

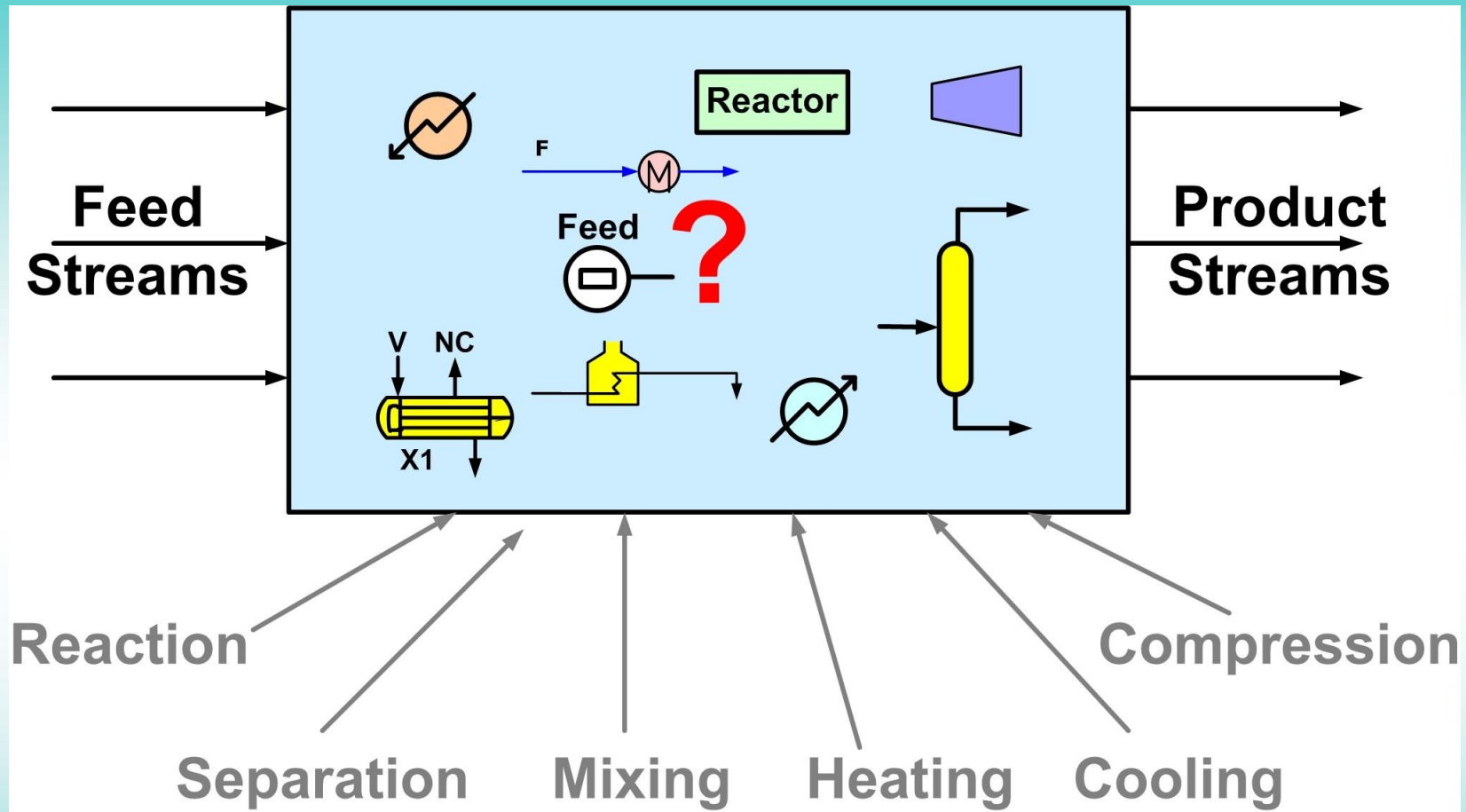
Facultad de Ingeniería - UNJu
Ingeniería Química

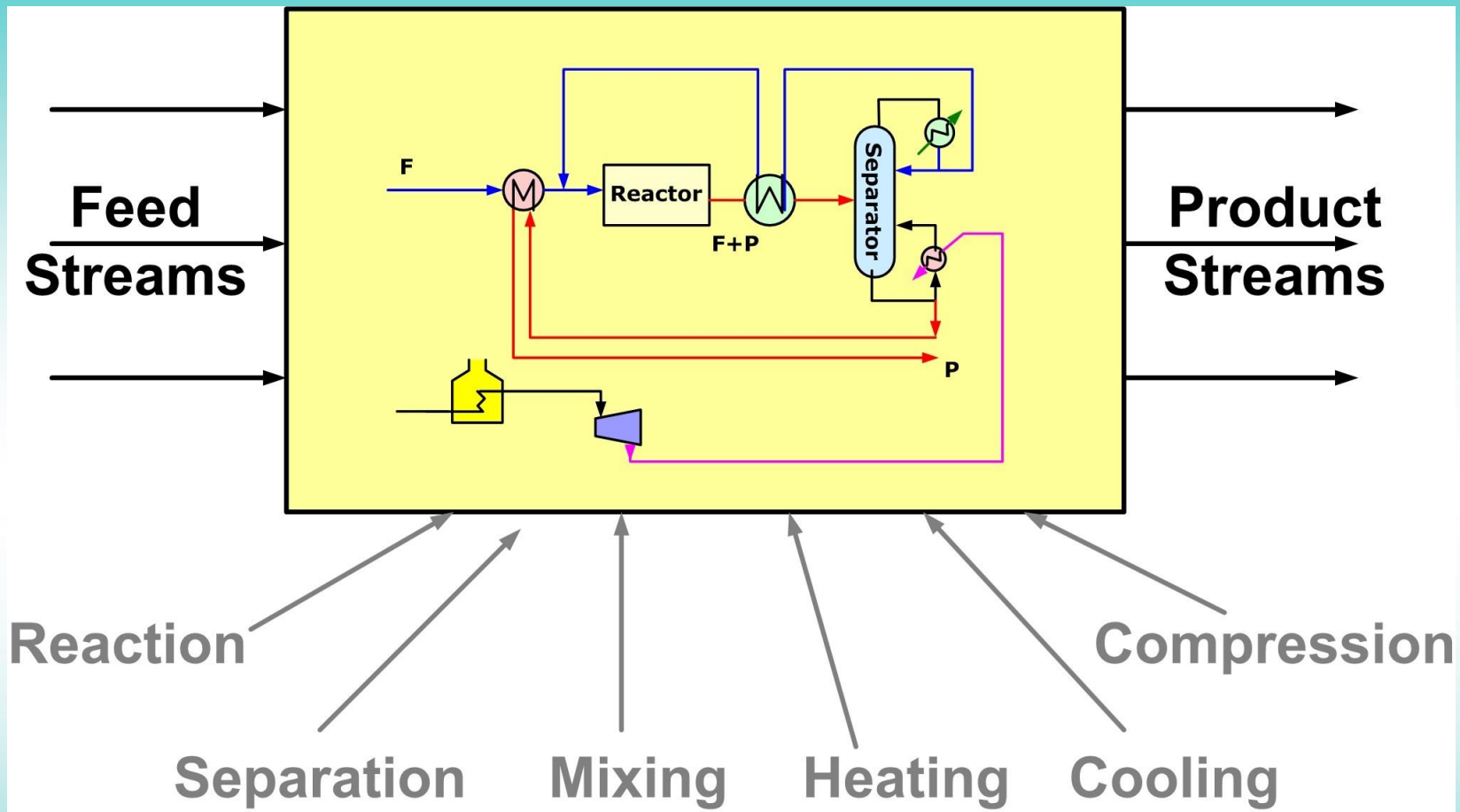
Ingeniería de Procesos



Heurísticos para Diseño de Procesos

ADS: Romina Gisela Huaranca - Prof. Adj: Demetrio Humana





Diseño de Procesos

El proceso de diseño

¿Qué pasos están involucrados en el diseño del proceso?

¿Cuáles son los principales problemas ambientales y de seguridad?

Creación de procesos

Enfoque sistemático de arriba hacia abajo (top-down) para preparar el caso base de diseños de proceso.

Heurístico para diseño de procesos

Reglas generales útiles y pautas cualitativas para ayudarlo a comenzar o inicializar un diseño.

Objetivo

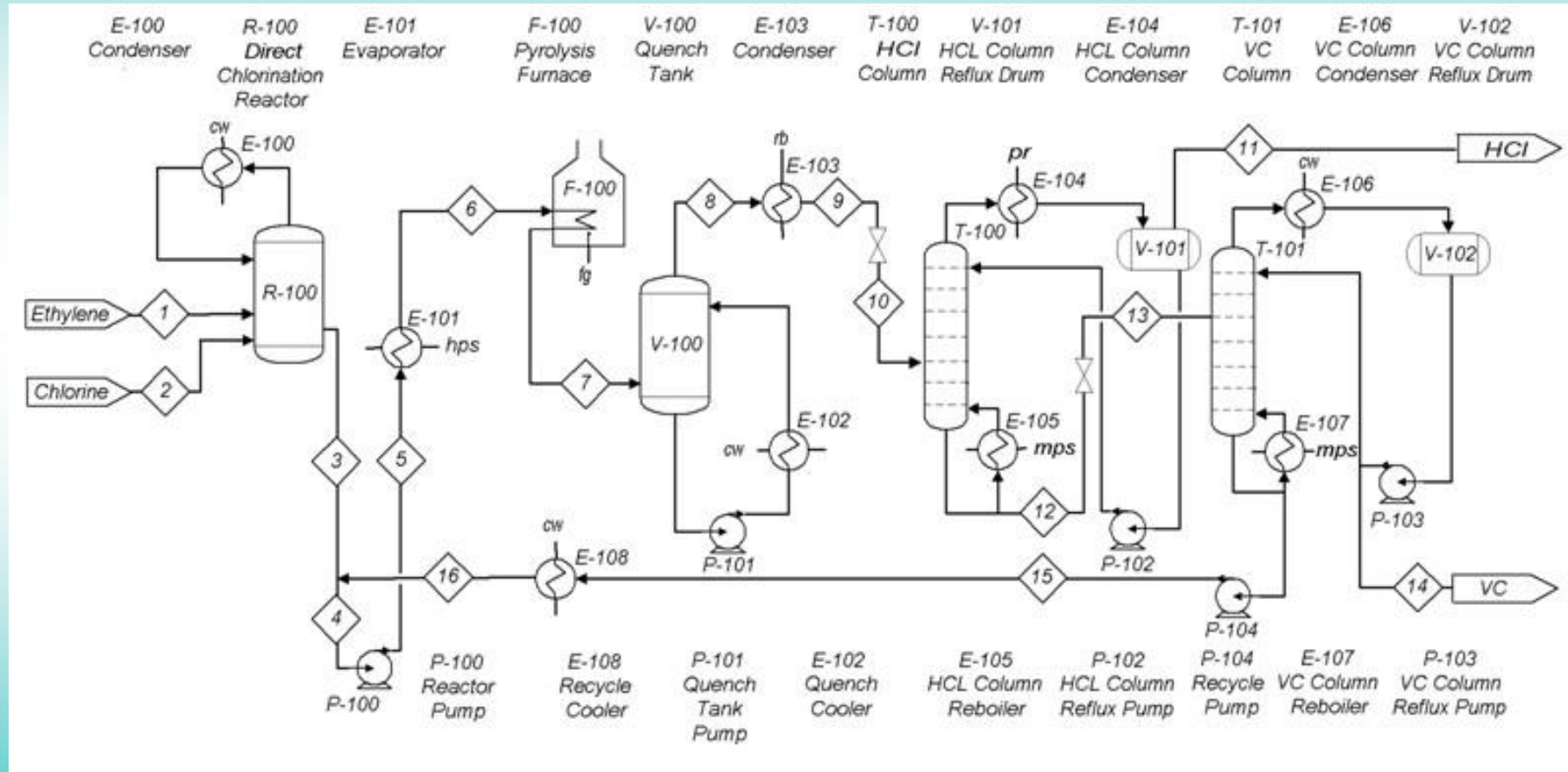
- Comprender la importancia de selección de caminos de reacción que no involucran productos químicos tóxicos o peligrosos, y cuando sea inevitable, reducir su presencia mediante cortos tiempos de residencia en las unidades de proceso y evitando su almacenamiento en las grandes cantidades.
- Ser capaz de distribuir los productos químicos en un flowsheet, para considerar como para la presencia de especies inertes, purgar especies que de otra manera originarían concentraciones inaceptables, para lograr una alta selectividad para los productos deseados.
- Aplicar heurísticos en la selección de procesos de separación para líquidos, vapores y mezclas líquido – vapor.
- Lograr distribuir productos químicos, usando reactivos en exceso, diluyentes inertes, inyección de corrientes frías, para remover calor de reacciones exotérmicas.
- Comprender las ventajas de bombear un líquido más que comprimir un vapor.

Herramientas para el diseño de procesos

- Las operaciones de procesos en síntesis de procesos.
 - ① Reacción química (para eliminar diferencia en tipo molecular)
 - ② Mezclado y reciclo (para distribuir los productos químicos)
 - ③ Separación (para eliminar diferencias en composición)
 - ④ Cambio de temperatura, presión y fase.
 - ⑤ Integración de tareas (para combinar tareas en operaciones unitarias)
- Las reglas heurísticas facilitan la selección y la orientación de operaciones de proceso a medida que se construyen los flowsheets.
- Estas reglas se basan en experiencia, deben ser probadas (por ejemplo por simulación) para asegurar que tengan aplicación en campos específicos.
- También, se verán cómo los métodos algorítmicos, se usan para mejorar decisiones del diseño.

Desarrollo del diseño del caso base

Desarrolle uno, dos o mas de los flowsheet mas factibles del árbol de síntesis para consideraciones mas detalladas.

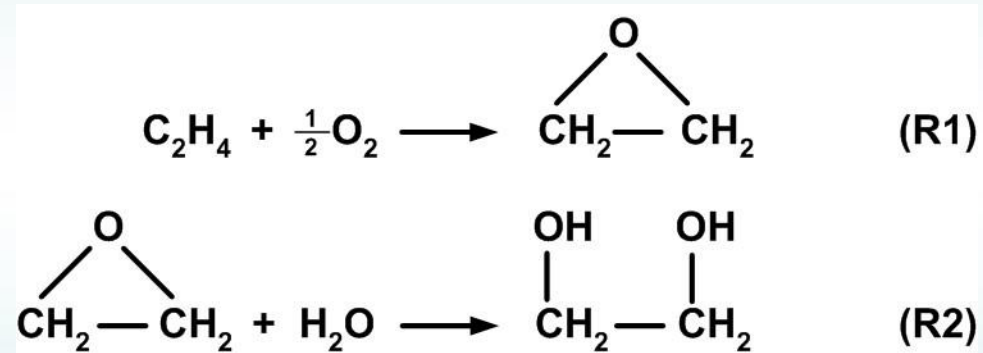


Cuestiones para tomar decisiones

1. La corriente de alimentación ...¿Debería purificarse antes que ingrese al proceso?
2. Un subproducto reversible ... ¿Debería removerse o hacerlo recircular?
3. ¿Debería usarse un reciclo de gas con una corriente de **purga**?
4. Los reactivos sin convertir... ¿Deberían eliminarse o hacerlos recircular?
5. Corrientes efluentes ... ¿Cuántas debería haber?
6. ¿Cuáles son las variables de diseño, y qué aspectos económicos están asociados con ellas?

Materia prima y reacción química

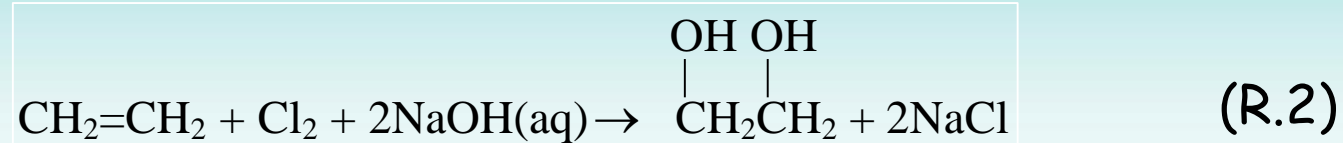
- **Heurístico 1:** Seleccionar materias primas y reacciones químicas para evitar o reducir, la manipulación y almacenamiento de productos químicos peligrosos y tóxicos.
- **Ejemplo: Producción de etilenglicol (EG)**



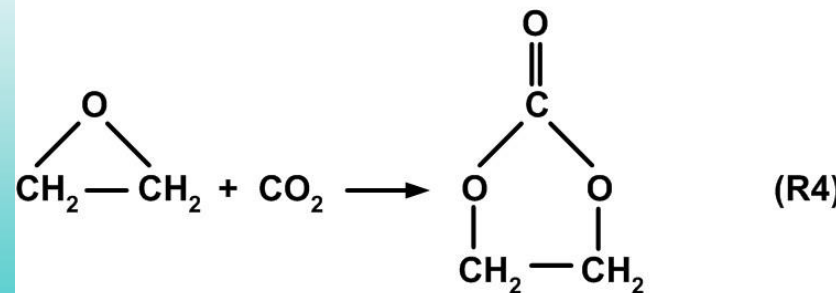
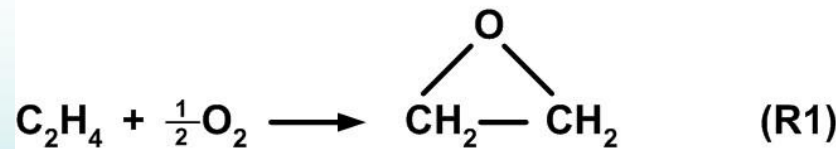
- ❖ Dado que ambas reacciones son **altamente exotérmicos**, necesitan controlarse cuidadosamente.
- ❖ El óxido de etileno es almacenado típicamente en un tanque intermedio para facilitar la producción continua ya que el proceso está diseñado en dos pasos.
- ❖ Un derrame de agua en un tanque de almacenamiento de óxido de etileno podría conducir a un accidente parecido al incidente Bhopal (<https://www.unizar.es/guiar/1/Accident/Bhopal.htm>).

Alternativas de procesos

- 1 Usar cloro y soda cáustica en una reacción de un sola etapa, para evitar el producto intermedio:



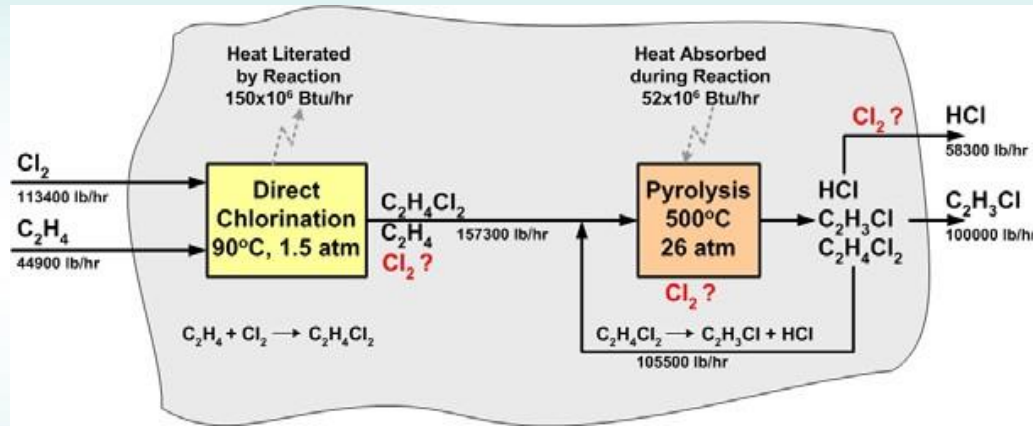
- 2 El oxido de etileno una vez formado, hacer reaccionar con dióxido de carbono para formar carbonato de etileno, un intermediario mucho menos activo que puede ser almacenado en forma segura e hidrolizado para formar etilenglicol.



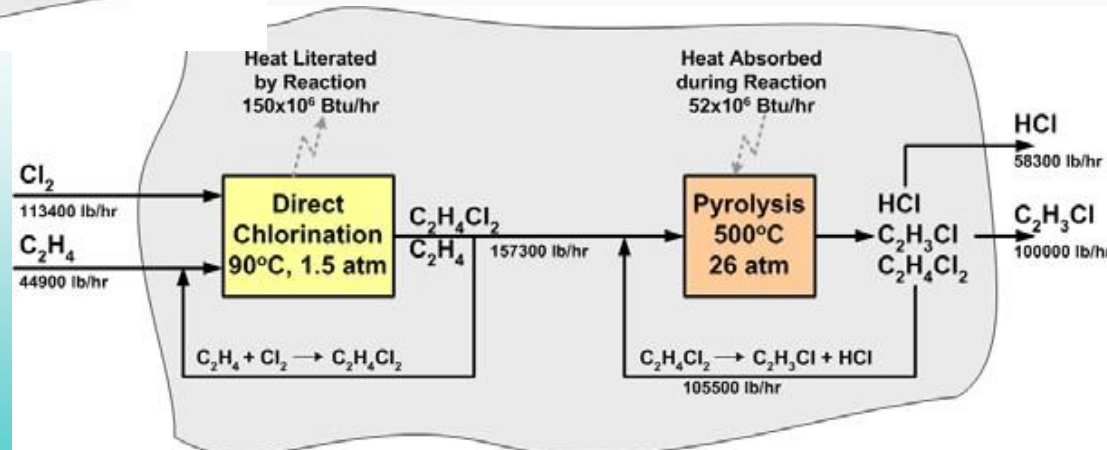
Distribución de sustancias químicas

- **Heurístico 2:** Usar un exceso de uno de los reactivos para consumir completamente reactivo de mayor valor, tóxico o peligroso. El MSDS indica cuales sustancias son tóxicas y peligrosas.

Ejemplo: Usar un exceso de etileno en la producción de DCE (dicloroetano) para consumir completamente el cloro (tóxico y peligroso).



Ratio etileno/cloro?

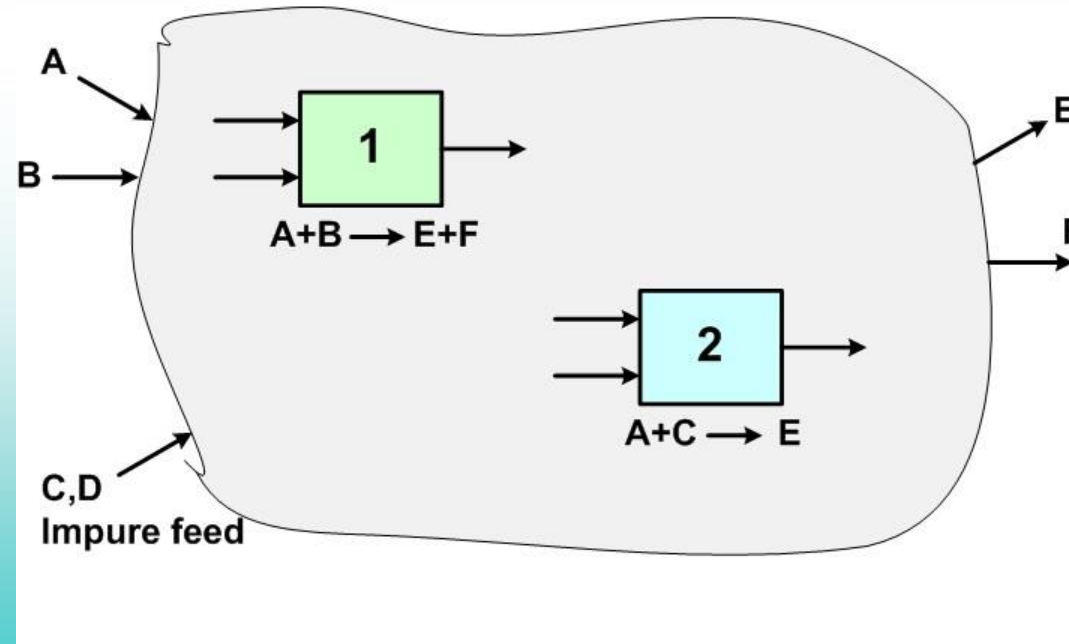


Distribución de sustancias químicas

Heurístico 3: Especies inertes

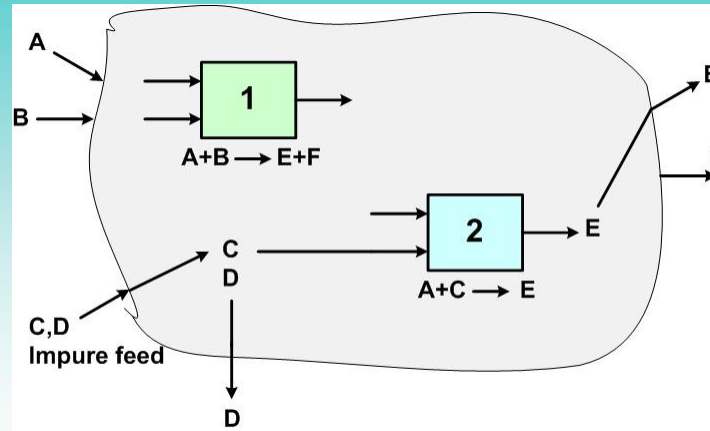
- Cuando se requieren productos puros, eliminar especies inertes (D) antes de la reacción cuando las separaciones son fácilmente realizables o cuándo el **catalizador** es afectado negativamente por lo inerte.
- No haga esto cuando el calor de reacción es muy grande y debe ser removido.

Ejemplo:

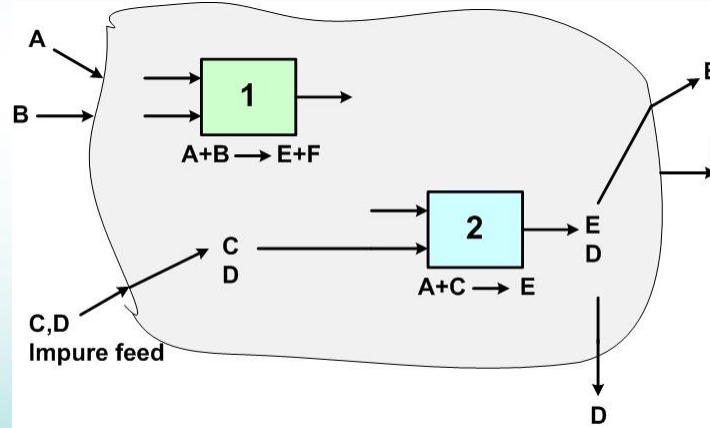


Distribución de productos químicos

Tomar la decisión
..si remover inertes antes
de la reacción ...

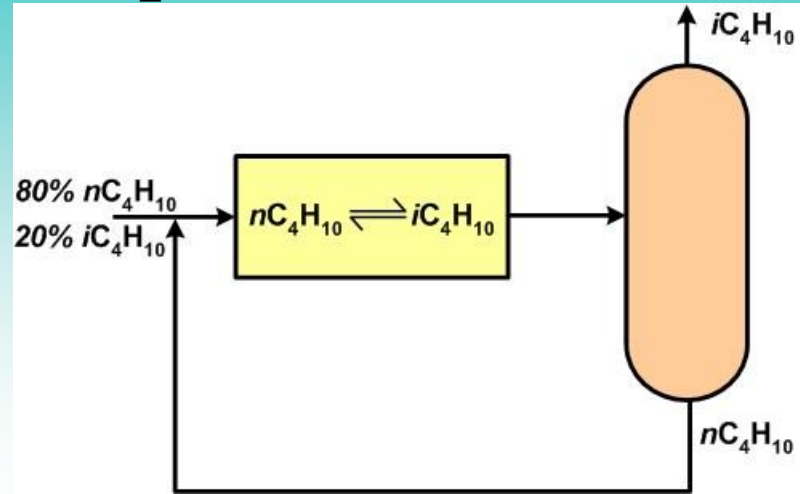


... o después de la reacción ...

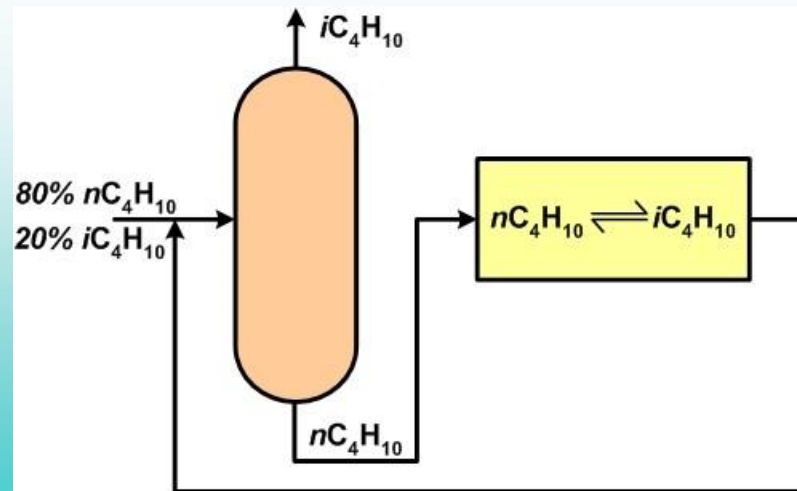


La facilidad y el costo de las separaciones deben ser evaluados. Esto puede realizarse examinando las propiedades físicas sobre las cuales se basan las separaciones, e implica el uso de simulación.

Distribución de productos químicos



La destilación columna antes de la separación, se logra una conversión del n -butano.



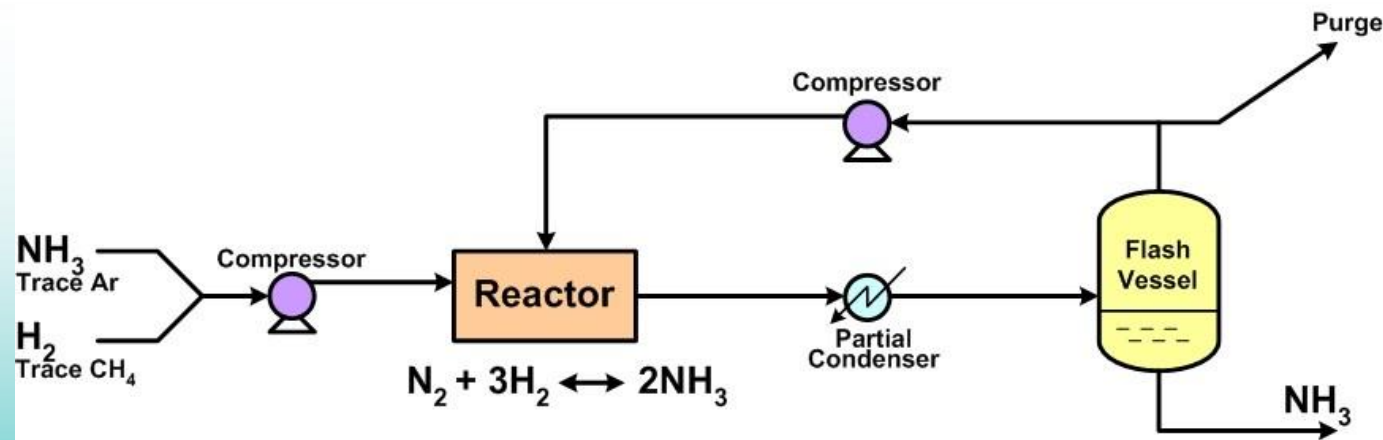
Distribución de productos químicos

Heurístico 4: Introducir corrientes de purga líquida o vapor para proveer de salidas de las especies que:

- Entran al proceso como impurezas en la alimentación.
- Se producen por reacciones laterales irreversibles

Cuando estas especies son trazas y/o son difíciles de separar de otros productos químicos. Las especies más ligeras salen en la corriente de vapor, y más pesados corriente líquida.

Ejemplo: Síntesis de NH₃.

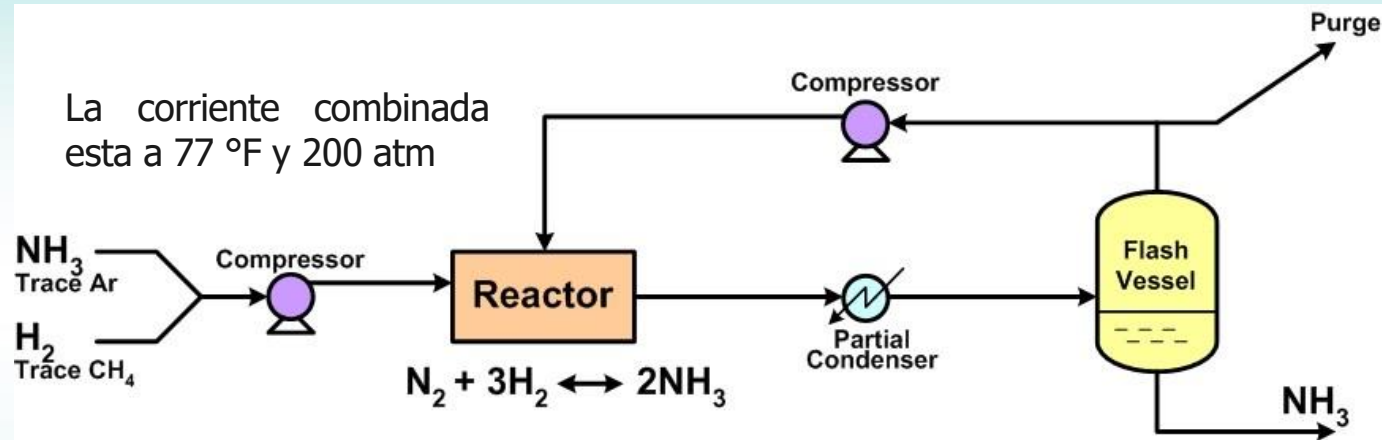


La selección del caudal de purga depende de criterios económicos

Distribución de productos químicos

Ejemplo: Purga de proceso de amoniaco.

Se simula el circuito del reactor de amoniaco para examinar el efecto de purga para definir la relación de reciclo de caudales de las corrientes de purga y reciclo . A continuación las especificaciones:



Simulation Unit	T (°F)	P (atm)
R1	932	200
F1	-28	136.3

	lbmol/hr	Mole Fraction
N_2	24.	0.240
H_2	74.3	0.743
Ar	0.6	0.006
CH_4	1.1	0.011
	100.0	1.000

Distribución de productos químicos

Ejemplo: Purga de proceso de amoniaco.

Variables de proceso en función de relación purga/reciclo:

Purga/Reciclo Ratio	Flujo PROD lbmol/h	Flujo Reciclo lbmol/h	Flujo Purga lbmol/h	Fracción Purga Ar	Fracción Purga CH4
0,1	39,2	191	19,1	0,028	0,052
0,08	40,75	209,3	16,7	0,033	0,06
0,06	42,4	233,9	14	0,04	0,074
0,04	44,3	273,5	10,9	0,053	0,093
0,02	45,8	405,6	8,1	0,072	0,133

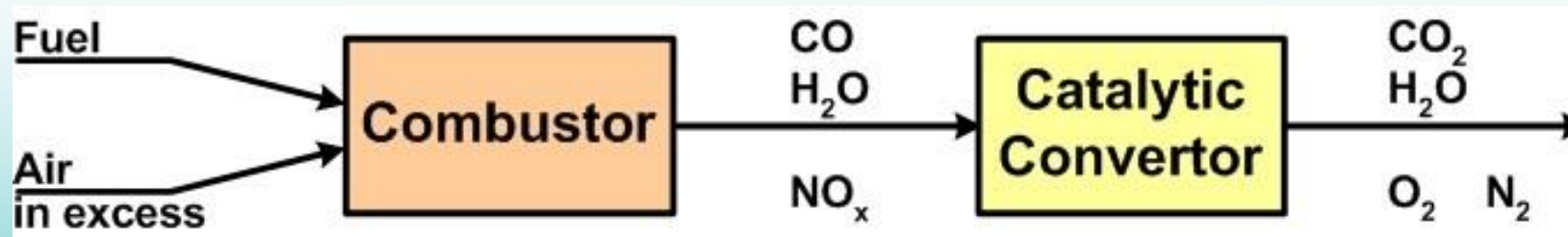
En todos los casos, la fracción molar de Ar y CH_4 en la purga son significativamente mayor que en la alimentación. A medida que **disminuye** la **relación de purga/reciclo**, el efluente de vapor del recipiente flash se vuelve más rico en especies inertes y menos H_2 y N_2 se pierden en la corriente de purga. Sin embargo, esto va acompañado de un importante **aumento** en la **tasa de reciclaje** y el **costo de la recirculación**, así como el volumen de **reactor**. Los costos de capital y operativos deben ser estimados y la rentabilidad debería ser optimizado como un función de la relación purga/reciclo.

Distribución de productos químicos

Heurístico 5: No purgue especies de valor o especies que son tóxicas o peligrosas, aun cuando están en pequeñas concentraciones.

- Agregue separadores para recuperar especies de valor.
- Agregar reactores para eliminar especies tóxicas o peligrosas.

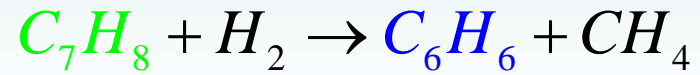
Ejemplo: Convertidor catalítico

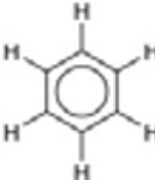
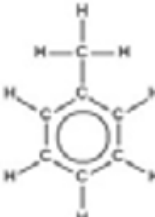
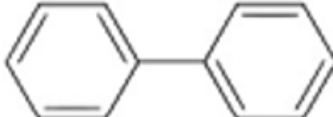


Distribución de productos químicos

Heurístico 6: Los subproductos que son producidos en reacciones reversibles, en pequeñas cantidades, son usualmente no recuperados en separadores o purgados. Generalmente son reciclados para su extinción.

Ejemplo: reacción de producción de difenilo en el proceso de producción de benceno a partir de tolueno.

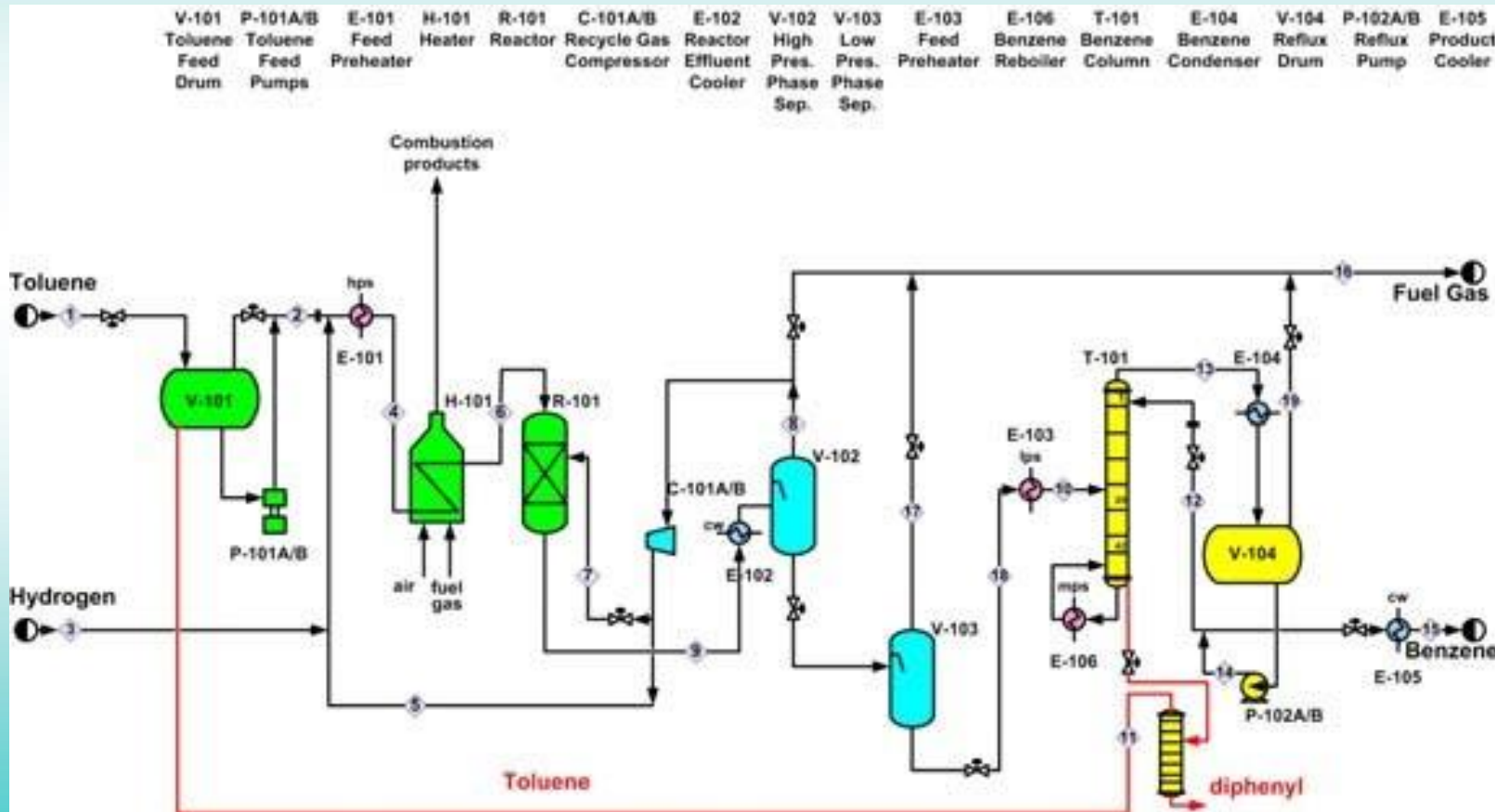


Compound		BP (°C)
Hydrogen	H_2	-253
Methane	CH_4	-164
Benzene		80.1
Toluene		110.6
Diphenyl		256.0

Distribución de productos químicos

Heurístico 6: Los subproductos que son producidos en reacciones reversibles, en pequeñas cantidades, son usualmente no recuperados en separadores o purgados. Generalmente son reciclados para su extinción.

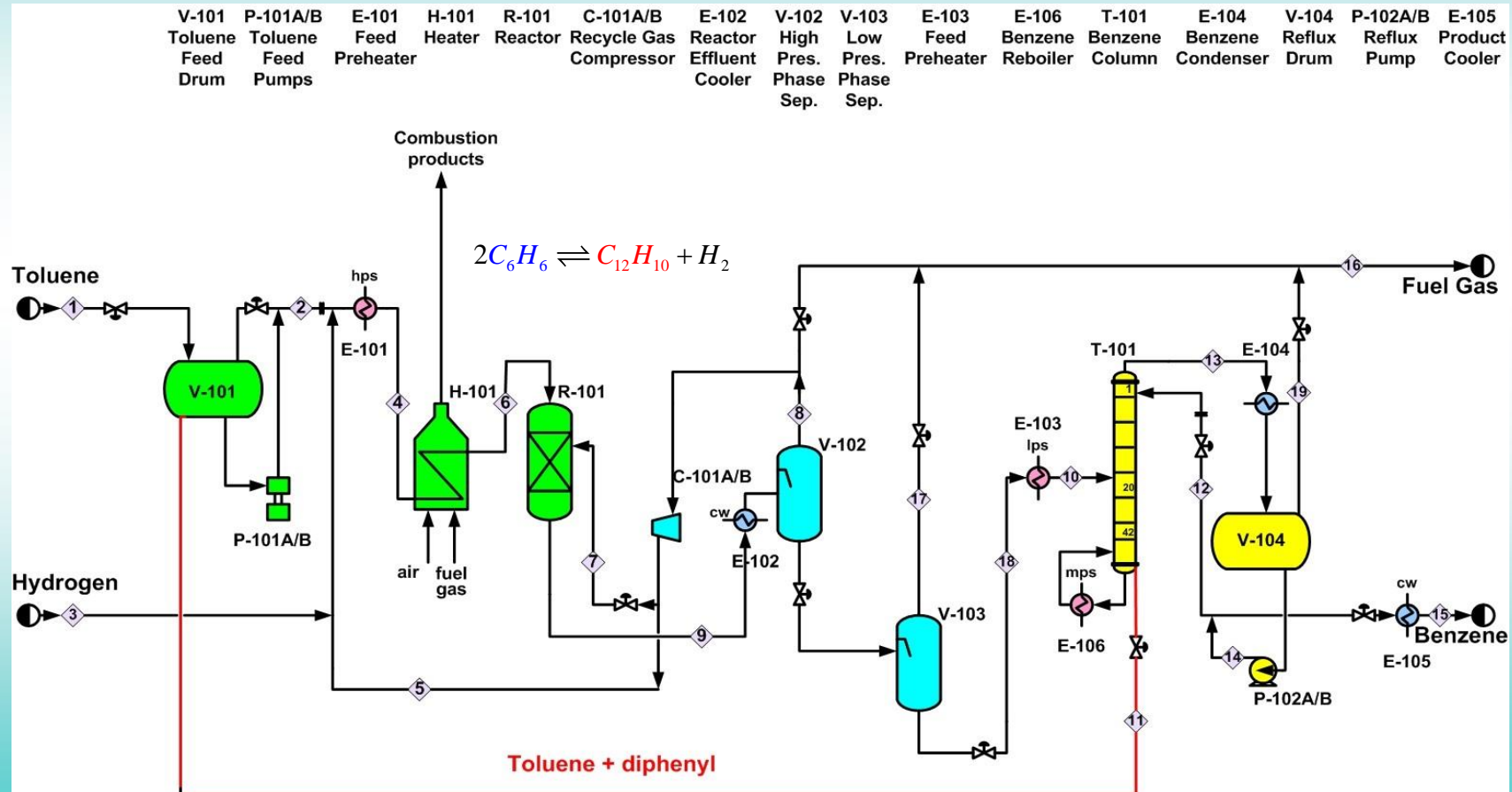
Alternativa 1: Separar difenilo para reciclar tolueno



Distribución de productos químicos

Heurístico 6: Los subproductos que son producidos en reacciones reversibles, en pequeñas cantidades, son usualmente no recuperados en separadores o purgados. Generalmente son reciclados para su extinción.

Con frecuencia se producen pequeñas cantidades de productos químicos en reacciones laterales. Cuando la reacción ocurre de forma irreversible, las cantidades pequeñas de subproductos deben ser purgadas, de otro modo incrementa su cantidad en proceso continuos hasta que el proceso debe ser parado. Para una reacción reversible, es posible lograr una conversión de equilibrio en estado estable reciclando los productos secundarios sin sacarlo del proceso.



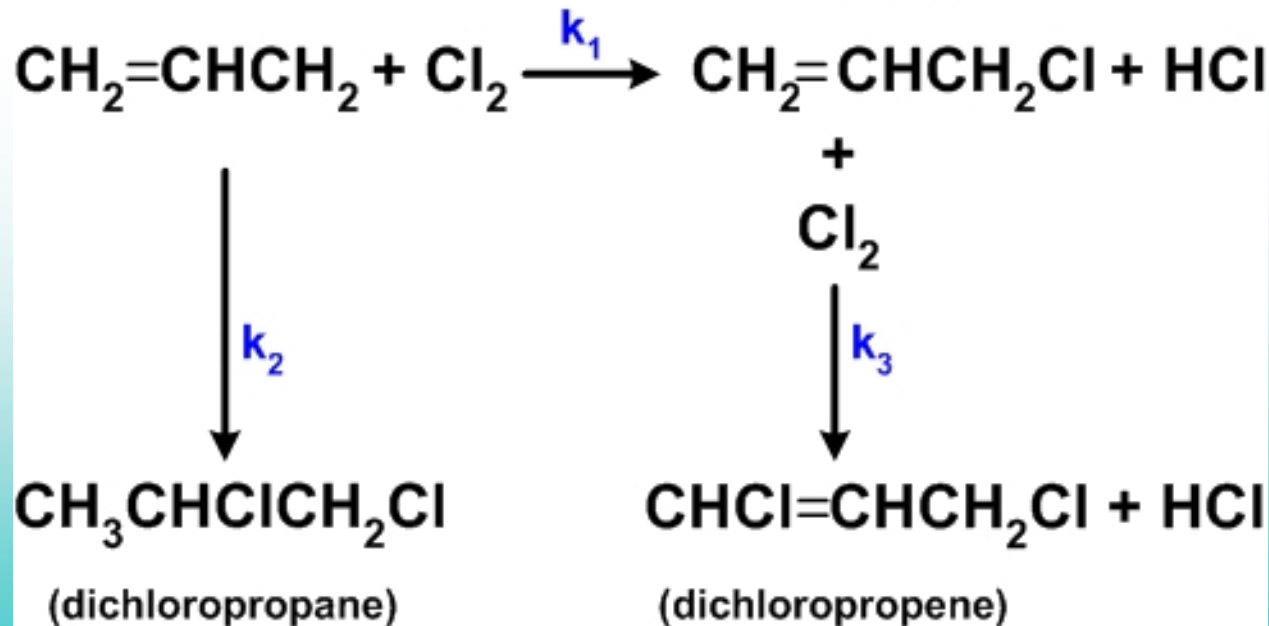
Distribución de componentes químicos

Temperatura de Reacción

Heurístico 7: Para reacciones competitivas en serie o paralelas, ajuste la temperatura, la presión y el catalizador para obtener rendimientos altos de los productos deseados.

En la distribución inicial de productos químicos, suponga que se pueden cumplir estas condiciones: obtenga datos cinéticos y verifique este supuesto antes de desarrollar un diseño de caso base.

Ejemplo: Producción de cloruro de alilo.
(propylene) (allyl chloride)



$$Sac = \frac{v_1 - v_3}{v_2 + v_3}$$

Distribución de componentes químicos

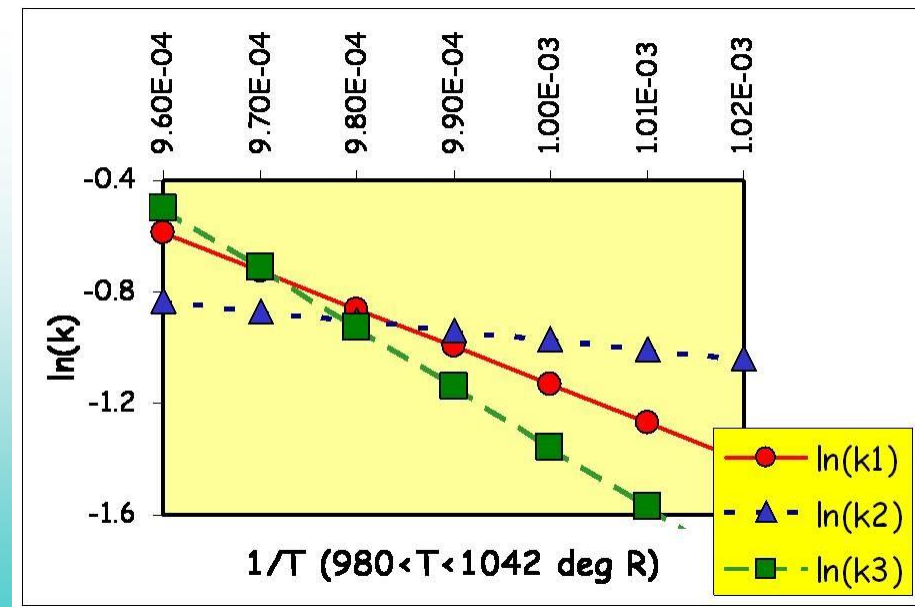
Temperatura de Reacción

Ejemplo: Producción de cloruro de alilo.

Datos de cinética de cloruro de alilo

Reaction	ΔH_R Btu/lbmole	k_o lbmole/(hr ft ³ atm ²)	E/R (°R)
1	-4,800	206,000	13,600
2	-79,200	11.7	3,430
3	-91,800	4.6×10^8	21,300

¿Qué rango de temperaturas de operación favorece la producción de cloruro de alilo?

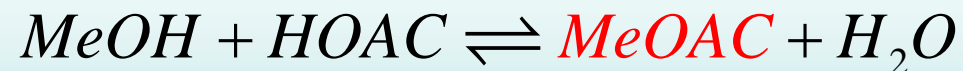


Distribución de componentes químicos

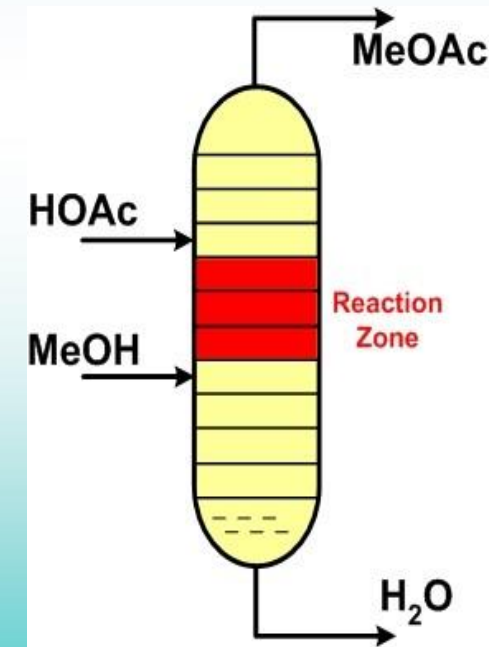
Heurístico 8: Para reversibles reacciones, especialmente, considerar la posibilidad de realizar en un equipo de separación capaz de eliminar los productos y, por lo tanto, conducir las reacciones a la derecha. Este tipo de operación reacción - conduce a muy diferentes distribuciones de productos químicos.

Ejemplo: Producción de acetate de etilo usando destilación reactiva.

Convencionalmente, la reacción es:

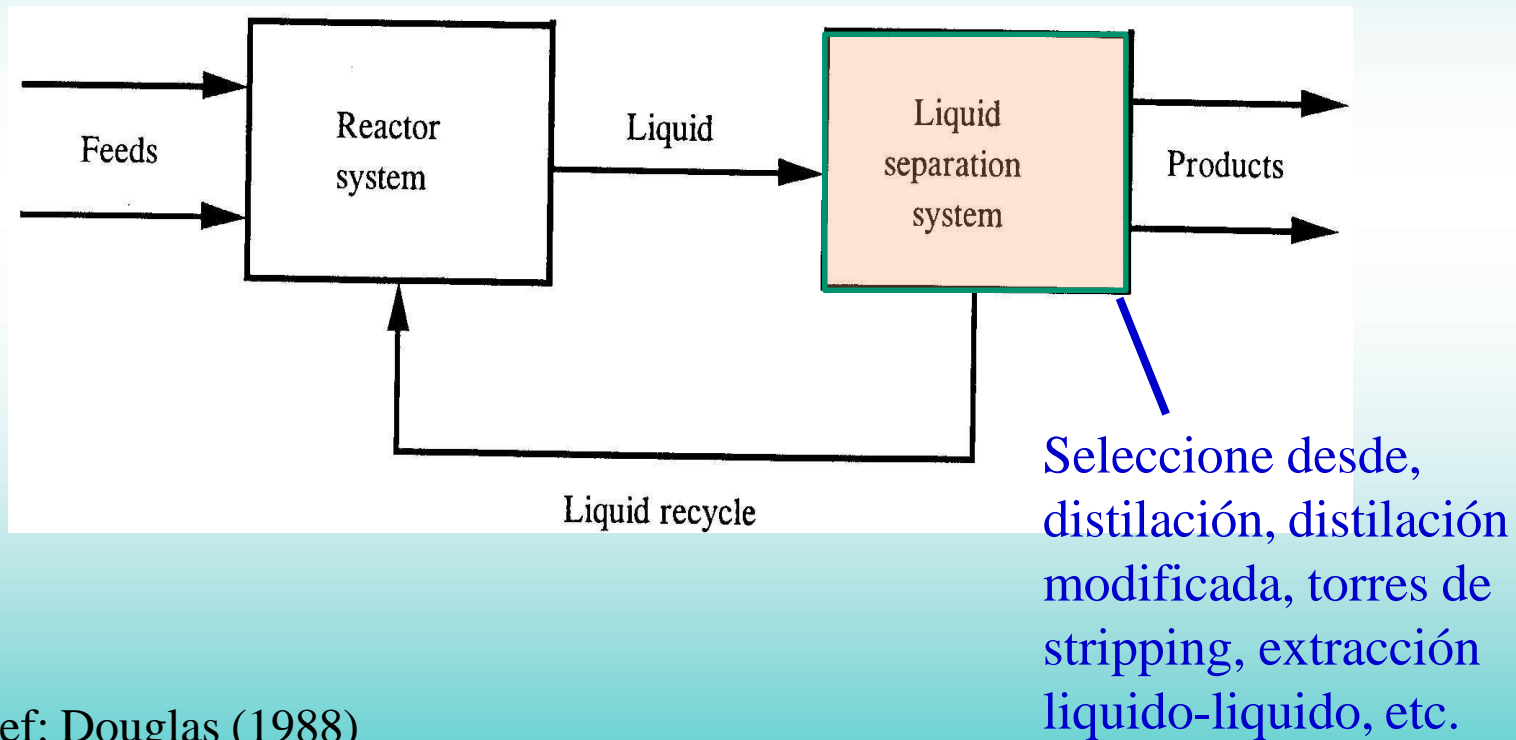


Seguido por separación de productos usando una secuencia de separación en torres.



Separación – Mezclas líquidas

Heurístico 9: Separe mezclas líquidas mediante torres de Destilación y extracción, y extracción líquido-líquido, entre otras operaciones similares, de los componentes sin reaccionar en una fase líquida y reciclar a la etapa de reacción.

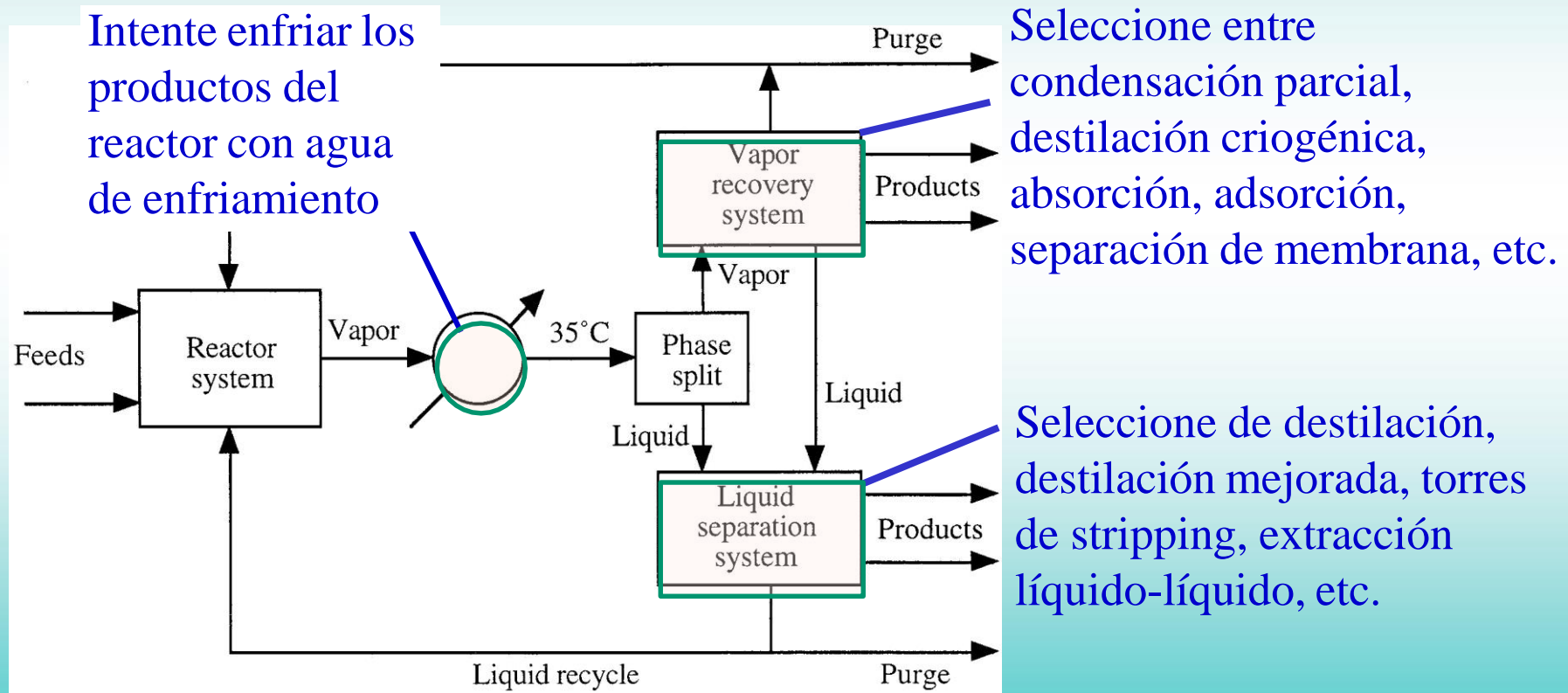


Ref: Douglas (1988)

Separación – Mezclas vapor

Heurístico 10: Intente condensar las mezclas de vapor utilizando agua de enfriamiento (30 °C a 40 °C) o agua de refrigeración. Luego utilice el heurístico 9.

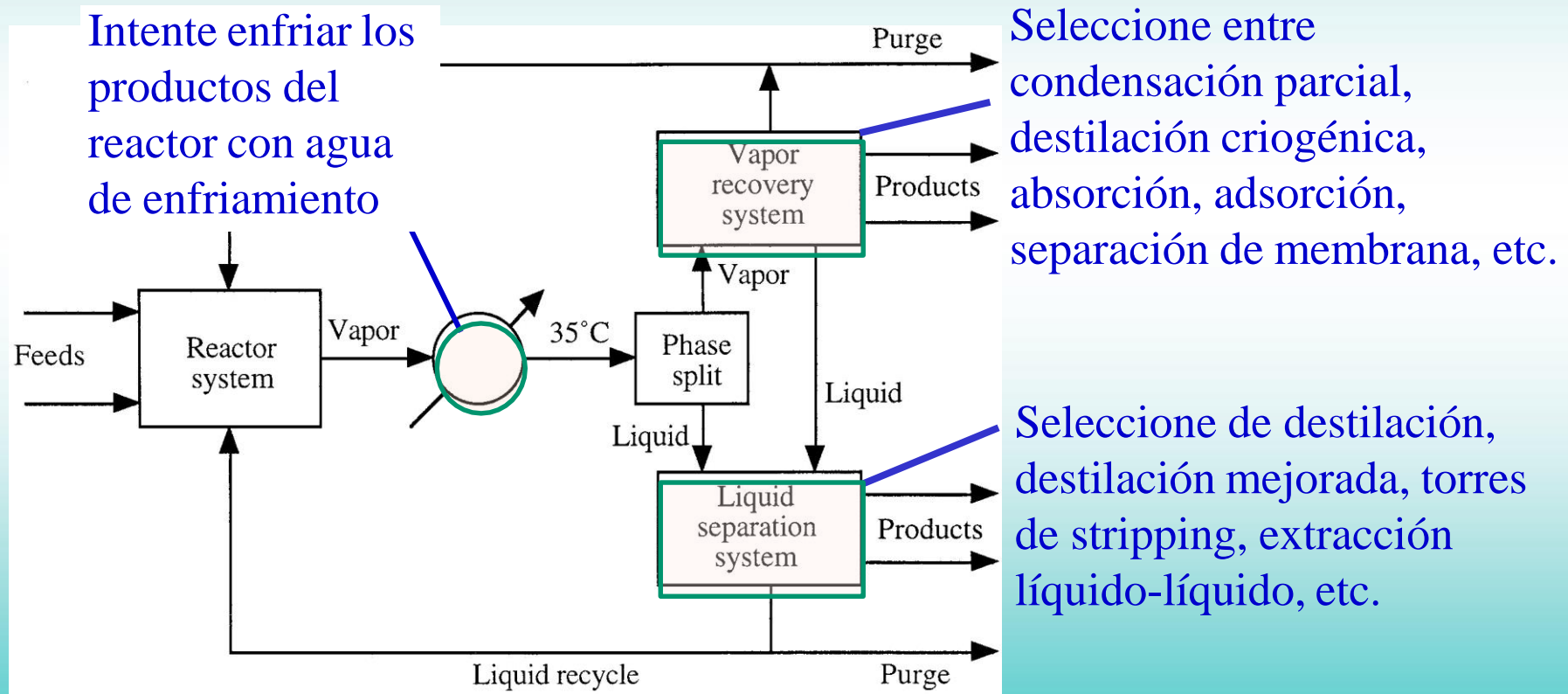
Se agregan purgas de vapor/líquido cuando es necesario para eliminar los inertes que se concentran en el vapor/líquido y no se separan fácilmente.



Ref: Douglas (1988)

Separación – Mezclas vapor

Heurístico 11: Separar mezclas de vapor mediante condensadores parciales, destilación criogénica, torres de absorción, adsorbentes, dispositivos de membrana.



Ref: Douglas (1988)

Operaciones de separación que involucran partículas sólidas

➤ La cristalización se produce en tres modos diferentes:

☞ **La cristalización** en solución se aplica principalmente a productos químicos inorgánicos, que se cristalizan en un disolvente (a menudo agua) con una temperatura de funcionamiento muy por debajo del punto de fusión de los cristales.

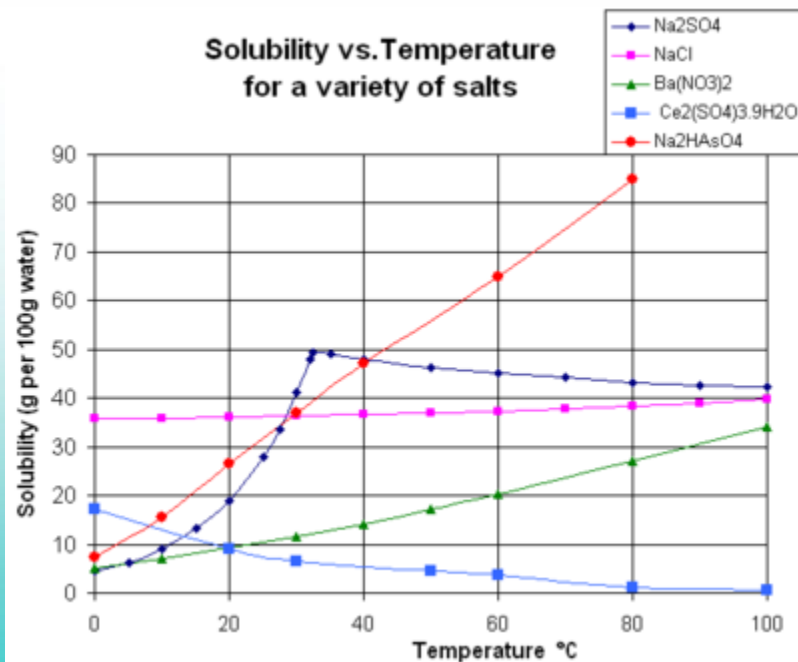
☞ **La precipitación** es una cristalización rápida de una solución que produce una gran cantidad de cristales muy pequeños. Generalmente se refiere al caso en el que un producto de dos soluciones que reaccionan es un sólido de baja solubilidad (por ejemplo, precipitación de cloruro de plata insoluble cuando se mezclan soluciones acuosas de nitrato de plata y cloruro de sodio).

☞ **En la cristalización por fusión**, se separan dos o más productos químicos con puntos de fusión comparables a una temperatura de funcionamiento en los rangos de temperaturas de fusión (por ejemplo, producción de obleas de silicio puro a partir de una masa fundida que consiste en SiO_2).

La cristalización es capaz de producir sustancias químicas muy puras cuando se realiza de acuerdo con las siguientes **heurísticos**:

Operaciones de separación que involucran partículas sólidas

- **Heurístico 12:** Cristalizar productos químicos inorgánicos de una solución acuosa concentrada **enfriándolos** cuando la solubilidad disminuye significativamente al disminuir la temperatura. Mantenga la solución como máximo entre 1 y 2 °F por debajo de la temperatura de saturación en la concentración predominante. Utilice la cristalización por **evaporación**, en lugar de enfriamiento, cuando la solubilidad no cambia significativamente con la temperatura

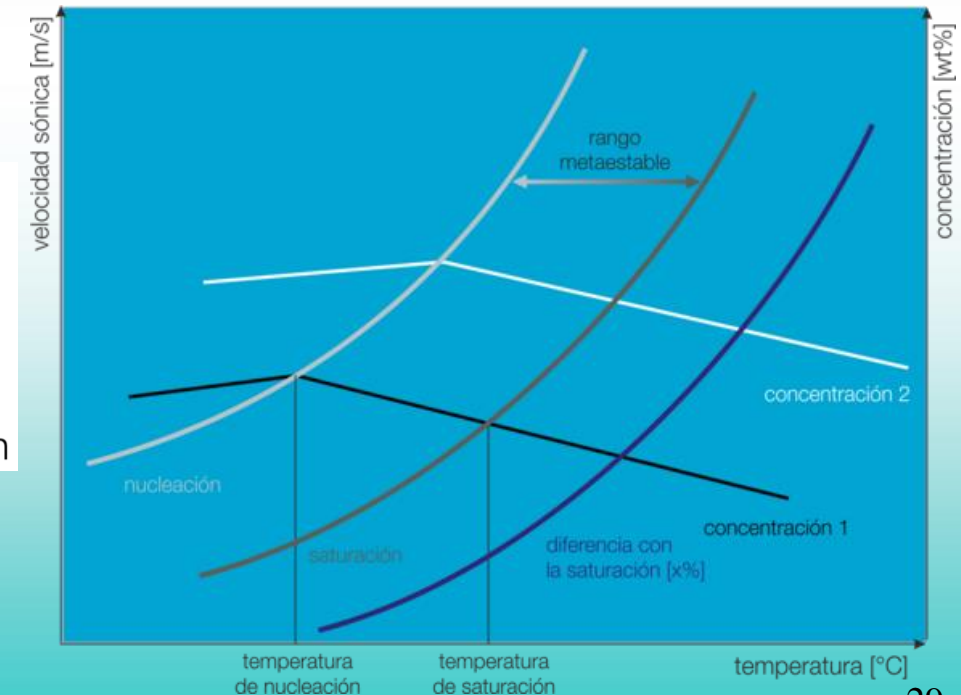


$$S = \frac{C_{\text{tot}} - C_{\text{sat}}}{C_{\text{tot}}}$$

S = saturación

C_{tot} = concentración total

C_{sat} = concentración de saturación



Operaciones de separación que involucran partículas sólidas

- **Heurístico 13:** La **tasa de crecimiento de los cristales** son aproximadamente las mismas en todas las direcciones, pero los cristales nunca son esferas. Las tasas y tamaños de crecimiento de los cristales se controlan limitando el **grado de sobresaturación**.
 $S = C/C_{\text{saturación}}$, donde C es la concentración, generalmente en el rango $1,02 < S < 1,05$. Las tasas de crecimiento están muy influidas por la presencia de impurezas y de ciertos aditivos específicos que varían de un caso a otro.

$$S = \frac{C_{\text{tot}} - C_{\text{sat}}}{C_{\text{tot}}}$$

S = saturación

C_{tot} = concentración total

C_{sat} = concentración de saturación

Operaciones de separación que involucran partículas sólidas

- **Heurístico 14:** Separar los productos químicos orgánicos mediante **crystalización en estado fundido** con enfriamiento, utilizando **crystalización en suspensión**, seguida de la eliminación de cristales mediante sedimentación, filtración o centrifugación. Alternativamente, utilice la **crystalización en capas** sobre una superficie enfriada, raspando o derritiendo para eliminar los cristales. Si la masa fundida forma una solución sólida en lugar de un eutéctico, utilice pasos repetidos de fusión y congelación, llamados **crystalización fraccionada en masa fundida**, o fusión por zonas para obtener productos cristalinos casi puros. Antes de la **crystalización**, es común emplear la evaporación para concentrar una solución, particularmente una solución acuosa de químicos inorgánicos. Debido al costo relativamente alto de evaporar agua con su gran calor de evaporación, los siguientes heurísticos son útiles para minimizar el costo.

Operaciones de separación que involucran partículas sólidas

- **Heurístico 15:** Utilizar **evaporadores** (llamados de **efectos**) en serie, se recupera y reutiliza el calor latente de evaporación del agua. Con un solo evaporador, **la relación entre la cantidad de agua evaporada y la cantidad de vapor externo suministrado para la evaporación** puede ser de **0,8**. Para dos efectos, la relación pasa a ser **1,6**; para tres efectos **2,4**, y así sucesivamente. La magnitud de elevación del punto de ebullición causada por los compuestos inorgánicos disueltos es un factor de control en la selección del número óptimo de efectos. La elevación está en el rango de 3 a 10°F entre los puntos de ebullición de la solución y el agua pura. Cuando el aumento del punto de ebullición es pequeño, se obtiene un coste mínimo de evaporación con 8 a 10 efectos. Cuando el aumento del punto de ebullición es apreciable, el número óptimo de efectos es pequeño, 6 o menos. Si es necesario, aumente las presiones de vapor entre etapas con compresores mecánicos o de chorro de vapor.

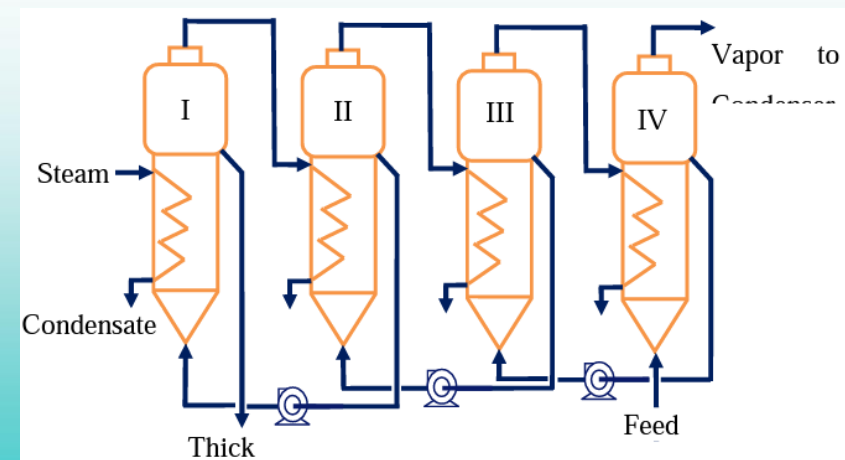
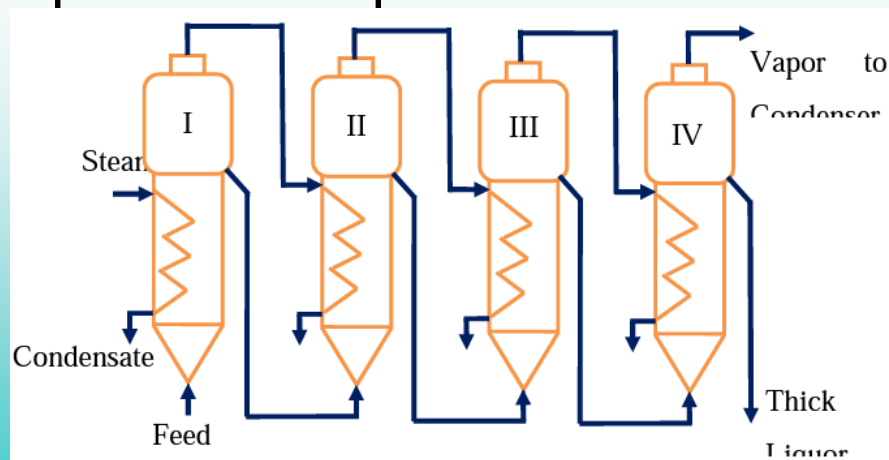
Operaciones de separación que involucran partículas sólidas

- **Heurístico 16:** Cuando se emplean efectos múltiples, los flujos de líquido y vapor pueden estar en la misma o en diferentes direcciones.

Utilice **alimentación directa**, donde tanto el líquido como el vapor fluyen en la misma dirección, para una pequeña cantidad de efectos, particularmente cuando la alimentación líquida está caliente.

Utilice **alimentación hacia atrás**, donde el líquido fluye en dirección opuesta a los flujos de vapor, para alimentaciones en frío y/o una gran cantidad de efectos.

Con alimentación directa, las bombas de líquido intermedias no son necesarias, mientras que sí lo son para alimentación inversa.



Operaciones de separación que involucran partículas sólidas

- **Heurístico 16:** ...

La cristalización de la solución produce una suspensión de cristales y licor madre, que se separa parcialmente mediante filtración o centrifugación en una torta húmeda y un licor madre.

- La filtración a través de un medio filtrante de tela porosa o metal puede realizarse por gravedad, vacío o presión.
- La centrifugación puede utilizar un recipiente sólido o un recipiente poroso con un medio filtrante.

Los factores importantes en la selección del equipo incluyen:

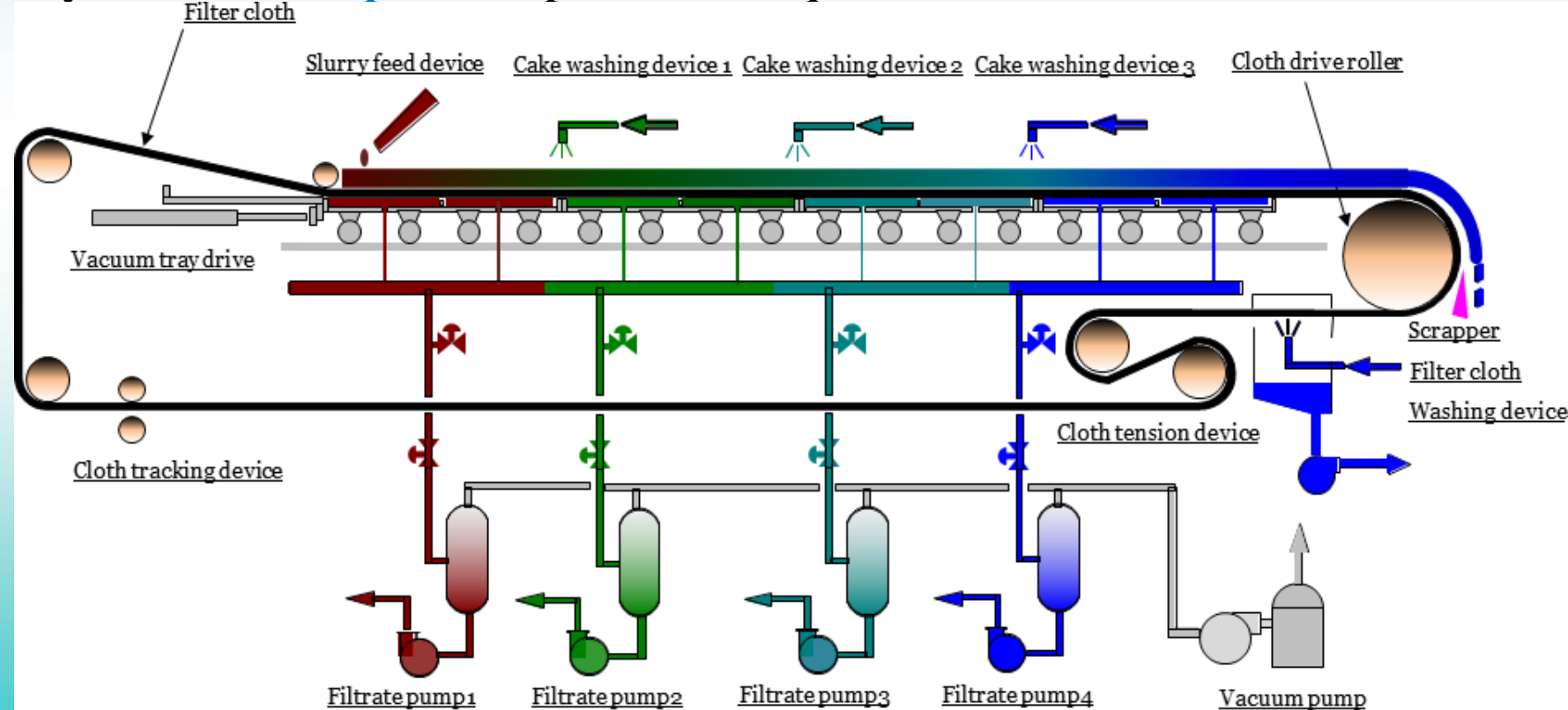
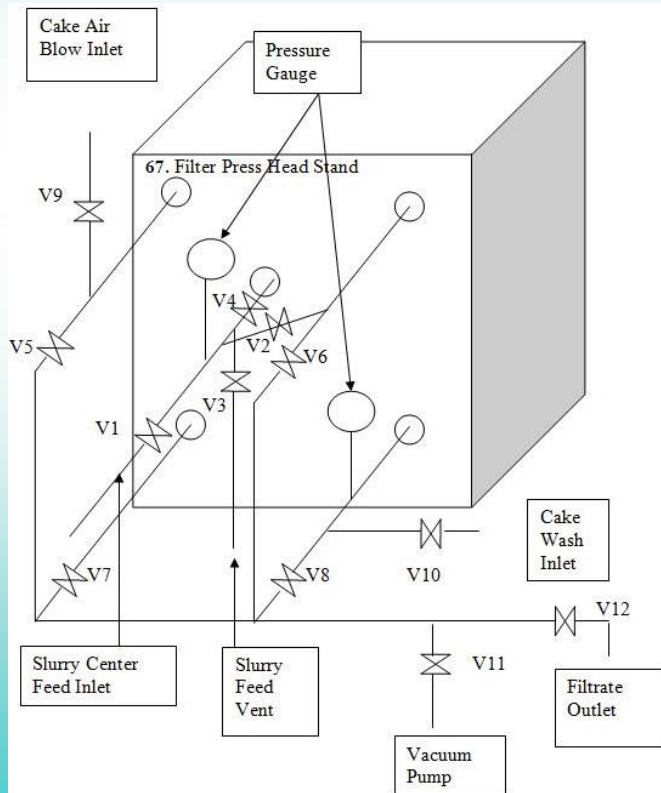
1) Contenido de humedad de la torta, (2) contenido de sólidos del licor madre, (3) fragilidad de los cristales, (4) tamaño de las partículas de cristal, (5) necesidad de lavar los cristales para reemplazar el licor madre con agua pura, y (6) tasa de filtración.

La mejor manera de determinar la tasa de filtración es midiendo el espesor de la tasa de acumulación de la torta usando una prueba de filtro de hojas al vacío de laboratorio a pequeña escala con los siguientes criterios: Rápido, 0,1 a 10 **cm/s** ; Medio, 0,1 a 10 **cm/min**; Lento, de **0,1 a 10 cm/h**.

Operaciones de separación que involucran partículas sólidas

- **Heurístico 17:**

Cuando los cristales son frágiles, se requiere un lavado efectivo y se desea un licor madre claro, use **filtración por gravedad con bandeja horizontal de alimentación superior** para lodos que se filtran a un ritmo rápido; **filtración de tambor rotatorio al vacío** para lodos que se filtran a un ritmo moderado; y **filtración a presión** para lodos que se filtran a un ritmo lento.



Operaciones de separación que involucran partículas sólidas

- Heurístico 17:....

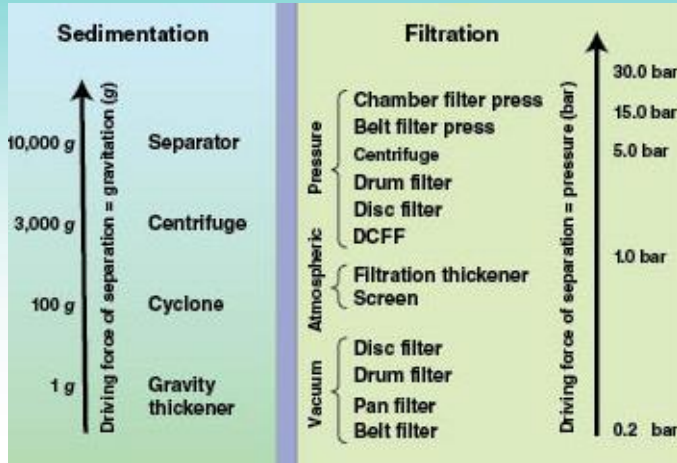


TABLE 1. G-FORCES GENERATED BY VARIOUS TYPES OF CENTRIFUGES ($\times g$, m^2/s)

Single-chamber bowl centrifuge	600 – 1,200
Decanter centrifuge	2,000–5,000
Multichamber bowl centrifuge	5,000–9,000
Disk stack centrifuge	5,000–15,000
Laboratory bottle centrifuge	2,000–20,000
Tubular centrifuge	12,000–62,000
Ultracentrifuge	20,000–1,000,000

TABLE 2. SIGMA FACTORS FOR VARIOUS COMMERCIAL CENTRIFUGES

Batch solid bowl centrifuge	20 – 200 m^2
Decanter centrifuge	150 – 2,500 m^2
Tubular centrifuge	2,000 – 3,000 m^2
Disk stack centrifuge	400 – 120,000 m^2

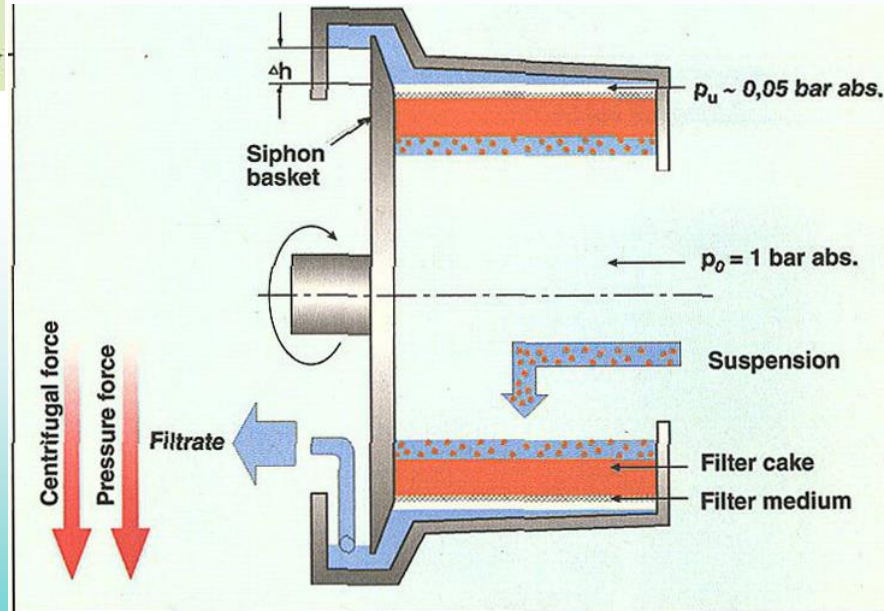
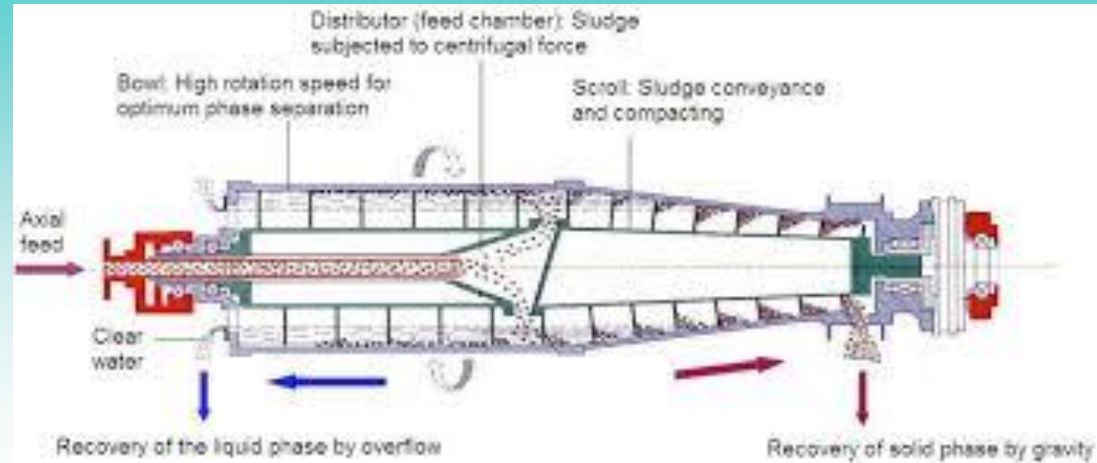
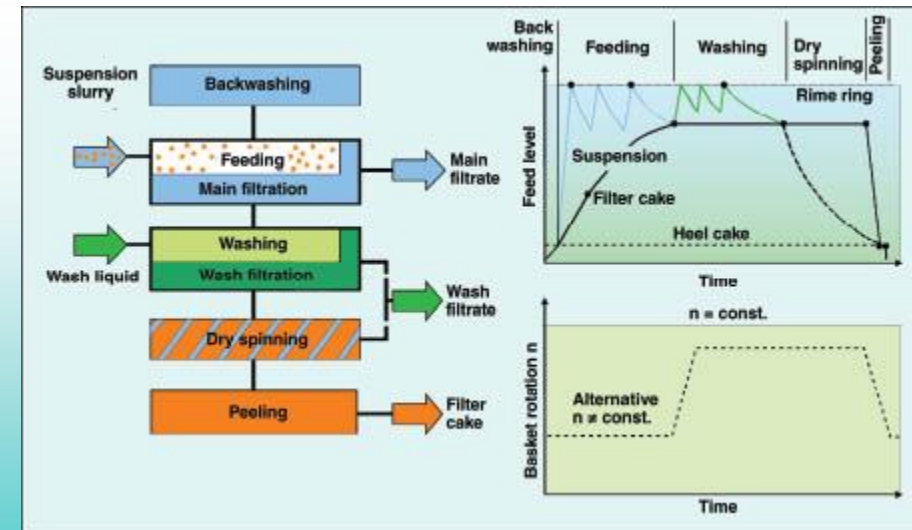


FIGURE 4. A horizontal peeler centrifuge with siphon basket backwashes the heel while adding pressure for higher filtration efficiency



Operaciones de separación que involucran partículas sólidas

- **Heurístico 18:**

Cuando se requieren tortas con bajo contenido de humedad, utilice **centrifugación en recipiente sólido** si se permiten sólidos en las aguas madre, y **filtración centrífuga** si se requiere un lavado eficaz.

Las tortas húmedas de las operaciones de filtración o centrifugación se envían a secadores para eliminar la humedad restante.

Se ha desarrollado una gran cantidad de tipos diferentes de secadores comerciales para manejar los diferentes tipos de alimentación, que incluyen no solo tortas húmedas, sino también pastas, películas, lodos y líquidos.

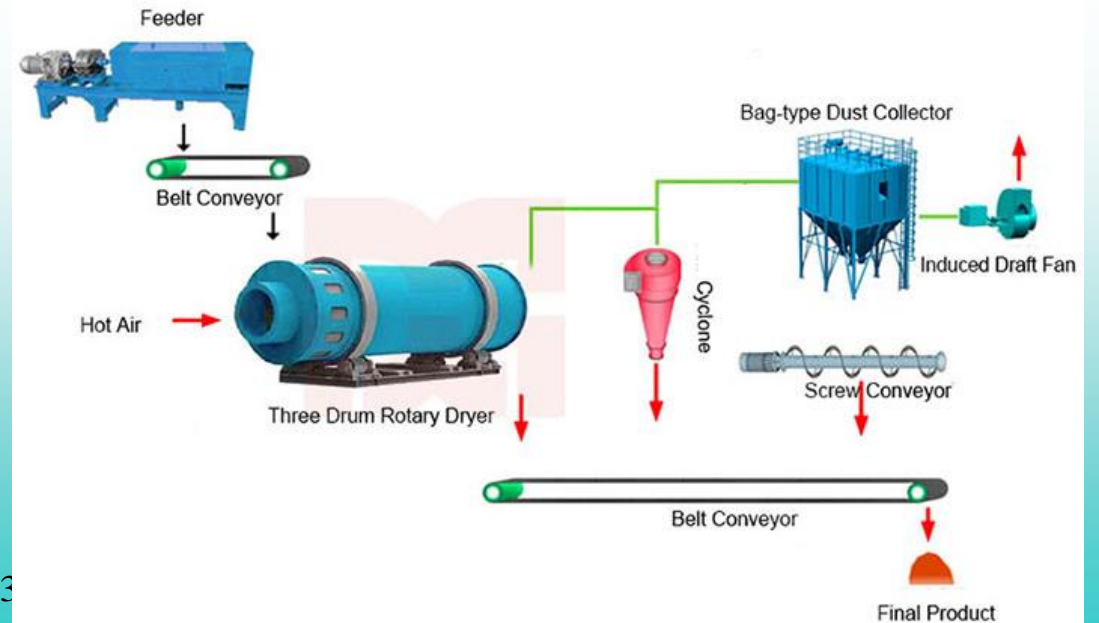
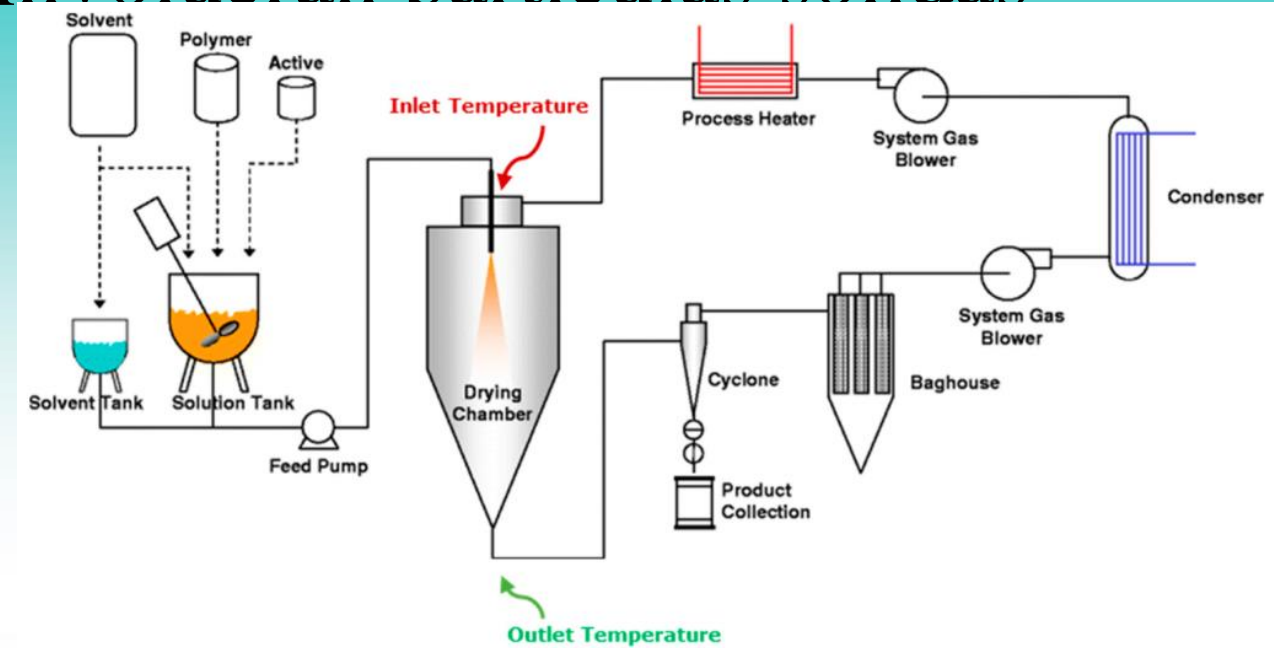
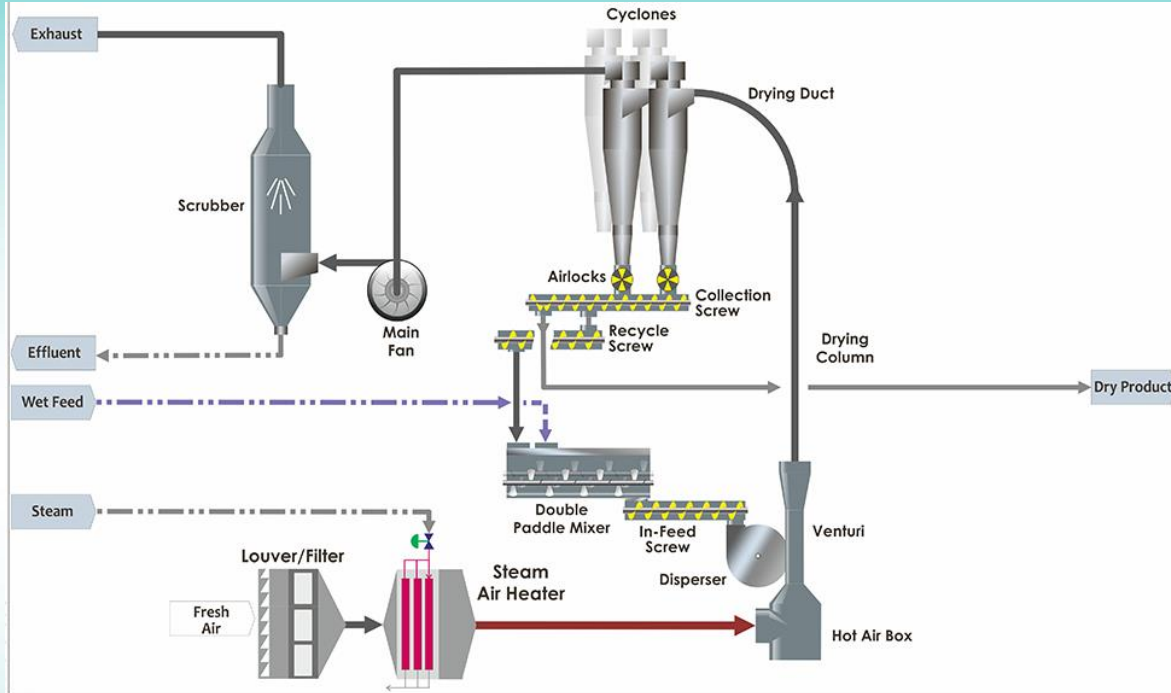
El calor para el secado puede suministrarse a partir de un gas caliente en contacto directo con el alimento húmedo o puede suministrarse indirectamente a través de una pared.

Dependiendo del espesor de la alimentación y del grado de agitación, los tiempos de secado pueden variar desde segundos hasta horas.

Las siguientes heurísticas son útiles para realizar una selección preliminar de equipos de secado.

Operaciones de separación que involucran partículas sólidas

- **Heurístico 18:**...



Operaciones de separación que involucran partículas sólidas

- **Heurístico 19:**

Para material granular, fluido o no, de granulometría de 3 a 15 mm, utilizar **secadores continuos de bandeja y campana** con calor directo.

Para sólidos granulares de flujo libre que no son sensibles al calor, use un **secador cilíndrico giratorio inclinado**, donde el calor puede ser suministrado directamente desde un gas caliente o indirectamente desde tubos que transportan vapor, que corren a lo largo del secador y están ubicados en una o dos anillos concéntricos y ubicados justo dentro de la carcasa giratoria de la secadora

Para partículas pequeñas que fluyen libremente de 1 a 3 mm de diámetro, cuando sea posible un secado rápido, utilice un **secador de transporte neumático** con calor directo.

Para partículas muy pequeñas que fluyen libremente y de menos de 1 mm de diámetro, utilice un secador de **lecho fluidizado** con calor directo.

Operaciones de separación que involucran partículas sólidas

- **Heurístico 20:**

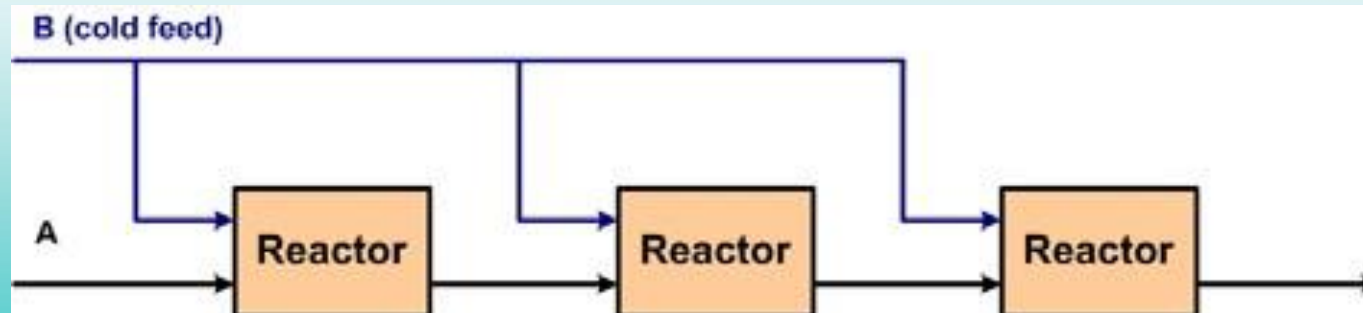
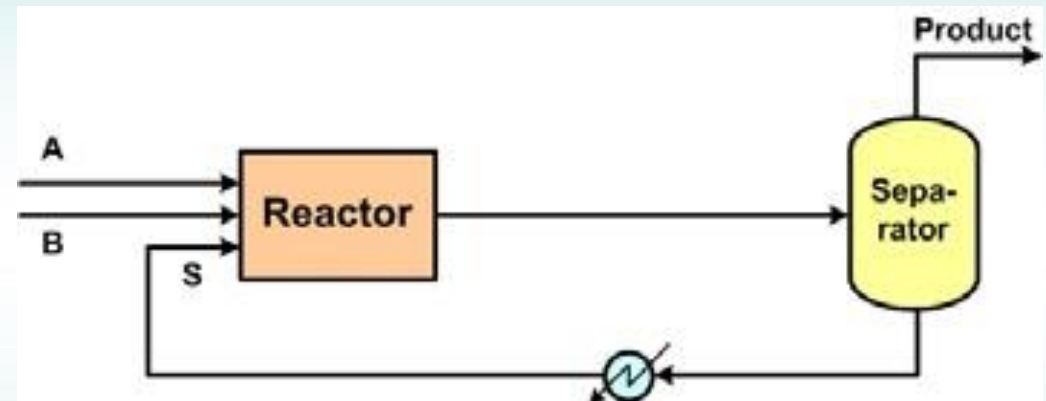
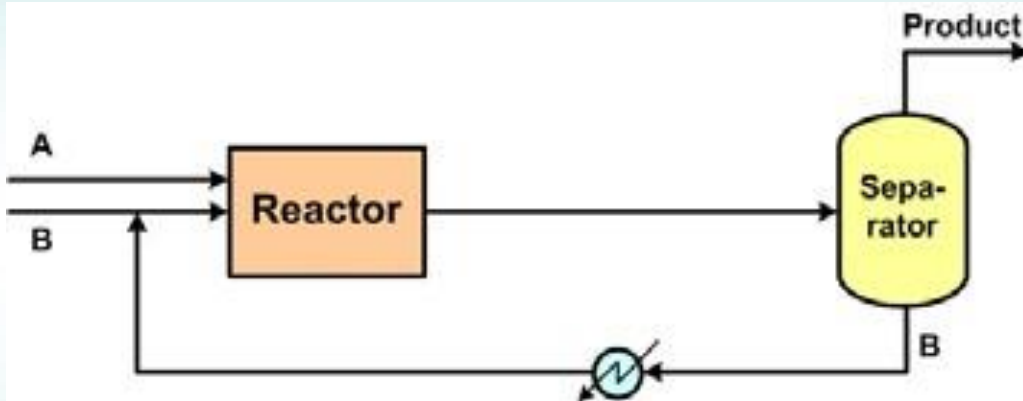
Para pastas y lodos de sólidos finos, utilice un **secador de tambor** con calor indirecto.

Para una suspensión líquida o bombeable, use un **secador por aspersion** con calor directo.

Transferencia de calor en reactores

- **Heurístico 21:**

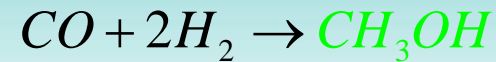
Para eliminar un calor de reacción altamente exotérmico, considere el uso de **un exceso de reactivo, un diluyente inerte y inyecciones frías**. Estos afectan la distribución de sustancias químicas y debe insertarse temprano en la síntesis del proceso..



Transferencia de calor en reactores

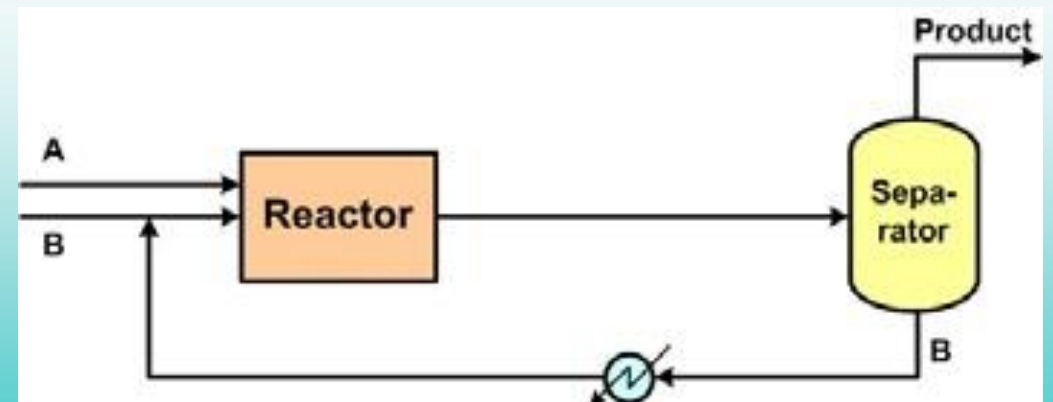
- **Heurístico 21:** Ejemplo exceso de reactivo

Considere la reacción del monóxido de carbono y el hidrógeno para formar metanol:



Con los reactivos alimentados en cantidades estequiométricas a 25 °C y 1 atm la temperatura de reacción adiabática (reacción completa, la presión de la corriente de producto de metanol regresa a 1 atm) será de 1158 °C, que es demasiado alta para los reactivos basados en catalizador de Cu y los materiales de construcción en la mayoría de los reactores. Por lo tanto, una cuestión clave en el proceso de síntesis del metanol y en procesos similares que implican reacciones altamente exotérmicas es cómo reducir la temperatura del producto.

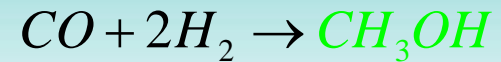
Ahora supongamos que se especifica un exceso de H₂ de modo que la relación molar de H₂/CO sea arbitrariamente 10, entonces, con una conversión completa de CO, la temperatura del efluente se reducirá a 337 °C.



Transferencia de calor en reactores

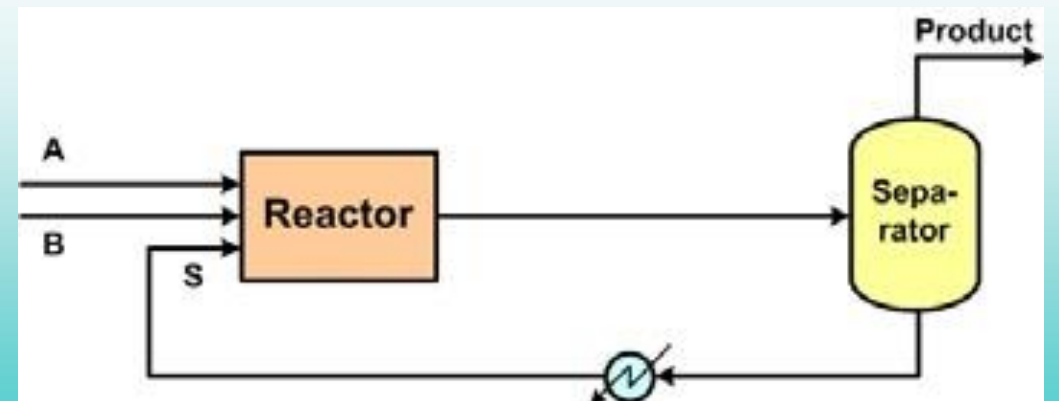
- **Heurístico 21:** Ejemplo exceso de reactivo

Considere la reacción del monóxido de carbono y el hidrógeno para formar metanol:



Con los reactivos alimentados en cantidades estequiométricas a 25 °C y 1 atm la temperatura de reacción adiabática (reacción completa, la presión de la corriente de producto de metanol regresa a 1 atm) será de 1158 °C, que es demasiado alta para los reactivos basados en catalizador de Cu y los materiales de construcción en la mayoría de los reactores. Por lo tanto, una cuestión clave en el proceso de síntesis del metanol y en procesos similares que implican reacciones altamente exotérmicas es cómo reducir la temperatura del producto.

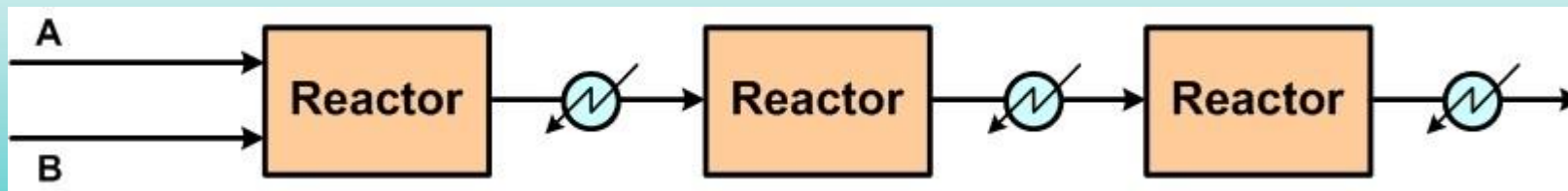
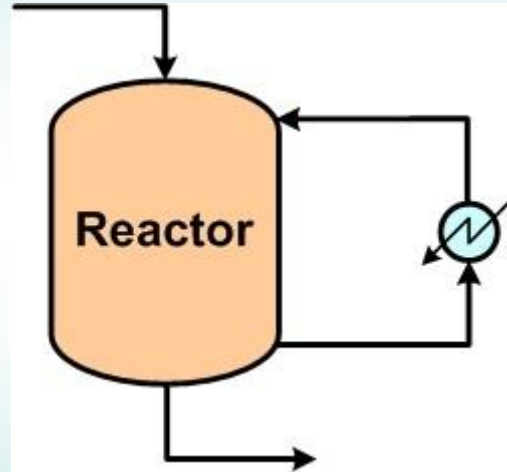
Ahora supongamos que se agregan 5 lbmol/h de dodecano a la alimentación del reactor (CO: H₂ = 1:2), luego, con una conversión completa de CO, la temperatura del efluente se reducirá a 77,6 °C.



Transferencia de calor en reactores

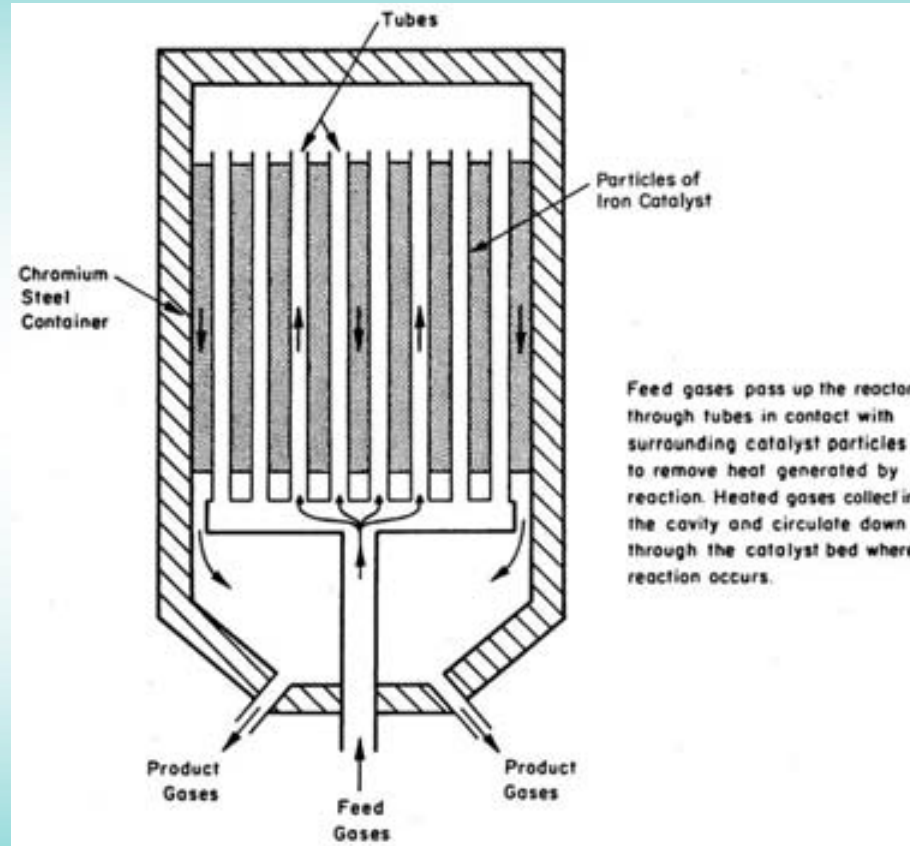
- **Heurístico 22:**

Para calores de reacción menos exotérmicos, haga circular el fluido del reactor a un enfriador externo o utilice un recipiente con camisa o serpentines de enfriamiento. Considere también el uso de intercoolers.



Transferencia de calor en reactores

- **Heurístico 22:** Ejemplo diseño de TVA para convertidores de síntesis de NH_3



Performance del reactor

Conversión por paso (x_p): en general se define en función del reactivo limitante.

$$x_p = \frac{\text{Reactivo consumido en el } reactor}{\text{Reactivo alimentado al } reactor}$$

Conversión Global (x_g): en general se define en función del reactivo limitante para el proceso.

$$x_g = \frac{\text{Reactivo consumido en el proceso}}{\text{Reactivo alimentado al proceso}}$$

Selectividad (v): se define en términos del producto deseado y no deseado.

$$v = \frac{\text{Velocidad de producción de producto deseado}}{\text{Velocidad de productos no deseados bi-productos}}$$

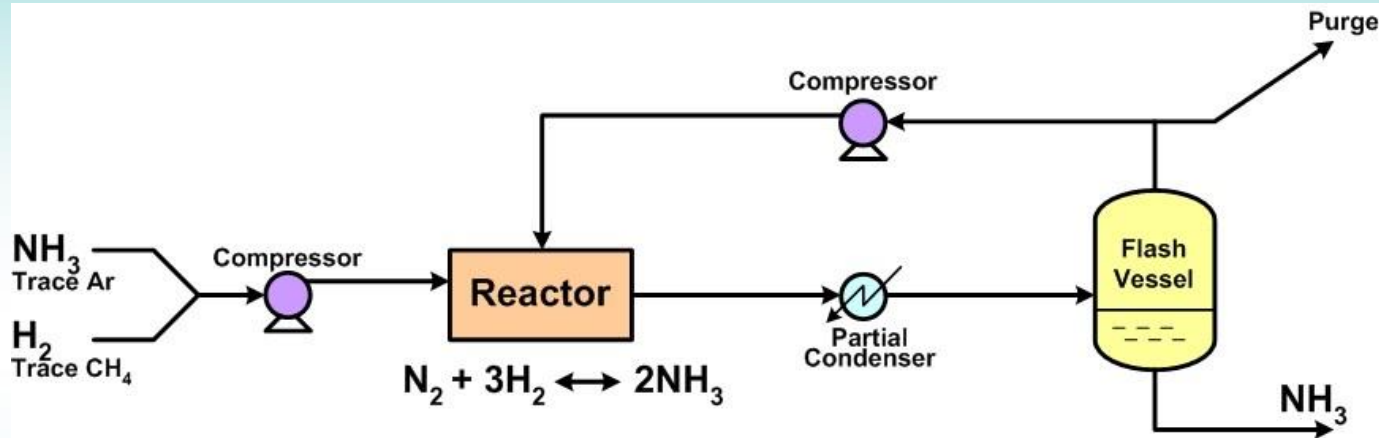
Rendimiento (η): se define en términos del producto deseado.

$$\eta = \frac{\text{Moles de reactivo para producir el producto deseado}}{\text{Moles de reactivo limitante reaccionado}}$$

Performance del reactor

$$x_p = \frac{\text{Reactivo consumido en el reactor}}{\text{Reactivo alimentado al reactor}}$$

$$x_g = \frac{\text{Reactivo consumido en el proceso}}{\text{Reactivo alimentado al proceso}}$$



$$x_p = \frac{N_{1H} + N_{3H} - N_{2H}}{N_{1H} + N_{3H}}$$

$$x_g = \frac{N_{1H} - N_{PH} - N_{AH}}{N_{1H}}$$

$$x_p = \frac{-\alpha_H X}{N_{1H} + N_{3H}}$$

$$N_{1Ar} - N_{PAr} - N_{AAr} = 0$$

$$N_{1M} - N_{PM} - N_{AM} = 0$$

Condiciones de proceso

Hay dos generalizaciones que ayudan en el análisis y comprensión de la selección de las condiciones de proceso.

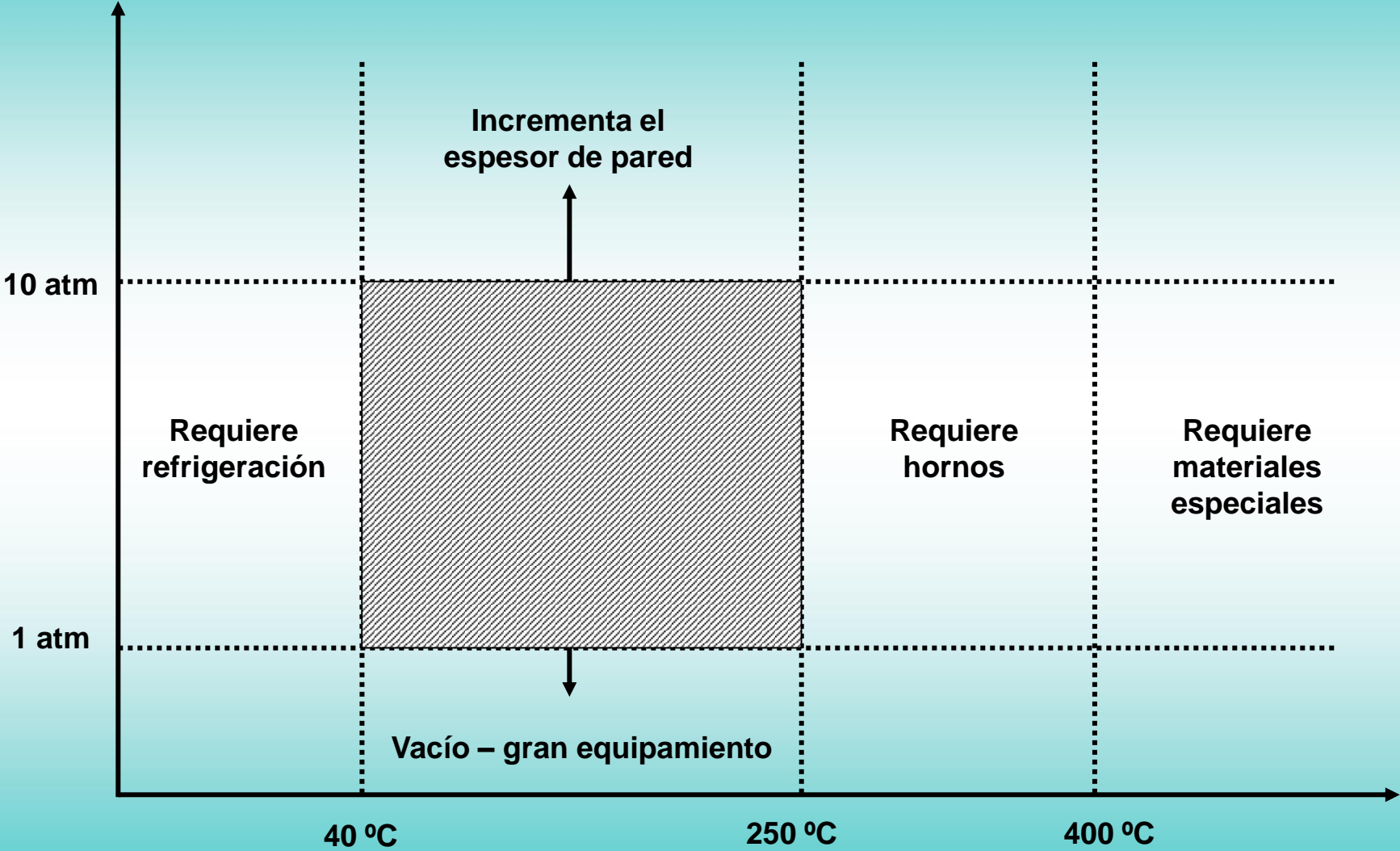
Es generalmente más fácil ajustar la **temperatura y / o la presión** de una corriente que cambiar la **composición**.

En realidad, muchas veces, la concentración de un compuesto en una corriente (para un gas) es una **variable dependiente** y se controla mediante la temperatura y la presión de la corriente.

Variables a analizar para equipos de proceso.

- Presión.
- Temperatura
- Relaciones no estequiométricas
 - Excesos
 - Inertes
 - Impurezas
- Cambio en condiciones en equipos
 - Aumento de presión
 - Diferencia de temperatura

Condiciones de operación



Condiciones de proceso

- En general, las presiones entre 1 y 10 bar y las temperaturas entre 40 °C y 250 °C no causan dificultades en el procesamiento.
- Una decisión de operar fuera del rango de presiones de 1 a 10 bar debe ser justificada.
- Presión > 10 bar requiere mayor espesor, lo que implica mayor costo.
- Presión < 1 bar, requiere equipos más grandes, técnicas especiales de construcción y mayor costo

Condiciones de proceso

- Las decisiones que deben ser justificadas:
 - La operación fuera del rango de 1 a 10 bar
 - La operación por encima de 400 °C
 - La operación fuera del rango de 40 - 250 °C, estos necesitan medios especiales de calefacción /enfriamiento.
- $T > 400$ °C: justificación, alta temperatura, materiales costosos.
- Limitantes de temperatura:
 - vapor de alta presión (40-50 bar, 250-260 °C).
 - Agua de enfriamiento (30 – 40 °C).

Una decisión de operar por fuera del rango de 40 °C a 260 °C, requieren medios especiales de calentamiento o enfriamiento, se debe justificar

Condiciones de proceso extremas

Criterios de justificación

- **Favorecer conversión de equilibrio**
- **Aumentar velocidad de reacción**
- **Mantener una fase gaseosa**
- **Mejorar la selectividad**

Altas temperaturas

Justificación y consecuencias

Condición de la corriente	Justificación	Penalidad
Alta temperatura > 250 °C	Reactores <ol style="list-style-type: none">1. Favorece la conversión de equilibrio para reacción endotérmica.2. Incrementar la velocidad de reacción.3. Mantener una fase gaseosa.4. Mejorar la selectividad.	<ol style="list-style-type: none">1. Uso de calentadores especiales.2. T>400 °C requiere materiales especiales de construcción.
	Separadores <ol style="list-style-type: none">1. Obtener una fase gaseosa para equilibrio líquido vapor.	

Bajas temperaturas

Justificación y consecuencias

Condición de la corriente	Justificación	Penalidad
Alta temperatura < 40 °C	Reactores <ol style="list-style-type: none"> 1. Favorece la conversión de equilibrio para reacción exotérmica. 2. Materiales sensibles a la temperatura. 3. Mejorar la selectividad. 4. Mantener un fase líquida 	<ol style="list-style-type: none"> 1. Uso de refrigerantes costosos. 2. Requiere materiales especiales de construcción para bajas temperaturas.
	Separadores <ol style="list-style-type: none"> 1. Obtener una fase líquida para equilibrio líquido-vapor o líquido-líquido. 2. Obtener una fase sólida para cristalización. 3. Materiales sensibles a la temperatura. 	

Altas temperaturas Justificación y consecuencias

Condición de la corriente	Justificación	Penalidad
Presión alta > 10 bar	Reactores <ol style="list-style-type: none">1. Favorece la conversión de equilibrio.2. Incrementar la velocidad de reacción en fase gaseosa (debido a la alta concentración).3. Mantener un fase líquida	<ol style="list-style-type: none">1. Requiere equipos con paredes gruesas.2. Requiere compresores costosos si el gas debe ser comprimido, temperaturas aumentan.
	Separadores <ol style="list-style-type: none">1. Obtener una fase líquida para equilibrio líquido-vapor o líquido-líquido.2. Obtener una fase sólida para cristalización.3. Materiales sensibles a la temperatura.	

Altas Presiones Justificación y consecuencias

Condición de la corriente	Justificación	Penalidad
Presión alta > 10 bar	Reactores <ol style="list-style-type: none">1. Favorece la conversión de equilibrio.2. Incrementar la velocidad de reacción en fase gaseosa (debido a la alta concentración).3. Mantener un fase líquida	<ol style="list-style-type: none">1. Requiere equipos con paredes gruesas.2. Requiere compresores costosos si el gas debe ser comprimido. temperaturas..
	Separadores <ol style="list-style-type: none">1. Obtener una fase líquida para equilibrio líquido-vapor o líquido-líquido.2. Obtener una fase sólida para cristalización.3. Materiales sensibles a la temperatura.	

Bajas presiones Justificación y consecuencias

Condición de la corriente	Justificación	Penalidad
Presión alta < 1 bar	Reactores <ol style="list-style-type: none">1. Favorece la conversión de equilibrio.2. Mantener un fase gaseosa.	<ol style="list-style-type: none">1. Requiere equipos grandes.2. Diseño especial para operar al vacío.3. Escape de aire en equipos puede ser peligroso y costoso de prevenir.
	Separadores <ol style="list-style-type: none">1. Obtener una fase gaseosa requerida para equilibrio líquido-vapor.2. Materiales sensibles a la temperatura.	

Relaciones no estequiométricas

Justificación y consecuencias

Condición de la corriente	Justificación	Penalidad
Material inerte en alimentación del reactor	<ol style="list-style-type: none">1. Actúa como un diluyente para controlar la velocidad de reacción y/o asegurar que la mezcla reaccionante éste fuera de límites explosivos.2. Inhibir reacciones no deseadas.	<ol style="list-style-type: none">1. Causa que el reactor y equipos corriente abajo sean grandes.2. Requiere equipos de separación para remover el material inerte.3. Puede causar reacciones laterales (el material no es tan inerte).4. Disminuye la conversión de equilibrio.

Relaciones no estequiométricas Justificación y consecuencias

Condición de la corriente	Justificación	Penalidad
Exceso de reactivo	<ol style="list-style-type: none">1. Incrementa la conversión de equilibrio del reactivo limitante.2. Inhibir reacciones no deseadas.	<ol style="list-style-type: none">1. Requiere equipos de separación para remover el exceso de reactivo.2. Requiere reciclo.3. Costos adicionales de alimentación (debido a pérdidas en la separación y/o no reciclo).
Producto presente en alimentación al reactor	<ol style="list-style-type: none">1. El producto no es fácil de separar del material recirculado.2. El producto recirculado retarda la formación de subproductos no deseados formados de reacciones laterales.	<ol style="list-style-type: none">1. Causa que el reactor y equipos corriente abajo sean grandes.2. Requiere lazos de reciclo grandes.3. Disminuye la conversión de equilibrio.

Cambio en las condiciones de proceso. Justificación y consecuencias

Tipo de equipo	Cambio en la condición de corriente	Justificación o remedio	Consecuencia de utilizar el equipo de esa forma.
Compresores	$P_{out}/P_{in} > 3$	Remedio: Utilizar múltiples etapas e interenfriadores.	Requerimiento alto de trabajo teórico debido al gran aumento de temperatura de gas
	Alta temperatura de gas de entrada	Remedio: Enfriar el gas antes de la compresión.	Requerimiento alto de trabajo teórico y materiales especiales de construcción.
Intercambiadores de calor	$\Delta T_{ml} > 100\text{ }^{\circ}\text{C}$	Remedio: Mejorar la integración de calor en el proceso.	Grandes diferencias de temperatura significa que se está desaprovechando energía útil de alta temperatura.
		Justificación: La integración no es posible o no rentable.	

Cambio en las condiciones de proceso

Justificación y consecuencias

Tipo de equipo	Cambio en la condición de corriente	Justificación o remedio	Consecuencia de utilizar el equipo de esa forma.
Calentadores	Tout < Tint	Remedio: Usar vapor de alta presión para calentar la corriente.	Los calentadores de proceso son caros e innecesarios si el calentamiento se puede completar usando un servicio disponible.
		Justificación: se hace necesario calentar durante el arranque.	
Válvulas	Grandes Δp a través de la válvula	Remedio: Para corriente de gas instalar una turbina para recuperar trabajo perdido.	Desaprovechamiento de energía debido a la estrangulación.
		Justificación: <ol style="list-style-type: none"> Válvula para propósito de control. Instalar la turbina no es rentable. El líquido está siendo estrangulado. 	

Cambio en las condiciones de proceso

Justificación y consecuencias

Tipo de equipo	Cambio en la condición de corriente	Justificación o remedio	Consecuencia de utilizar el equipo de esa forma.
Mezcladores	Corrientes de gran diferencia de temperatura	Remedio: Llevar cerca las temperaturas de las corrientes usando integración de calor.	Gasto de energía de alta temperatura.
	Corrientes de gran diferencia de composiciones	Justificación: 1. Extinción de productos de reacción. 2. Proporciona la fuerza motriz para la transferencia de masa.	Causa equipos de separación adicional y costos.

Compresión de N₂ (ejemplo)

Se requiere proporcionar una corriente de nitrógeno a **80 °C y 6 bar**. La fuente del nitrógeno está a 200 °C y 1.2 bar.

Determine el trabajo y los requerimientos de enfriamiento para tres alternativas.

- A. Comprimir en una sola etapa y enfriar el gas comprimido.
- B. Enfriar el gas alimentado a 80 °C y luego repetir la parte **A**.
- C. Repetir la parte B, sólo que usando dos etapas de compresión con un interenfriador.
- D. Identificar cualquier condición de especial interés que ocurra.

Compresión de N2 (ejemplo)

El nitrógeno se puede tratar como un gas ideal diatómico, para este ejemplo, usando una base de 1 Kmol de nitrógeno y asumiendo que la eficiencia, ε , **de cada etapa de** compresión es 70%.

Para el gas ideal diatómico:

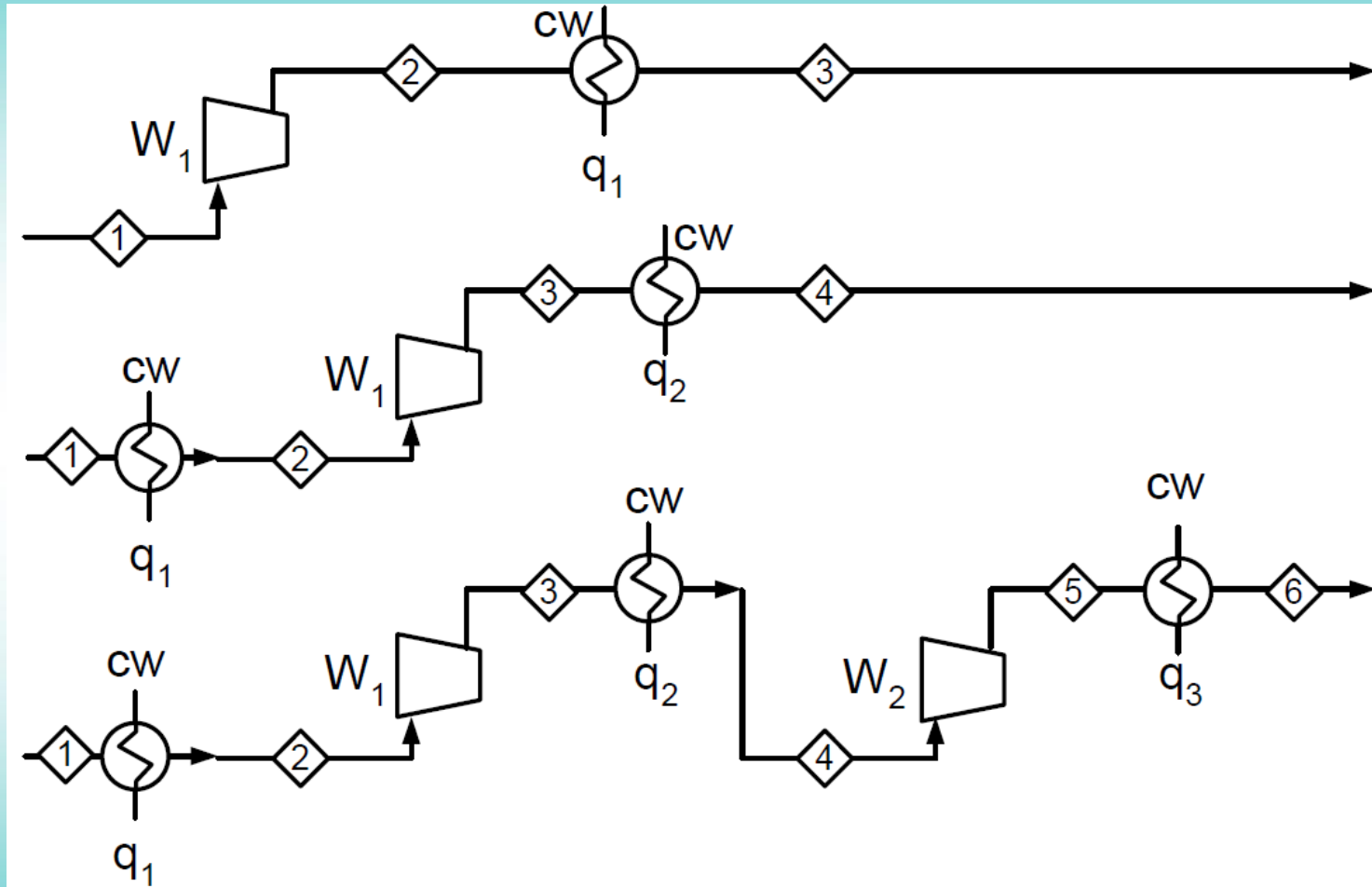
$$C_p = 3.5R, C_v = 2.5R, \gamma = C_p/C_v = 1.4$$

$$R = 8.314 \text{ kJ/kmol K}, \varepsilon = \mathbf{70\%}$$

Ecuaciones:

$$q = C_p \Delta T, w = RT_{in} \gamma / (\gamma - 1) [(P_{out}/P_{in})^{(\gamma-1)/\gamma} - 1] / \varepsilon,$$
$$T_{out} = T_{in} \left(1 + \frac{1}{\varepsilon} [(P_{out}/P_{in})^{(\gamma-1)/\gamma} - 1] \right)$$

Compresión de N2 (ejemplo)



Compresión de N2 (ejemplo)

No Corriente Figura E4.2	Sistema A		Sistema B		Sistema C	
	T (°C)	P (bar)	T (°C)	P (bar)	T (°C)	P (bar)
1	200	1.2	200	1.2	200	1.2
2	595	6.0	80	1.2	80	1.2
3	80	6.0	374	6.0	210	2.68
4	-	-	80	6.0	80	2.68
5	-	-	-	-	210	6.0
6	-	-	-	-	80	6.0

Compresión de N₂ (ejemplo)

Trabajo kJ/kmol	Sistema A	Sistema B	Sistema C
w_1	11470	8560	3780
w_2	-	-	3780
w_{Total}	11470	8560	7560
Calor: kJ/kmol			
q_1	14970	3490	3490
q_2	-	8550	3780
q_3	-	-	3780
w_{Total}	14970	12040	11050

Compresión de N2 (ejemplo)

El ejemplo 4.2 muestra tres alternativas de diferente complejidad para conseguir las condiciones finales. La cantidad de trabajo (w) y servicios de enfriamiento (q) que se requiere para cada alternativa se calcularon. Basado solamente en la complejidad del proceso, la Alternativa A es la más deseable. Sin embargo, esta alternativa tiene muchos inconvenientes. La Alternativa A tiene:

1. Alta demanda de servicio de electricidad y costos.
2. Alta demanda de servicios de enfriamiento y costos.
3. $T > 400 \text{ }^\circ\text{C}$
4. Excede la relación de presión

La Alternativa B es más compleja que la Alternativa A debido a que esta requiere un intercambiador adicional, pero evade la condición 3 para la Alternativa A. el resultado del intercambiador extra es una disminución significativa en servicios sobre la Alternativa A. Como resultado podría preferirse la Alternativa A.

La Alternativa C requiere una etapa de compresión adicional y un enfriador antes del segundo compresor que no se usa en la Alternativa B. sin embargo, la Alternativa C resulta en ahorros adicionales en utilidades sobre la Alternativa B.

El análisis cualitativo dado, sugiere que las Alternativas B y C son superiores a la Alternativa A. Esta conclusión es consistente con los heurísticos para compresores.

Matriz de condiciones

Equipo	Reactores y separadores Tablas 4.1 - 4.3					Otros equipos Tabla 4.4				
	Alta Temp	Baja Temp	Alta Pres	Baja Pres	Alimento no Estq	Comp	Interc	Calent	Válv	Mezcl
R-101	X		X		X					
V-101										
V-102			X							
V-103										
V-104										
T-101										
H-101										
E-101							X			
E-102							X			
E-103										
E-104										
E-105										
E-106										
C-101										
P-101										
P-102										
PCV corriente 8									X	
PCV de V-101 a V103									X	

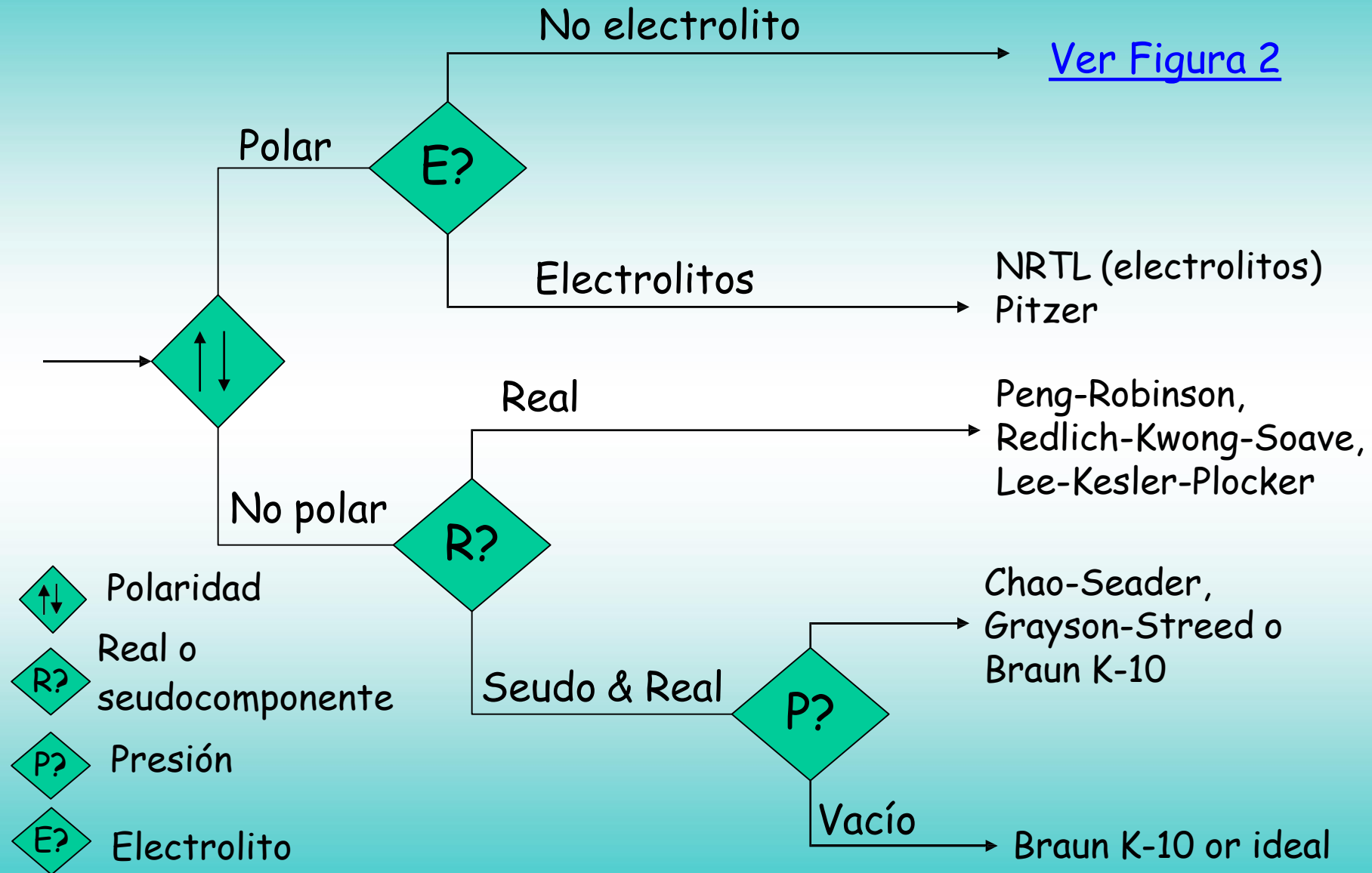
Fisicoquímica

¿Cómo elegir el **paquete de predicción** de propiedades más adecuado para simulación?

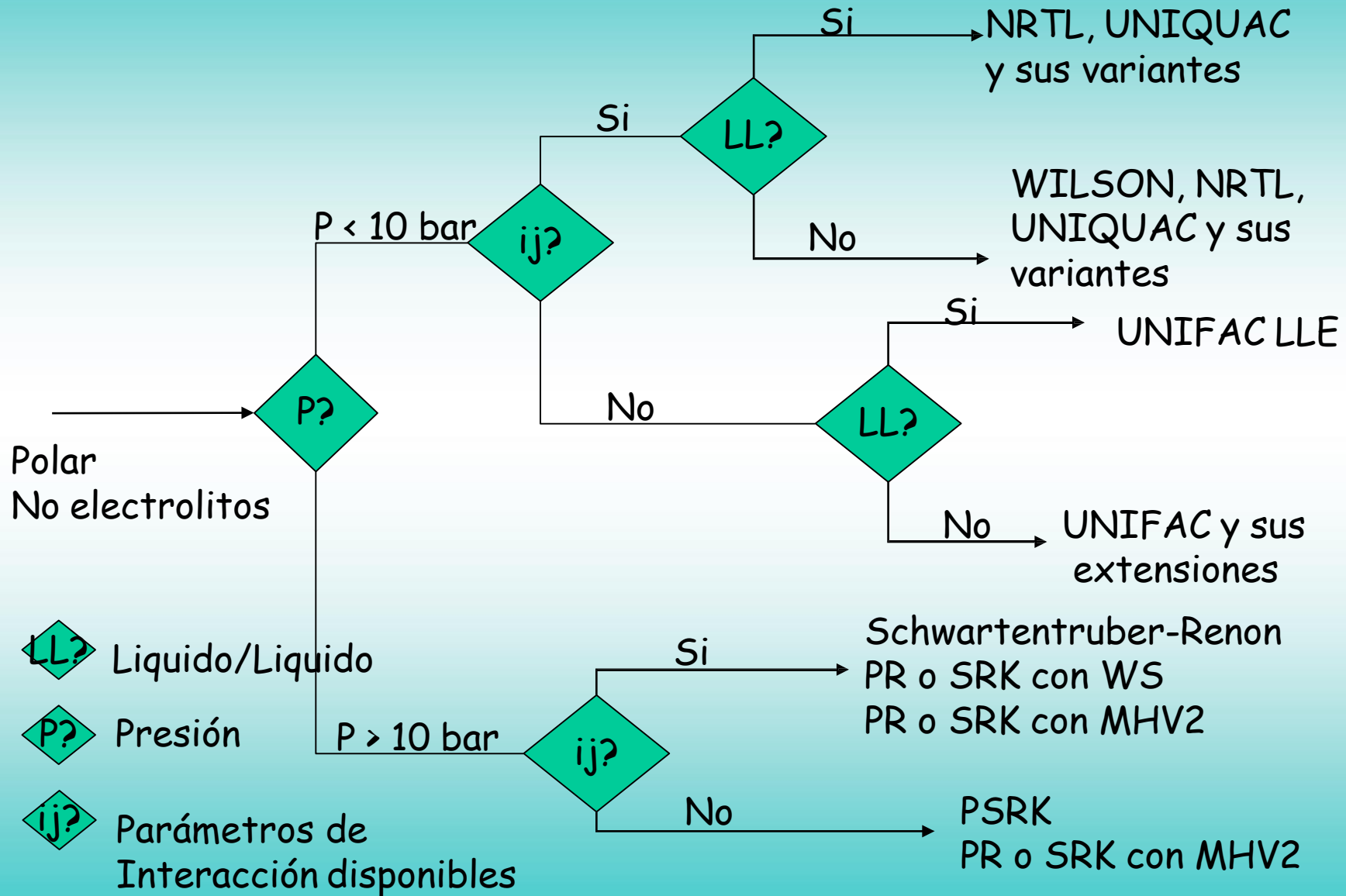
Hay que tener en cuenta:

- Naturaleza de la mezcla (por ejemplo, hidrocarburos, polares, electrolitos, etc.)
- Rango de temperatura y presión de trabajo.
- Disponibilidad de datos.

Recomendaciones de Eric Carlson (Figura 1)



Recomendaciones de Eric Carlson (Figura 2)



El objetivo es llevar a cabo un diseño de proceso.

Síntesis de procesos químicos

“Síntesis de procesos es la etapa durante el diseño, donde el ing. Químico selecciona las partes componentes y las interconexiones entre esas partes para crear el flowsheet”.

“La presentación esta basada en Seider et al.”

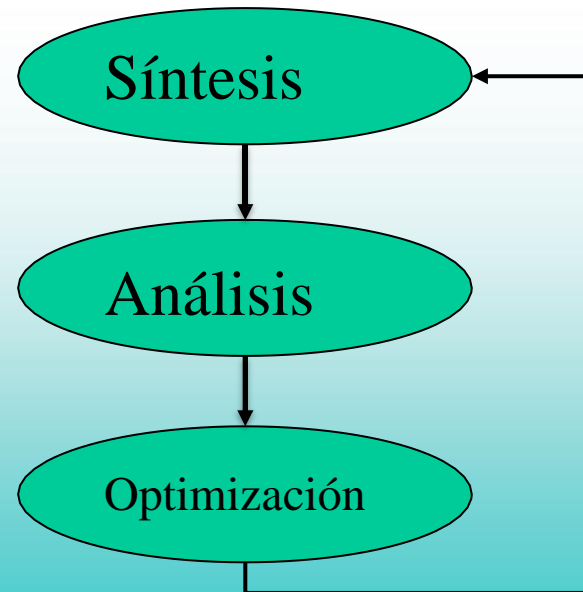
El objetivo es llevar a cabo un diseño de proceso.

A menudo, los problemas de diseño resultan de las exploraciones de químicos, bioquímicos e ingenieros en laboratorios de investigación para satisfacer los deseos de los clientes de obtener productos químicos con propiedades mejoradas para muchas aplicaciones. Sin embargo, varios productos conocidos, como el teflón, fueron descubiertos por accidente.

Introducción la síntesis de procesos

El problema de síntesis de un proceso químico se caracteriza por:

- Número grande de alternativas
- Altamente combinatorio
- Su objetivo: Descubrir la mejores alternativas sin una búsqueda exhaustiva.
- Proceso iterativo, que recorre el lazo: Síntesis-Análisis-optimización



Análisis vs. Síntesis

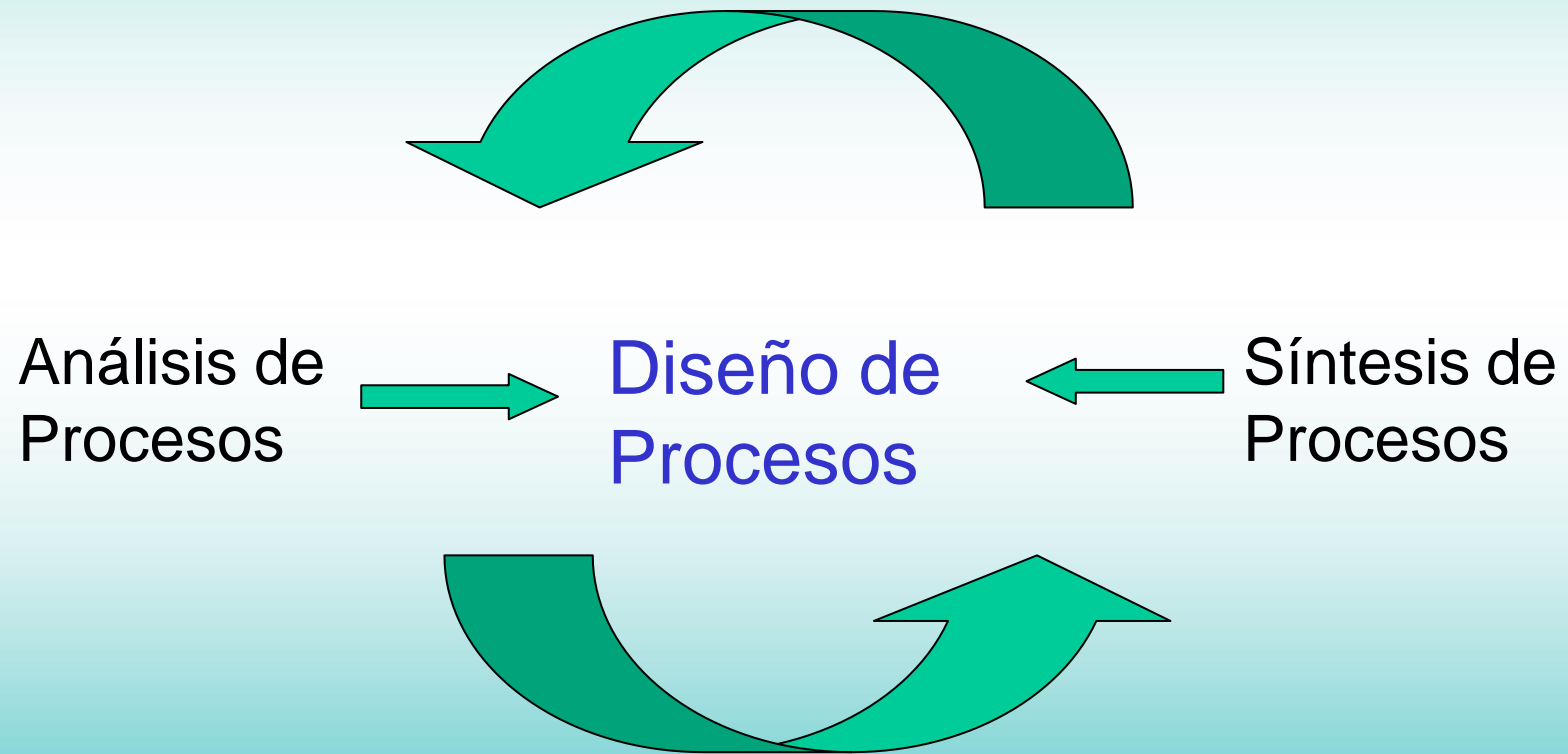
- Dadas las entradas y el sistema. Dadas las entradas y salidas.



- Encontrar efectos en las salidas.
- Tareas:
 - Descomposición
 - Modelado
 - Simulación
- Diseñar el sistema
- Tareas:
 - Integración de componentes
 - Evaluación
 - Optimización

Síntesis de Procesos

Elección de alternativas de Procesamiento.



Síntesis de secuencias de separación

- Esta clase se realizará una introducción al concepto de síntesis de procesos.
- Se presentarán aplicaciones específicas de síntesis de secuencias de separación.
- Se espera alcanzar los siguientes objetivos
 - Conocer los conceptos generales involucrados en síntesis de procesos.
 - Síntesis de proceso de secuencias de separación

Problemas

- Dada una mezcla de N componentes
 - ¿Cuál es la mejor secuencia de destilación para producir los N productos puros?
- Dadas N corrientes calientes para ser enfriadas y M corrientes para ser calentadas.
 - ¿Cuál es el mejor arreglo de calentadores y enfriadores e intercambiadores de calor para enfriar las corrientes calientes y calentar las corrientes frías?

Problemas de síntesis de proceso

- Secuencias de separación
- Redes de intercambio de calor
- Configuraciones de control de proceso.
- Integración energética de secuencias de destilación.
- *Flowsheet* total
 - *Flowsheet*

Problemas claves en síntesis de procesos

- Generación y representación de alternativas.
 - Gran número de *flowsheets*.
 - Representación de cada alternativa en forma simple.
- Evaluación de alternativas.
- Estrategia para seleccionar entre las alternativas.
 - Gran número de alternativas.

Metodología para resolver problemas de síntesis

- Experiencia.
- Heurísticos.
- Algorítmicos.
- Sistemas combinados.
- Sistemas expertos.

Métodos de separación industriales

Método de separación	Fase de alimentación	Agente de separación	Fase desarrollada o agregada	Principio de separación
flash Equilibrio	L y/o V	Reducción de presión o transf. de calor	V o L	Diferencia en volatilidad
Destilación	L y/o V	Transf. calor	V o L	Diferencia en volatilidad
Absorción de gas	V	Absorbente Líquido	L	Diferencia en volatilidad
Stripper	L	Vapor	V	Diferencia en volatilidad
Destilación Extractiva	L y/o V	Solvente líquido y transf. de calor	V y L	Diferencia en volatilidad
Destilación Azeotrópica	L y/o V	Líquido y transferencia de calor	V y L	Diferencia en volatilidad

Métodos de separación industriales

Método de separación	Fase de alimentación	Agente de separación	Fase desarrollada o agregada	Principio de separación
Extracción L-L	L	Solvente líquido	Segundo líquido	Diferencia en solubilidad
Cristalización	L	Transf. calor	Sólido	Diferencia en solubilidad
Adsorción de gas	V	Adsorbente sólido	Sólido	Diferencia en adsorción
Adsorción líquida	L	Adsorbente sólido	sólido	Diferencia en adsorción
Secado	S y L	transf. de calor	V	Diferencia en volatilidad
Lixiviación	S y L	Solvente líquido	L	Diferencia en solubilidad

Secuencias de separación

- Numero de secuencias

$$N_f = \frac{[2(N_c - 1)]! N_s^{(N_c - 1)}}{(N_c - 1)! N_c !}$$

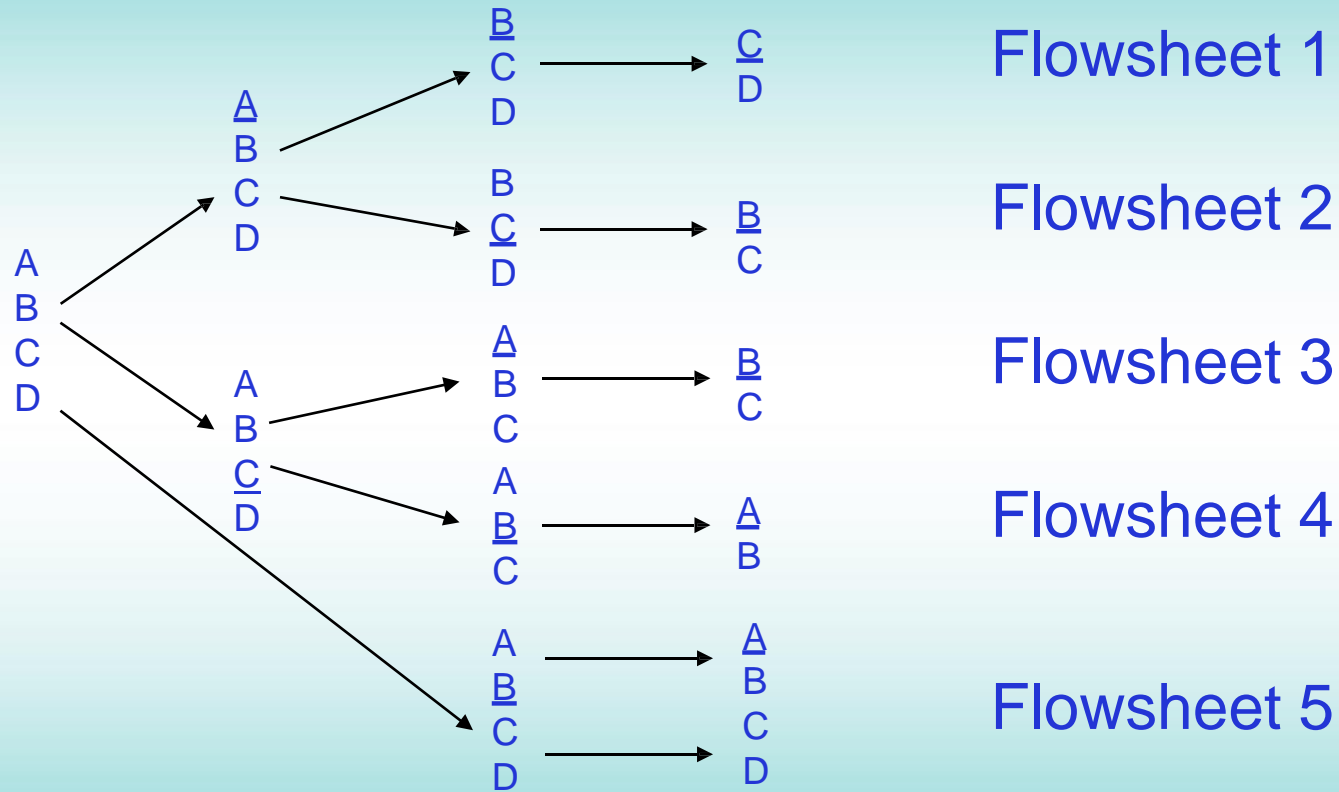
N_f = número posible de flowsheets

N_c = número de componentes a separar

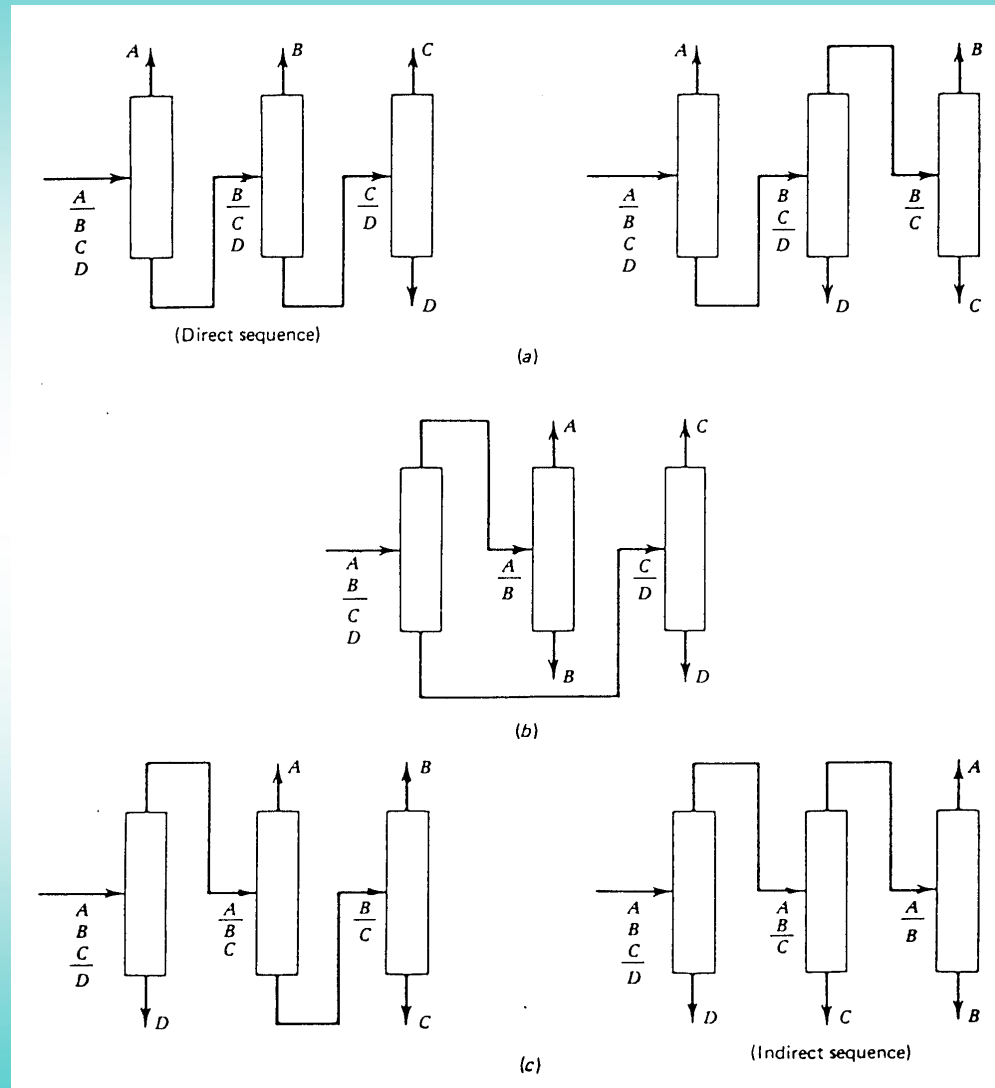
N_s = número de alternativas de separación

Nc	Ns	Nf
3	1	2
3	2	8
5	1	14
5	2	224
9	1	1,430
9	2	336,080
9	5	558,593,750

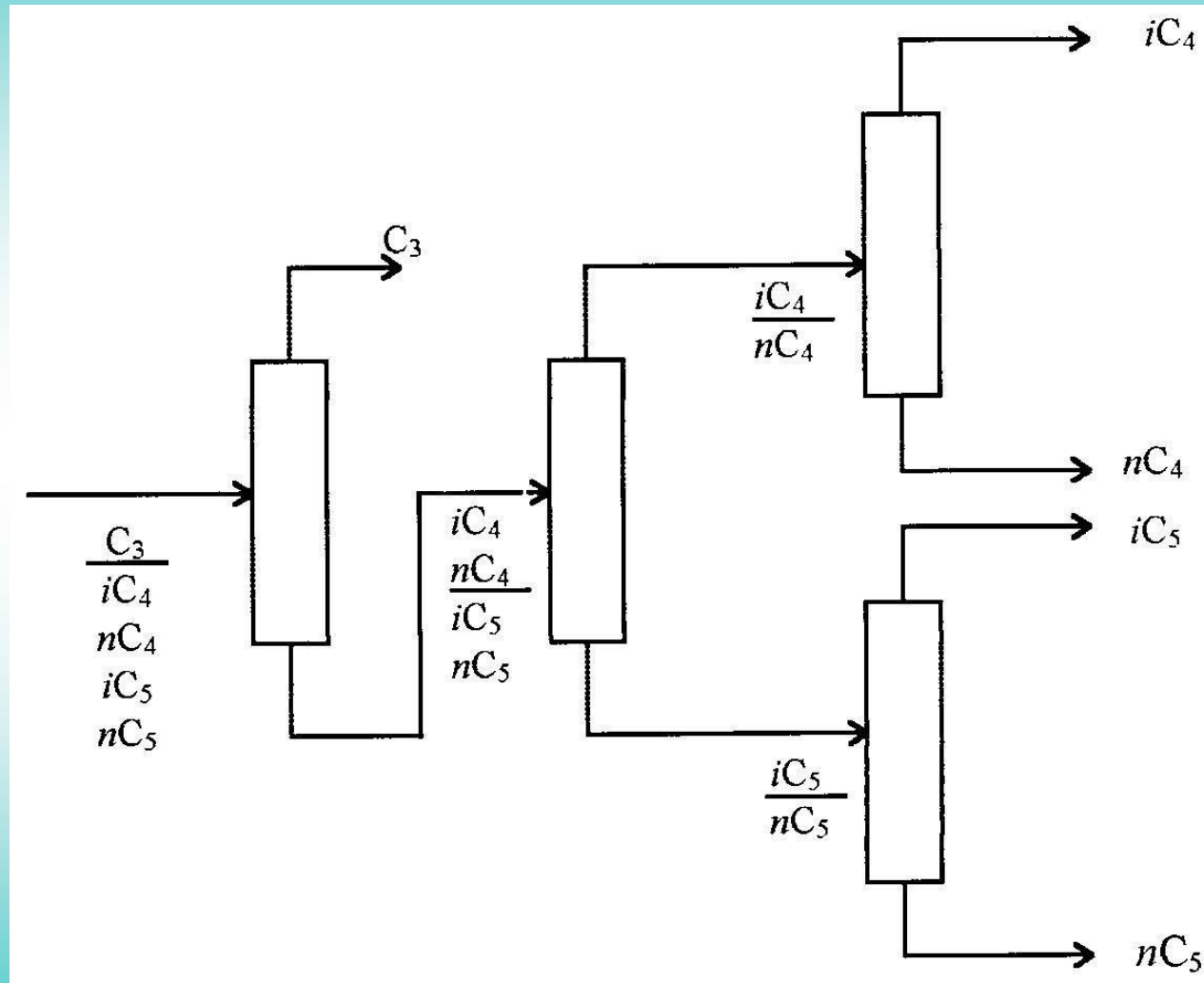
Representación



Secuencia de separación



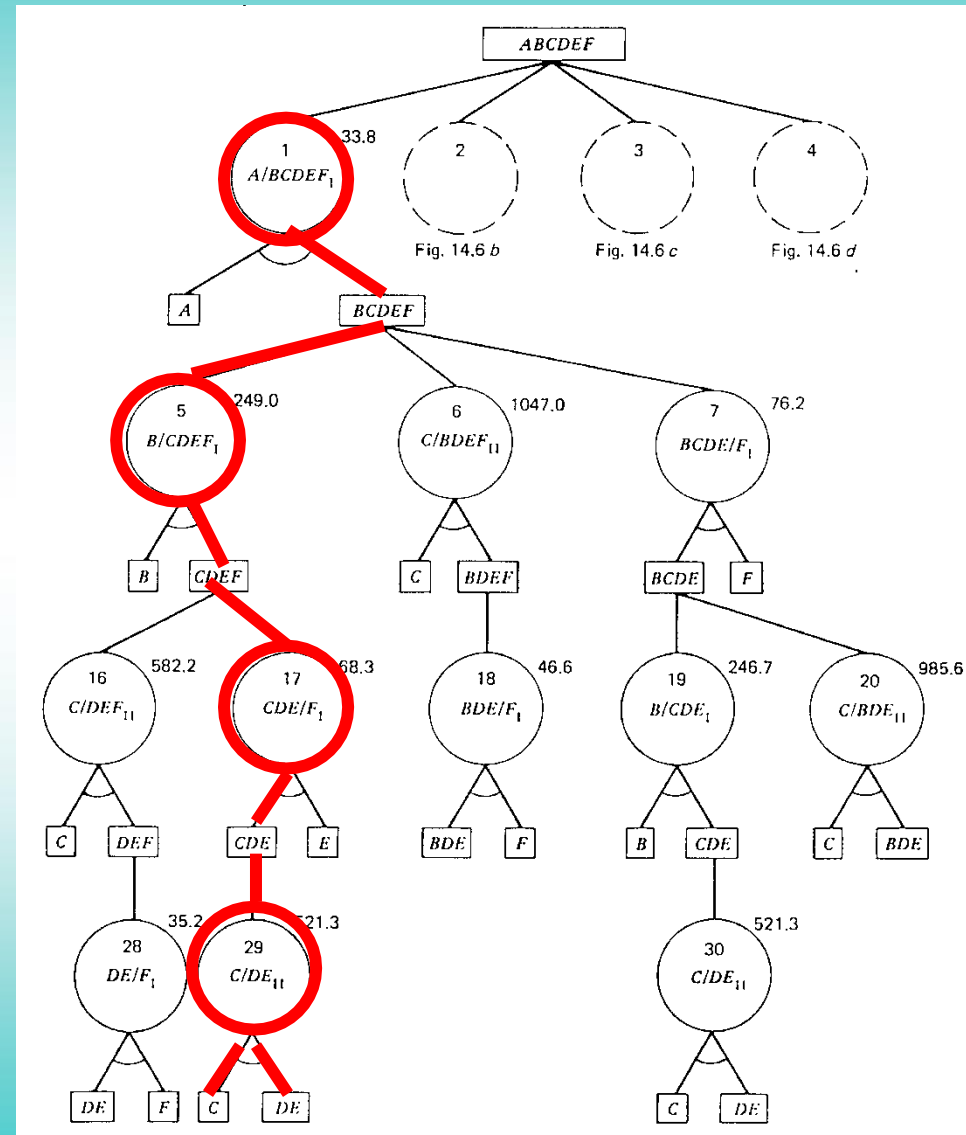
Secuencia de separación (5 comp)



Árbol de separación

1° secuencia

Secuencia	Costo, \$/yr
1-5-16-28	900,200
1-5-17-29	872,400
1-6-18	1,127,400
1-7-19-30	878,000
1-7-20	1,095,600
Species	
Propane	A
1-Butene	B
<i>n</i> -Butane	C
<i>trans</i> -2-Butene	D
<i>cis</i> -2-Butene	E
<i>n</i> -Pentane	F

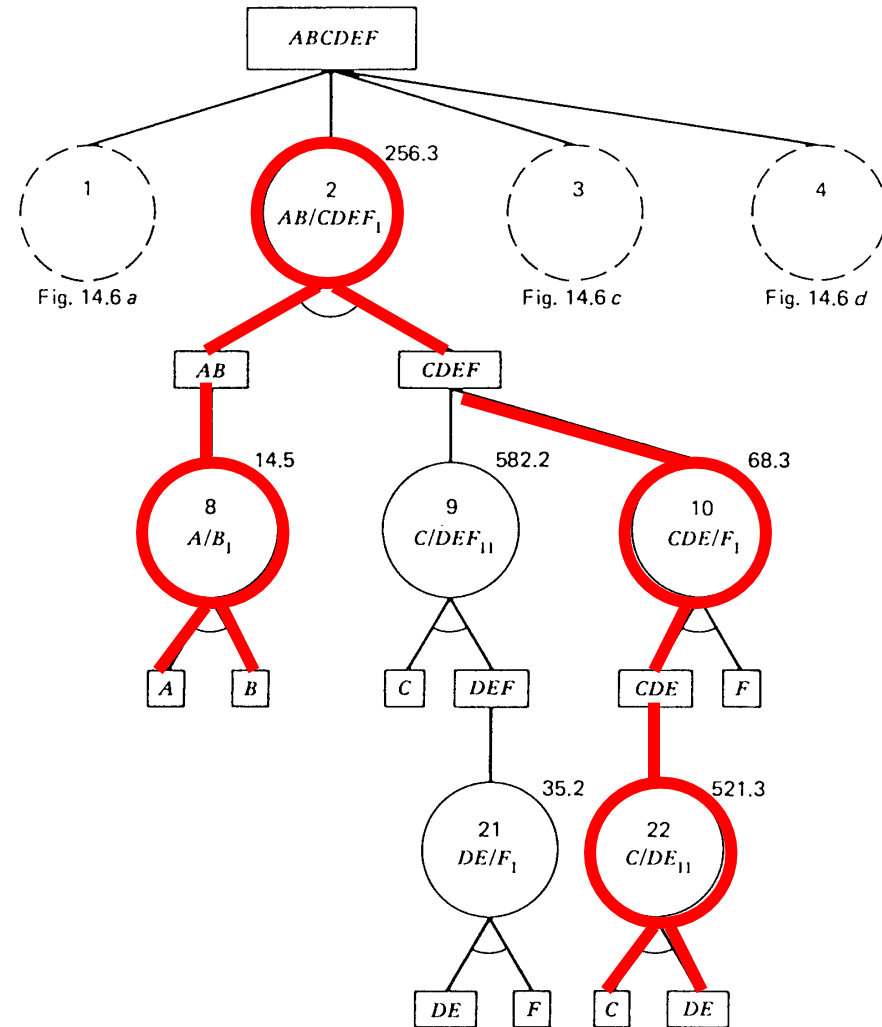


Árbol de separación

2º Secuencia

Secuencia	Costo, \$/yr
2-(8,9-21)	888,200
2-(8,10-22)	860,400

Species	
Propane	A
1-Butene	B
<i>n</i> -Butane	C
<i>trans</i> -2-Butene	D
<i>cis</i> -2-Butene	E
<i>n</i> -Pentane	F



Estrategia para abordar la síntesis de procesos completos

Dada la complejidad y magnitud del problema de síntesis de procesos químicos, se propone:

- Subdividirlo en sub-problemas más sencillos, con un determinado enfoque, factibles de ser abordados con las herramientas disponibles.
- A partir de las soluciones parciales generadas, encontrar la solución al problema global

Descomposición en sub-problemas

Cada subproblema

Lazo síntesis – análisis - optimización

Se pueden abordar con diferentes enfoques de resolución cada uno:

Heurísticos, termodinámicos, algorítmicos

Métodos basados en el conocimiento.

- **Heurísticos:** diseños basados en el conocimiento de la experiencia y la práctica industrial.
- **Evolucionarios:** El diseño comienza con un buen diseño caso-base, sobre el que se introducen cambios para mejorar el diseño en forma incremental.
- **Termodinámicos.**
- Métodos de optimización (algorítmicos).