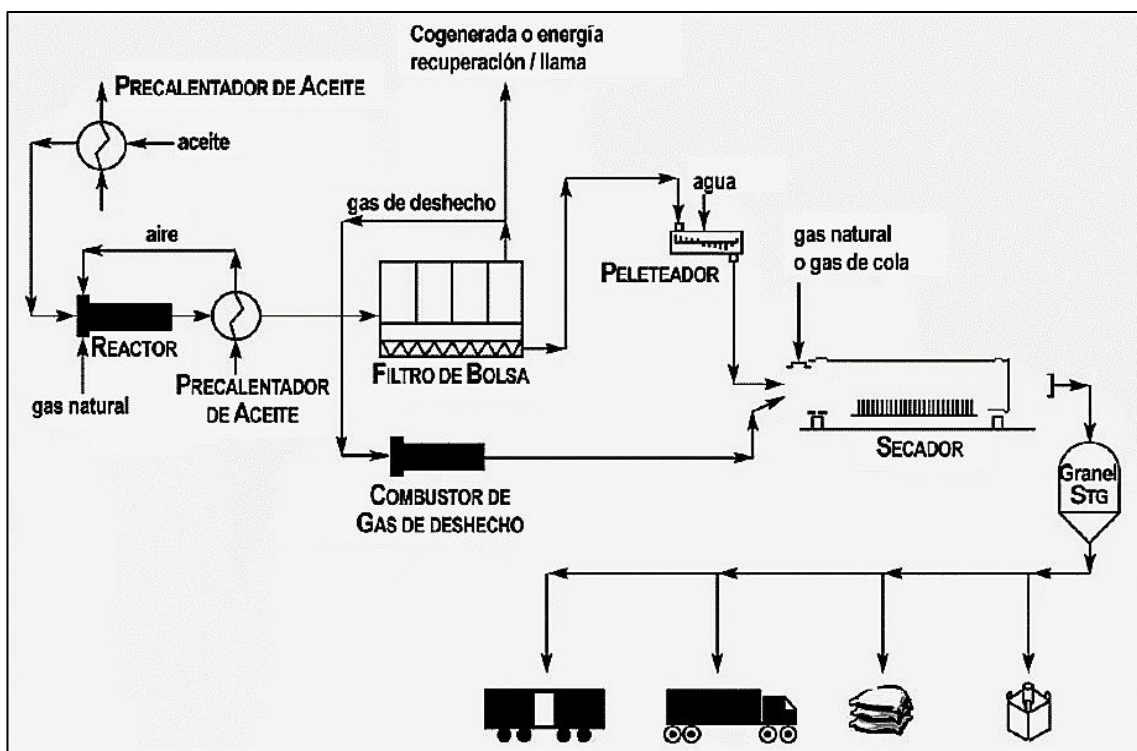


Ilustración 7. Proceso de Horno para fabricar negro de humo (9)

CAPÍTULO III: TRABAJO EXPERIMENTAL Y METODOLOGÍAS

A nivel mundial existen varias empresas encargadas de la producción de negro de humo, cada uno de ellas posee un método para obtener el producto final y con las especificaciones que exige el mercado. El negro de humo se obtiene mediante la combustión incompleta de un hidrocarburo tal como petróleo, gas natural y otros materiales bien conocidos, a elevadas temperaturas. Cuando se separa de los gases de reacción, el producto es un polvo esponjoso de negro de humo.

3.1. PROCESO POR CABOT CORPORATION (10)

El proceso por etapas está constituido por una zona de combustión primaria (primera etapa) en donde se forma una corriente de productos de combustión gaseosa calientes; una segunda zona o zona de transición en donde se inyecta una alimentación hidrocarbonada líquida, bien en forma pre-atomizada o bien en forma de corrientes coherentes no pre-atomizadas, de un modo sustancialmente radial desde la periferia exterior o interior de la corriente gaseosa de combustión dentro de la corriente preformada de gases de combustión calientes; y una tercera zona (la zona de reacción) en donde se verifica la formación del negro de humo antes del término de la reacción por enfriamiento. Sin embargo, existen casos en donde es conveniente producir negros de humo que, para un área superficial determinada, se caractericen por presentar un menor poder colorante y una mayor estructura. Los negros de humo son de utilidad en la preparación de compuestos de caucho que tienen valores incrementados de módulo y rebote. En consecuencia, el principal objeto de la invención es proporcionar un nuevo y mejorado procedimiento para la preparación de negros de humo los cuales, para un área superficial determinada, se caracterizan por tener un menor poder colorante y una mayor estructura. Este y otros objetos, ventajas y características de la presente invención llegarán a ser evidentes para el experto en la materia tras la consideración de la siguiente descripción detallada y reivindicaciones adjuntas. El procedimiento de la presente invención comprende formar una corriente gaseosa de combustión caliente por reacción de un combustible o un oxidante en una primera zona de combustión o zona de combustión primaria. La presión relativa, o presión

por encima de la ambiental, dentro de la zona de combustión es de por lo menos 51 mm de mercurio.

Con preferencia, la presión relativa dentro de la zona de combustión debería ser de al menos 152 mm de mercurio y aún más preferiblemente por encima de 254 mm de mercurio. La alimentación se inyecta entonces en la corriente gaseosa de combustión caliente de un modo sustancialmente radial o axial. Preferiblemente, la alimentación se inyecta en la corriente gaseosa de combustión en forma de corrientes coherentes no pre-atomizadas radialmente hacia el interior o hacia el exterior desde la periferia interior y/o exterior de la corriente gaseosa de combustión. Asimismo, es posible, cuando la alimentación se inyecta tanto desde la periferia exterior como desde la periferia interior de la corriente gaseosa de combustión, inyectar dicha alimentación en forma pre-atomizada desde una de las periferias y en forma no pre-atomizada desde la otra periferia. Después de la inyección de la alimentación en la corriente gaseosa de combustión, dicha corriente gaseosa de combustión, conteniendo a la alimentación, fluye a través de la zona de transición al interior de una primera zona de reacción que tiene un área en sección transversal interna mayor que la mostrada por la zona de transición. Con preferencia, la relación del área en sección transversal interna de la primera zona de reacción a la de la zona de transición está comprendida entre 1,1 y 4. Desde la primera zona de reacción, la corriente gaseosa de combustión fluye al interior de una zona de la garganta que tiene un área en sección transversal interna más pequeña que la de la zona de transición. Con preferencia, la relación del área en sección transversal interna de la zona de garganta a la de la zona de transición está comprendida entre 0,25 y 0,9 aproximadamente. Desde la zona de garganta, la corriente gaseosa de combustión, que contiene a la alimentación, fluye al interior de una segunda zona de reacción que tiene un área en sección transversal interna mayor que la de la zona de garganta. Preferiblemente, la relación del área en sección transversal interna de la segunda zona de reacción a la de la zona de transición está comprendida entre 1,1 y 16 aproximadamente. A continuación, y dentro de la segunda zona de reacción, se termina el proceso de formación de negro de humo mediante la inyección de un medio de enfriamiento, tal como agua.

3.2. PROCESO POR COLUMBIAN CHEMICALS COMPANY (11)

La presente invención se relaciona con reactores y métodos para la producción de negro de humo. Más particularmente, la presente invención se relaciona con reactores y métodos para la producción de negro de humo de alta actividad superficial. El método básico para la producción de negro de humo es ya bien conocido. Generalmente, el negro de humo se produce por inyección de un material de partida hidrocarbonado (denominado de aquí en adelante la alimentación hidrocarbonada") en un flujo de gas oxigenado caliente, en donde la alimentación hidrocarbonada es pirolizada parcialmente antes de enfriarse mediante una pulverización de agua.

El gas caliente se produce por combustión de un combustible en una cámara de combustión. La cámara de combustión está en comunicación axial abierta con un reactor cilíndrico y el gas caliente producido en la cámara de combustión fluye a través del reactor, en donde la alimentación hidrocarbonada se introduce en el flujo de gas caliente. El negro de humo se emplea en diversas aplicaciones ya conocidas para el experto en la materia. El negro de humo se usa principalmente para reforzar compuestos elastoméricos, tal como el caucho de las cubiertas neumáticas para automóviles. El negro de humo se emplea también como pigmento negro en pintas, pinturas, plásticos, toner xerográfico y compuestos elastoméricos.

Existen varias propiedades físicas del negro de humo que pueden ser variadas para producir negros de humo distintivos que son particularmente escasos en ciertas aplicaciones. La actividad superficial es una de tales propiedades físicas del negro de humo. La actividad superficial de un negro de humo se debe como la capacidad del negro de humo para interaccionar física o químicamente con el compuesto o mezcla con el cual se combina el negro de humo. El estado general de desorden de las partículas de negro de humo afecta a la actividad superficial del negro de humo. A medida que aumenta el estado de desorden general del negro de humo, también aumenta la actividad superficial del negro de humo. Las partículas de negro de humo comprenden capas de carbono grafítico. La existencia de menor continuidad en las capas grafíticas y de defectos estructurales en capas grafíticas aumentan el estado de desorden y la actividad superficial del negro de humo. La presencia de electrones no apareados y de radicales libres en las partículas de negro de

humo aumenta también el estado de desorden general y la actividad superficial del negro de humo.

La presencia de hidrógeno enlazado a carbono en los límites expuestos de las capas gráficas de las partículas de negro de humo incrementa la actividad superficial del negro de humo. El hidrógeno enlazado a carbono ayuda también a mantener el estado de desorden del negro de humo al impedir que las capas gráficas, en la superficie de las partículas de negro de humo, se alinean o lleguen a ser más continuas. La presencia de hidrógeno enlazado a carbono y el estado de desorden general del negro de humo contribuyen principalmente a la actividad superficial de los negros de humo en elastómeros de alta instauración, tales como caucho de estireno – butadieno (SBR), caucho de butadieno (BR) y caucho natural (NR). La capacidad del negro de humo para reforzar elastómeros, tales como los indicados anteriormente, se debe generalmente, al parecer, a la interacción física entre las capas gráficas en la superficie exterior de las partículas de negro de humo y el elastómero. Sin embargo, se ha demostrado igualmente que el hidrógeno enlazado a carbono sobre las partículas de negro de humo puede transferirse al elastómero durante la mezcla, formando con ello puntos activos en la superficie de las partículas de negro de humo para su enlace covalente con el elastómero.

El reforzamiento del elastómero por el negro de humo se traduce en una composición elastomérica que es más resistente al desgarramiento, más resistente a la abrasión y que disipa energía más fácilmente. Los reactores de negro de humo del estado de la técnica comprenden normalmente una cámara de combustión cilíndrica axialmente conectada a un extremo de una cámara de reacción cilíndrica. Con frecuencia se conecta axialmente una estrangulación del reactor al otro extremo de la cámara de reacción. La estrangulación del reactor tiene un diámetro sustancialmente menor que el diámetro de la cámara de reacción. La estrangulación del reactor conecta la cámara de reacción con una cámara de salida.

Frecuentemente, en los reactores del estado de la técnica, la cámara de salida tiene un diámetro uniforme el cual es sustancialmente más grande que el diámetro de la estrangulación del reactor, y la cámara de salida está conectada con la estrangulación del reactor de modo que exista una expansión brusca de 90 en el diámetro desde la estrangulación del reactor hacia la cámara de salida.

3.3. PROCESO SELECCIONADO PARA LA SIMULACIÓN

La materia prima será la señalada anteriormente, es decir, ciertos hidrocarburos derivados de los procesos a los cuales es sometido el petróleo en su tratamiento. Estos hidrocarburos son: tolueno, antraceno, fenantreno, naftaleno y benceno. Estas materias primas inicialmente serán sometidas a un previo calentamiento en el lugar donde se almacenarán, esto con el fin de que al momento de introducirlas al proceso estas se encuentran con una temperatura más alta y disminuya la cantidad de calor necesitado para calentar esta corriente hasta la temperatura necesaria para llevar acabo del proceso. Posteriormente al previo calentamiento la materia prima es dirigida mediante bombas hacia un mixer o mezclador, el cual se encarga de hacer uniforme es decir homogénea esta corriente ya que, no solo contiene la materia prima previamente calentada si no también contiene corrientes de inertes como lo es el nitrógeno (N_2), azufre (S) e hidrogeno (H_2). Al momento en que la mezcla se encuentra en las condiciones necesarias de homogeneidad es pasada del mezclador hacia un intercambiador de calor que incrementa la tempera de la corriente a la necesaria para que el proceso sea óptimo. Con la temperatura requerida por el proceso en la corriente esta es llevada hasta una torre de separación flash, en donde al momento en el que la corriente ingresa a la torre son separadas en dos fases, la fase liquida de la fase vapor; la fase liquida de la corriente es extraída por los fondos de la torre (la parte inferior de la torre), y la fase vapor sale por el domo de la torre (la parte superior de la torre). En esta parte del proceso la corriente principal del mismo está lista para ser sometida a la reacción de combustión en la cual se obtendrá el producto deseado y objeto de estudio. La corriente es llevada hasta un reactor en el cual se va a llevar a cabo la reacción de combustión incompleta, para esto al mismo tiempo que se introduce la corriente al reactor, también se adiciona oxigeno previamente calentado en un intercambiador de calor (utilizando la fase liquida separada de en el separador flash), y gas natural esto con el fin de asegurar que haya una reacción de combustión.

A medida que va ocurriendo la reacción se va extrayendo el producto que ésta va arrojando y se comienza a enfriar mediante un dispositivo que se encarga de reducir el flujo del negro de humo y los gases de combustión extraídos del reactor hasta llegar a una temperatura optima de operación. Este dispositivo es el Venturi Cooler o enfriador. El producto enfriado es pasado a través de una serie de filtros los cuales se encargar de

separar el producto terminado por la distribución de su tamaño, esto con el fin de proporcionar las partículas del tamaño adecuado a las empresas que los soliciten y dentro de las especificaciones deseadas. Cuando el producto final es extraído y llevado a condiciones normales como; presión de 1 atmosfera (101.3 kPa) y una temperatura de 25°C está listo para su almacenamiento.

A continuación, se presenta un diagrama de bloques o diagrama de flujos mediante el cual se pretende ilustrar cada uno de los procesos que se llevan a cabo en la producción de negro de humo a nivel industrial.

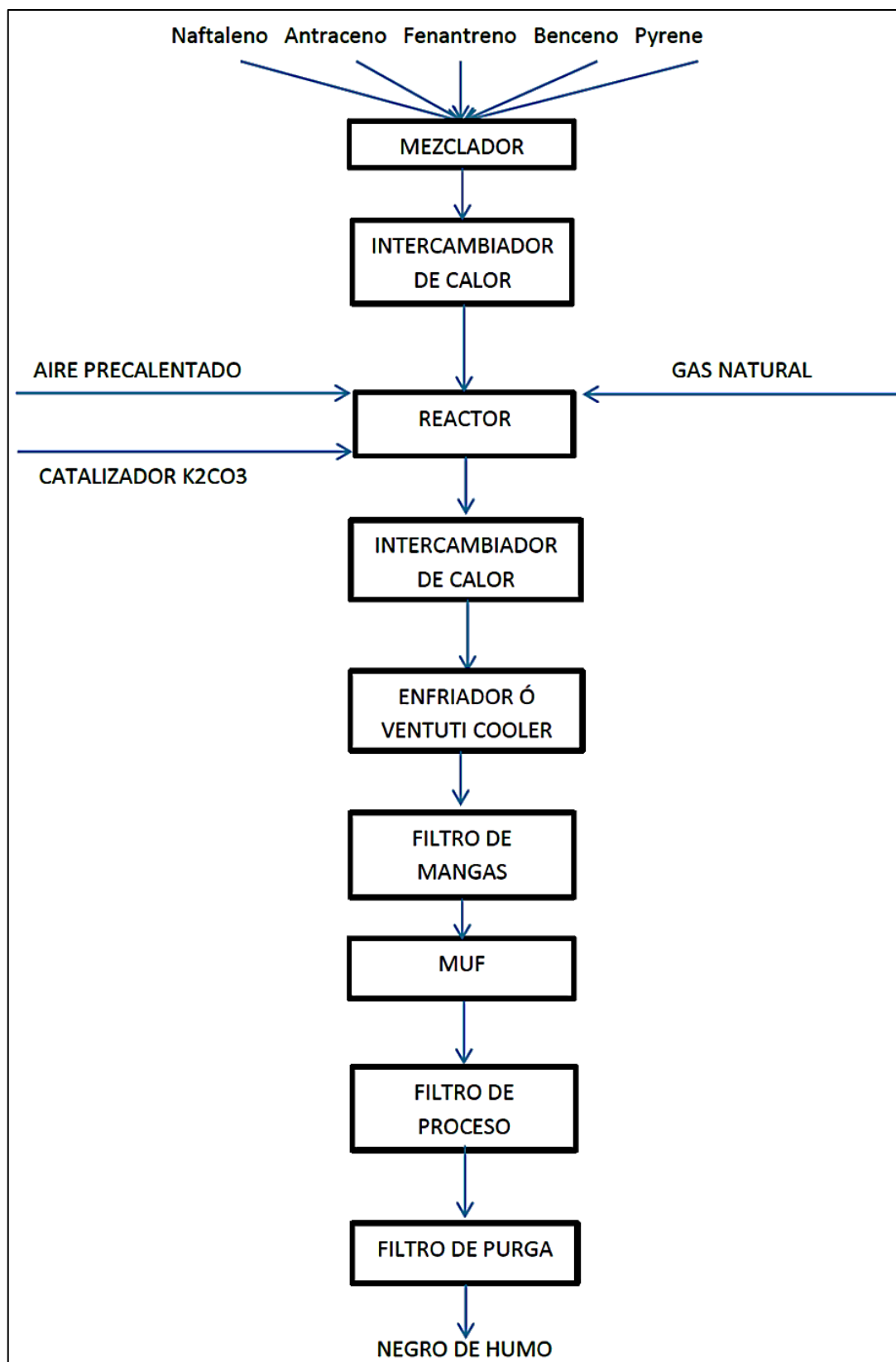


Ilustración 8. Diagrama de flujo de producción de negro de humo

3.4. SIMULACIÓN DEL PROCESO

En este ítem, se detallan los pasos que se siguen para llevar a cabo una simulación por medio de un software de modelado de procesos. En las siguientes figuras se destaca la importancia de la selección del modelo termodinámico, tal vez esta sea la decisión más importante que cada usuario debe tomar al desarrollar un caso de simulación, dado que los errores al seleccionar de forma incorrecta un modelo termodinámico solo se verán reflejados al obtener los resultados. Por consiguiente, es de muy importante desarrollar criterios que ayuden a establecer el modelo adecuado a un problema específico.

El ingeniero E.C. Carlson de Aspen Tech, plantea un procedimiento de selección basado en arboles de decisión para elegir el modelo termodinámico apropiado en su documento „“Don’t Gamble with Physical Properties for Simulations”” (No arriesgue con las propiedades físicas para simulaciones), y propone los siguientes árboles de decisión para seleccionar correctamente el modelo termodinámico.

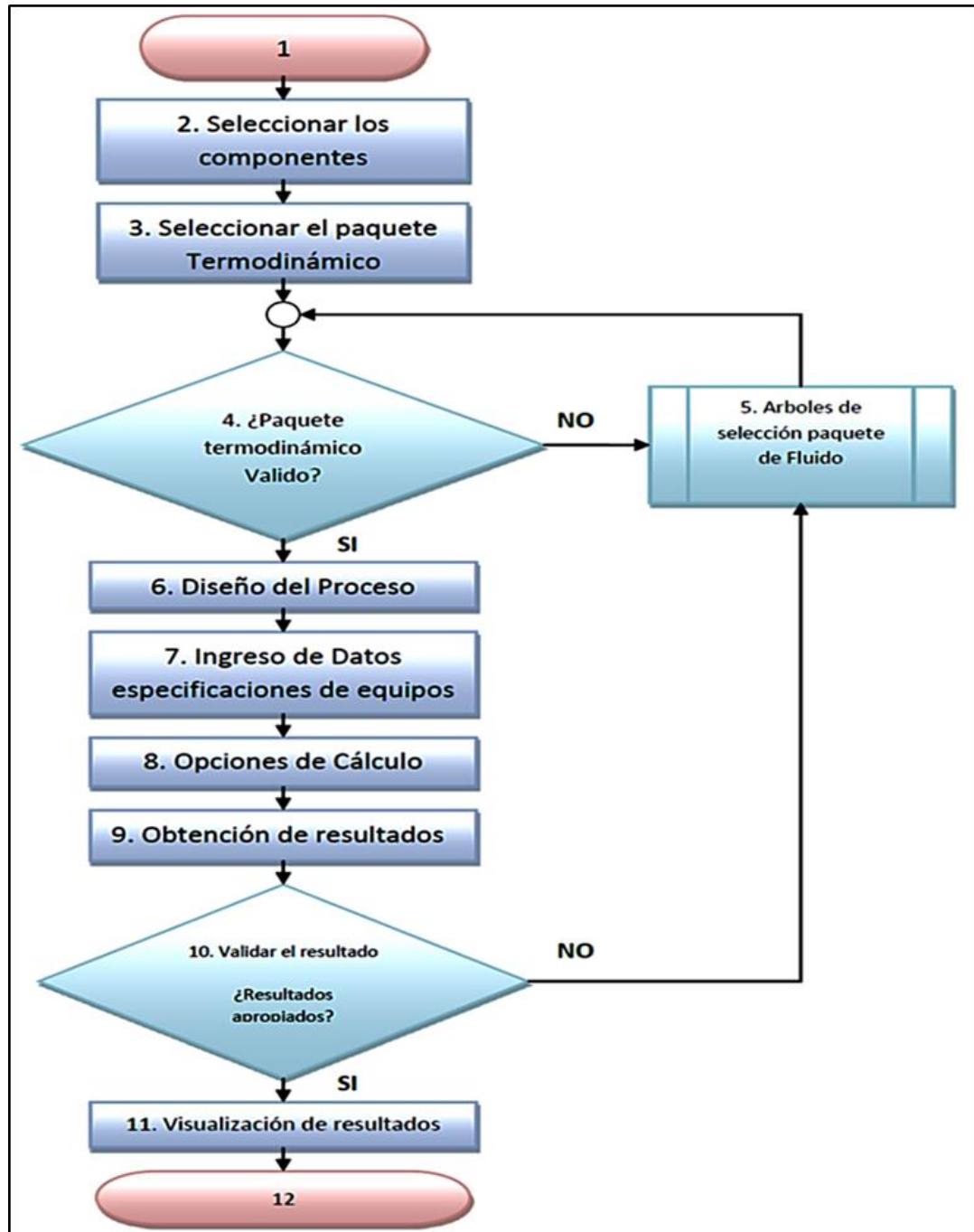


Ilustración 9. Diagrama de flujo del desarrollo de la Simulación

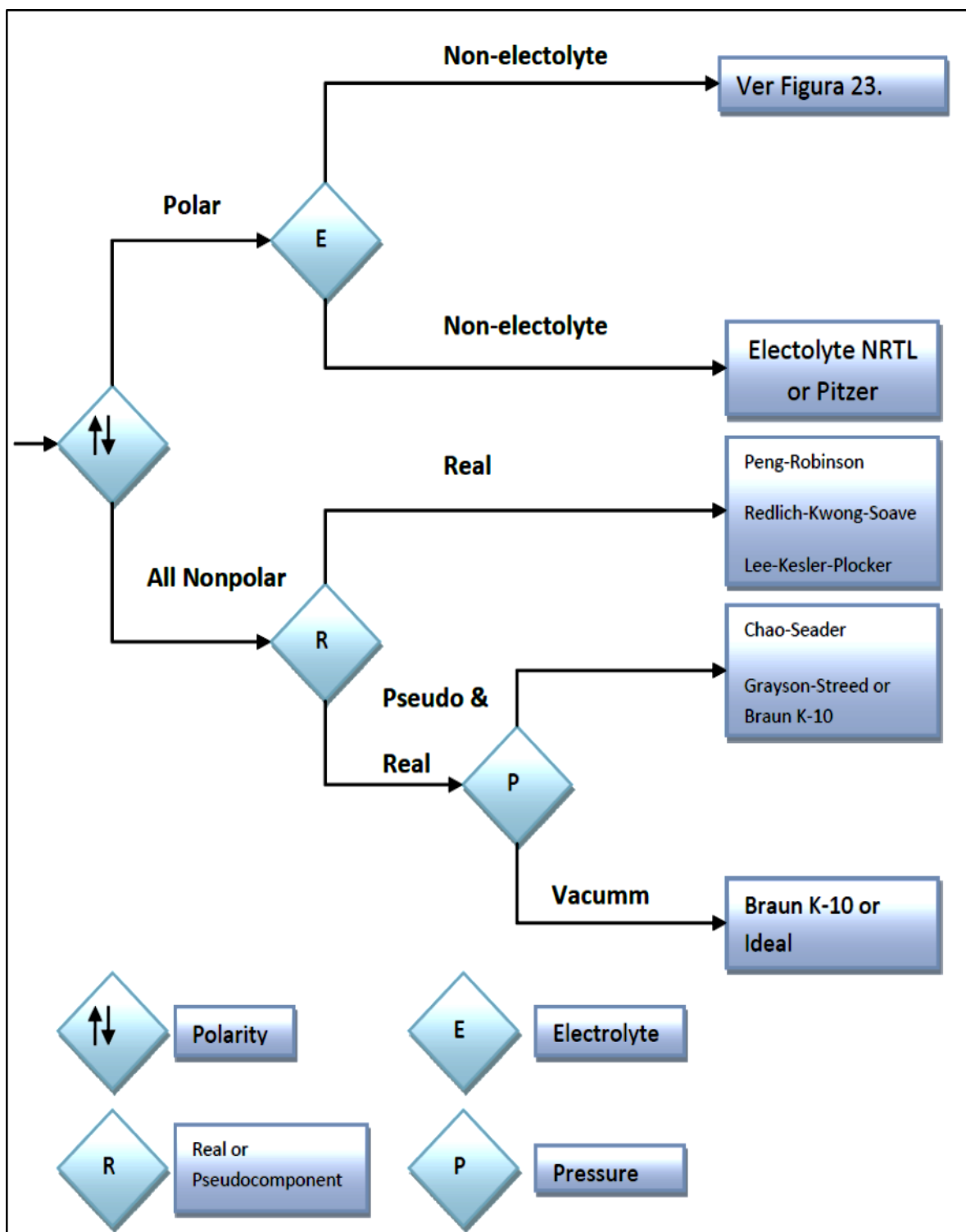


Ilustración 10. Árbol de decisiones para seleccionar el modelo termodinámico

Fuente: Introductory Chemical Engineering Thermodynamics, J. Richard Elliott, Carl T. Lira.

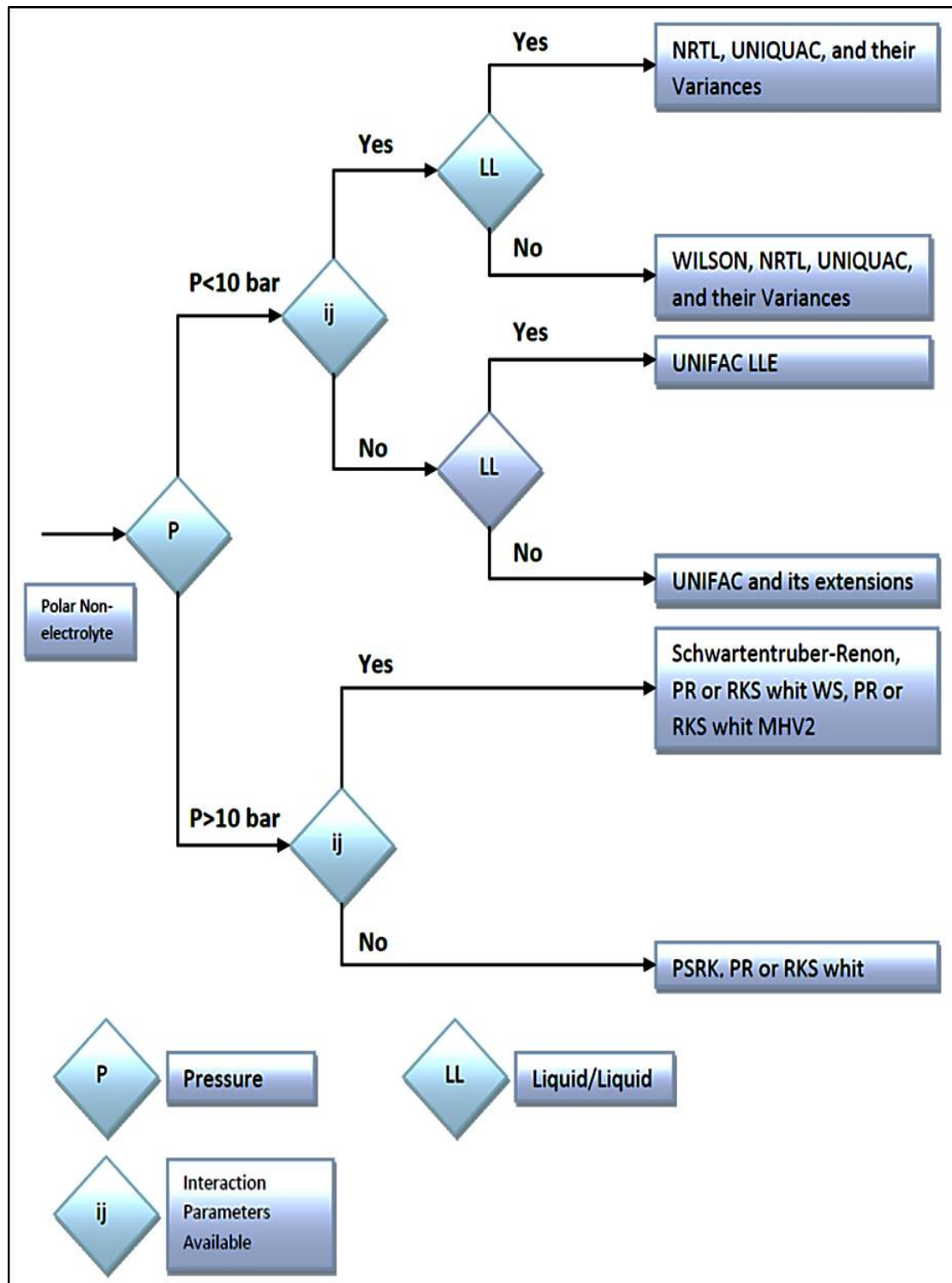


Ilustración 11. Selección de métodos de propiedades físicas.

Fuente: Don't Gamble with Physical Properties for Simulations, E.C. Carlson, 1996

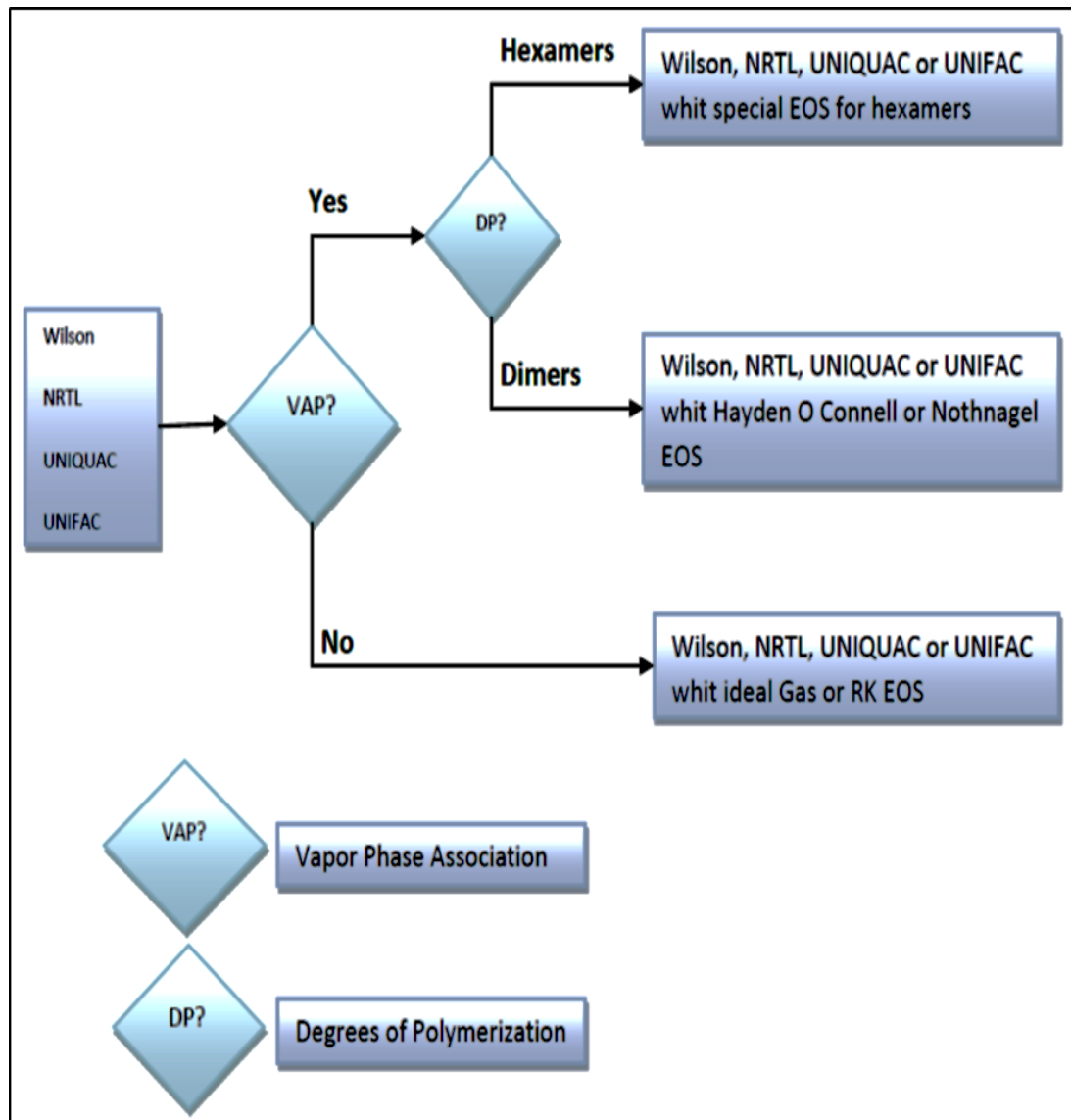


Ilustración 12. Selección de modelo para componentes polares y no electrolitos.

Fuente: Don't Gamble with Physical Properties for Simulations, E.C. Carlson, 1996

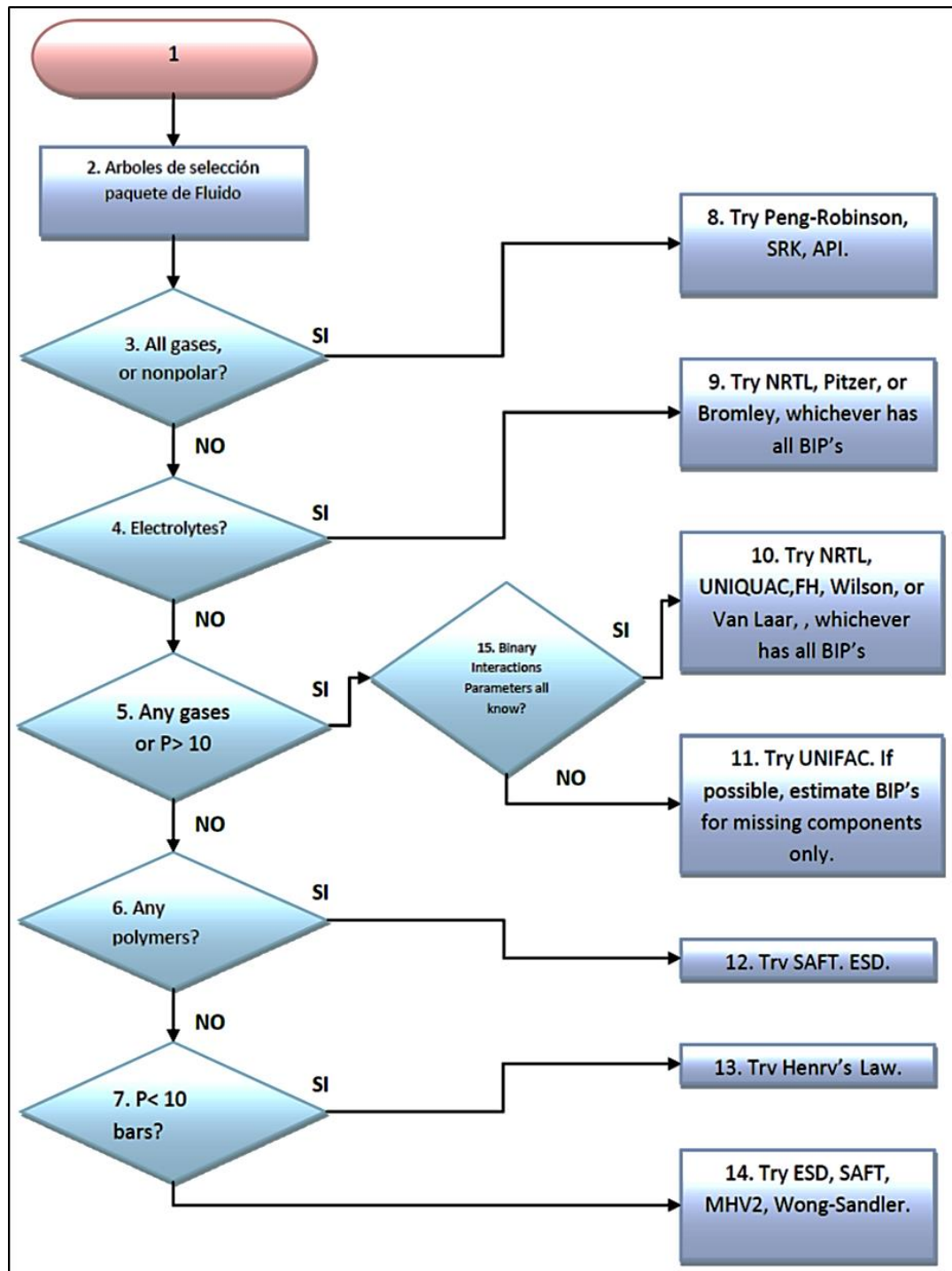


Ilustración 13. Opciones para cálculos de vapor de fase y modelos de coeficientes de actividad.

Fuente: Don't Gamble with Physical Properties for Simulations, E.C. Carlson, 1996

3.4.1. Selección del simulador

Existe una gran variedad de simuladores de procesos comerciales, existiendo una variada oferta de licencias para su uso académico. Algunos de estos simuladores son: ASCEND, Aspen Hysys, Aspen plus, CHEMCAD, COO simulator, Design II, Dymola, SimSciEsscor DYNsim, EMSO, GIBBSim, gPROM, OpenModelica, Petro-SIM, SimSci-Esscor PRO/II, ProMAX, SysCA, UniSim Design y VMGSim, entre otros (12, 13).

La casa comercial AspenTech® oferta una suite de programas encaminados a la simulación de procesos, destacando entre ellos ASPEN-PLUS y ASPEN-HYSYS. El ASPEN-HYSYS es ampliamente utilizado en universidades, tanto a nivel introductorio como a nivel avanzado en el campo de la investigación. En la industria, el programa informático es usado en investigación, desarrollo, modelado y diseño.

El programa informático descrito permite obtener una estimación de las variables de sistema (temperaturas, presiones de operación, salinidades, flujos, etc.) para realizar posteriormente un prediseño de la planta. Así mismo, permite evaluar las diferentes alternativas de configuración del proceso y determinar la sensibilidad de las variables del proceso con respecto a cambios viables introducidos en el proceso a criterio del usuario.

Los objetivos de este trabajo requieren del uso de un simulador. La función de este es proporcionar información acerca del caso de estudio práctico de forma rápida a fin de evaluar las formulaciones realizadas en el caso de estudio. Debido a su disponibilidad y utilidad para la simulación de ciclos se seleccionó al simulador ASPEN HYSYS como la herramienta adecuada para validar las formulaciones teóricas.

ASPEN HYSYS es un programa interactivo orientado a objetos que difiere de la mayor parte de los simuladores interactivos en dos aspectos principales. En primer lugar, cuenta con la estructura para interpretar los comandos en forma interactiva, es decir, ejecutarlos en el momento que recibe la información. El resto de las opciones disponibles requiere de un botón “correr”, el cual debe presionarse cada vez que se ingresan datos nuevos. Por otro lado, ASPEN HYSYS cuenta con la capacidad de ejecutar todos los cálculos relacionados con las modificaciones de cualquier punto del proceso en forma bidireccional, es decir, tanto para los procesos subsecuentes como para los predecesores. Gracias a esto ASPEN HYSYS reduce la necesidad de cálculos iterativos con lo que incrementa la velocidad de

respuesta. Asimismo, la capacidad de seccionar el diagrama de flujo permite utilizar diferentes opciones de simulación a lo largo del proceso.

El ambiente de ASPEN HYSYS este compuesto por cuatro interfases. El primero de estos se denomina “Component Lists” (Listado de Componentes) donde se introducen las sustancias que intervienen en el proceso y que están disponibles en las bibliotecas del Aspen Hysys.

Luego se tiene la interfase del “Fluid Package”, donde se selecciona el modelo termodinámico que gobernará el proceso.

Luego de definir los componentes y el modelo termodinámico, se accede a la interfase de “Simulation” donde se define el PFD (Process Flow Diagram), cuya función es permitir al usuario construir la topología del proceso que desea simular.

Asimismo, existe el “Workbook” (Libro de Trabajo) el cual es una colección de hojas de cálculo las cuales despliegan la información del proceso de forma tabular. Y la Paleta de Operaciones y corrientes, que consiste en una colección de páginas que contienen información acerca de los objetos que constituyen el proceso. Por último, existe la vista de Resumen, la cual despliega una lista de las corrientes y los módulos considerados. Una de las ventajas de este sistema es que se pueden tener abiertas dos de estas interfases simultáneamente, lo que facilita el trabajo, sin olvidar que los cambios realizados en cualquier vista se reflejarán de inmediato en las otras tres.

3.4.2. Inicialización de la simulación

La interfase de inicio que nos presenta el Aspen Hysys es el llamado entorno del simulador. Este será el programa con el cual se llevará a cabo la simulación de la producción de negro de humo, utilizando como materia prima una mezcla entre el naftaleno y el antraceno.

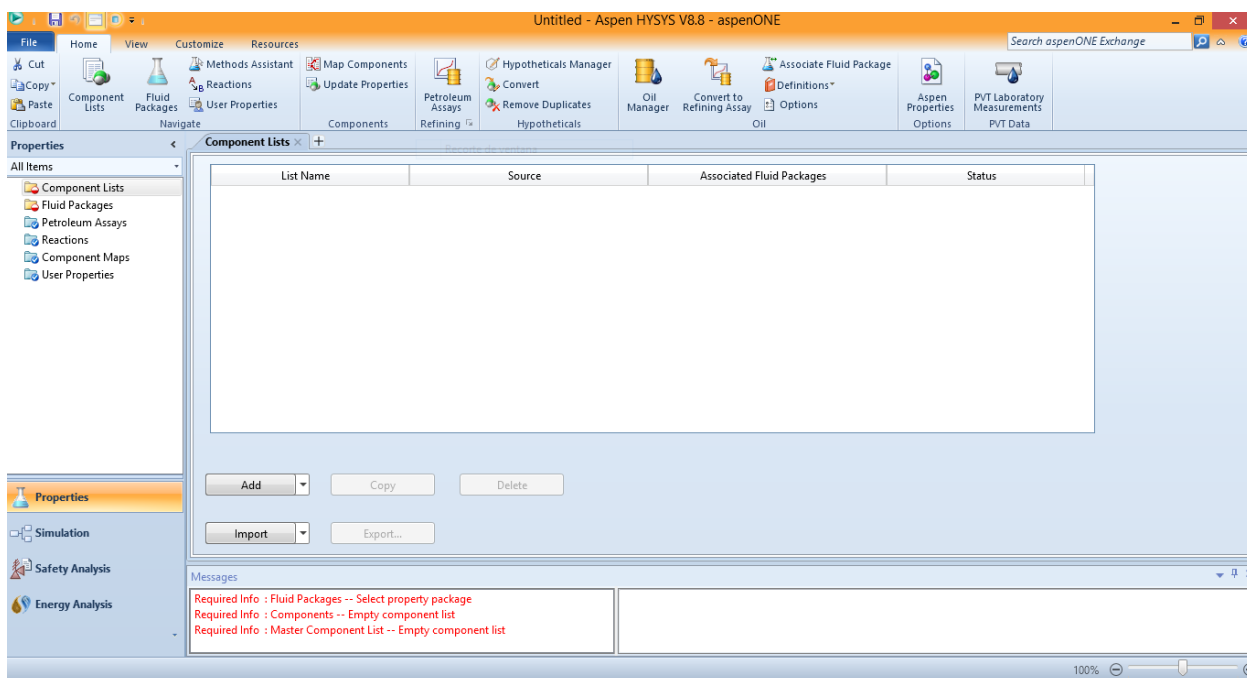


Ilustración 14. Interfase de inicio del Aspen Hysys

3.4.3. Selección de los componentes

Aquí en esta ventana es posible seleccionar y agregar los componentes que serán utilizados como materia prima en la simulación, y también es posible agregar de la misma forma los que serán obtenidos como productos en esta misma; en este caso los componentes que se usaran como materia prima son el Naftaleno, el Antraceno y el Oxígeno. Y para los productos tenemos Agua (H_2O), y el Carbón (C).

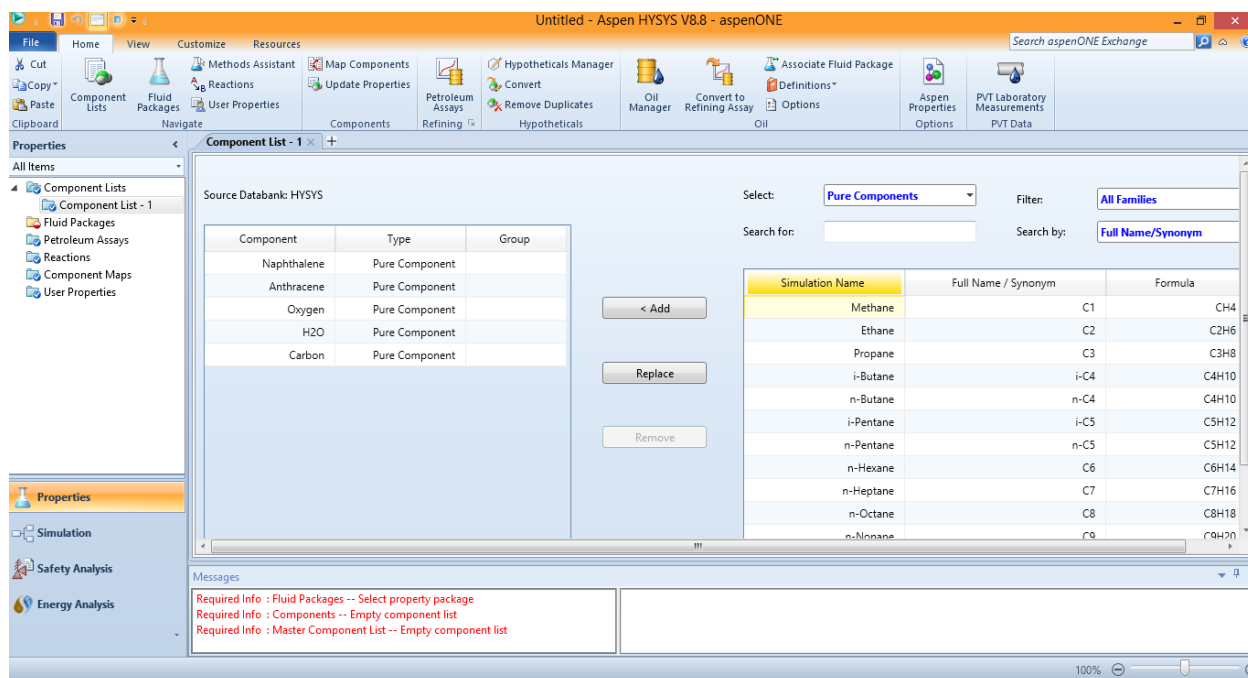


Ilustración 15. Selección de los componentes que intervienen

3.4.4. Selección del Fluid Package (Termodinámica)

Luego de añadir los componentes que intervienen en la simulación, es necesario seleccionar el Fluid Package, es decir un paquete termodinámico o sistema de ecuaciones con el cual el simulador realizará los cálculos y balances de materia y energía a lo largo de la simulación. Para la selección de este paquete termodinámico se utilizó el artículo Don't Gamble With Physical Properties For Simulations publicado por Eric C. Carlson, Aspen Technology, Inc., que se ha expuesto anteriormente. El cual presenta pautas que si son seguidas al pie de la letra el paquete termodinámico seleccionado será el más adecuado para el sistema a simular.

Luego de utilizar el artículo y las pautas que este presenta, se toma la determinación de utilizar el paquete termodinámico de Peng-Robinson, ya que teniendo en cuenta la naturaleza de sustancia es uno de los paquetes que se amolda al proceso que se simula.

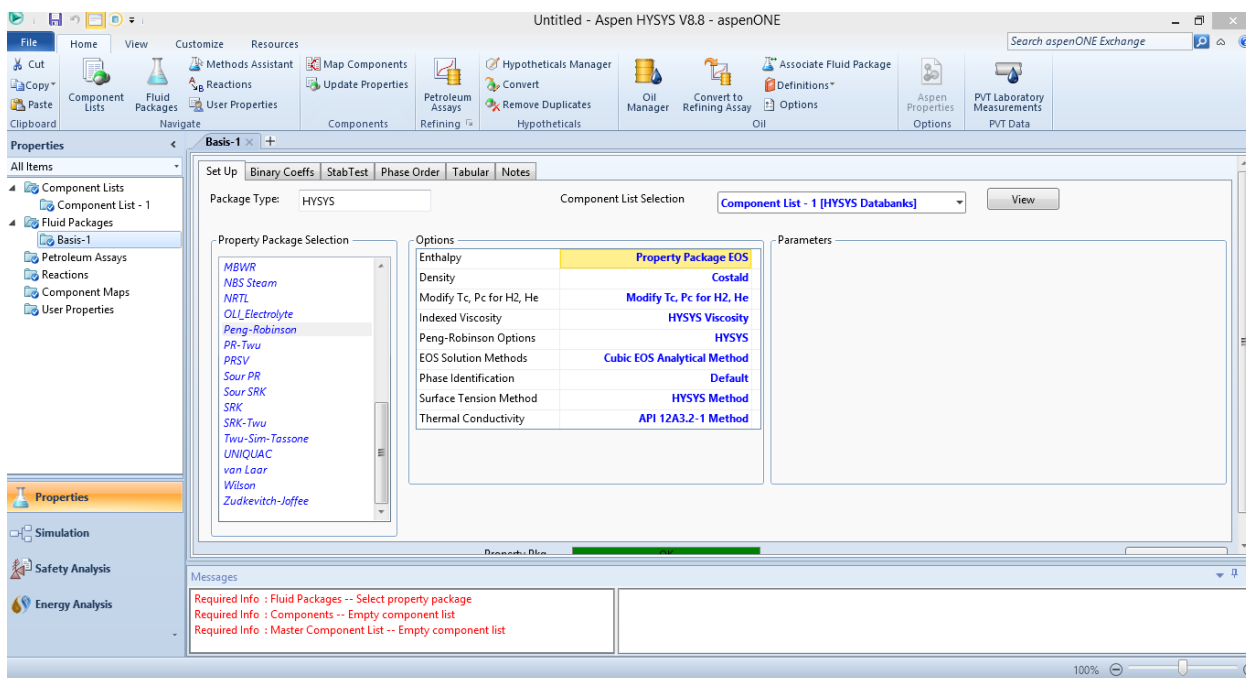
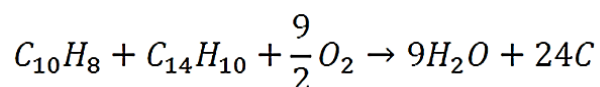


Ilustración 16. Selección del paquete termodinámico (Fluid Package)

3.4.5. Definición de las Reacciones

Luego de haber definido el paquete termodinámico, pasamos a definir las reacciones o la reacción que se llevará a cabo en la simulación. Para esto se da clic en el ítem Reactions que se encuentra en la parte izquierda (Navegador de Propiedades). Y le damos clic en la punta de flecha de “Add...” y seleccionamos “Set Reactions”. Ingresamos a la ventana de “Reaction Set: Set-1” y hacer clic en agregar reacción (Add Reaction) y seleccionamos el tipo de reacción que es de “Conversión”, hacer clic en Add Reaction y cerrar la ventana Reaction.

El simulador nos presenta una ventana en la cual se pueden introducir los valores de los coeficientes estequiométricos de la reacción los cuales son obtenidos de la siguiente reacción.



Se hace doble clic en Rxn-1 para ingresar los datos de componentes y estequiometría

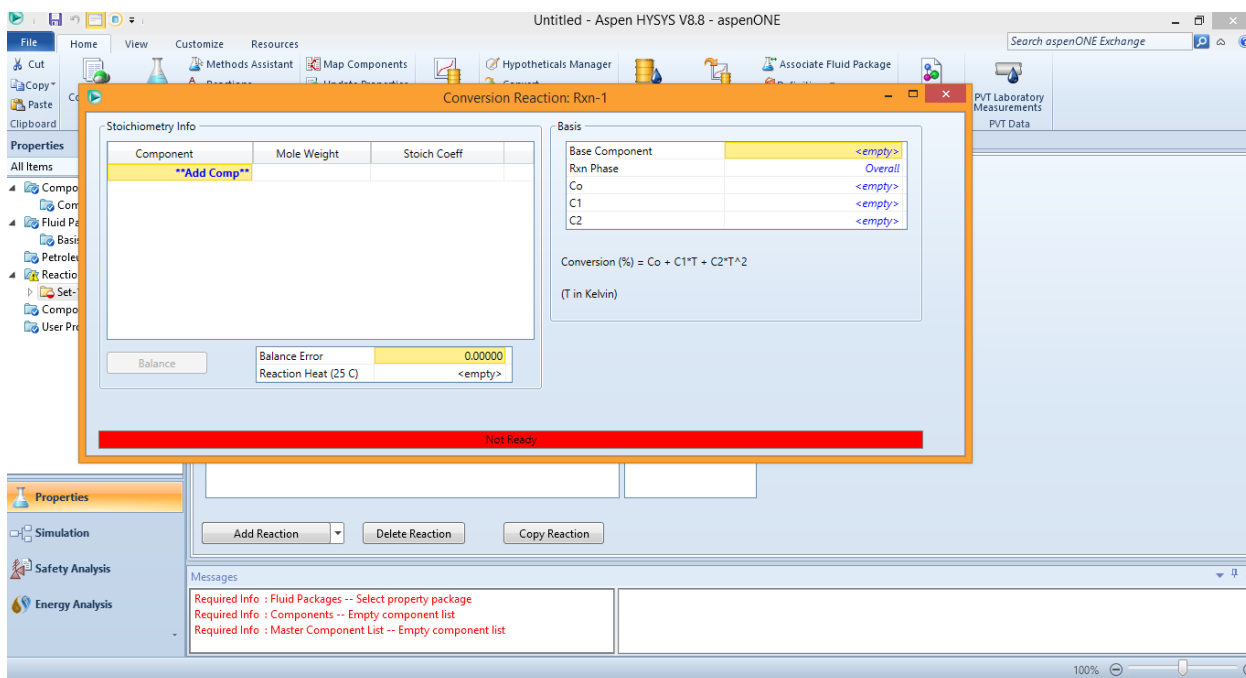


Ilustración 17. Definición de las reacciones y la estequiometria

A continuación, añadimos los reactantes y productos

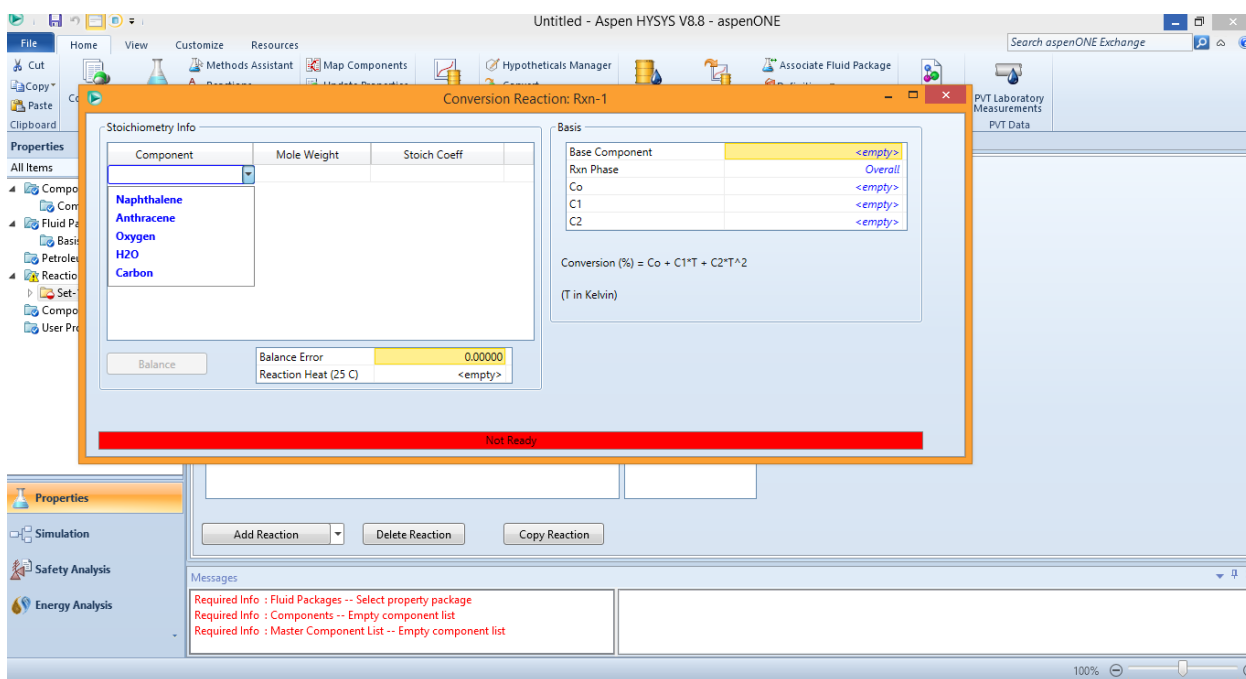


Ilustración 18. Definición de las reacciones y la estequiometria

El simulador añade automáticamente los pesos moleculares y el usuario debe declarar los coeficientes estequiométricos (Stoich Coeff) de acuerdo a la reacción química conocida. Se introducen los coeficientes de los reactantes con signo negativo y los productos con signo positivo. El último producto (Carbón) no se introduce el coeficiente, sino que se hace clic en “Balance” para que el programa termine el balanceo.

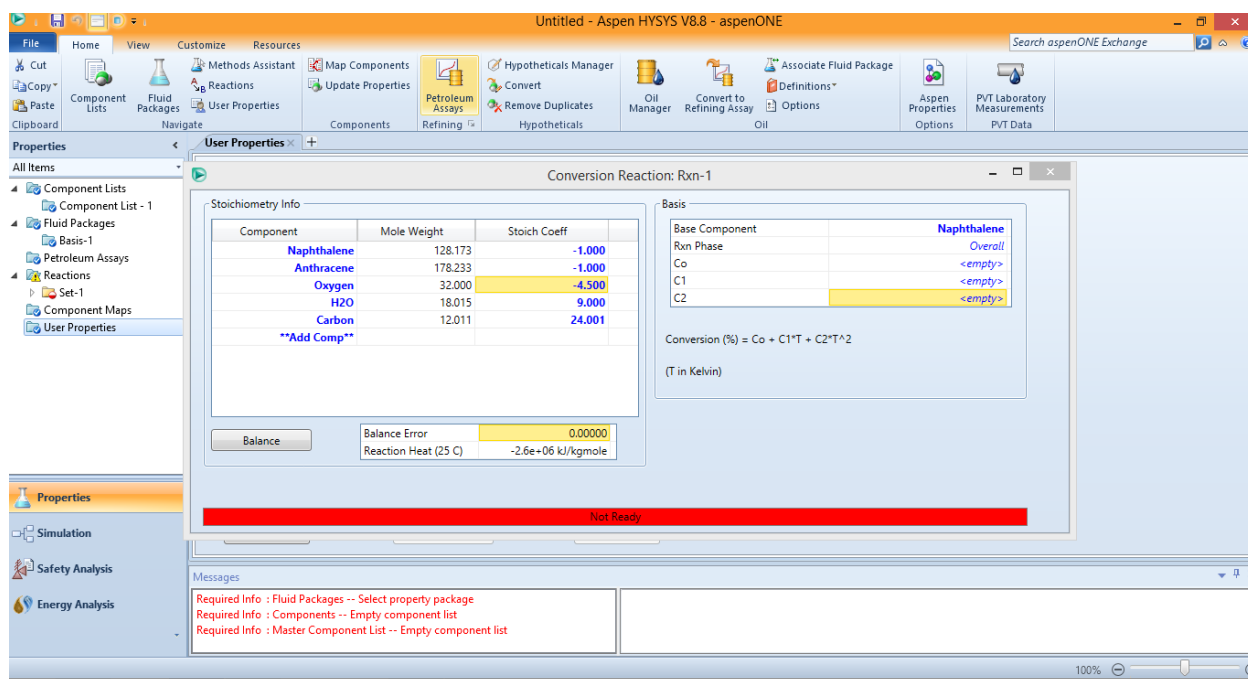


Ilustración 19. Definición de los reactantes, productos y balanceo.

Debido al tipo de reacción que fue seleccionada para la simulación, el programa solicita que se elija el porcentaje de eficiencia con el que se va a trabajar, en este caso debido a la facilidad de las pruebas y a lo ideal del proceso se usa una eficiencia de conversión de 100. (Co = 100).

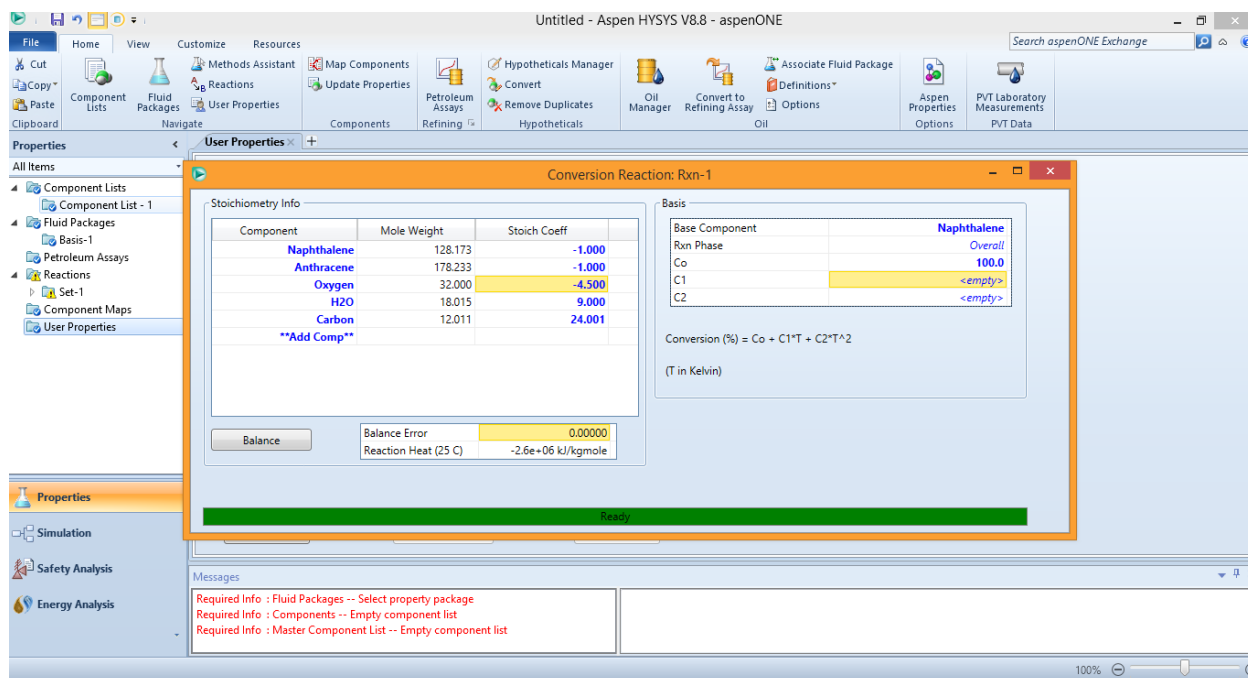


Ilustración 20. Declaración de la eficiencia de conversión.

Luego de eso es necesario acoplar el paquete termodinámico seleccionado con la reacción especificada. Para esto se cierra la ventana y se observa un recuadro amarillo de “Not attached to FP”. Y se hace clic en Añadir a FP (Add to FP) conjunto de reacciones, se selecciona la reacción global y se termina en el botón agregar paquete de fluidos.

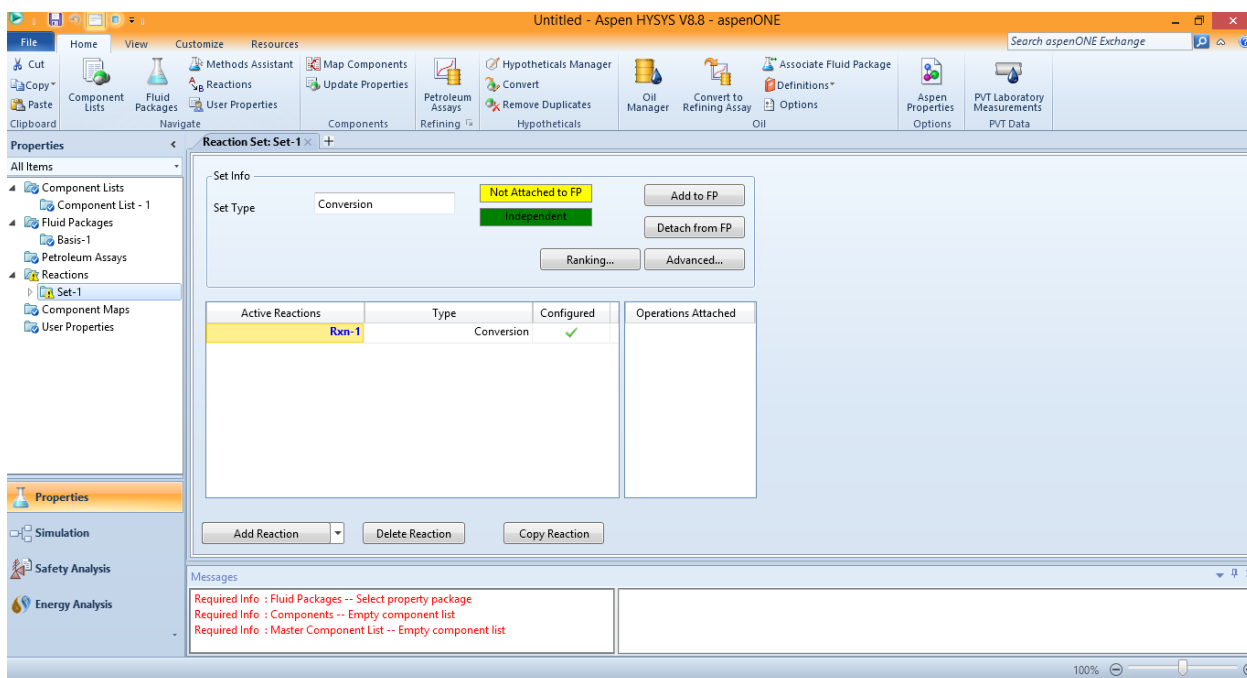


Ilustración 21. Adjuntar la reacción declarada al Fluid Package.

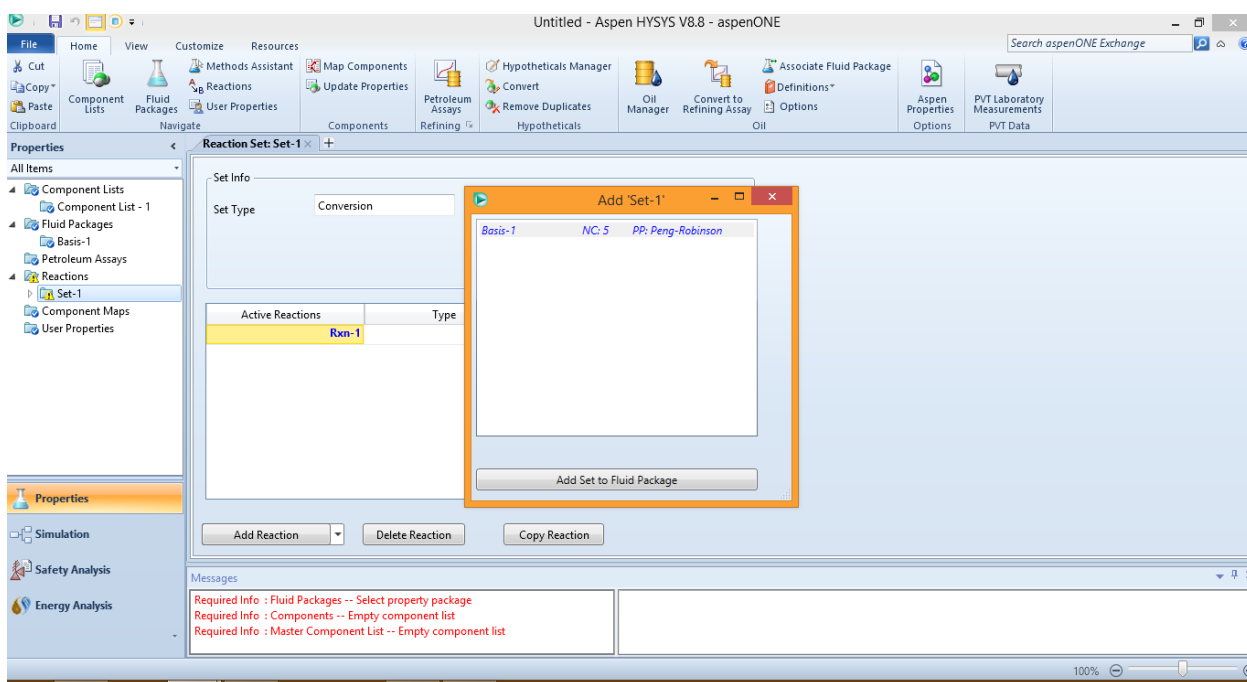


Ilustración 22. Adjuntar la reacción declarada al Fluid Package.

3.4.6. El entorno de simulación

En este momento se accede al entorno de simulación, haciendo clic en Simulation al lado inferior izquierdo, debajo de Properties. Aparece la Paleta de Modelos y Corrientes.

Ya en el entorno la simulación se comienza con introducir en el las corrientes que serán utilizadas como materia prima. Para esto se hace clic en la flecha azul ubicada en la parte superior derecha y se introducen el número de corrientes necesarias para la simulación, que en este caso son 3, que corresponden a los tres reactantes naftaleno, antraceno y oxígeno.

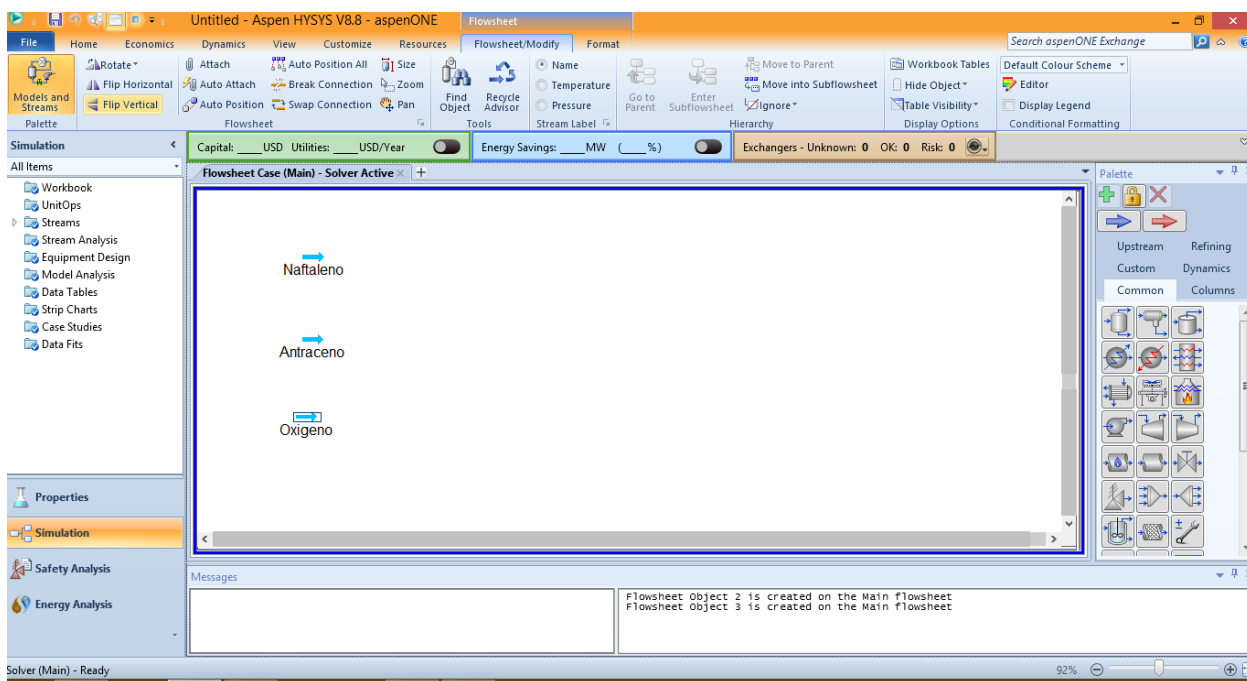


Ilustración 23. Declarar las tres corrientes de alimentación.

Después de darle el rótulo a las corrientes es necesario asignarle las composiciones que cada una de ellas posee y completar los datos de Temperatura, presión y flujo.

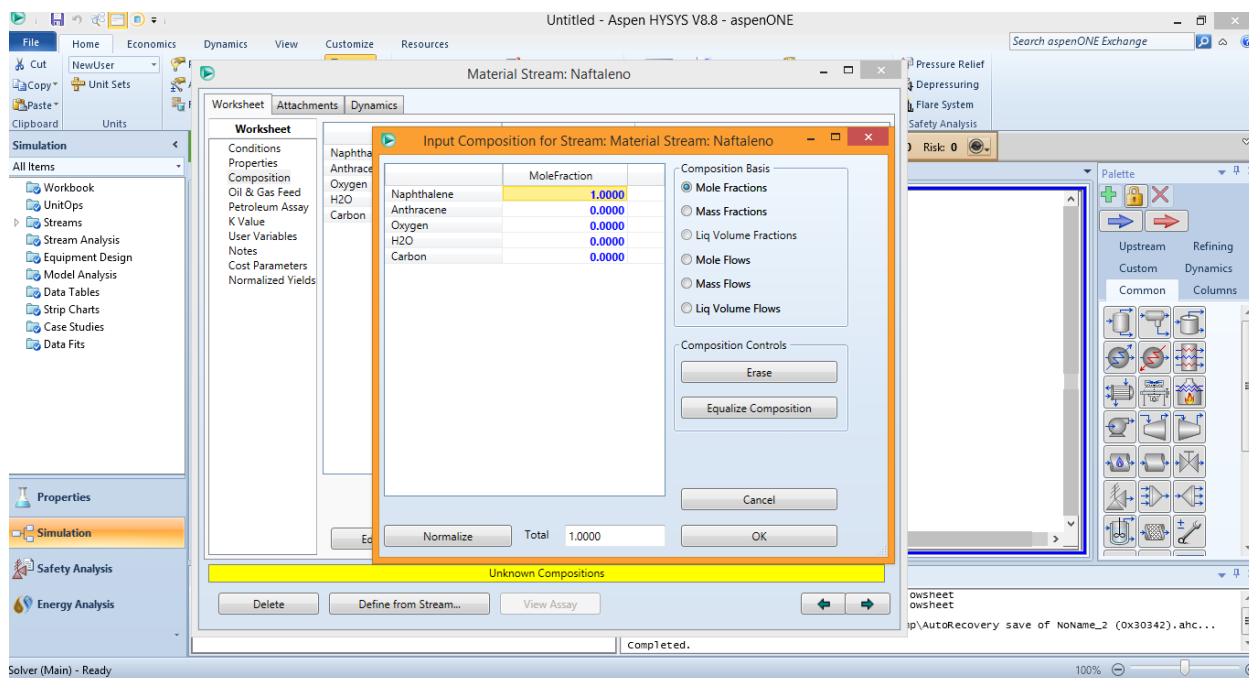


Ilustración 24. Declarar las composiciones de tres corrientes.

Flowsheet Case (Main) - Solver Active x Workbook x +			
Material Streams	Compositions	Energy Streams	Unit Ops
Name	Naftaleno	Antraceno	Oxigeno
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	1.0000
Temperature [C]	30.00	30.00	30.00
Pressure [kPa]	337.8	337.8	337.8
Molar Flow [kgmole/h]	0.3251	<empty>	<empty>
Mass Flow [kg/h]	41.67	<empty>	<empty>
Liquid Volume Flow [m3/h]	4.300e-002	<empty>	<empty>
Heat Flow [kJ/h]	3.234e+004	<empty>	<empty>

Ilustración 25. Declarar las variables de las tres corrientes de alimentación.

Con la finalidad de garantizar que las proporciones de las materias primas sean las indicadas en la reacción de producción de negro de humo es necesario introducir desde la paleta la Operación “Set” (Conjunto) el cual permite mantener equilibradas las proporciones de naftaleno-antraceno.

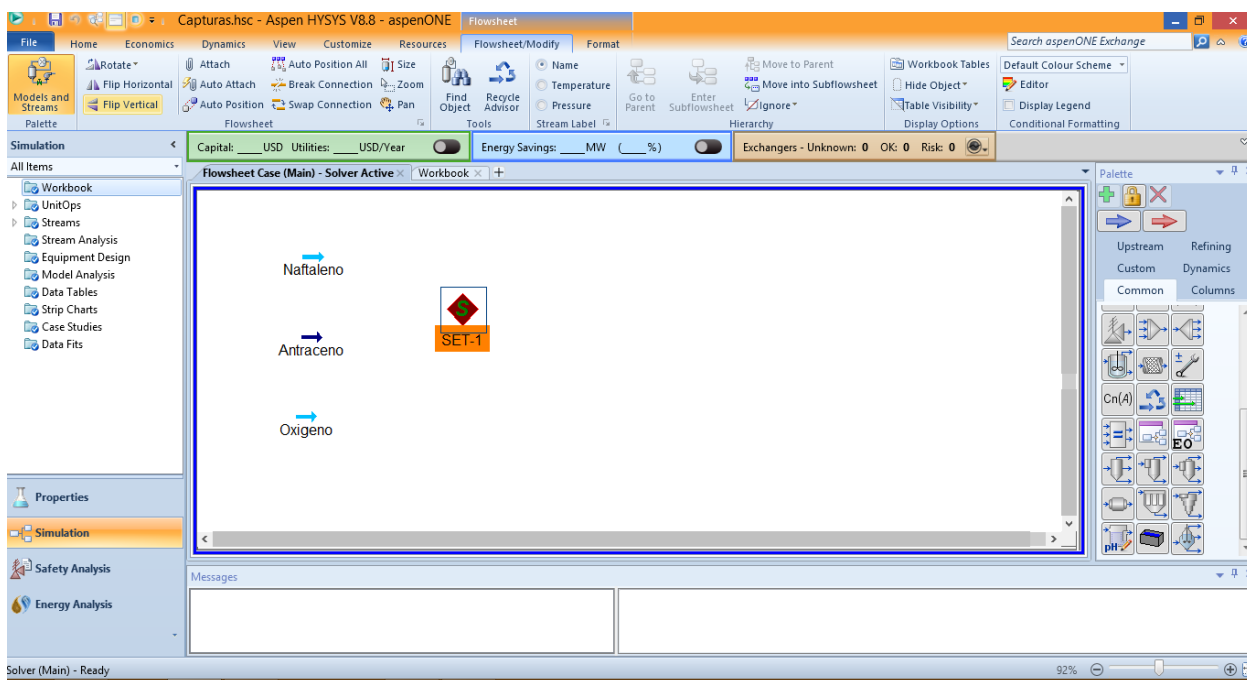


Ilustración 26. Selección de la Operación SET.

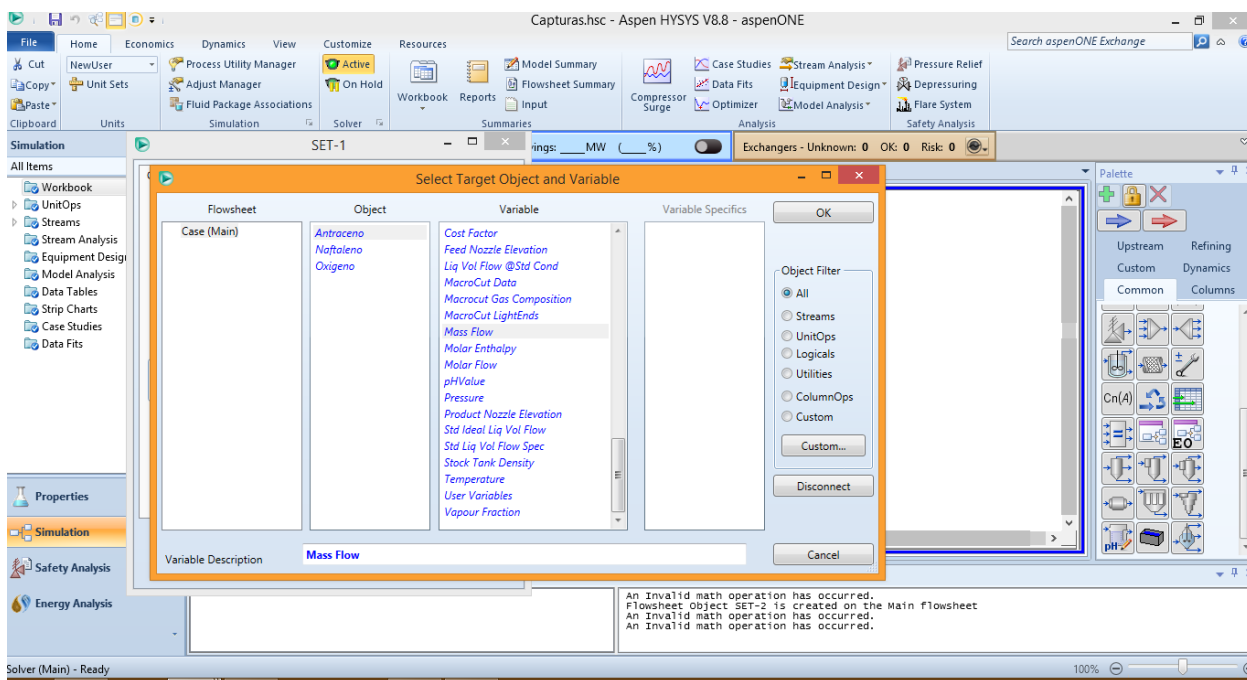


Ilustración 27. Configuración de la Operación SET.

En esta parte de la simulación es necesario definir la relación en la que ingresan las corrientes para que de esa forma se encuentre equilibrada la reacción y los flujos másicos.

De la siguiente manera:

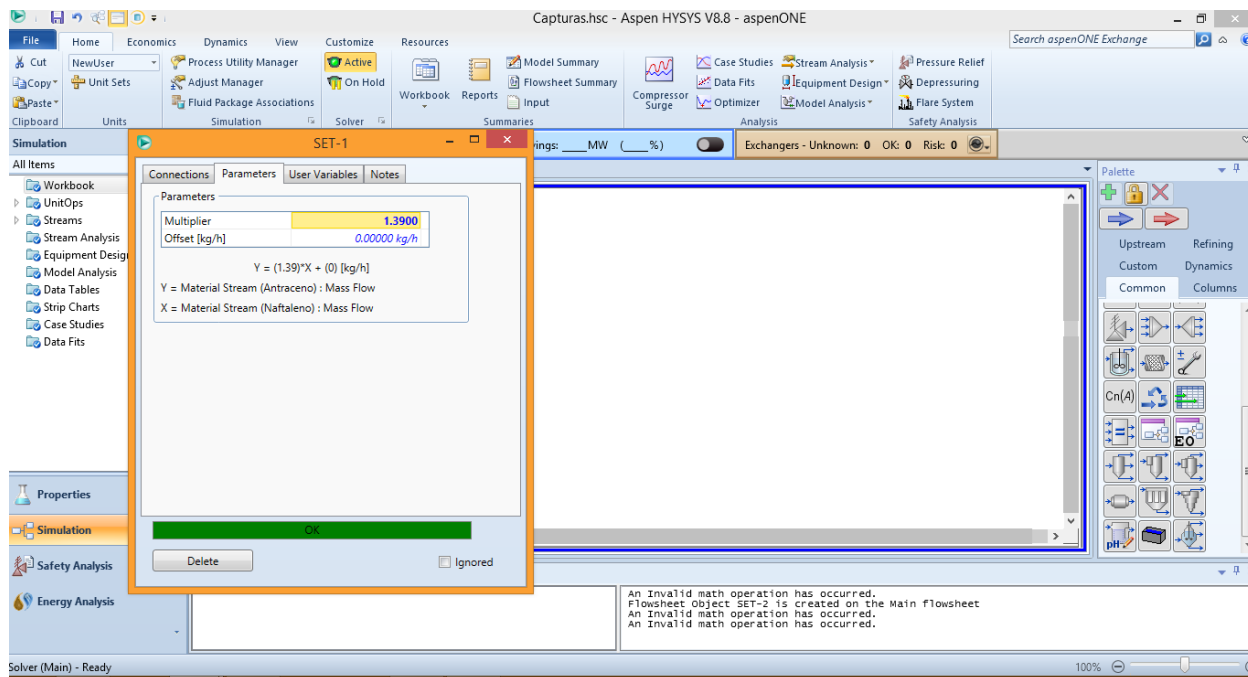


Ilustración 28. Definir relación de corrientes

De la misma forma que es importante tener en cuenta que las proporciones del antraceno y naftaleno deben ser fijas, también es necesario fijar la relación de estos dos con el flujo de oxígeno, lo cual se puede realizar utilizando como fuente el naftaleno, el multiplicador es 1.125.

Luego de tener las corrientes de entrada definidas, con sus composiciones, las condiciones de entrada y las relaciones de flujo, se procede a introducir en el proceso un mezclador que una a la corriente de naftaleno con la de antraceno y obtenga una corriente de mezcla al salir de este.

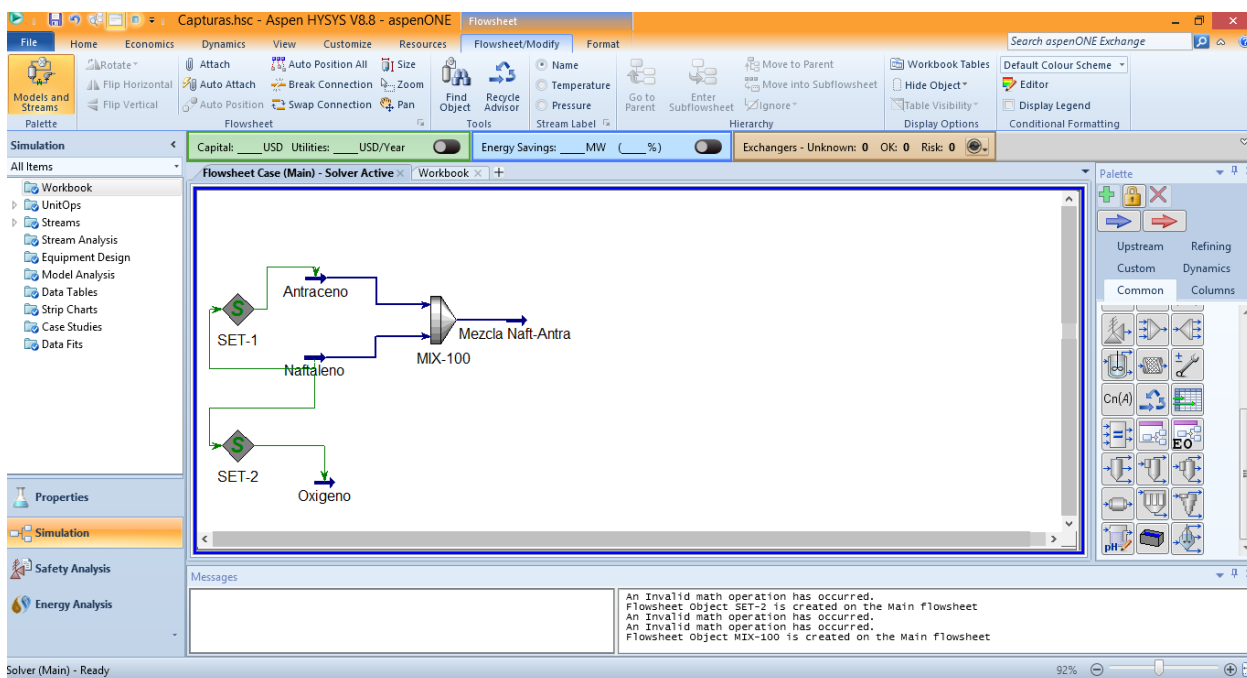


Ilustración 29. Mezcla de alimentaciones

Debido a que las condiciones a las que llegan las materias primas no son las necesarias para llevar a cabo la reacción, es necesario introducir un equipo que aumente la temperatura de la corriente de mezcla a la necesaria para alimentarla al reactor. Este equipo es el Heater o Calentador.

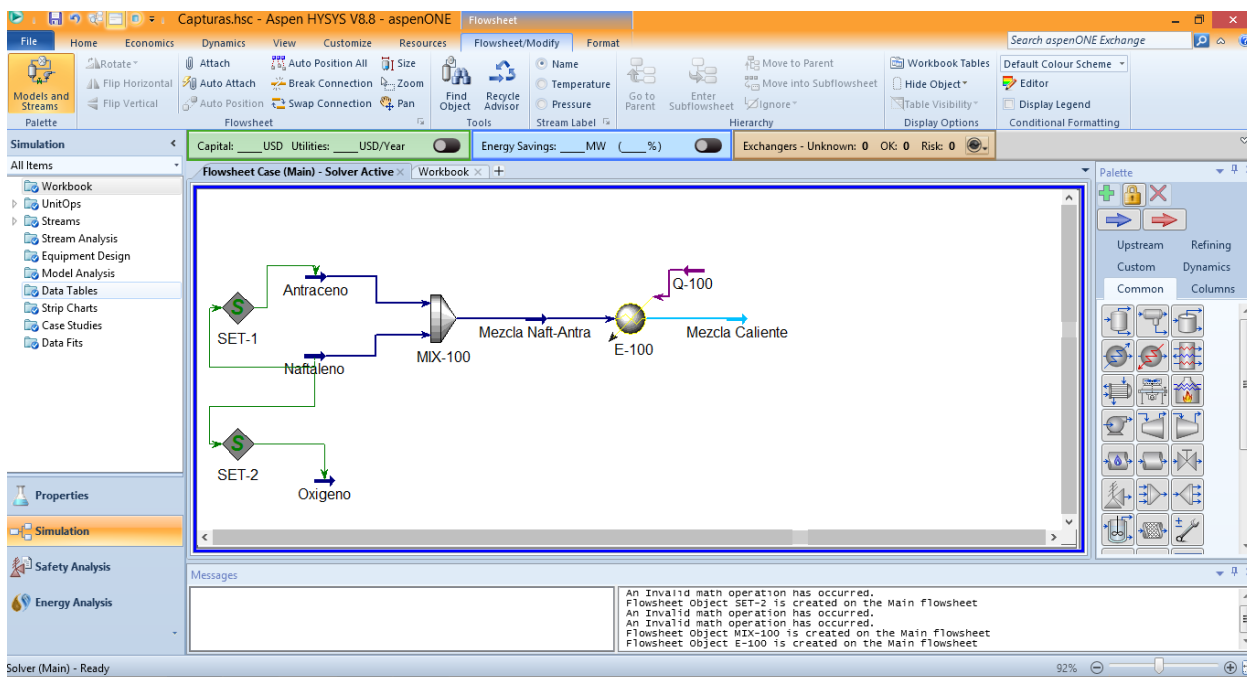


Ilustración 30. Agregando calentador a la mezcla

Luego de ingresar el calentador a la simulación, se definen la temperatura y la presión a la cual se espera que salga la mezcla, ya que para esto es que es utilizado este equipo dentro de la simulación. Los datos son los que se muestran a continuación:

Stream Name	Mezcla Caliente	Vapour Phase
Conditions		
Vapour / Phase Fraction	1.0000	1.0000
Properties		
Temperature [C]	2204	2204
Composition		
Oil & Gas Feed		
Pressure [kPa]	337.8	337.8
Molar Flow [kgmole/h]	0.4677	0.4677
Petroleum Assay		
Mass Flow [kg/h]	71.65	71.65
K Value		
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	6.905e-002	6.905e-002
User Variables		
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	1.195e+006	1.195e+006
Notes		
Cost Parameters		
Normalized Yields		
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	770.4	770.4
Heat Flow [kJ/h]	5.589e+005	5.589e+005
Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	6.626e-002	6.626e-002
Fluid Package	Basis-1	
Utility Type		

Ilustración 31. Colocando variables a la mezcla

De igual forma que para la corriente de mezcla, es necesario precalentar la corriente de oxígeno que va a ingresar a el reactor. Esto se hace de la misma forma que para la corriente de mezcla, utilizando el calentador que permite definir las condiciones a las cuales se desea tener la corriente de oxígeno.



Ilustración 32. Agregando calentador al oxigeno

Y los datos de la corriente de salida del Oxígeno Caliente son:

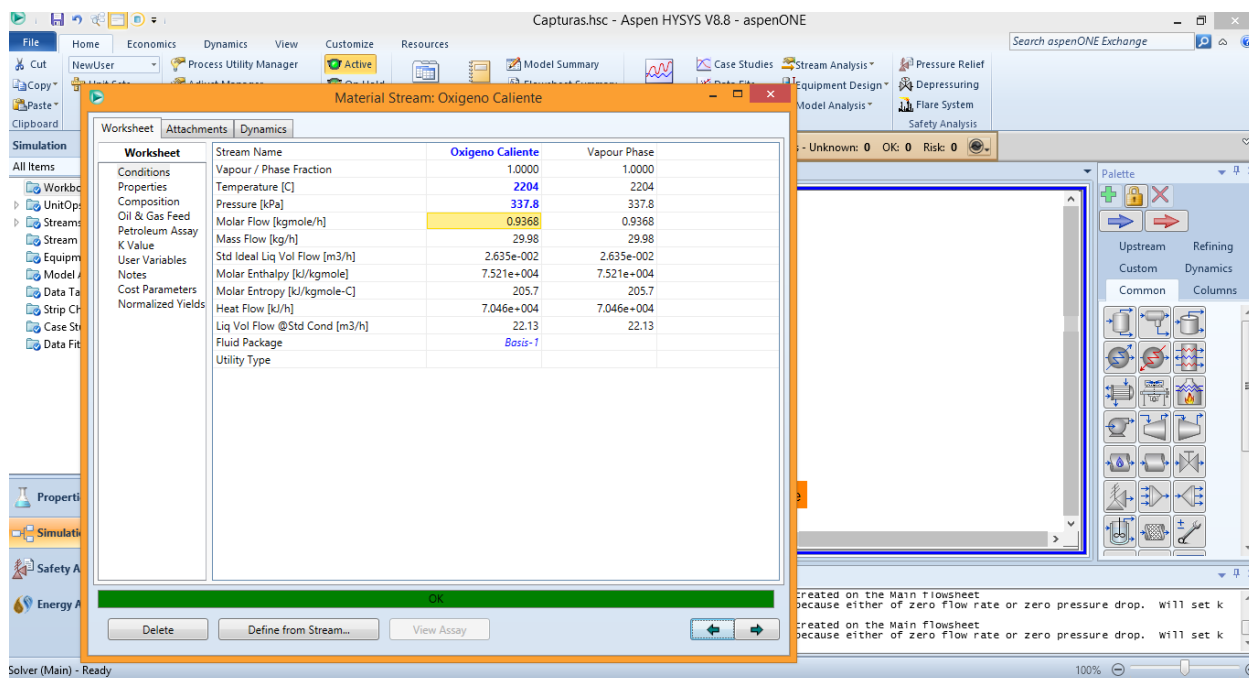


Ilustración 33. Colocando variables al oxígeno

Al tener listas las dos corrientes que van a reaccionar se procede a incluir en la simulación un reactor de conversión, al cual se introducen ambas corrientes y se obtiene por el tope el vapor de agua a altas temperaturas y por los fondos se obtiene negro de humo, que en el simulador aparece como carbón.

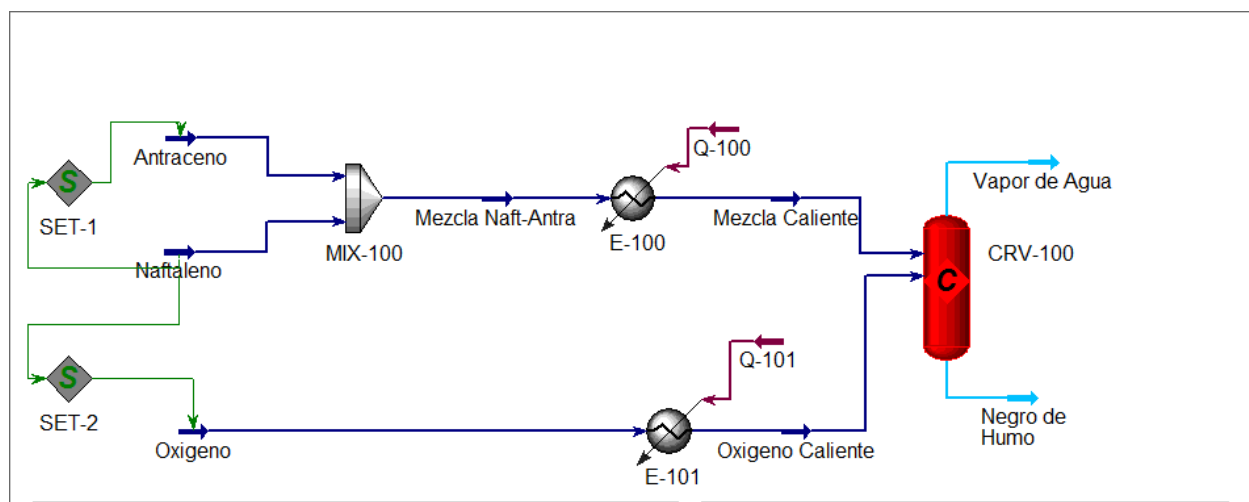


Ilustración 34. Añadiendo el reactor

Para que la reacción descrita anteriormente se pueda llevar acabo en el reactor de conversión es necesario adjuntar la reacción al reactor, de esta manera:

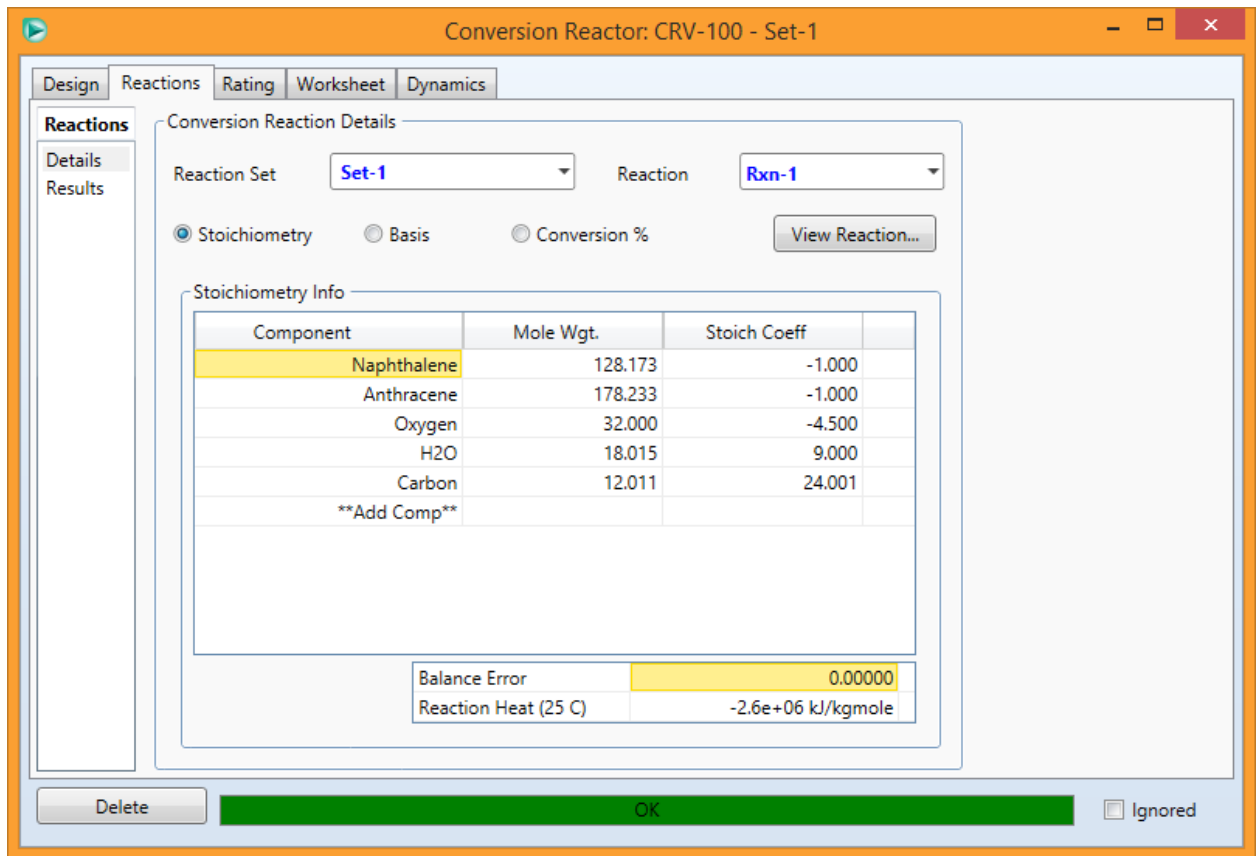


Ilustración 35. Añadiendo la reacción al reactor

Luego es necesario enfriar el negro de humo obtenido por el fondo. Para lograrlo se utiliza un enfriador o Cooler, el cual permite llevar el negro de humo a condiciones normales de presión y temperatura.

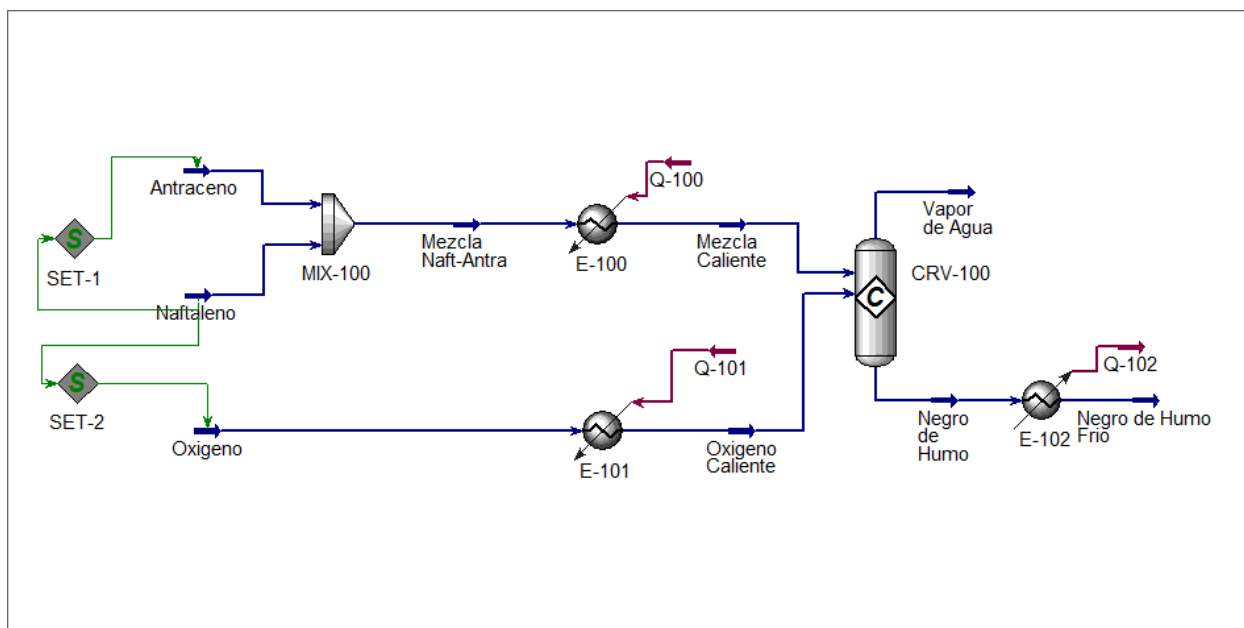


Ilustración 36. Simulación sin Integración Energética

Posterior a eso, es necesario definir las condiciones a las que debe salir la corriente de Negro de humo; condiciones tanto de presión como de temperatura.

Flowsheet Case (Main) - Solver Active Workbook +							
Material Streams Compositions Energy Streams Unit Ops							
Name	Naftaleno	Antraceno	Oxigeno	Mezcla Naft-A...	Mezcla Caliente	Oxigeno Calie...	Vapor de Agua
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Temperature [C]	30.00	30.00	30.00	29.64	2204	2204	3262
Pressure [kPa]	337.8	337.8	337.8	337.8	337.8	337.8	337.8
Molar Flow [kgmole/h]	0.3251	0.3250	1.465	0.6501	0.6501	1.465	2.927
Mass Flow [kg/h]	41.67	57.92	46.88	99.59	99.59	46.88	52.79
Liquid Volume Flow [m3/h]	4.300e-002	5.298e-002	4.121e-002	9.598e-002	9.598e-002	4.121e-002	5.289e-002
Heat Flow [kJ/h]	3.234e+004	4.994e+004	168.6	8.227e+004	7.769e+005	1.102e+005	3.477e+005
Name	Negro de Humo	Negro de Hu...	** New **				
Vapour Fraction	0.0000	0.0000					
Temperature [C]	3262	25.00					
Pressure [kPa]	337.8	101.3					
Molar Flow [kgmole/h]	7.800	7.800					
Mass Flow [kg/h]	93.68	93.68					
Liquid Volume Flow [m3/h]	5.705e-002	5.705e-002					
Heat Flow [kJ/h]	5.394e+005	32.68					

Ilustración 37. Resultados de la simulación

Luego de lo cual se obtiene la simulación completa.

3.4.7. Simulación con integración energética

Para realizar la simulación utilizando la integración energética se necesita regresar al momento en que se añadió el mezclador (Mixing) a la simulación sin integración energética y partir de ahí.

Luego de tener las corrientes definidas y mezcladas se opta por introducir antes del calentador un intercambiador de calor que permita aumentar la temperatura de la mezcla antes de llegar al calentador con el fin de que la carga que este necesite sea menor y de esa forma disminuir el hecho de tener que recurrir a los servicios industriales de la empresa por ende se reducen los costos de producción.

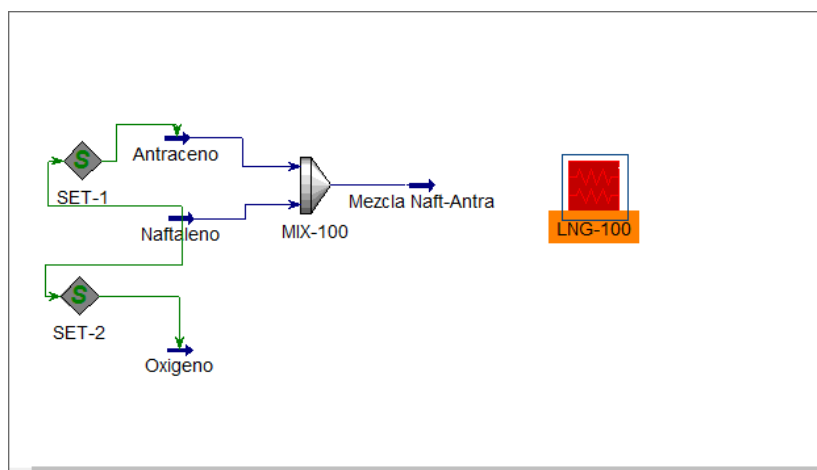


Ilustración 38. Agregando intercambiador de calor al proceso

Luego de introducir el intercambiador de calor en la simulación se deben definir las corrientes que se van a calentar y cuáles son las corrientes que se van a enfriar. Para hacer esto se hace doble clic en el intercambiador y se seleccionan las corrientes que van a calentar y las que van a enfriar.

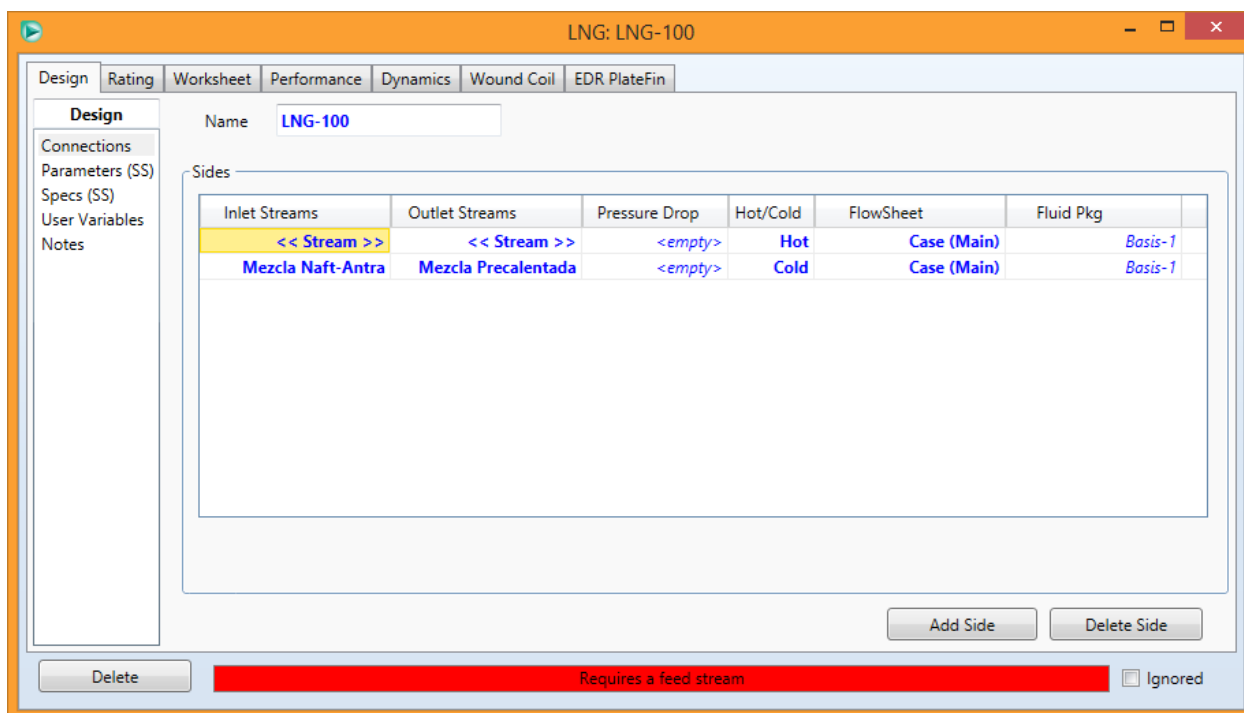


Ilustración 39. Colocando corrientes

Debido a que no se tiene aun la corriente que va a precalentar la corriente de mezcla se deja hasta ahí por el momento. Luego de eso se introduce en calentador con el fin de que garantice que la mezcla llega al reactor con las condiciones necesarias para reacción.

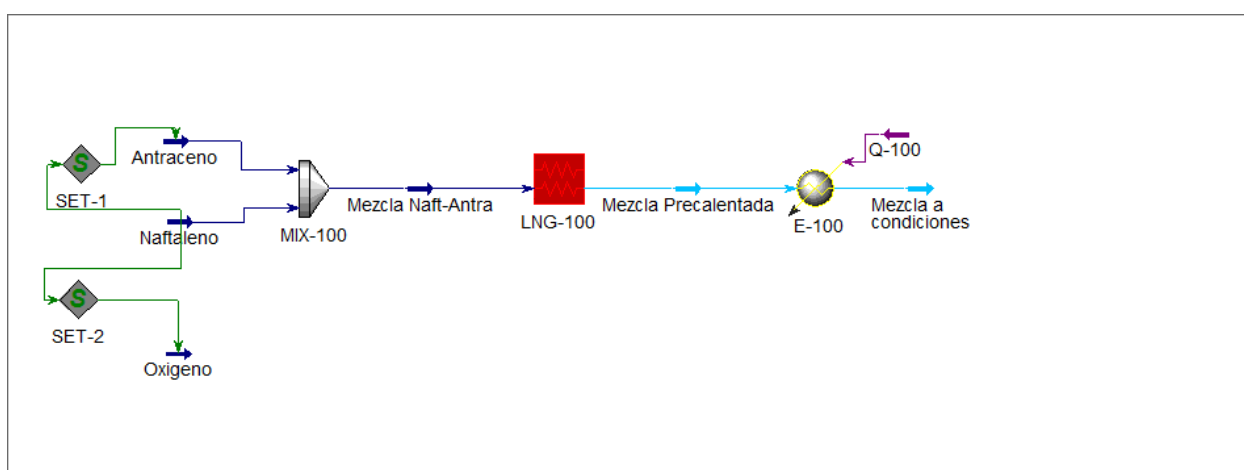


Ilustración 40. Corriente de mezcla a condiciones

Ahora es necesario definir las condiciones a las que deben salir las corrientes tanto del intercambiador de calor como del calentador mismo. Para esto utilizamos el workbook donde podemos definir las condiciones de las corrientes que necesitamos.

Flowsheet Case (Main) - Solver Active Workbook +

Material Streams Compositions Energy Streams Unit Ops

Name	Antraceno	Naftaleno	Oxigeno	Mezcla Naft-A...	Mezcla Precal...	Mezcla a cond...	** New **
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	
Temperature [C]	30.00	30.00	30.00	29.64	2000	2204	
Pressure [kPa]	337.8	337.8	337.8	337.8	337.8	337.8	
Molar Flow [kgmole/h]	0.3250	0.3251	1.465	0.6501	0.6501	0.6501	
Mass Flow [kg/h]	57.92	41.67	46.88	99.59	99.59	99.59	
Liquid Volume Flow [m3/h]	5.298e-002	4.300e-002	4.121e-002	9.598e-002	9.598e-002	9.598e-002	
Heat Flow [kJ/h]	4.994e+004	3.234e+004	168.6	8.227e+004	6.771e+005	7.769e+005	

ProductBlock_Mezcla a condiciones
E-100

Fluid Pkg: All

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

☒ Horizontal Matrix

Ilustración 41. Variables para la corriente a condiciones

En estos momentos se tiene la corriente de la mezcla lista para entrar a reaccionar en el reactor, por ende, es necesario llevar a las condiciones óptimas de reacción a la corriente de oxígeno. Para esto se utilizará un intercambiador de calor con el que se seguirá recuperando energía proveniente de la cima del reactor de conversión donde se llevará a cabo la reacción. Se añade otro intercambiador y también se asignan las corrientes fría y caliente.

LNG: LNG-101

Design Rating Worksheet Performance Dynamics Wound Coil EDR PlateFin

Design

Connections
Parameters (SS)
Specs (SS)
User Variables
Notes

Name: LNG-101

Sides

Inlet Streams	Outlet Streams	Pressure Drop	Hot/Cold	FlowSheet	Fluid Pkg
<< Stream >>	<< Stream >>	<empty>	Hot	Case (Main)	Basis-1
Oxigeno	Oxigeno Precalentado	<empty>	Cold	Case (Main)	Basis-1

Add Side Delete Side

Delete Requires a feed stream Ignored

Ilustración 42. Intercambiador para el oxigeno

Igual que para la corriente de mezclado, para la corriente de oxígeno es necesario garantizar que esta corriente ingrese al reactor a las condiciones de presión y temperatura necesarias para llevar a cabo la reacción de la mejor forma. Para lograr esto es necesario implementar en la corriente de oxígeno un calentador el cual se encargará de que esta corriente llegue a las condiciones necesarias para que la reacción sea óptima.

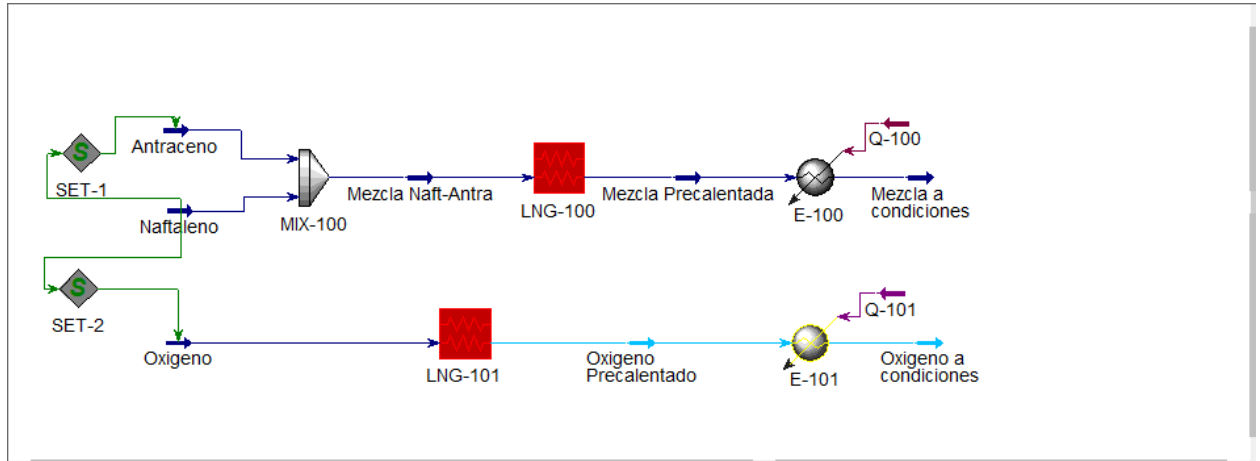


Ilustración 43. Corriente de oxígeno a condiciones

También hay que definir la salida de las corrientes provenientes del intercambiador y el calentador, con el fin de que esta última posea las condiciones necesarias para la reacción.

Flowsheet Case (Main) - Solver Active Workbook +

Material Streams	Compositions	Energy Streams	Unit Ops
Name	Antraceno	Naftaleno	Oxigeno
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	1.0000
Temperature [C]	30.00	30.00	30.00
Pressure [kPa]	337.8	337.8	337.8
Molar Flow [kgmole/h]	0.3250	0.3251	1.465
Mass Flow [kg/h]	57.92	41.67	46.88
Liquid Volume Flow [m3/h]	5.298e-002	4.300e-002	4.121e-002
Heat Flow [kJ/h]	4.994e+004	3.234e+004	168.6
Name	Oxigeno a con...	** New **	
Vapour Fraction	1.0000		
Temperature [C]	2204		
Pressure [kPa]	337.8		
Molar Flow [kgmole/h]	1.465		
Mass Flow [kg/h]	46.88		
Liquid Volume Flow [m3/h]	4.121e-002		
Heat Flow [kJ/h]	1.102e+005		

ProductBlock_Oxigeno a condiciones
E-101

Fluid Pkg: All

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

☒ Horizontal Matrix

Ilustración 44. Variables del oxígeno a condiciones

Luego de tener la corriente de la mezcla lista para la reacción, y la corriente de oxígeno lista para la reacción se procede a insertar el reactor de conversión y a introducir en el las corriente tanto de mezcla como de oxígeno.

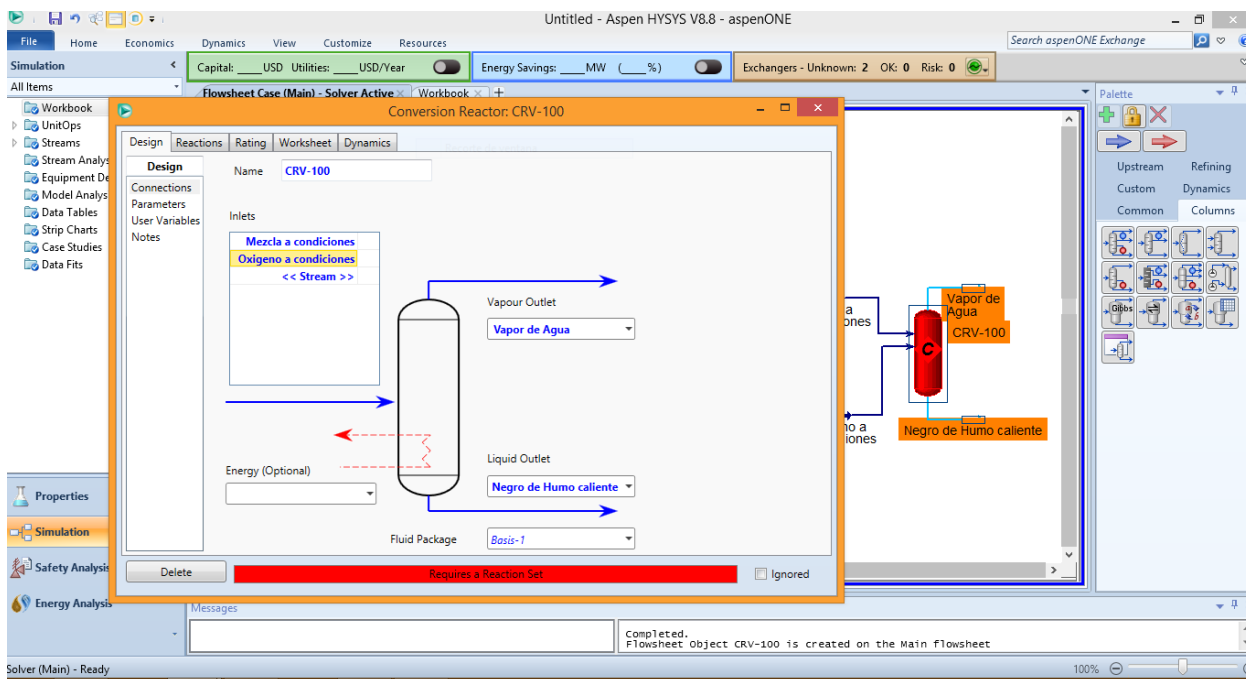


Ilustración 45. Añadiendo corrientes a condiciones al reactor

Para activar la reacción dentro del reactor es necesario hacer doble clic en él y en la pestaña reacciones activar la reacción descrita al inicio de la simulación con el fin de que esta se lleva a cabo dentro del reactor.

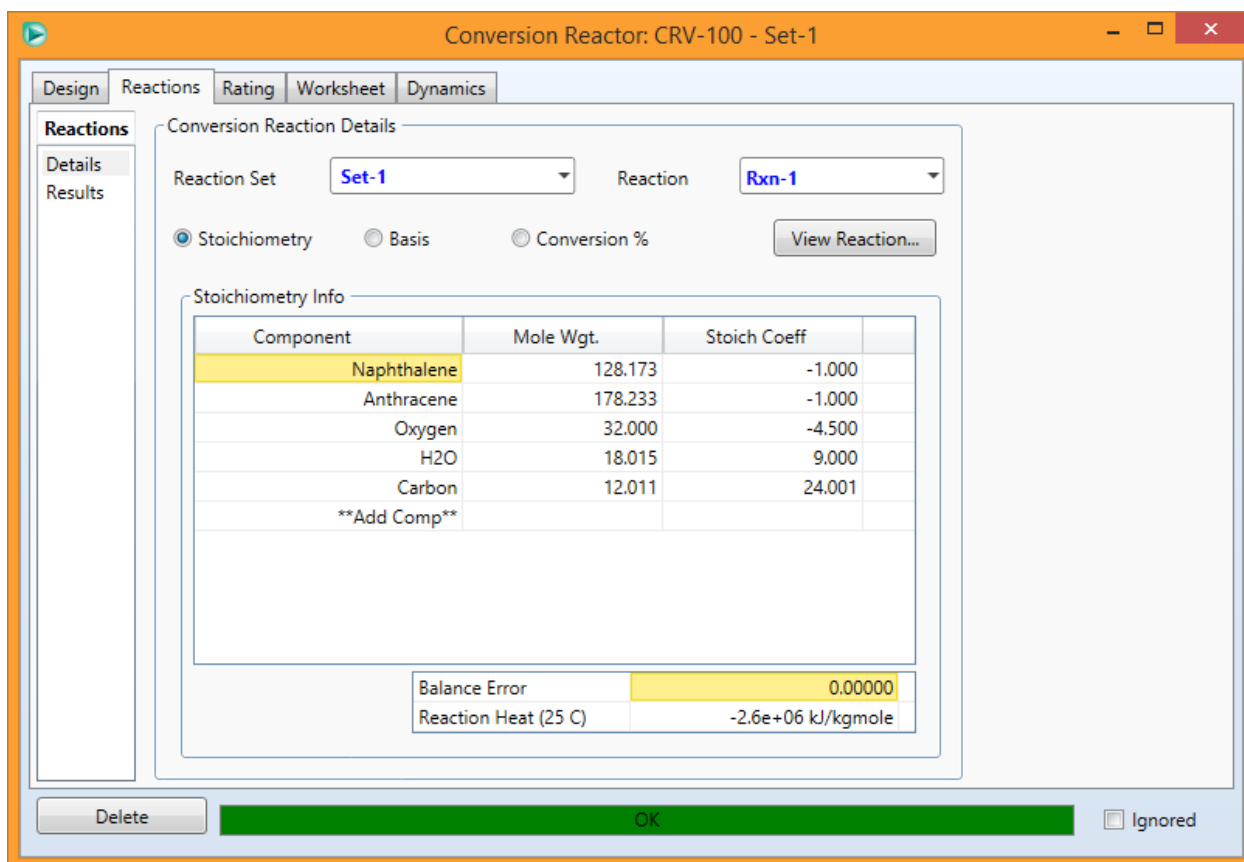


Ilustración 46. Agregando reacción

Para iniciar con la integración energética se hace pasar la corriente proveniente del tope del reactor (vapor de agua) por el intercambiador de calor con el fin de calentar la corriente de mezcla proveniente del mezclador.

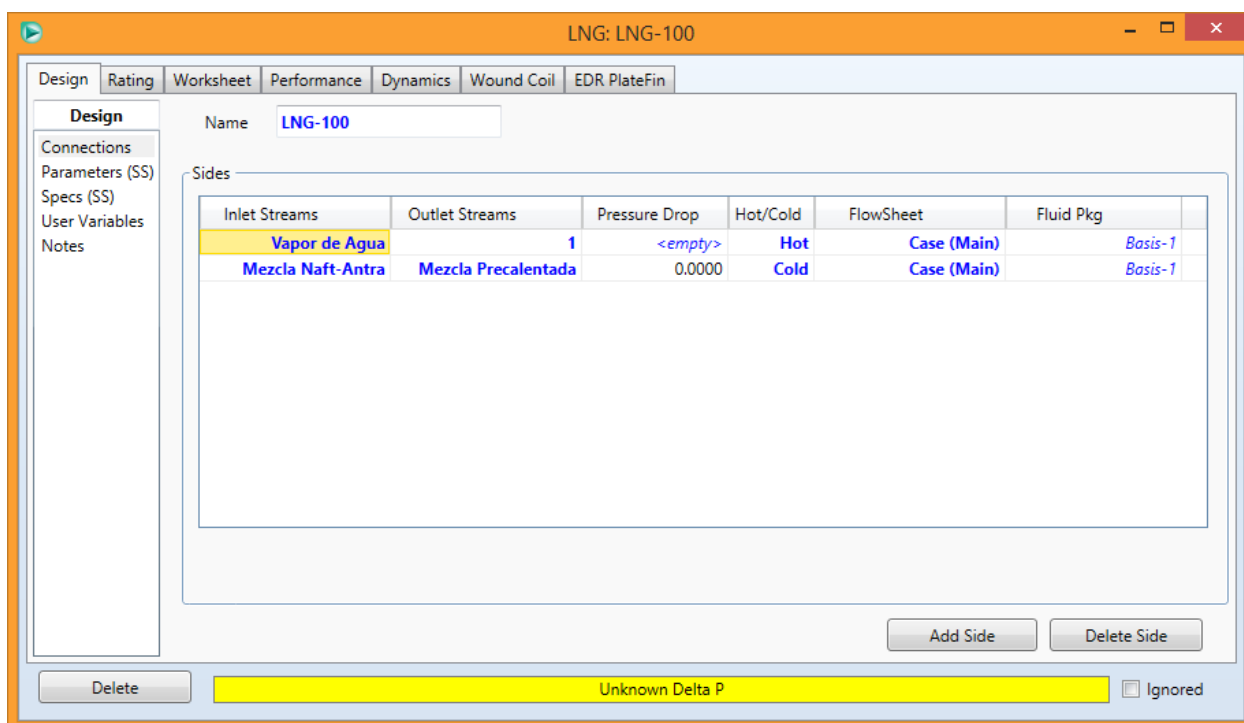


Ilustración 47. Añadiendo corriente de vapor de agua al intercambiador 1

La corriente de vapor de agua que sale del primer intercambiador es utilizada también para el precalentamiento de la corriente de oxígeno, ya que el vapor de agua sale del reactor a una temperatura bastante elevada y en el primer intercambiador no se logra extraer todo el calor que esta posee.

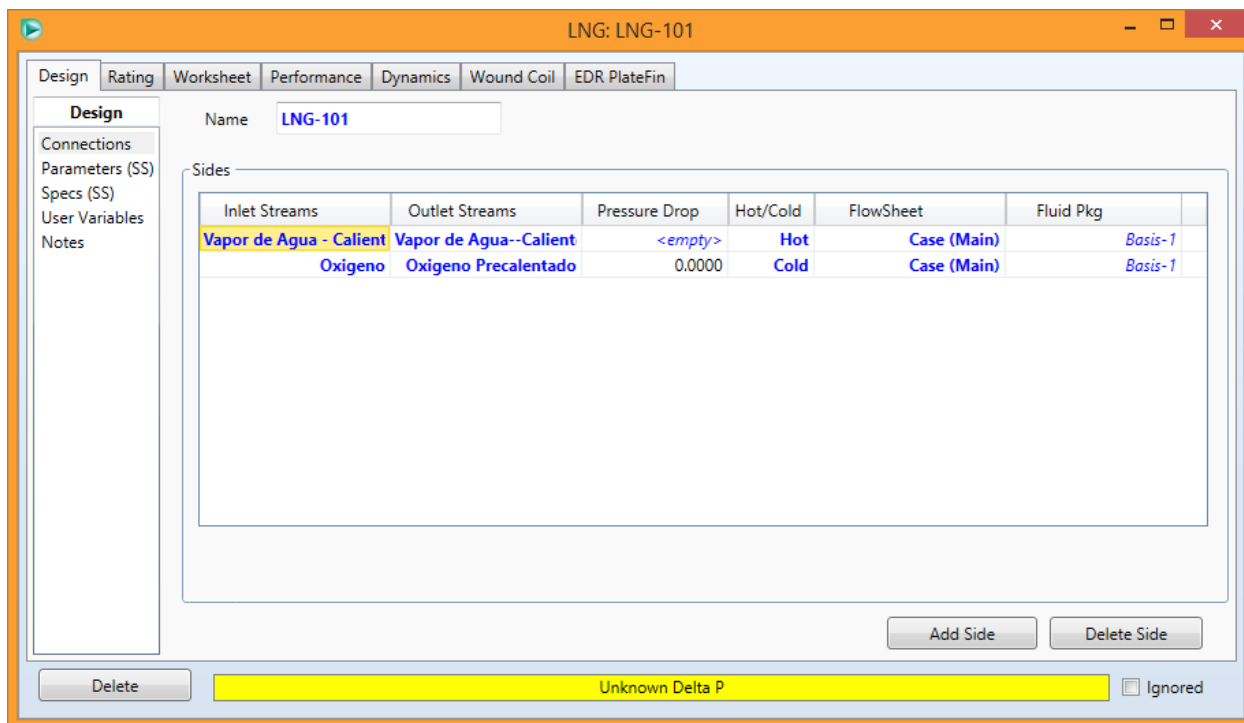


Ilustración 48. Añadiendo corriente de vapor de agua al intercambiador 2

Debido a que aun después de haber pasado por dos intercambiadores de calor el Vapor de agua aún posee mucha energía que entregar en el proceso y no hay aparentemente algún otro proceso que necesite de calentamiento, se procede a utilizar un expansor con el fin de transformar todo ese calor y la presión que esa corriente trae en energía eléctrica.

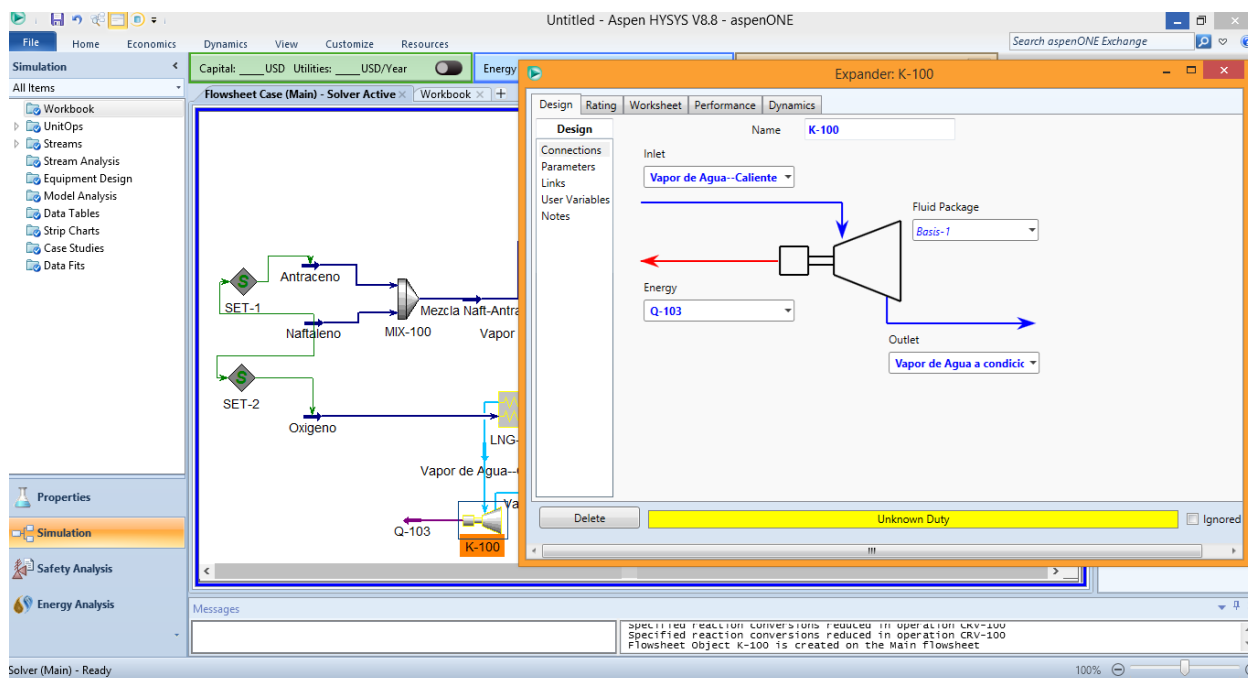


Ilustración 49. Añadiendo expensor

Debido a que el simulador necesita de algunos datos en las composiciones de la corriente de vapor de agua que salen de los intercambiadores es necesario suministrar las condiciones de presión a la cual salen estas corrientes de los intercambiadores de calor y también a la presión que sale la corriente de vapor de agua luego de pasar por el expensor.

Name	Oxigeno a con...	Vapor de Agua	Negro de Hu...	Vapor de Agu...	Vapor de Agu...	Vapor de Agu...
Vapour Fraction	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Temperature [C]	2204	3262	3262	2565	2322	2143
Pressure [kPa]	337.8	337.8	337.8	337.8	337.8	101.3
Molar Flow [kgmole/h]	1.465	2.927	7.800	2.927	2.927	2.927
Mass Flow [kg/h]	46.88	52.79	93.68	52.79	52.79	52.79
Liquid Volume Flow [m3/h]	4.121e-002	5.289e-002	5.705e-002	5.289e-002	5.289e-002	5.289e-002
Heat Flow [kJ/h]	1.102e+005	3.477e+005	5.394e+005	-2.472e+005	-3.470e+005	-4.014e+005

Ilustración 50. Variables para las corrientes de vapor de agua

Al terminar con la parte de redes de intercambio de calor, es necesario enfriar y llevar a condiciones normales de presión y temperatura la corriente que sale por el fondo de reactor que contienen el negro de humo a altas temperaturas. Para esto se utiliza un enfriador que permite llevar esta corriente a condiciones de 101.3 Kpa de presión y 25°C de temperatura.

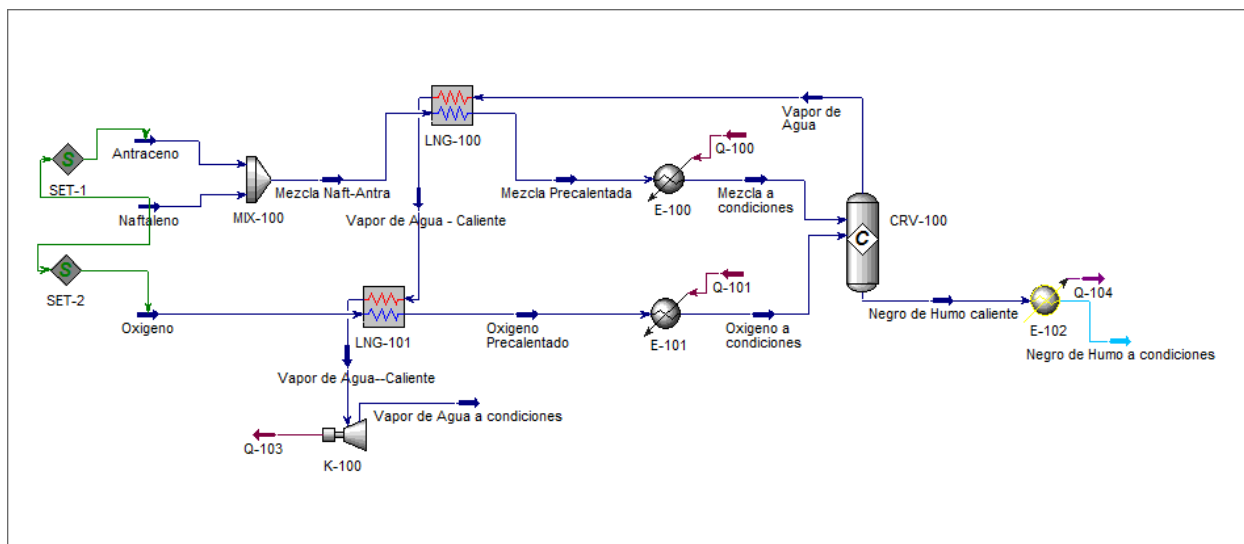


Ilustración 51. Simulación sin obtención del producto a condiciones

Aun después de eso es necesario especificar las condiciones de presión y temperatura a la cual va a salir el negro de humo después del enfriador.

Flowsheet Case (Main) - Solver Active **Workbook**

Material Streams Compositions Energy Streams Unit Ops

Name	Antraceno	Naftaleno	Oxigeno	Mezcla Naft-A...	Mezcla Precal...	Mezcla a con...	Oxigeno Precal...
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Temperature [C]	30.00	30.00	30.00	29.64	2000	2204	2000
Pressure [kPa]	337.8	337.8	337.8	337.8	337.8	337.8	337.8
Molar Flow [kgmole/h]	0.3250	0.3251	1.465	0.6501	0.6501	0.6501	1.465
Mass Flow [kg/h]	57.92	41.67	46.88	99.59	99.59	99.59	46.88
Liquid Volume Flow [m3/h]	5.298e-002	4.300e-002	4.121e-002	9.598e-002	9.598e-002	9.598e-002	4.121e-002
Heat Flow [kJ/h]	4.994e+004	3.234e+004	168.6	8.227e+004	6.771e+005	7.769e+005	1.000e+005
Name	Oxigeno a con...	Vapor de Agua	Negro de Hu...	Vapor de Agu...	Vapor de Agu...	Vapor de Agu...	Negro de Hu...
Vapour Fraction	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000
Temperature [C]	2204	3262	3262	2565	2322	2143	25.00
Pressure [kPa]	337.8	337.8	337.8	337.8	337.8	101.3	101.3
Molar Flow [kgmole/h]	1.465	2.927	7.800	2.927	2.927	2.927	7.800
Mass Flow [kg/h]	46.88	52.79	93.68	52.79	52.79	52.79	93.68
Liquid Volume Flow [m3/h]	4.121e-002	5.289e-002	5.705e-002	5.289e-002	5.289e-002	5.289e-002	5.705e-002
Heat Flow [kJ/h]	1.102e+005	3.477e+005	5.394e+005	-2.472e+005	-3.470e+005	-4.014e+005	32.68
Name	** New **						
Vapour Fraction							

ProductBlock_Negro de Humo a condiciones
E-102

Fluid Pkg: All

☒ Horizontal Matrix

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

Ilustración 52. Variables para la corriente del producto a condiciones

Y por último se tiene la simulación completa con redes de intercambiador de calor.

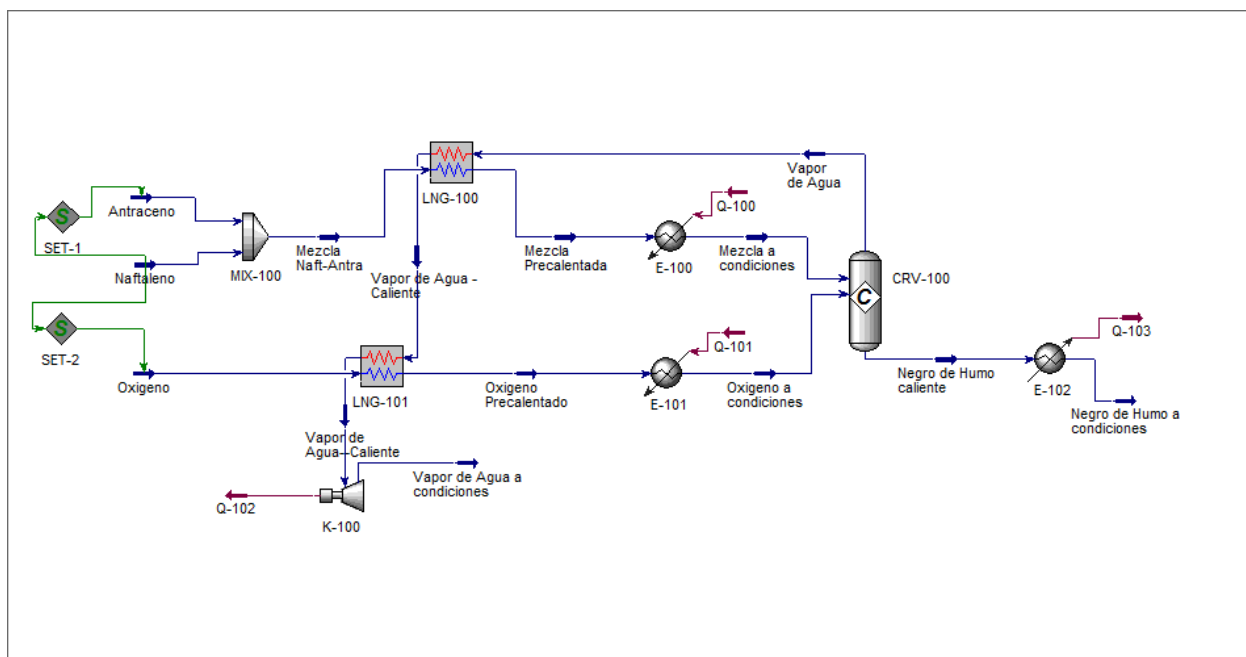


Ilustración 53. Simulación con Integración Energética

CAPÍTULO IV: RESULTADOS

4.1. RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN

El hecho de realizar la simulación de dos formas distintas, permite hacer una comparación en la utilización de los recursos con los que se cuenta dentro de la simulación. El recurso utilizado para la comparación del proceso es el de integración energética, la cual admite la utilización de corrientes que contengan alto poder calorífico para el calentamiento previo de algunas de las corrientes de entrada al proceso. Para obtener las mejores conclusiones es necesario analizar los procesos de forma individual, y posteriormente hacer una comparación entre ellos mismos con el fin de visualizar las ventajas o desventajas que se pueden presentar al momento de utilizar alguna de las dos distribuciones del proceso simuladas. En la primera simulación se presenta el proceso de producción de negro de humo de una forma sencilla y directa, en la que las corrientes de naftaleno, antraceno y oxígeno, son llevadas a las condiciones necesarias para la reacción mediante la utilización de un calentador, el cual utiliza recursos suministrados por el área de servicios industriales de empresa. Estas dos corrientes llevadas al reactor con la reacción previamente implantada en este, producen por la cima vapor de agua a temperatura y presión elevada con una porción aproximadamente del 10% de naftaleno y antraceno. Y por el fondo del reactor sale negro de humo puro a temperatura y presión elevadas. Esta corriente de negro de humo es enfriada y llevada a condiciones normales de presión y temperatura, mediante la implementación de un enfriador.

A continuación, se presenta una tabla en la cual se encuentran las composiciones de cada una de las corrientes a lo largo del proceso de producción de negro de humo.

Tabla 3. Composición de las corrientes a lo largo del proceso sin integración energética

Name	Naftaleno	Antraceno	Oxígeno	Mezcla Naft-A...	Mezcla Caliente	Oxígeno Calie...	Vapor de Agua
Comp Mole Frac (Naphthalene)	1.0000	0.0000	0.0000	0.5001	0.5001	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Anthracene)	0.0000	1.0000	0.0000	0.4999	0.4999	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	1.0000	0.0009
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.9991
Comp Mole Frac (Carbon)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Name	Negro de Humo	Negro de Hu...	** New **				
Comp Mole Frac (Naphthalene)	0.0000	0.0000					
Comp Mole Frac (Anthracene)	0.0000	0.0000					
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000					
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000					
Comp Mole Frac (Carbon)	1.0000	1.0000					

Además de obtener las composiciones de las corrientes a lo largo del proceso también es posible saber la cantidad de Naftaleno y antraceno que es transformado en negro de humo utilizando este proceso de producción sencillo y directo.

La información con la cantidad de flujo transformada en producto final se presenta en la siguiente tabla.

Tabla 4. Balance de masa de las corrientes del proceso sin integración energética

Material Streams	Compositions	Energy Streams	Unit Ops				
Name	Naftaleno	Antraceno	Oxígeno	Mezcla Naft-A...	Mezcla Caliente	Oxígeno Calie...	Vapor de Agua
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Temperature [C]	30.00	30.00	30.00	29.64	2204	2204	3262
Pressure [kPa]	337.8	337.8	337.8	337.8	337.8	337.8	337.8
Molar Flow [kgmole/h]	0.3251	0.3250	1.465	0.6501	0.6501	1.465	2.927
Mass Flow [kg/h]	41.67	57.92	46.88	99.59	99.59	46.88	52.79
Liquid Volume Flow [m3/h]	4.300e-002	5.298e-002	4.121e-002	9.598e-002	9.598e-002	4.121e-002	5.289e-002
Heat Flow [kJ/h]	3.234e+004	4.994e+004	168.6	8.227e+004	7.769e+005	1.102e+005	3.477e+005
Name	Negro de Humo	Negro de Hu...	** New **				
Vapour Fraction	0.0000	0.0000					
Temperature [C]	3262	25.00					
Pressure [kPa]	337.8	101.3					
Molar Flow [kgmole/h]	7.800	7.800					
Mass Flow [kg/h]	93.68	93.68					
Liquid Volume Flow [m3/h]	5.705e-002	5.705e-002					
Heat Flow [kJ/h]	5.394e+005	32.68					

A parte de los flujos de materiales y las composiciones de cada una las corrientes es indispensable suministrar la información relacionada con la cantidad de energía utilizada para llevar las corrientes iniciales desde sus condiciones de presión y temperatura hasta las requeridas por el proceso, ya que esto en una empresa representa gastos y aumento en los costos de producción. A continuación, se presenta la tabla con la información concerniente a los flujos de calor utilizados en el proceso.

Tabla 5. Balance de energía en los calentadores y enfriadores del proceso sin integración energética.

Material Streams	Compositions	Energy Streams	Unit Ops	
Name		Q-100	Q-101	Q-102
Heat Flow [kJ/h]		6.946e+005	1.100e+005	5.394e+005

De la misma forma como se plantean las tablas en la cuales se especifican las composiciones, flujos de materiales y flujos energéticos para la primera simulación que no cuenta con una integración energética, es necesario plasmar también las tablas que presenten esa información para la segunda simulación, la cual tiene integración energética. A continuación, se presentan dichas tablas para la simulación que posee integración energética.

Tabla 6. Composiciones de las corrientes de proceso con integración energética

Material Streams	Compositions	Energy Streams	Unit Ops				
Name	Antraceno	Naftaleno	Oxigeno	Mezcla Naft-A...	Mezcla Precal...	Mezcla a cond...	Oxigeno Precal...
Comp Mole Frac (Naphthalene)	0.0000	1.0000	0.0000	0.5001	0.5001	0.5001	0.0000
Comp Mole Frac (Anthracene)	1.0000	0.0000	0.0000	0.4999	0.4999	0.4999	0.0000
Comp Mole Frac (Oxygen)	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Carbon)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Name	Oxigeno a con...	Vapor de Agua	Negro de Hu...	Vapor de Agu...	Vapor de Agu...	Vapor de Agu...	Negro de Hu...
Comp Mole Frac (Naphthalene)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Anthracene)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (Oxygen)	1.0000	0.0009	0.0000	0.0009	0.0009	0.0009	0.0000
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	0.9991	0.0000	0.9991	0.9991	0.9991	0.0000
Comp Mole Frac (Carbon)	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	0.0000	0.0000	1.0000

Tabla 7. Balance de materia en las corrientes del proceso con integración energética

Material Streams	Compositions	Energy Streams	Unit Ops				
Name	Antraceno	Naftaleno	Oxigeno	Mezcla Naft-A...	Mezcla Precal...	Mezcla a cond...	Oxigeno Precal...
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Temperature [C]	30.00	30.00	30.00	29.64	2000	2204	2000
Pressure [kPa]	337.8	337.8	337.8	337.8	337.8	337.8	337.8
Molar Flow [kgmole/h]	0.3250	0.3251	1.465	0.6501	0.6501	0.6501	1.465
Mass Flow [kg/h]	57.92	41.67	46.88	99.59	99.59	99.59	46.88
Liquid Volume Flow [m3/h]	5.298e-002	4.300e-002	4.121e-002	9.598e-002	9.598e-002	9.598e-002	4.121e-002
Heat Flow [kJ/h]	4.994e+004	3.234e+004	168.6	8.227e+004	6.771e+005	7.769e+005	1.000e+005
Name	Oxigeno a con...	Vapor de Agua	Negro de Hu...	Vapor de Agu...	Vapor de Agu...	Vapor de Agu...	Negro de Hu...
Vapour Fraction	1.0000	1.0000	0.0000	1.0000	1.0000	1.0000	0.0000
Temperature [C]	2204	3262	3262	2565	2322	2143	25.00
Pressure [kPa]	337.8	337.8	337.8	337.8	337.8	101.3	101.3
Molar Flow [kgmole/h]	1.465	2.927	7.800	2.927	2.927	2.927	7.800
Mass Flow [kg/h]	46.88	52.79	93.68	52.79	52.79	52.79	93.68
Liquid Volume Flow [m3/h]	4.121e-002	5.289e-002	5.705e-002	5.289e-002	5.289e-002	5.289e-002	5.705e-002
Heat Flow [kJ/h]	1.102e+005	3.477e+005	5.394e+005	-2.472e+005	-3.470e+005	-4.014e+005	32.68

Tabla 8. Balance de energía a través de los calentadores, enfriadores y expansores del proceso con integración energética.

Material Streams	Compositions	Energy Streams	Unit Ops				
Name		Q-100	Q-101	Q-102	Q-103		
Heat Flow [kJ/h]		9.977e+004	1.018e+004	5.442e+004	5.394e+005		

CONCLUSIONES

1. En ambos casos la obtención de negro de humo se lleva a cabo en las mismas proporciones, es decir que la misma cantidad de materia prima que es transformada en producto terminado en el proceso que no cuenta con integración energética, es la misma cantidad para el proceso que cuenta con esta herramienta de aprovechamiento de energía.
2. Debido a que la reacción es exotérmica en ambos procesos se obtiene una corriente de vapor de agua a una temperatura bastante elevada.
3. Debido a las inclusiones de dos intercambiadores de calor, uno para la corriente de mezcla y otro para la corriente de oxígeno; las cargas calóricas requeridas por los calentadores para llevar estas corrientes hasta las condiciones requeridas por la reacción es mucho menor en el caso del proceso que cuenta con integración energética, ya que la corriente proveniente de la cima del reactor transfiere gran parte de esa energía a cada una de las corrientes tanto la de mezcla como la de oxígeno, lo cual reduce la carga suministrada por el área de servicios industriales y por ende reduce el costo de producción de la planta.
4. Aun después de utilizar la corriente proveniente de la cima del reactor en el precalentamiento de las corrientes de materia prima, esta corriente aún posee un gran poder calorífico el cual puede ser utilizado en distintos procesos. En este caso ese poder calorífico será utilizado para la producción de energía eléctrica. Esto se llevará a cabo haciendo pasar esta corriente de vapor de agua por un expansor o turbina la cual hace girar unos alabes para la producción de energía eléctrica y lleva la corriente a la presión atmosférica.

RECOMENDACIONES

1. Al utilizar la turbina para la producción de energía eléctrica disminuye los gastos en suministro de energía en la planta, ya que esta energía puede ser utilizada para el suministro en el sector de oficinas de la industria debido a que estas instalaciones no requieren un alto voltaje para su óptimo funcionamiento y se disminuyen aun mas los costos de producción de la planta.
2. Todo lo dicho anteriormente lleva a decir que es necesario implementar redes de intercambio de calor en todos los procesos industriales, siempre y cuando estos procesos permitan esta implementación ya que si bien es cierto que al inicio de la implementación hay que asumir los costos por la compra de los intercambiadores de calor que se utilizarán, estos mismo a medida que el tiempo pasa se encargaran de pagar el precio por el cual fueron adquiridos y, además se encargaran de empezar a disminuir los costos de producción y por ende generarán mayores ganancias a la empresa que implemente esta técnica de optimización de procesos.
3. Es preciso anotar para futuras investigaciones en este mismo campo, que en lo posible obtengan la información de las composiciones de las corrientes de entrada al reactor, y las condiciones tanto de presión como de temperatura con las que se trabaja en las empresas encargadas de la producción de negro de humo, ya que la idea de las simulaciones es la representar en un programa de computación las situaciones que se presentan a diario en una planta industrial.

BIBLIOGRAFÍA

1. Martínez V. H. et al. “Simulación de procesos en ingeniería Química”, Ed. Plaza y Valdez, 1era ed. 2000.
2. Scenna N. J. et al.” Modelado, Simulación y Optimización de Procesos Químicos”. 1999.
3. Creus Solé, Antonio “Simulación de procesos con PC”, (1989); Marcombo S.A. España, Barcelona.
4. Avalo, B.; Varela, A. 2008. Modelación y simulación de un evaporador de triple efecto para la concentración de jugos naturales. Revista Técnica de Ingeniería, vol. 32: p151-158.
5. Coulson y cols. “Ingeniería Química, vol II y V, 3ª ed., Reverté, 1981 y 1982.
6. Reklaitis, G.V., “Balances de Materia y Energía” (1989), McGraw-Hill/Interamericana, México.
7. Enrique Macías: El mundo del polietileno
<https://hdpemacias.wordpress.com/2015/01/20/que-es-el-negro-de-humo/>
8. Camacho Becerra Francisco A, y Solano Urban Héctor A.; Estudio del proceso de obtención de negro de humo en México. Tesis. México. 1986.
9. Asociación Internacional de Negro de Carbón. Guía del usuario de Negro de Carbón. 2016.
10. Cabot Corporation (NYSE: CBT)
<http://www.cabotcorp.com.ar/company/about-cabot>
11. Watson, J.M., Jones, W.R., Reactor y método para la producción de negro de humo de alta actividad superficial. 1989.
12. Aspen Plus vs Aspen HYSYS vs Chemcad. Ingeniería química.
13. http://www.ingenieriaquimica.org/foros/aspen_plus_vs_aspen_hysys_vs_chemcad_0 (30 octubre 2016)
14. Dhara, J. S.; Bhagchandani, C. G. 2012. Design, Modelling and Simulation of Multiple Effect Evaporators. International Journal of Scientific Engineering and Technology, vol.1: p01-05
15. Cerquera, Armando, “Algorítmica para programación”, octubre, 2001
16. Enrique Eduardo Tarifa, Teoría de Modelos y Simulación. Buenos Aires. 2001.

17. Smith, J. M. y Van Ness, H. C. “Introducción a la Termodinámica en Ingeniería Química”, (1997), 5ª Edición, McGraw-Hill Co, México
18. Santana Rodríguez, J.J., y Mena González, V. Manual docente de introducción a ASPEN-PLUS. Servicio de Publicaciones de la ULPGC (2016).