



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

**APLICACIÓN DEL SOFTWARE HYSYS V8.0 EN ESTADO DINÁMICO PARA
LA SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE PROPILENGLICOL**

Sucely Marylena Zapeta Panjoj

Asesorado por el Ing. Williams Guillermo Álvarez Mejía

Guatemala, julio de 2018

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA



FACULTAD DE INGENIERÍA

**APLICACIÓN DEL SOFTWARE HYSYS V8.0 EN ESTADO DINÁMICO PARA
LA SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE PROPILENGLICOL**

TRABAJO DE GRADUACIÓN

PRESENTADO A LA JUNTA DIRECTIVA DE LA
FACULTAD DE INGENIERÍA
POR

SUCELY MARYLENA ZAPETA PANJOJ

ASESORADO POR EL ING. WILLIAMS GUILLERMO ÁLVAREZ MEJÍA

AL CONFERÍRSELE EL TÍTULO DE

INGENIERA QUÍMICA

GUATEMALA, JULIO DE 2018

UNIVERSIDAD DE SAN CARLOS DE GUATEMALA
FACULTAD DE INGENIERÍA



NÓMINA DE JUNTA DIRECTIVA

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

TRIBUNAL QUE PRACTICÓ EL EXAMEN GENERAL PRIVADO

| | |
|------------|-------------------------------------|
| DECANO | Ing. Pedro Antonio Aguilar Polanco |
| EXAMINADOR | Ing. Otto Raúl de León de Paz |
| EXAMINADOR | Ing. Pablo Enrique Morales Paniagua |
| EXAMINADOR | Ing. Erwin Manuel Ortiz Castillo |
| SECRETARIA | Inga. Lesbia Magalí Herrera López |

HONORABLE TRIBUNAL EXAMINADOR

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

APLICACIÓN DEL SOFTWARE HYSYS V8.0 EN ESTADO DINÁMICO PARA LA SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE PROPILENGLICOL

Tema que me fuera asignado por la Dirección de la Escuela de Química, con fecha 26 de noviembre de 2015.



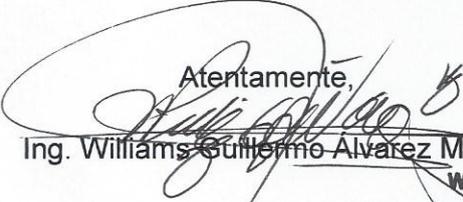
Sucely Marylena Zapeta Panjoj

Guatemala 22 de septiembre 2017

Ing. Carlos Salvador Wong Davi
Director de Escuela de Ingeniería Química
Facultad de Ingeniería USAC

Por este medio me dirijo a usted para informarle que he revisado el informe final del Trabajo de Graduación titulado: **"APLICACIÓN DEL SOFTWARE HYSYS V8.0 EN ESTADO DINÁMICO PARA LA SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE PROPILENGLICOL"**. El cual ha sido elaborado por la estudiante de Ingeniería Química, **Sucely Marylena Zapeta Panjoj** quién se identifica con su registro estudiantil **201020238**, y su Código Único de Identificación **2135811911401**. Considero que el referido informe cumple los requisitos establecidos por la Escuela, por lo tanto apruebo para que pueda ser presentado.

Agradezco de antemano su colaboración.

Atentamente,

Ing. Williams Guillermo Álvarez Mejía
Colegiado 259
Asesor de trabajo de graduación

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



Guatemala, 17 de noviembre de 2017.
Ref. EIQ.TG-IF.050.2017.

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

Estimado Ingeniero Wong:

Como consta en el registro de evaluación del informe final EIQ-PRO-REG-007 correlativo **092-2015** le informo que reunidos los Miembros de la Terna nombrada por la Escuela de Ingeniería Química, se practicó la revisión del:

INFORME FINAL DE TRABAJO DE GRADUACIÓN

Solicitado por la estudiante universitaria: **Sucely Marylena Zapeta Panjoj.**
Identificada con número de carné: **2010-20238.**
Previo a optar al título de **INGENIERA QUÍMICA.**

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

APLICACIÓN DEL SOFTWARE HYSYS V8.0 EN ESTADO DINÁMICO PARA LA SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE PROPILENGLICOL

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

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

“ID Y ENSEÑAD A TODOS”

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



C.c.: archivo



Agencia Centroamericana de Acreditación de
Egresados de Arquitectura y de Ingeniería

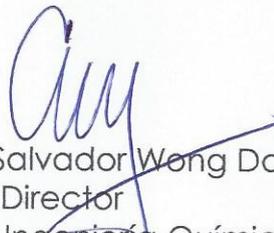




Ref.EIQ.TG.012.2018

El Director de la Escuela de Ingeniería Química de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer el dictamen del Asesor y de los Miembros del Tribunal nombrado por la Escuela de Ingeniería Química para revisar el Informe del Trabajo de Graduación de la estudiante, **SUCELY MARYLENA ZAPETA PANJOJ** titulado: **"APLICACIÓN DEL SOFTWARE HYSYS V8.0 EN ESTADO DINÁMICO PARA LA SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE PROPILENGLICOL"**. Procede a la autorización del mismo, ya que reúne el rigor, la secuencia, la pertinencia y la coherencia metodológica requerida.

"Id y Enseñad a Todos"



Ing. Carlos Salvador Wong Davi
Director
Escuela de Ingeniería Química

Guatemala, julio de 2018

FACULTAD DE INGENIERIA USAC
ESCUELA DE INGENIERIA QUIMICA
DIRECTOR

Cc: Archivo
CSWD/ale





El Decano de la Facultad de Ingeniería de la Universidad de San Carlos de Guatemala, luego de conocer la aprobación por parte del Director de la Escuela de Ingeniería Química, al Trabajo de Graduación titulado: **APLICACIÓN DEL SOFTWARE HYSYS V8.0 EN ESTADO DINÁMICO PARA LA SIMULACIÓN DEL PROCESO DE PRODUCCIÓN DE PROPILENGLICOL**, presentado por la estudiante universitaria: **Sucely Marylena Zapeta Panjoj**, y después de haber culminado las revisiones previas bajo la responsabilidad de las instancias correspondientes, autoriza la impresión del mismo.

IMPRÍMASE:

Ing. Pedro Antonio Aguilar Polanco
Decano



Guatemala, julio de 2018

/gdech

ACTO QUE DEDICO A:

- Dios** Por guiarme a culminar con éxito mi carrera, darme sabiduría y abrir puertas. A Él sean la gloria y la honra.
- Mi esposo** Jorge Vinicio González Martin por impulsarme y apoyarme a alcanzar mis metas, gracias por tus palabras llenas de amor y oraciones.
- Mis padres** Carlos Vicente Zapeta Rojas y Sara Panjoj por su trabajo, dedicación, oraciones y amor incondicional en cada etapa de mi vida.
- Mis hermanos** Carlos Zapeta y William Zapeta por el apoyo que han brindado todos estos años de convivencia.

AGRADECIMIENTOS A:

| | |
|---|--|
| Universidad de San Carlos de Guatemala | Casa de estudios que permitió mi formación como profesional y a la Facultad de Ingeniería por otorgarme los conocimientos en la carrera de Ingeniería Química. |
| Amigos | Que conservamos un esfuerzo en común, gratos recuerdos y éxitos que me llenan de alegría. |
| Mi familia | Por sus palabras, cariño y oraciones. |
| Mi asesor y revisor | Que gracias a su dedicación y conocimiento se logró culminar este trabajo de graduación. |

ÍNDICE GENERAL

| | |
|---|------|
| ÍNDICE DE ILUSTRACIONES..... | V |
| LISTA DE SÍMBOLOS | IX |
| GLOSARIO | XI |
| RESUMEN..... | XIII |
| OBJETIVOS..... | XV |
| INTRODUCCIÓN | XVII |
| | |
| 1. ANTECEDENTES | 1 |
| | |
| 2. MARCO TEÓRICO..... | 3 |
| 2.1. Simuladores..... | 3 |
| 2.2. Simular | 4 |
| 2.3. Modelo..... | 4 |
| 2.4. Ventajas del uso de software de simulación..... | 5 |
| 2.5. Desventajas del uso de software de simulación | 5 |
| 2.6. Ejemplos de simuladores de uso general | 6 |
| 2.7. Hysys..... | 6 |
| 2.8. Paquetes termodinámicos de Hysys | 7 |
| 2.9. Ingreso al uso del programa | 7 |
| 2.10. Algoritmo para realizar una simulación en estado estable..... | 8 |
| 2.10.1. Crear un caso nuevo | 9 |
| 2.10.2. Selección de componentes | 10 |
| 2.10.3. Selección del paquete termodinámico..... | 12 |
| 2.10.3.1. Asistente de métodos..... | 12 |
| 2.10.3.2. Métodos de selección | 13 |

| | | | |
|----------|-------------|---|----|
| | 2.10.3.2.1. | Ecuaciones de estado..... | 16 |
| | 2.10.3.2.2. | Modelos de actividad | 17 |
| | 2.10.3.2.3. | Modelos semiempíricos..... | 18 |
| | 2.10.3.2.4. | Modelos de presión de vapor ... | 19 |
| | 2.10.3.2.5. | Misceláneos..... | 19 |
| | 2.10.3.3. | Simulación con reacción | 20 |
| 2.10.4. | | Construcción del PFD | 22 |
| 2.10.5. | | Agregar condiciones a cada corriente..... | 24 |
| 2.10.6. | | Agregar condiciones de operación de equipos | 25 |
| 2.10.7. | | Generación de reportes | 26 |
| 2.10.8. | | Estudios de caso..... | 26 |
| 2.10.9. | | Estado dinámico | 27 |
| 2.10.10. | | Reactor CSTR..... | 33 |
| 2.10.11. | | Propilenglicol..... | 34 |
| | 2.10.11.1. | Propiedades | 34 |
| | 2.10.11.2. | Producción de propilenglicol..... | 35 |
| | 2.10.11.3. | Reacción general..... | 35 |
| | 2.10.11.4. | Diagrama de bloques..... | 35 |
| | 2.10.11.5. | Diagrama de flujo de proceso (PFD) | 36 |
| 3. | | DISEÑO METODOLÓGICO..... | 37 |
| 3.1. | | Variables | 37 |
| | 3.1.1. | Variables involucradas en el proceso | 37 |
| 3.2. | | Delimitación del campo de estudio..... | 38 |

| | | |
|----------|--|----|
| 3.3. | Recursos humanos disponibles..... | 38 |
| 3.4. | Recursos materiales disponibles..... | 38 |
| 3.5. | Técnica cualitativa o cuantitativa..... | 39 |
| 3.6. | Recolección y ordenamiento de la información..... | 39 |
| 3.6.1. | Representación del modelo de producción de propilenglicol..... | 39 |
| 3.6.2. | Ejemplo de la simulación del proceso de producción de propilenglicol en estado estacionario..... | 43 |
| 3.6.2.1. | Caso nuevo y selección de componentes..... | 43 |
| 3.6.2.2. | Selección del paquete termodinámico..... | 44 |
| 3.6.2.3. | Selección e introducción de datos para la reacción involucrada..... | 45 |
| 3.6.2.4. | Construcción de PFD..... | 47 |
| 3.6.2.5. | Condiciones para cada corriente de entrada..... | 47 |
| 3.6.2.6. | Agregar condiciones de operación a equipos..... | 48 |
| 3.6.3. | Ejemplo de la simulación del proceso de producción de propilenglicol en estado dinámico..... | 52 |
| 3.6.4. | Perturbaciones al sistema..... | 62 |
| 4. | RESULTADOS..... | 65 |
| 4.1. | Representación del modelo de producción de propilenglicol... | 65 |

| | | |
|------|---|----|
| 4.2. | Generación de reportes y estudio de caso de producción de propilenglicol en estado estacionario | 65 |
| 4.3. | Resultados de la simulación en estado dinámico..... | 67 |
| 4.4. | Resultados de realizar perturbaciones al sistema dinámico..... | 69 |
| 5. | INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS | 75 |
| 6. | LOGROS OBTENIDOS..... | 79 |
| | CONCLUSIONES..... | 81 |
| | RECOMENDACIONES | 83 |
| | BIBLIOGRAFÍA..... | 85 |
| | APÉNDICE | 89 |

ÍNDICE DE ILUSTRACIONES

FIGURAS

| | | |
|-----|--|----|
| 1. | Vista de la ventana principal, Hysys V8.0 | 8 |
| 2. | Creación de caso nuevo en Hysys V8.0..... | 9 |
| 3. | Componentes de la ventana principal, Hysys V8.0 | 10 |
| 4. | Selección de componentes en Hysys V8.0 | 11 |
| 5. | Selección del paquete termodinámico..... | 12 |
| 6. | Ventana de asistente de métodos..... | 13 |
| 7. | Paquetes termodinámicos en Hysys | 14 |
| 8. | Selección de paquete termodinámico, autor Eric C. Carlson | 15 |
| 9. | Selección de paquete termodinámico, fase vapor, autor Eric C. Carlson..... | 15 |
| 10. | Ventana para selección de reacciones..... | 21 |
| 11. | Ventana para ingresar datos de la reacción..... | 21 |
| 12. | Configuración de la reacción a paquete de fluidos..... | 22 |
| 13. | Ubicación de la venta Palette..... | 23 |
| 14. | Ventana Palette..... | 24 |
| 15. | Avisos de la barra de estado..... | 25 |
| 16. | Condiciones para equipos..... | 26 |
| 17. | Selección de 'Case Studies'..... | 27 |
| 18. | Ventana para realizar un caso de estudio | 27 |
| 19. | Controlador PID | 31 |
| 20. | Ventana de controlador PID, parámetros | 32 |
| 21. | Reactor CSTR en Hysys V8.0..... | 33 |
| 22. | Estructura de propilenglicol | 34 |

| | | |
|-----|---|----|
| 23. | Proceso de producción de propilenglicol | 35 |
| 24. | Diagrama de flujo del proceso de propilenglicol | 36 |
| 25. | Selección de componentes..... | 43 |
| 26. | Selección del paquete termodinámico | 44 |
| 27. | Configuración para el cálculo de componentes | 44 |
| 28. | Selección de reacción cinética..... | 45 |
| 29. | Especificación de parámetros para la reacción cinética | 45 |
| 30. | Adición de la reacción al paquete de fluidos..... | 46 |
| 31. | Reacción correctamente especificada | 46 |
| 32. | Construcción del PFD..... | 47 |
| 33. | Condiciones de la corriente de agua..... | 47 |
| 34. | Condiciones de la corriente de óxido | 48 |
| 35. | Configuración de condiciones de entrada para las válvulas | 49 |
| 36. | Configuración de diámetro de válvulas | 49 |
| 37. | Estimación de coeficientes de flujo | 50 |
| 38. | Configuración de corrientes de entrada al reactor | 50 |
| 39. | Configuración del volumen para el reactor CSTR..... | 51 |
| 40. | Selección de la reacción para el reactor CSTR | 51 |
| 41. | Ventana con datos para estudio de caso..... | 52 |
| 42. | Ingreso al estado dinámico | 53 |
| 43. | Asistente dinámico..... | 53 |
| 44. | Finalización del asistente dinámico..... | 54 |
| 45. | Instalación, bloque de función de transferencia y controladores PID ... | 55 |
| 46. | Configuración de función de transferencia (tiempo muerto) | 55 |
| 47. | Selección de la temperatura del reactor como PV | 56 |
| 48. | Selección de la temperatura del reactor como PV | 56 |
| 49. | Configuración de conexiones del controlador IC-100 | 57 |
| 50. | Activación de la opción 'Delay' en tiempo muerto..... | 58 |
| 51. | Ajuste de parámetros en tiempo muerto | 58 |

| | | |
|-----|--|----|
| 52. | Configuración de parámetros de controlador IC-100 | 59 |
| 53. | Configuración de conexiones de controlador FIC-101 | 59 |
| 54. | Configuración de conexiones de controlador LIC-102 | 60 |
| 55. | Configuración de conexiones de controlador LIC-102 | 60 |
| 56. | 'Strip chart' de controladores..... | 61 |
| 57. | Diagrama previo a correr simulación dinámica en el tiempo | 61 |
| 58. | Integrador..... | 62 |
| 59. | Modificación de la temperatura en la corriente de agua..... | 63 |
| 60. | Diagrama de producción de propilenglicol en estado estacionario | 65 |
| 61. | Generación de reportes del estado estable del proceso de producción de propilenglicol..... | 66 |
| 62. | Estudio de caso de producción de propilenglicol | 66 |
| 63. | PFD después de 30 minutos de simulación | 67 |
| 64. | 'Strip chart' de controlador IC-100..... | 67 |
| 65. | 'Strip chart' de controlador FIC-101 | 68 |
| 66. | 'Strip chart' de controlador LIC-102..... | 68 |
| 67. | PFD después de 60 minutos de simulación, perturbación de la temperatura en la corriente de agua | 69 |
| 68. | 'Strip chart' de controlador IC-100..... | 69 |
| 69. | 'Strip chart' de controlador FIC-101 | 70 |
| 70. | 'Strip chart' de controlador LIC-102..... | 70 |
| 71. | Composición de la corriente de salida de la corriente de productos | 71 |
| 72. | PFD después de 90 minutos de simulación, perturbación de la temperatura en la corriente de óxido..... | 72 |
| 73. | 'Strip chart' de controlador IC-100..... | 72 |
| 74. | 'Strip chart' de controlador FIC-101 | 73 |
| 75. | 'Strip chart' de controlador LIC-102..... | 73 |
| 76. | Composición de la corriente de salida, productos..... | 74 |

TABLAS

| | | |
|-------|--|----|
| I. | Ecuaciones de estado y su aplicación | 16 |
| II. | Modelos de actividad y su aplicación..... | 17 |
| III. | Modelos semi-empíricos y su aplicación..... | 18 |
| IV. | Modelos de presión de vapor y su aplicación | 19 |
| V. | Modelos misceláneos y su aplicación | 20 |
| VI. | Nomenclatura básica utilizada en el sistema dinámico por los controladores | 29 |
| VII. | Letras de identificación para controladores | 30 |
| VIII. | Valores para 'Tuning Parameters'..... | 32 |
| IX. | Variables del modelo de producción de propilenglicol | 37 |
| X. | Condiciones para las corrientes de entrada..... | 40 |
| XI. | Configuración de válvulas Universal Gas Sizing, Lineal | 41 |
| XII. | Condiciones para configurar el reactor CSTR | 41 |
| XIII. | Parámetros de configuración para controladores | 42 |

LISTA DE SÍMBOLOS

| Símbolo | Significado |
|----------------------|--------------------------------|
| Cg | Coeficiente de flujo, gases |
| Cv | Coeficiente de flujo, líquidos |
| IC | Controlador indicador |
| FIC | Controlador indicador de flujo |
| LIC | Controlador indicador de nivel |
| E | Energía de activación |
| A | Factor de frecuencia |
| Kc | Ganancia |
| °C | Grados Celsius |
| H | Hora |
| Kg | Kilogramo |
| kPa | Kilopascal |
| m³ | Metros cúbicos |
| Mol | Mol |
| Plg | Pulgada |
| Bar | Presión |
| Td | Tiempo derivativo |
| Ti | Tiempo integral |
| Pv | Variable del proceso |
| OP | Variable manipulable |

GLOSARIO

| | |
|------------------------------|--|
| Estado dinámico | Permite interactuar con los parámetros que influyen en la simulación, evaluando posibles hipótesis del proceso, permitiendo variaciones y comprobación de resultados. |
| Estado estacionario | Permite analizar el entorno de una simulación por medio de diagramas o datos estadísticos que proporciona el programa. |
| Hysys | Un software desarrollado por AspenTech, un agente de ensayos para la simulación, optimización, diseño y operación de procesos. |
| Integrador | Es una herramienta de Hysys para controlar el tiempo, la aceleración y otros parámetros de la simulación dinámica. |
| Paquete termodinámico | Son desarrollos matemáticos que por medio de un software permiten evaluar el comportamiento termodinámico de una sustancia pura o de una mezcla bajo condiciones dadas como temperatura o presión. |

| | |
|-----------------------|---|
| Perturbaciones | Son modificaciones que se realizan a las variables de la simulación para comprobar comportamientos y analizar hipótesis. |
| PFD | Es un diagrama de proceso, <i>process flowsheet diagram</i> , por sus siglas en inglés. Permite interactuar con las corrientes de entrada, equipos y parámetros del modelo que se requiere simular. |
| PID | Son dispositivos de control que a través de un lazo de retroalimentación permiten regular las variables de un proceso manteniéndolas a un determinado valor de referencia. |
| Simulación | Herramienta de ingeniería, basada en un software para interactuar con un modelo que define todas las características de un proceso que permite la manipulación de variables. |

RESUMEN

Se dará a conocer una de las herramientas importantes en la ingeniería de procesos los simuladores; existen distintos simuladores de acuerdo al proceso que se requiere evaluar; para el presente estudio se utilizó el simulador *Hysys* V8.0 por medio del proceso de producción de propilenglicol.

Se estableció un modelo el cual involucra los parámetros que definen el proceso; se ejemplificó el proceso en estado estable analizando la simulación por medio de una generación de reportes y un estudio de caso. Para el estado estable se definió un diagrama de proceso, PFD, el cual incluye válvulas como una configuración previa al estado dinámico.

Se representó cada paso de la configuración del modelo a estado dinámico, dando a conocer el uso de controladores PID, los cuales se utilizaron para controlar el flujo de alimentación, la temperatura del reactor y el nivel de líquido en el reactor; los controladores involucran 3 variables: variable del proceso (PV), variable manipulable (OP) y *set point* (SP).

Los controladores actúan para mantener el valor de SP en un valor establecido de referencia. Para observar el comportamiento de las variables en el tiempo se colocaron monitores o '*strip chart*' y se comprobó que la configuración del proceso en estado dinámico era correcta dado que en el tiempo las variables no presentaron modificaciones; para poner a prueba la configuración se realizaron perturbaciones al sistema analizadas por diagramas que proporciona el simulador. El uso del simulador comprobó ser una herramienta útil para el estudio de procesos industriales.

OBJETIVOS

General

Representar el modelo de producción de propilenglicol; simular el proceso en estado estacionario y dinámico para ejemplificar el uso del software Hysys V8.0.

Específicos

1. Analizar, definir y representar el modelo de la producción de propilenglicol.
2. Simular y ejemplificar cada operación del proceso de producción de propilenglicol en estado estacionario con el simulador Hysys V8.0.
3. Simular y ejemplificar cada operación del proceso de producción de propilenglicol en estado dinámico con el simulador Hysys V8.0.
4. Ejemplificar el uso del sistema dinámico por medio de perturbaciones.

INTRODUCCIÓN

El uso de simuladores ha simplificado el tiempo y uso de insumos para realizar pruebas sobre hipótesis planteadas en la industria de procesos, su aplicación es una práctica y tecnología moderna. Los simuladores más conocidos son: Hysys, Pro II, Aspen Plus y Chemcad. Existen empresas que prestan servicios para realizar simulaciones para distintos procesos industriales, lo que hace al uso y aplicación de simuladores una parte competitiva en conocimiento de software.

Los simuladores contienen paquetes que permiten desarrollar modelos con distintas alternativas de aplicación. Los simuladores se clasifican según el tipo de estudio que se desea realizar; existen simuladores en estado estacionario (las propiedades no varían con el tiempo) y en estado dinámico (las propiedades varían con el tiempo). Los requerimientos industriales han creado simuladores de uso específico, propiamente elaborados para una operación específica, y los de uso general, en su estructura contienen varias operaciones unitarias que se relacionan para simular un proceso.

En distintas universidades a nivel mundial se imparten cátedras para el aprendizaje y aplicación de simuladores; Guatemala es un país cuyas universidades no cuentan con una cátedra en el pensum de estudios sobre el manejo de software de simulación; por lo tanto; se requiere iniciar con una alternativa para motivar el aprendizaje.

El presente trabajo tiene como finalidad motivar el aprendizaje de un software de simulación; para este estudio es Hysys V8.0. Se aplicará al proceso de producción de propilenglicol por medio de la definición de un modelo y ejemplificando el desarrollo de la simulación del proceso en estado dinámico.

El proceso de propilenglicol es una reacción exotérmica, la cual incluye en sus equipos principalmente un reactor; la aplicación en el software se establece en modo estacionario para luego demostrar la aplicación en estado dinámico; el estado dinámico permite analizar las variables en el tiempo, por lo que se aplicarán perturbaciones (modificación de variables) al sistema; estas variaciones se analizarán por medio de gráficas que el software proporciona.

1. ANTECEDENTES

- En el año 2010 se realizó una guía para la asignatura con el nombre Integración IV de la Universidad Tecnológica Nacional, de la Facultad Regional Rosario en el área Informática Aplicada a la Ingeniería Química para realizar la simulación estacionaria y dinámica de un proceso químico, trabajo de modelación y simulación con el software Hysys. La guía consiste en la simulación en modo estático para la producción de Etilen Glycol por reacción de óxido de etileno y agua, la simulación en modo dinámico para la producción de propilenglicol; la guía contiene las corrientes de alimentación, la descripción de las reacciones químicas, datos cinéticos, el uso de controladores PID y la explicación del uso del software.
- En el año 2007, Luis Emilio Villegas Vivar realizó un trabajo en conformidad a los requisitos para obtener el título de ingeniero civil químico, en la Universidad de Magallanes Chile con el título Simulación en hysys de los procesos productivos en enap magallanes. En el trabajo de graduación se realizó un manual para simular procesos productivos de ENAP Magallanes; la simulación completa de la planta Cullen y Posesión; se compararon los valores normales de operación de cada planta con el resultado que entrega Hysys; se concluye que las similitudes son adecuadas; las simulaciones se realizaron en estado estacionario.
- En el año 2015, Omar Martínez Trillos y Romel Rolando Porras Amaya realizaron un trabajo de grado para obtener el título de ingeniero en

control, en la Universidad Distrital Francisco José De Caldas, con el título Simulación de sistemas de control en procesos del sector oil & gas a través del software aspen hysys y conexión a rockwell automation con el estándar de comunicación opc. El trabajo de graduación consiste en cuatro procesos reales, comunes del sector Oil & Gas: separación de hidrocarburos, blending de gasolina, reactor de propilenglicol y columna de destilación utilizando el software de simulación Aspen hysys.

- Existen distintas universidades a nivel internacional que imparten el curso o cátedra de simulaciones haciendo uso del software Hysys; a continuación,, se enumeran algunas:
 - La Universidad Nacional del Centro del Perú imparte la cátedra “Análisis y simulación de procesos”.
 - La Universidad Nacional Experimental Politécnica de la Fuerza Armada Nacional Boliviana, imparte la cátedra con el nombre “Simulación de procesos”.
 - La Universidad Tecnológica Nacional perteneciente a la República Argentina imparte la cátedra con el nombre “Integración IV”.
 - Universidad Nacional de Colombia, sede Bogotá imparte la cátedra “Análisis y simulación de procesos en estado estable y dinámico”.

2. MARCO TEÓRICO

Constantemente en las industrias existen distintos procesos de los cuales surgen preguntas significativas que requieren experimentar para evaluar un comportamiento, estimar soluciones o planificar proyectos; las pruebas resultan ser costosas por el tiempo o el uso de insumos; una alternativa para responder cuestionamientos es la creación de modelos para ser representados en simuladores.

2.1. Simuladores

Son dispositivos de aprendizaje; una práctica moderna por medio de la aplicación de un software para modelar parte de la réplica de los fenómenos de la realidad; su propósito es la comprobación de hipótesis y la experimentación de conocimientos en un entorno interactivo que permite modificar parámetros y ver la reacción de un sistema ante un cambio producido.

Los simuladores se aplican al diseño de equipos, comprobar configuraciones de la planta, restricciones establecidas, propiedades termodinámicas de las sustancias, desarrollo de protocolos, cálculo de costos, considerar iniciativas para mejorar procesos y otras.

Han facilitado el funcionamiento de procesos industriales; se pueden clasificar en simuladores en estado estacionario en los cuales las propiedades de reactivos, productos o mezclas no varían con el tiempo; también, simuladores en estado dinámico, en estos las propiedades varían con el tiempo.

Existen simuladores de uso específico elaborados para una operación unitaria o rango de operación específica, y los simuladores de uso general, estructurados con varias operaciones unitarias que pueden relacionarse entre sí para la simulación de un proceso.

El uso de simuladores se ha convertido en una herramienta indispensable para la solución adecuada de problemas en procesos, permitiendo análisis de operación y para el diseño de plantas o equipos. Se realiza en distintas áreas para probar la factibilidad técnica y económica tomando en cuenta decisiones procedentes de distintas alternativas o condiciones de operación.

2.2. Simular

“Al proceso de experimentar con el modelo, esto es, cambiar parámetros, modificar esquemas, etc., se le denomina simular. Un dispositivo que permita simular se denomina simulador”.¹

2.3. Modelo

Es una representación, abstracción, construcción intelectual o descripción de la realidad que contiene las características bajo las cuales se plantea la formulación de un problema o un proceso establecido, describiendo los objetivos a estudiar, las variables de interés, definiendo el sistema y los resultados esperados al experimentar variaciones en un proceso. Un modelo permite desarrollar un sistema para entender la realidad y en consecuencia poder modificarla.

¹ VILLEGAS VIVAR, Luis Emilio. *Simulación en hysis de los procesos productivos en enap magallanes*. p. 12.

2.4. Ventajas del uso de software de simulación

A continuación, se detallan algunas ventajas del uso de software de simulación:

- La simulación interfiere en sistemas del mundo real.
- Es un proceso relativamente eficiente y flexible.
- Hace posible analizar y sintetizar una compleja y extensa situación real.
- Permite al diseñador experimentar rápidamente varias configuraciones de planta.
- Permite la experimentación en condiciones que podrían ser peligrosas en el sistema real.
- Reduce el tiempo de diseño de una planta.
- Evaluación de alternativas de proceso para reducir el consumo de energía.
- Análisis de nuevos procesos para nuevos productos.

2.5. Desventajas del uso de software de simulación

A continuación, se detallan algunas desventajas del uso de software de simulación:

- El modelo se debe realizar con conocimiento preciso y cuidadoso ya que la simulación trabaja con base en este.
- Se requiere gran cantidad de corridas para encontrar Soluciones óptimas.

2.6. Ejemplos de simuladores de uso general

- Hysys: simulación para estado estacionario y para régimen dinámico; interpreta interactivamente los comandos según se introducen en el programa; por lo tanto, no necesita un botón de ejecución; entre sus características están: interfaz gráfica de fácil uso, modelos termodinámicos comunes y *flowsheet* comunes.
- Pro II: es un simulador en estado estacionario, permite el diseño y análisis de procesos para mejorarlos. Diseñado para balances de masa y cálculos de balance energético para distintos procesos químicos, en especial, petróleo, gas natural e industrias de polímeros.
- Aspen Plus: es un sistema avanzado para procesos de ingeniería; permite la regresión de datos experimentales, diseño experimental de los diagramas de flujo usando modelos de los equipos simplificados, realizar balances de materia y energía y dimensionar piezas clave de los equipos.
- Chemcad: incluye base de datos de componentes químicos, métodos termodinámicos y unidades que permiten la operación en estado estacionario o procesos químicos desde escala laboratorio a escala industrial.

2.7. Hysys

HYSYS es una herramienta desarrollada por AspenTech; es una alternativa completa para el modelado de procesos utilizados por los principales productores mundiales y empresas de ingeniería para la simulación, optimización, diseño y operaciones de procesos.

Es un programa computacional, un agente de ensayos para la simulación de procesos químicos por medio de la aplicación de herramientas matemáticas para el planeamiento y formulación de modelos que representan de manera simple procesos químicos industriales.

Trabaja con sistemas operativos de Windows, con facilidad de armar diagramas de flujo de procesos en ventanas PFD *process flowsheet diagram* ingresando datos como presión, temperatura, composiciones, flujos y especificaciones técnicas de equipos; cuenta con gran variedad de datos de componentes químicos, modelos termodinámicos y a su vez indica cuando una simulación no puede ser modelada; da la posibilidad de seleccionar distintos paquetes termodinámicos.

2.8. Paquetes termodinámicos de Hysys

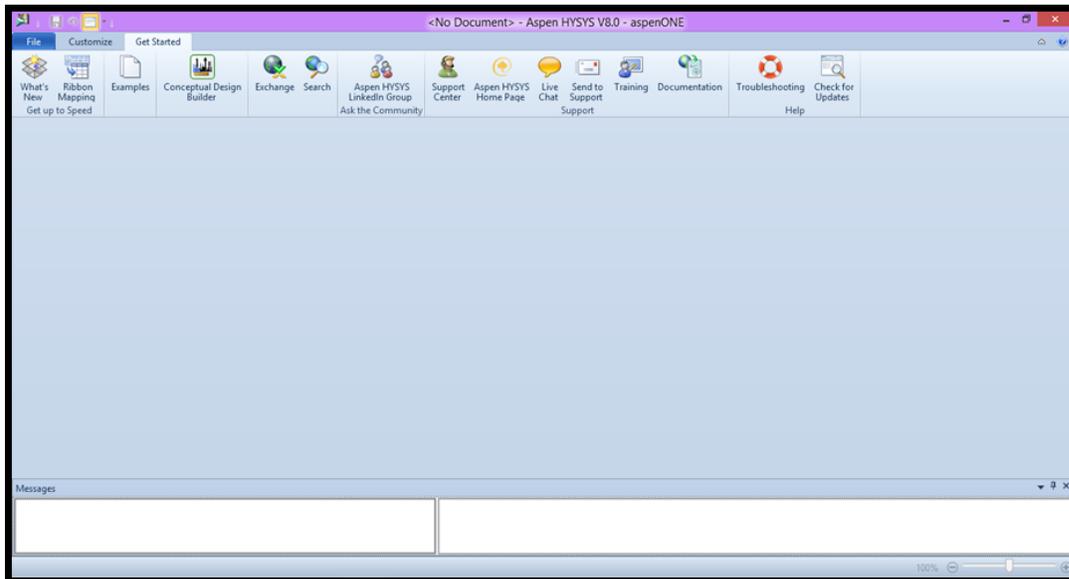
Representa el comportamiento de las fases presentes (sólido, líquido y gaseoso); Hysys contiene una gran variedad de paquetes termodinámicos, entre ellos, ecuación de estado, modelos de coeficientes de actividad, modelos semiempíricos, modelos de presión de vapor y modelos especiales.

2.9. Ingreso al uso del programa

El programa Hysys demanda que el usuario conozca claramente las características y los datos que están involucrados en el proceso; esto será de gran ayuda para simplificar el uso del programa y aprovechar correctamente las herramientas del simulador.

Para ingresar se debe dar doble clic sobre el icono de Hysys.

Figura 1. Vista de la ventana principal, Hysys V8.0



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

2.10. Algoritmo para realizar una simulación en estado estable

Este algoritmo no es una regla para el uso de Hysys; sin embargo, es una propuesta para dar a conocer el programa, facilitar el uso, conocer cómo desarrollar una simulación, las opciones principales con las que cuenta y las herramientas de apoyo. Existen más opciones dentro de Hysys de las que se describirán a continuación, las cuales se aplican de acuerdo al criterio del proceso a utilizar.

Para fines del presente trabajo de investigación, se tomó en cuenta este algoritmo para el desarrollo del proceso de producción de propilenglicol.

A continuación, se detalla el algoritmo de 7 pasos básicos para realizar una simulación.

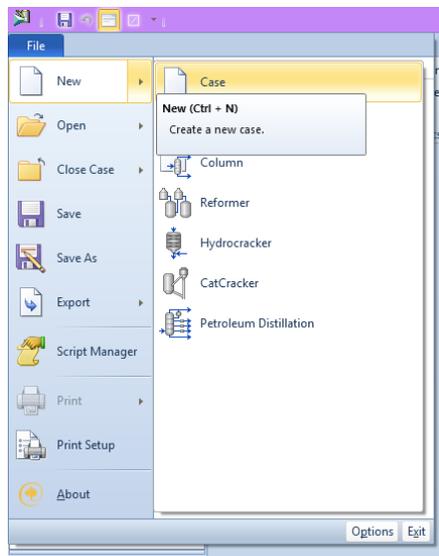
- Crear un caso nuevo
- Selección de componentes
- Selección del paquete termodinámico
- Construcción del PFD
- Agregar condiciones a cada corriente
- Agregar condiciones de operación de equipos
- Generación de reportes

2.10.1. Crear un caso nuevo

Crear un caso nuevo activará las herramientas necesarias para poder llevar a cabo una simulación.

Para crear un caso se ingresa a 'file', 'new' y 'case'.

Figura 2. Creación de caso nuevo en Hysys V8.0

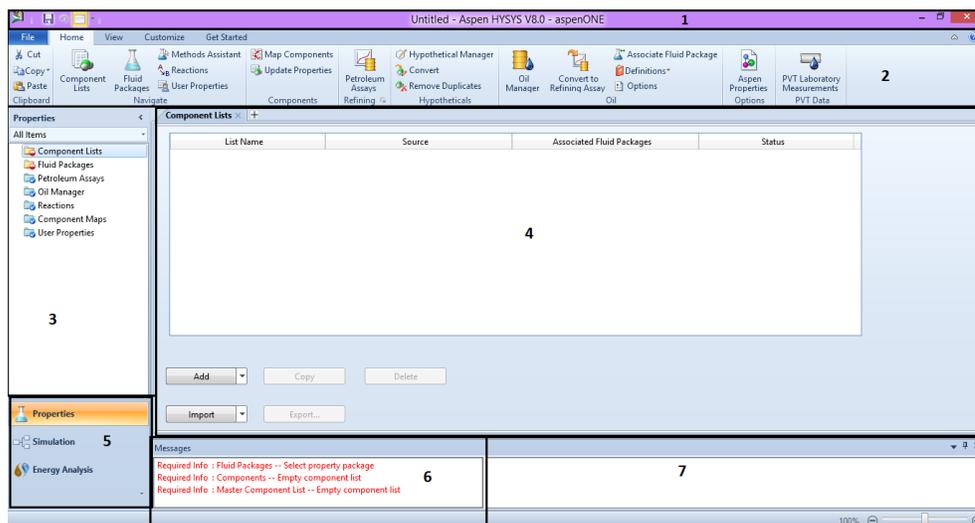


Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Al crear un caso nuevo, la ventana principal estará compuesta por:

- Barra de título (1)
- Cinta de opciones (2)
- Panel de navegación (3)
- Panel de simulación (4)
- Botones de entorno (5)
- Ventana de mensajes de estado del objeto (6)
- Ventana de mensajes de seguimiento (7)

Figura 3. Componentes de la ventana principal, Hysys V8.0



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

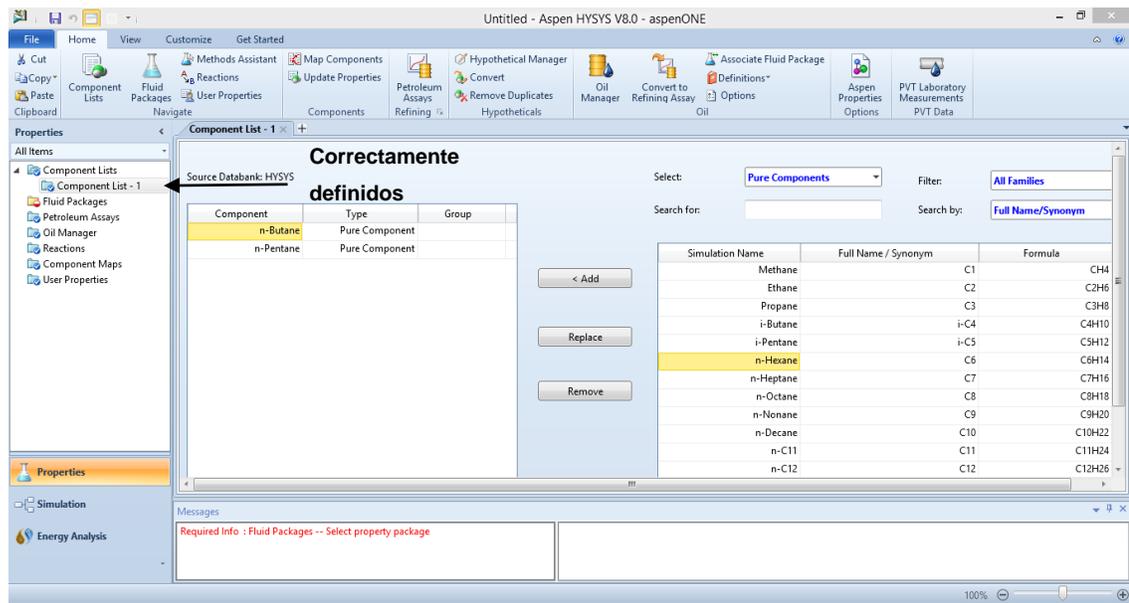
2.10.2. Selección de componentes

La base de datos de Hysys contiene más de 1 500 componentes y más de 1 600 sistemas binarios. Si dentro de la biblioteca de Hysys no se encuentra un componente, existe el método para la creación de componentes hipotéticos.

Para agregar componentes, se selecciona del panel de navegación o de la cinta de opciones 'Home', 'Component List'; en el panel de simulación se selecciona 'Add', al momento de seleccionar el componente presiona nuevamente 'Add'.

Hysys da la opción de utilizar los filtros por tipo de familia, ingresando fórmulas o el nombre del componente (nombres en inglés) y configurar sus propiedades. El panel de navegación afirmará con un *check list* que los datos ingresados están correctamente definidos.

Figura 4. Selección de componentes en Hysys V8.0

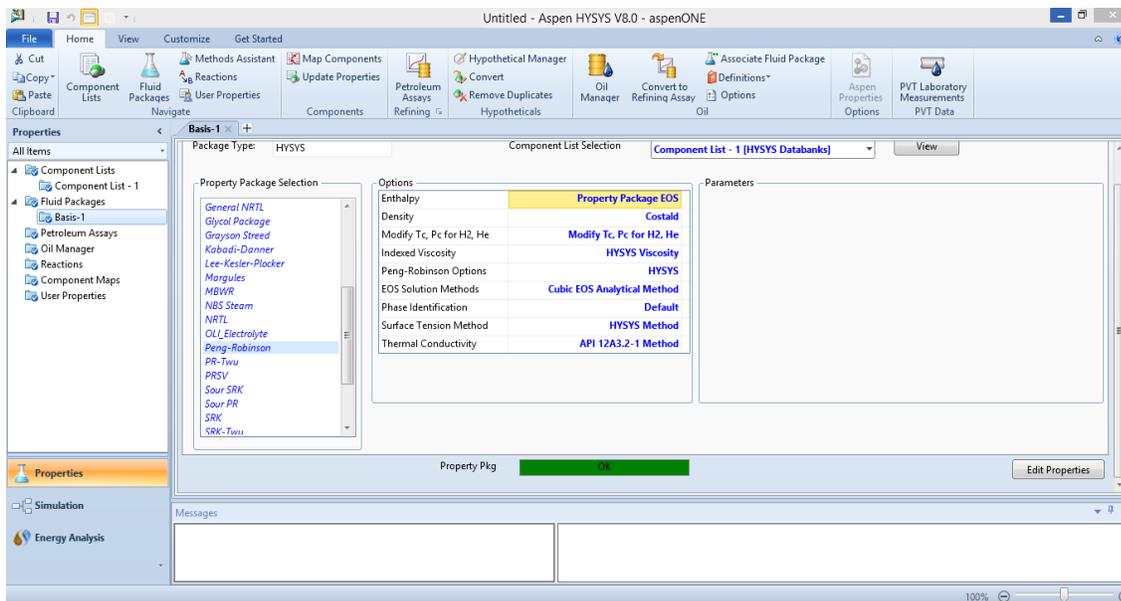


Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

2.10.3. Selección del paquete termodinámico

En el panel de navegación se selecciona la carpeta 'Fluid Packages', en el panel de simulación se selecciona 'Add' y se selecciona el paquete termodinámico requerido.

Figura 5. Selección del paquete termodinámico



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

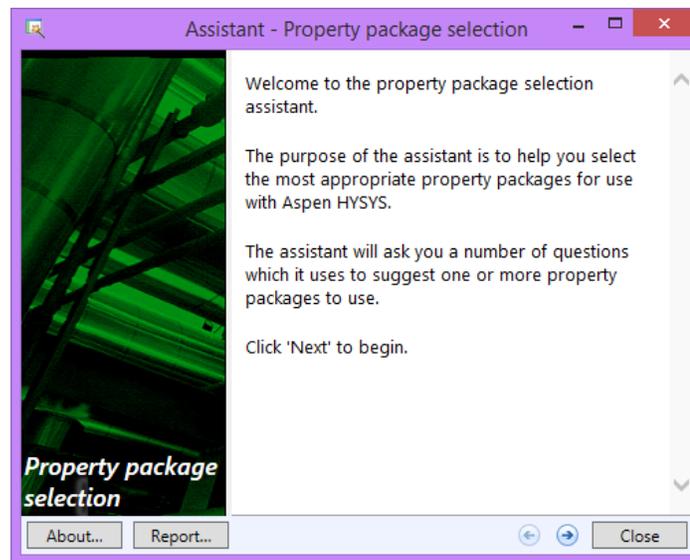
Si el paquete termodinámico está correctamente especificado, dentro del panel de simulación la barra de estado indicara un 'Ok'.

2.10.3.1. Asistente de métodos

Hysys contiene un asistente de métodos para seleccionar el paquete termodinámico apropiado en caso de desconocer el adecuado.

Para abrir el asistente, en la cinta de opciones se selecciona 'Home', 'Navigate' y 'Methods Assistant'.

Figura 6. **Ventana de asistente de métodos**



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

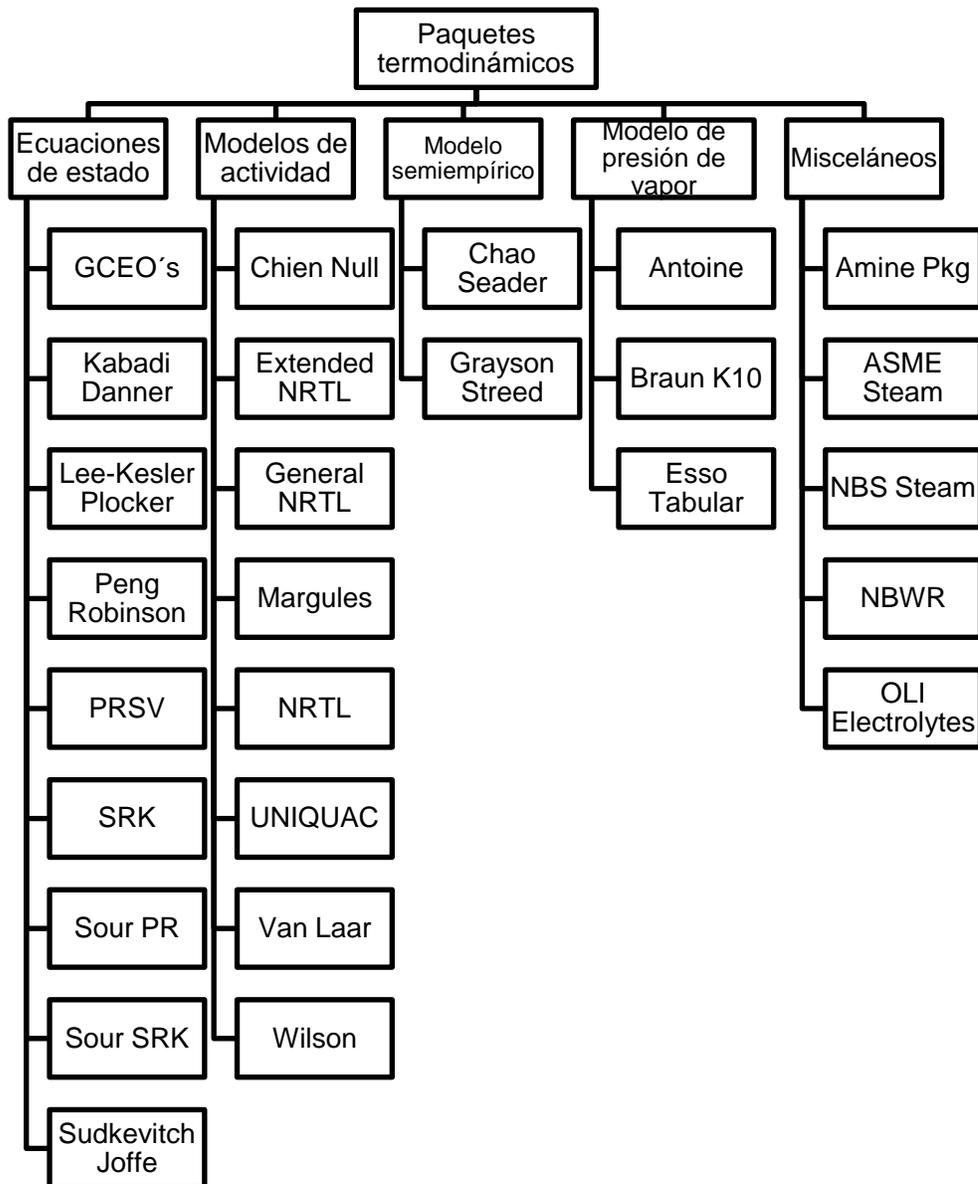
Para iniciar el proceso se procede a dar clic en el botón 'siguiente', donde aparecerán distintas opciones respecto al proceso que se desea simular; al final el asistente dará recomendaciones sobre el paquete termodinámico adecuado.

2.10.3.2. Métodos de selección

Existen otras herramientas creadas por autores para la selección de paquetes termodinámicos, es importante tener seguridad sobre cual se usará ya que será quien defina la simulación. Es posible utilizar distintos paquetes termodinámicos para una misma simulación.

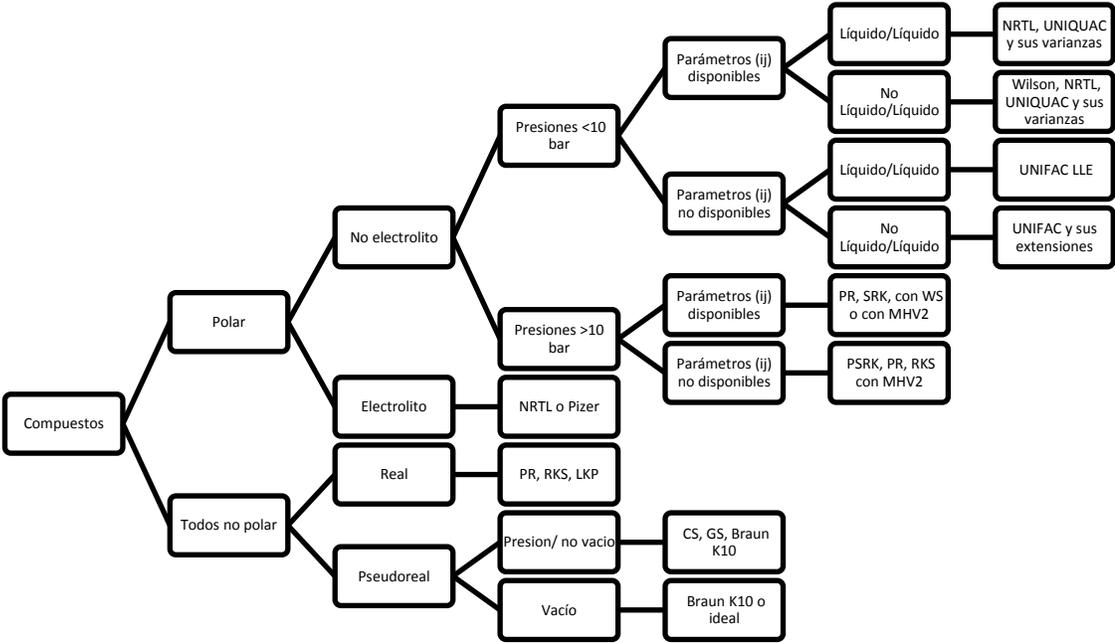
A continuación, se presenta un diagrama resumen de los paquetes termodinámicos contenidos en Hysys y su descripción.

Figura 7. Paquetes termodinámicos en Hysys



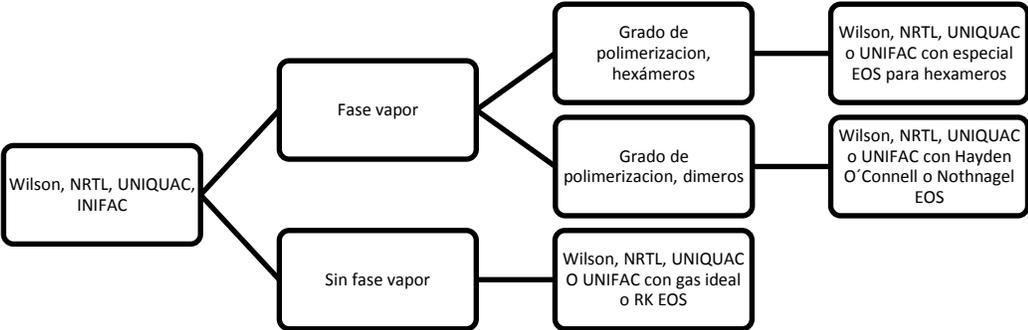
Fuente: elaboración propia.

Figura 8. Selección de paquete termodinámico, autor Eric C. Carlson



Fuente: elaboración propia.

Figura 9. Selección de paquete termodinámico, fase vapor, autor Eric C. Carlson



Fuente: elaboración propia.

2.10.3.2.1. Ecuaciones de estado

Para aplicaciones en gas, petróleo y petroquímica, en su mayoría, fluidos de base hidrocarburo.

Tabla I. Ecuaciones de estado y su aplicación

| Ecuación | Aplicación |
|--------------------|--|
| GCEO's | Esta opción de modelo permite definir e implementar una ecuación de estado generalizada cúbica de los parámetros, incluyendo las reglas de mezclado y de traslación de volumen. |
| Kabadi Danner | Es una modificación de la ecuación de estado de Soave-Redlich-Kwon (SRK) original, mejorada para cálculos de equilibrio vapor-líquido (VLE), sistemas de hidrocarburos acuosos, particularmente en el rango diluido. |
| Lee-Kesler Plocker | Este modelo es el método general de mayor precisión para sustancias no polares y mezclas de las mismas. |
| Peng Robinson | Ideal para cálculos de EVL, para cálculos de densidad de líquido en sistemas de hidrocarburos. Se incluyen varias modificaciones y mejoras efectuadas con el fin de extender su rango de aplicabilidad y precisión de predicción para algunos sistemas no ideales. |
| PRSV | Peng-Robinson Stryek Vera es una modificación en dos planos de la EOS Peng Robinson para extender su aplicabilidad a sistemas moderados de no idealidad. |
| SRK | En muchos casos la ecuación de estado de Soave-Redlich y Kwong provee resultados comparables a los de PR, pero su rango de aplicabilidad es mucho más limitado. Este método no es nada confiable para sistemas no ideales. |
| Sour PR | Combina la ecuación de estado PR con el modelo ácido de API Wilson para manejo de sistemas ácido acuosos. |
| Sour SRK | Combina la ecuación de estado SRK con el modelo ácido de API Wilson para manejo de sistemas ácido acuosos. |
| Sudkevithc Joffe | Es una modificación de la ecuación de estado de SRK, para desarrollar mejores predicciones del comportamiento de equilibrio vapor-líquido de los sistemas de hidrocarburos halogenados. |

Fuente: elaboración propia.

2.10.3.2.2. Modelos de actividad

Las ecuaciones de estado han comprobado ser muy confiables para la predicción de propiedades termodinámicas de la mayoría de fluidos a base de hidrocarburos en un amplio rango de condiciones de operación, pero está limitada principalmente a componentes no polares o levemente polares. Los sistemas no ideales son mejor simulados por modelos de actividad.

Tabla II. **Modelos de actividad y su aplicación**

| Ecuación | Aplicación |
|-----------------|---|
| Chien Null | Provee un marco de trabajo consistente para aplicar modelos de actividad existentes en una base binaria por binaria para sistemas binarios. Permite seleccionar el mejor modelo de actividad para cada par del caso en simulación. |
| Extended NRTL | La variación del modelo NRTL (<i>non random two liquids</i>), permite ingresar valores de parámetros A_{ij} , B_{ij} , C_{ij} y Alp_{2ij} utilizados en la definición de coeficientes de actividad. Se aplica este modelo a sistemas que: tengan un amplio rango de punto de ebullición entre componentes, requiera de soluciones simultáneas de EVL y ELL y cuando se tenga amplios rangos de puntos de ebullición o de concentración entre componentes. |
| General NRTL | Esta variación del modelo NRTL (<i>non random two liquids</i>), permite seleccionar el formato de ecuación para los parámetros t y a . Se aplica este modelo a sistemas con un amplio rango de punto de ebullición entre componentes, requiera de soluciones simultáneas de EVL y ELL y cuando se tenga amplios rangos de puntos de ebullición o de concentración entre componentes. |
| Margules | Esta fue la primera representación desarrollada del exceso de energía de Gibbs. Esta ecuación no tiene ninguna base teórica, pero es muy útil para estimados rápidos e interpolación de datos. |
| NRTL | Esta es una extensión de la ecuación de Wilson. Utiliza mecánica estadística y la teoría de celda líquida para representar la estructura líquida. Es capaz de representar el comportamiento de fases de sistemas de equilibrio vapor-líquido, líquido-líquido y vapor-líquido-líquido (EVL, ELL, EVLL). |

Continuación de la tabla II.

| | |
|----------|---|
| UNIQUAC | Utiliza mecánica estadística y la teoría pseudoquímica de Guggenheim para representar la estructura líquida. Esta ecuación es capaz de representar sistemas de equilibrio VL, LL y VLL con mayor precisión que el modelo NRTL; además sin la necesidad de usar el factor de distribución aleatoria. |
| Van Laar | Esta ecuación se ajusta a varios sistemas bastante bien, especialmente, a la distribución de componentes de equilibrio de LL. Se la puede usar en sistemas que exhiben desviaciones negativas o positivas de la Ley de Raoult. Sin embargo, no predice máximos o mínimos en los coeficientes de actividad. Por lo tanto, tiene pobres resultados con sistemas de HC halogenados y alcoholes. |
| Wilson | Es la primera ecuación de coeficiente de actividad en usar el modelo de composición local para derivar una expresión del Exceso de Energía de Gibbs. Ofrece un enfoque termodinámico muy consistente para la predicción de comportamiento de fase de sistemas multicomponentes de data regresiva de equilibrio binario. Sin embargo, este modelo no se puede aplicar en sistemas de dos fases líquidas. |

Fuente: elaboración propia.

2.10.3.2.3. Modelos semiempíricos

Son métodos antiguos, Grayson Streed es una extensión de Chao Seader con énfasis especial en el hidrógeno.

Tabla III. **Modelos semi-empíricos y su aplicación**

| Ecuación | Aplicación |
|----------------|--|
| Chao Seader | Para hidrocarburos pesados en procesos para presiones menores 1500 psia y rangos de temperatura de 0 a 500 fahrenheit. |
| Grayson streed | Recomendado para uso en sistemas de Hidrocarburos con alto contenido de hidrogeno. |

Fuente: elaboración propia.

2.10.3.2.4. Modelos de presión de vapor

Modelos de presión de vapor o también valores de K; se pueden utilizar para mezclas ideales o bajas presiones. Las mezclas de soluciones ideales incluyen los sistemas de hidrocarburos y mezclas de acetonas con alcoholes, en las cuales el comportamiento de la fase líquida es aproximadamente ideal. Estos modelos se pueden también utilizar como aproximaciones iniciales para sistemas no ideales.

Tabla IV. **Modelos de presión de vapor y su aplicación**

| Ecuación | Aplicación |
|-----------------|---|
| Antoine | Este modelo es aplicable para sistemas a presiones bajas que se comporten idealmente. |
| Braun K10 | Es estrictamente aplicado en sistemas de hidrocarburos pesados a bajas presiones. El modelo emplea el método de convergencia de presión de Braun, donde dado el punto de ebullición normal de un componente, el valor de K se determina a la temperatura del sistema y a 10 psia. |
| Esso Tabular | Este modelo es estrictamente aplicado en sistemas de hidrocarburos a bajas presiones. El modelo emplea una modificación del modelo de presión de vapor Maxwell-Bonnel. |

Fuente: elaboración propia.

2.10.3.2.5. Misceláneos

Contienen paquetes de propiedades que son únicos y que se ajustan a los descritos anteriormente.

Tabla V. **Modelos misceláneos y su aplicación**

| Ecuación | Aplicación |
|------------------|---|
| Amine Pkg | Contiene modelos termodinámicos desarrollados por D.B. Robinson y asociados para la planta e simulación de aminas de su propiedad, denominada AMSIM. Se puede usar este paquete de propiedades para simulaciones de plantas de amina con HYSYS. |
| ASME Steam | Está restringido a sistemas de un componente, específicamente agua. Utiliza tablas de vapor de la ASME (American Society of Mechanical Engineers) del año 1967. |
| NBS Steam | Está restringido a sistemas de un componente, específicamente agua. Utiliza tablas de vapor de la NBS (National Boiler Society) del año 1984. |
| MBWR | Es una modificación de la versión original de la ecuación Benedict-Webb-Rubin. Esta ecuación de 32 términos de modelo de estado es aplicable solo para un set de componentes específicos y de condiciones de operación específicas. |
| OLI Electrolytes | Desarrollado por OKI Systems Inc. Se utiliza para predicción de propiedades de sistemas acuosos incluyendo reacciones de fase y químicas. |

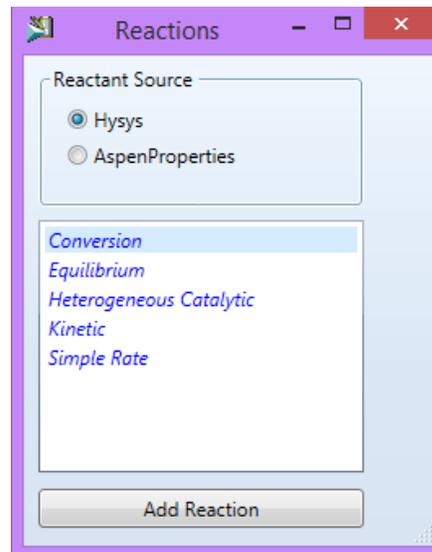
Fuente: elaboración propia.

2.10.3.3. Simulación con reacción

En el panel de navegación (figura 10) se encuentra la opción 'Reactions', en el panel de simulación se selecciona la opción 'Add' y dependiendo del tipo de reacción, se selecciona entre las siguientes opciones.

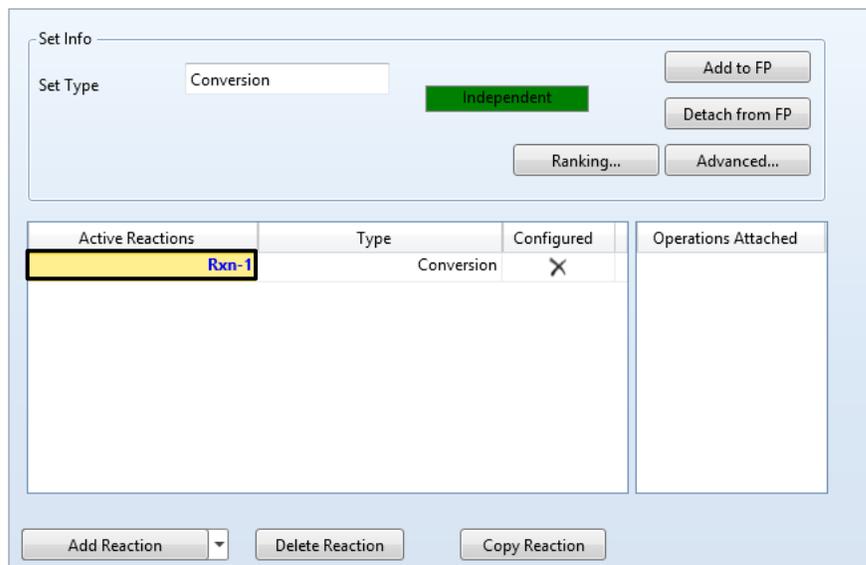
Para ingresar datos que especifiquen la reacción, dar doble clic sobre 'Rxn-1' (figura 11); con un clic se puede modificar el nombre.

Figura 10. **Ventana para selección de reacciones**



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

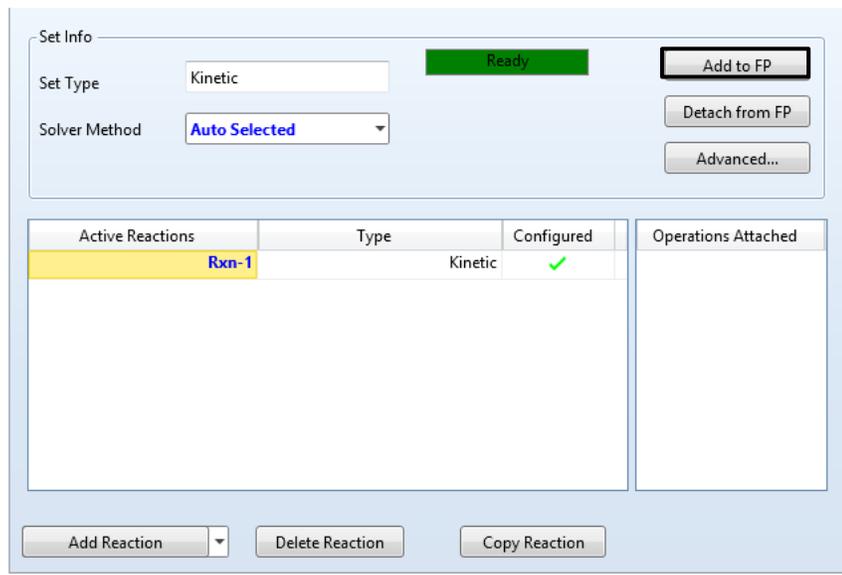
Figura 11. **Ventana para ingresar datos de la reacción**



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Para agregar la reacción al paquete de fluidos, se selecciona 'Add to FP', con esto la reacción quedara correctamente especificada.

Figura 12. Configuración de la reacción a paquete de fluidos



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

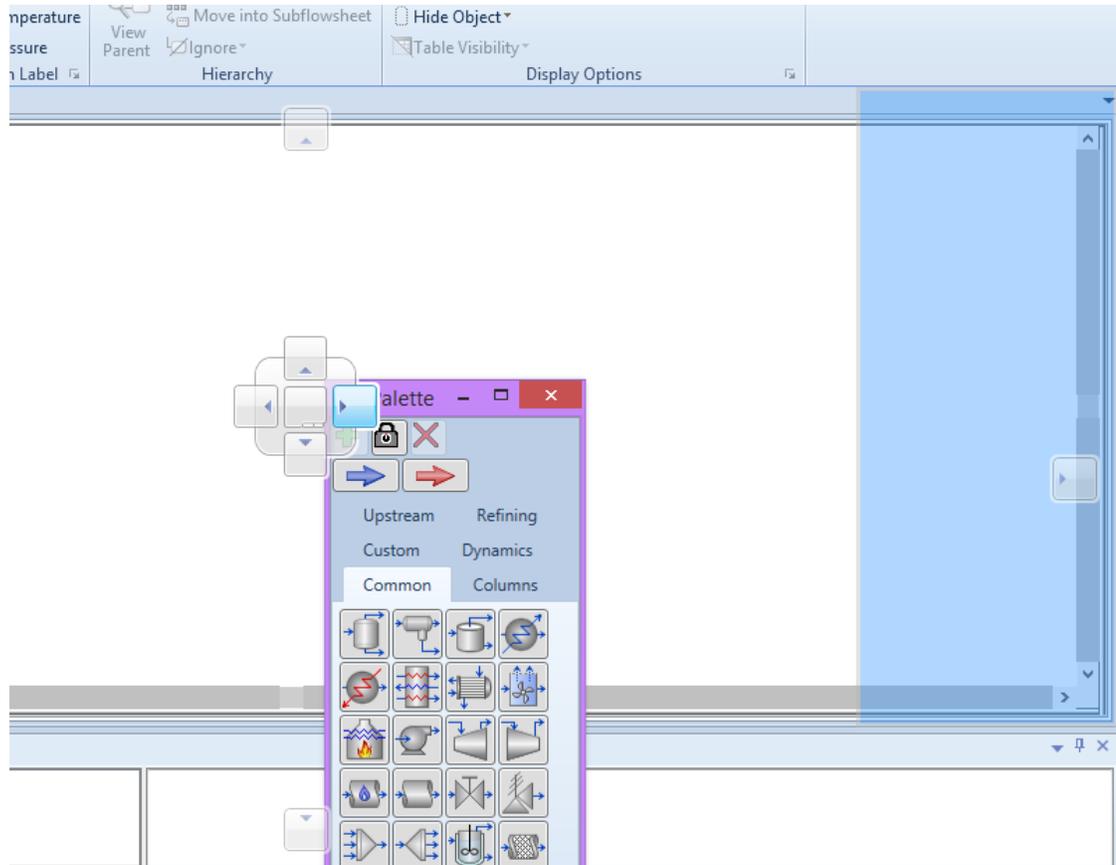
2.10.4. Construcción del PFD

Para construir correctamente el PFD se necesita tener definido el modelo, conocer el equipo, corrientes de materia y energía.

En los botones de entorno se selecciona 'Simulation', automáticamente abrirá una nueva ventana 'Palette'.

La ventana 'Palette' se puede ubicar arrastrándola al centro del Panel de simulación, otra manera de obtenerla es dirigiéndose a la cinta de opciones, se selecciona View 'Model Palette'.

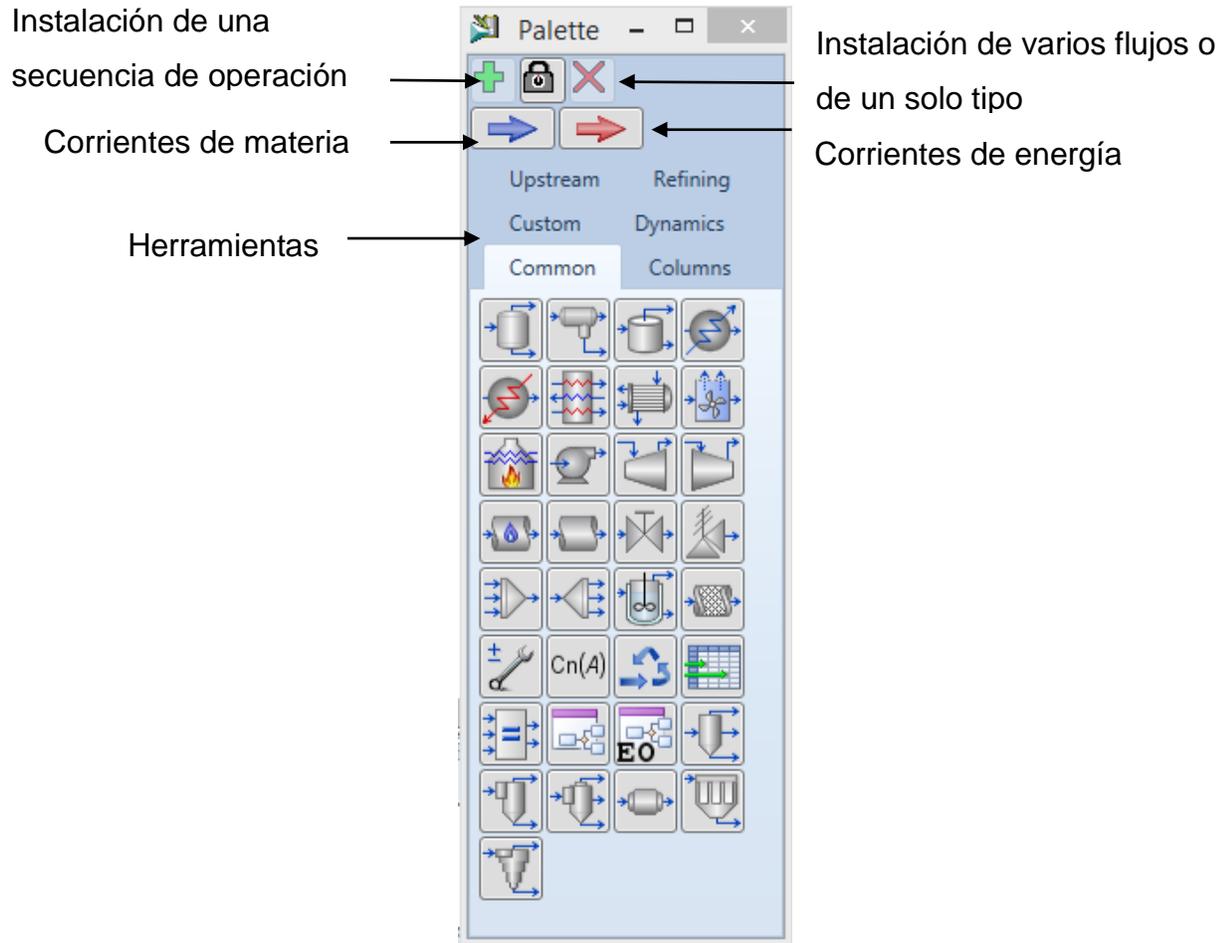
Figura 13. Ubicación de la venta Palette



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Las corrientes de materia requieren la especificación del flujo y algunas variables que permitan la estimación de sus propiedades físicas y termodinámicas. Las corrientes de energía representan unidades energéticas, como en intercambiadores de calor, bombas y otras. La corriente de materia se representa en la ventana 'Palette' de color azul y las corrientes de energía en rojo.

Figura 14. **Ventana Palette**



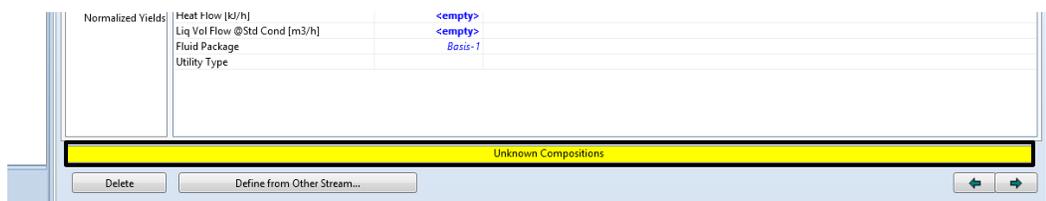
Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

2.10.5. **Agregar condiciones a cada corriente**

Para agregar condiciones a cada corriente, se selecciona del panel de navegación 'Streams', en subcarpetas aparecerán los nombres de las corrientes de materia y energía que se eligieron anteriormente. Al dar clic se podrá desplegar las opciones para ingresar datos, en color azul aparecerán los datos ingresados y en negro los calculados.

Dentro del panel de simulación aparecerán avisos sobre datos que se necesitan agregar para definir correctamente una corriente; esto se puede verificar en la barra de estado que indicará que datos harán falta para completar las condiciones; por ejemplo; composición, temperatura o presión.

Figura 15. Avisos de la barra de estado



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Si una corriente está definida correctamente la barra de estado indica 'Ok' y la carpeta correspondiente en el panel de navegación se encuentra con un *check list* azul. Para cambiar unidades se selecciona en la cinta de opciones 'Home', 'Units'.

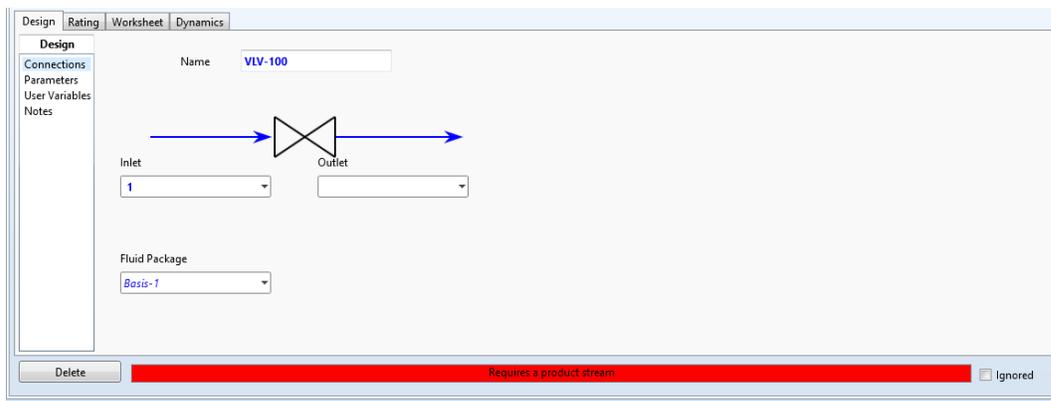
La información para definir una corriente de materia es: temperatura, presión, tasa de flujo, composiciones y fracción de vapor de la corriente; estos datos se pueden importar de otras corrientes con la opción 'Define from Other Stream'.

2.10.6. Agregar condiciones de operación de equipos

Para agregar condiciones a los equipos, se selecciona del panel de navegación 'UnitOps', en subcarpetas nos aparecerán los nombres de los equipos. Al dar doble click se desplegarán las opciones para identificar

correctamente las condiciones del equipo, como cada corriente de entrada, salida, presión y 'Rating'.

Figura 16. **Condiciones para equipos**



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

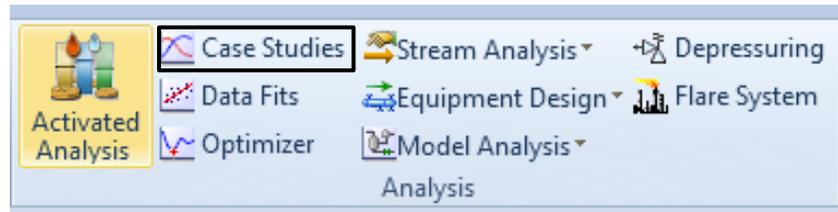
2.10.7. **Generación de reportes**

Para generar reportes, en el panel de navegación se selecciona 'Worbook' o de la cinta de opciones se selecciona 'Home', 'Summaries', 'Worbook'. Aparecerá un cuadro en resumen de las corrientes y equipos seleccionados.

2.10.8. **Estudios de caso**

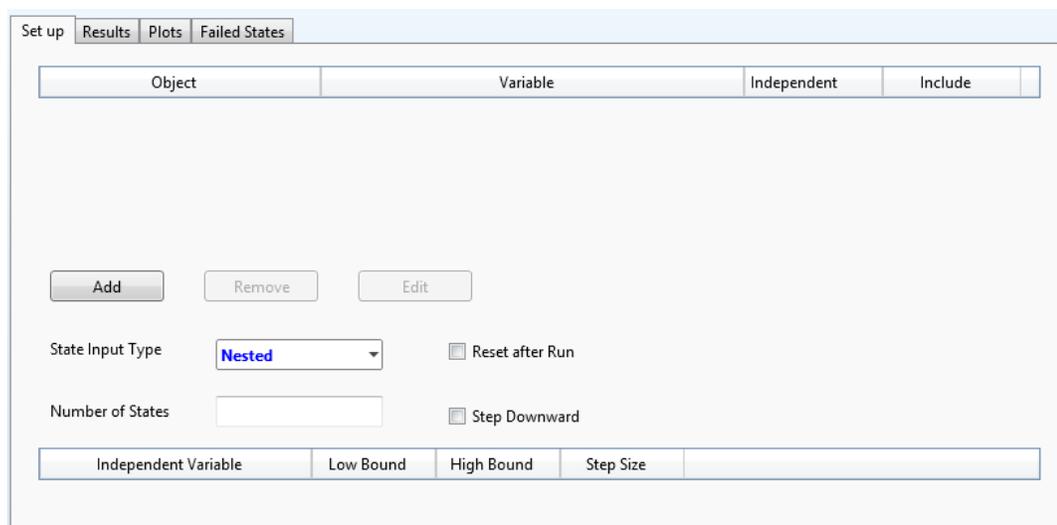
Nos permite analizar la información por medio de gráficas que pueden involucran a las distintas variables, el estudio de caso no devolverá a su estado original su simulación después de realizarla, por lo cual antes de ejecutarla es recomendable hacer un registro y guardar una copia original. En la cinta de opciones 'Home', 'Analysis', 'Case Studies' y 'Add'.

Figura 17. Selección de 'Case Studies'



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 18. Ventana para realizar un caso de estudio



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

2.10.9. Estado dinámico

Es un tipo de modelo para representar sistemas cuyo estado varía con el tiempo.

Ayuda a mejorar el diseño, optimización, evaluación de seguridad, rendimiento, transiciones entre las condiciones de funcionamiento, arranque, condiciones de apagado y operación de procesos; los factores como carga, medio ambiente, mal intercambio de calor y degradación catalítica afectan las condiciones de un proceso estable y dado que las plantas de producción nunca están en estado estacionario; los sistemas de procesos son mejor estudiados usando simulación dinámica.

Se puede estudiar el funcionamiento de una planta en una situación real por medio de la especificación de los equipos para conocer su funcionamiento y optimizar el diseño de control sin afectar la seguridad de la planta proporcionando una visión del sistema de proceso cuando no es posible con modelado de estado estacionario.

El modelo dinámico utiliza un conjunto de ecuaciones diferentes para demostrar los cambios a través del tiempo; las ecuaciones de materia, energía y composición incluyen un término adicional 'acumulación' este término es una diferenciación con respecto al tiempo.

El modo dinámico se activa al añadir un nuevo PFD, previamente se debe guardar el proceso en estado estacionario. En estado dinámico es necesario configurar lazos de control o controladores los cuales controlan el flujo de la corriente de alimento, el nivel de líquido o la presión en el tanque manipulando válvulas.

Hysys tiene un paquete de simulación dinámica con la capacidad de ofrecer características para un público amplio:

- Exactitud
- Facilidad de uso

- Velocidad
- Diseño detallado
- Realismo
- Personalización

Existe una nomenclatura básica para el uso del sistema dinámico, el cual se presenta a continuación.

Tabla VI. **Nomenclatura básica utilizada en el sistema dinámico por los controladores**

| Ecuación | Aplicación |
|-------------------------------|--|
| PV | Variable del proceso, corresponde a la variable controlable. |
| OP | Salida (output) o variable manipulable, encargada de mantener a PV en su valor de set point (SP). |
| Parámetro operacional directo | Cuando el valor de la variable de salida aumenta, la apertura de la válvula también aumenta. |
| Parámetro operacional inverso | Cuando el valor de la variable de salida aumenta, la apertura de la válvula debe disminuir. |
| <i>Tuning</i> | Sintoniza los controladores, le da valores a los parámetros como ganancia, tiempo integral y tiempo derivativo. |
| Tiempo muerto | El tiempo muerto en la simulación, define un periodo en el cual no existe una respuesta positiva por parte de las variables del sistema; por ejemplo, que no exista reacción en un tiempo determinado, lo cual es un indicador de que se deben manipular variables para disminuir estos periodos o mejorarlos. |

Fuente: elaboración propia.

Los lazos de control se activan mediante controladores conocidos como PID, siendo los más utilizados en la industria de procesos.

Los controladores PID utilizan letras para la identificación de instrumentos; la primera letra indica la variable medida, variable del proceso.

Tabla VII. **Letras de identificación para controladores**

| Significado | Letra |
|--------------------|--------------|
| Flujo | F |
| Nivel | L |
| Presión | P |
| Temperatura | T |
| Peso | W |
| Tiempo | K |
| Humedad | M |
| Concentración | A |

Fuente: elaboración propia.

La segunda letra es un modificador o función del dispositivo, T (transmisor, E (sensor) e I (indicador). La tercera letra es la función del dispositivo o modificador, C (control).

Viene determinado por tres parámetros: proporcional o ganancia, integral y derivativo. Dependiendo de la modalidad del controlador alguno de estos valores puede ser 0.

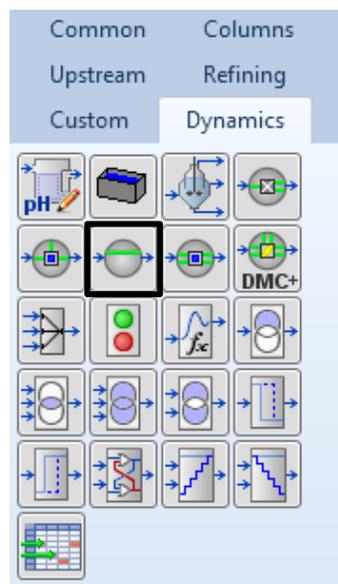
El control proporcional o ganancia: es el control principal y su función es crear una respuesta en la salida proporcional al error.

El control integral: se encarga de eliminar el error residual que da el control proporcional reduciéndolo a 0.

Control derivativo: se utiliza para eliminar las sobre-oscilaciones generando una corrección en la señal de control proporcional al error, anticipa para estabilizar rápidamente.

De la paleta de objeto se selecciona 'Dynamics' y 'PID Controller'

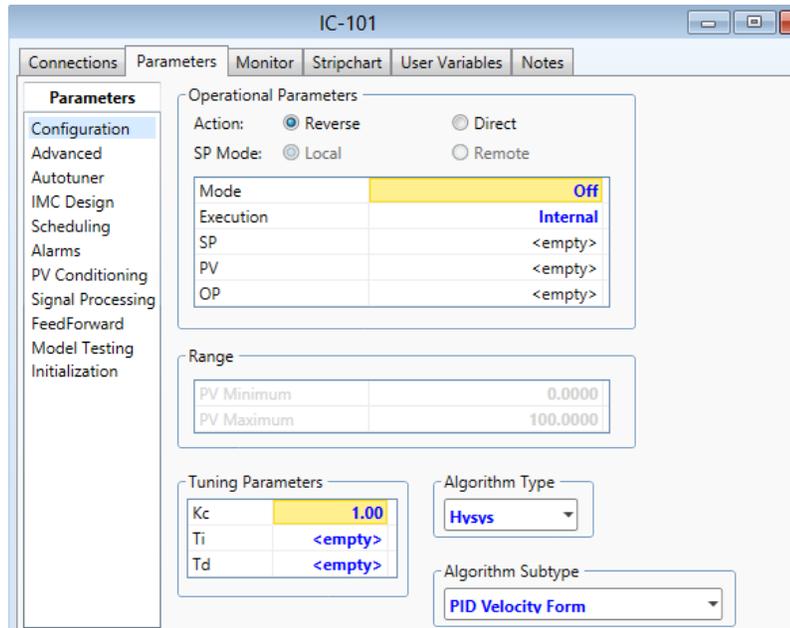
Figura 19. **Controlador PID**



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Para definir un controlador PID en Hysys es necesario contar con los valores de 'Tuning Parameters', 'Range' e importante conocer el tipo de parámetro operacional, 'Operational Parameters'.

Figura 20. **Ventana de controlador PID, parámetros**



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Los valores de 'Tuning Parameters' se encuentran en manuales de Aspen Hysys dependiendo de la función del controlador PID.

Tabla VIII. **Valores para 'Tuning Parameters'**

| Sistema | Kc | Ti(minutes) | Td (minutes) |
|-------------|-----|-------------|--------------|
| Flujo | 0,1 | 0,2 | 0 |
| Nivel | 2 | 10 | 0 |
| Presión | 2 | 2 | 0 |
| Temperatura | 1 | 20 | 0 |

Fuente: elaboración propia.

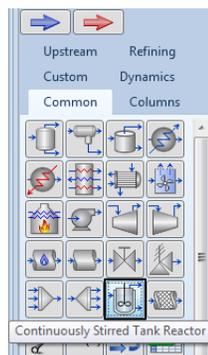
Los valores de P_v máximo y P_v mínimo que solicita 'Tuning' se seleccionan dependiendo del valor en estado estacionario de la variable de proceso, con el objetivo de mantener el valor de PV entre el rango. Hysys completa el resto de las especificaciones.

2.10.10. Reactor CSTR

Es un reactor continuo de mezcla perfecta o también llamado de retromezcla (*backmix*), se emplea sobre todo para reacciones en fase líquida.

Normalmente, se opera en estado estacionario (es decir, las condiciones no cambian con el tiempo)² y se asume que produce mezcla perfecta (agitación continua), no hay dependencia del tiempo, o de la posición en la temperatura, la concentración o la velocidad de reacción dentro del CSTR; en este reactor todas las variables son iguales en todos los puntos de su interior por lo que las variables de salida se toman iguales a aquellas en el interior del reactor.

Figura 21. Reactor CSTR en Hysys V8.0



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

² FOGLER, H. Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. p. 13.

2.10.11. Propilenglicol

Es un compuesto orgánico, incoloro e inodoro. Es un anticongelante en aviones, vehículos e industria, ecológicamente amigable y no tóxico para mascotas. En la mayoría de los casos es un disolvente eficaz, sus aplicaciones se presentan en productos farmacéuticos, alimentos, alimentos para mascotas, cosméticos, tratamientos de aguas o como emulsificante para pinturas.

2.10.11.1. Propiedades

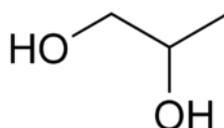
Propiedades base:

- Peso molecular: 76,10 g/mol
- Punto de ebullición: 187,4 °C
- Densidad ideal del líquido: 1 040 kg/m³

Propiedades en puntos críticos:

- Temperatura: 351,9 °C
- Presión: 6070 kPa
- Volumen: 0,2370 m³/ kg mol
- Excentricidad: 1,107

Figura 22. Estructura de propilenglicol



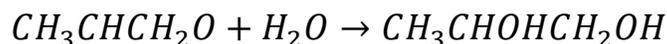
Fuente: elaboración propia.

2.10.11.2. Producción de propilenglicol

“Es producido por la hidratación del óxido de propileno en un proceso similar que para la producción de etilenglicol por hidratación de óxido de etileno”.³ El propilenglicol constituye aproximadamente el 25 % de los principales derivados del óxido de propileno.

2.10.11.3. Reacción general

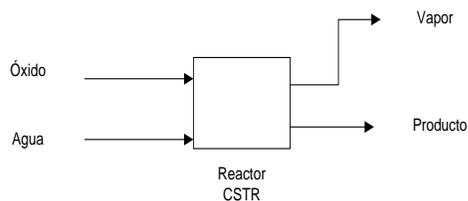
La reacción de hidratación del óxido de propileno es exotérmica, se representa de la siguiente manera:



2.10.11.4. Diagrama de bloques

Los flujos de entrada correspondientes al proceso son: óxido de propileno y agua, los cuales se integran a un reactor, CSTR. El proceso cuenta con venteo en caso que la presión del reactor se eleve y exceda determinado límite.

Figura 23. **Proceso de producción de propilenglicol**



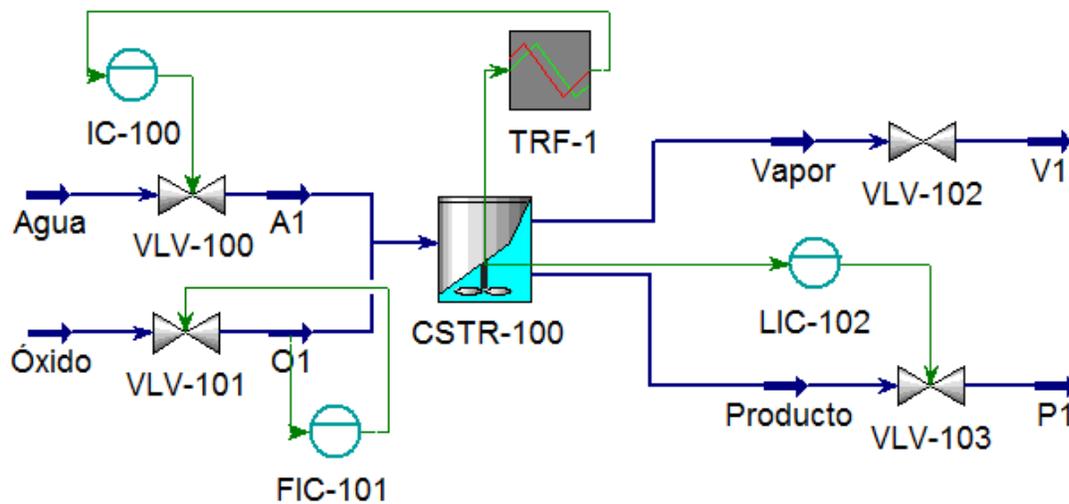
Fuente: elaboración propia.

³ SPEIGHT, James G. *Chemical process and design handbook*. p. 2437.

2.10.11.5. Diagrama de flujo de proceso (PFD)

El siguiente diagrama de flujo es el que se tomará de guía para ser representado en el simulador Hysys en estado dinámico.

Figura 24. Diagrama de flujo del proceso de propilenglicol



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

3. DISEÑO METODOLÓGICO

Detalle de la metodología para el estudio y la obtención de resultados.

3.1. Variables

3.1.1. Variables involucradas en el proceso

Tabla IX. Variables del modelo de producción de propilenglicol

| Núm. | Variable | Descripción | Controlable/ no controlable | Dependiente / independiente |
|------|----------------|--------------------------------------|--------------------------------|--------------------------------|
| 1. | Kg/h | Flujo másico del agua | C | D |
| 2. | Kg/h | Flujo másico del óxido | C | D |
| 3. | A | Factor de frecuencia | NC | I |
| 4. | E | Energía de activación | NC | I |
| 5. | °C | Temperatura de corrientes de entrada | C | D |
| 6. | °C | Temperatura del reactor | C | D |
| 7. | m ³ | Volumen del reactor | NC | I |
| 8. | bar | Presión de corrientes de entrada | C | D |
| 9. | bar | Presión máxima de válvulas | C | D |
| 10. | bar | Presión del reactor | C | D |
| 11. | plg | Diámetro de tubería | NC | I |
| 12. | Cv | Coefficiente de flujo | NC | I |
| 13. | % | Porcentaje de apertura de válvulas | C | D |
| 14. | °C | Temperatura del reactor | C | D |
| 15. | m ³ | Nivel del reactor | C | D |
| 16. | Pv | Variable del proceso | NC | I |
| 17. | Kc | Ganancia | NC | I |
| 18. | Ti | Tiempo integral | NC | I |
| 19. | Td | Tiempo derivativo | NC | I |

Fuente: elaboración propia.

3.2. Delimitación del campo de estudio

Se representó el modelo de producción de propilenglicol y se ejemplificó cada operación en estado estable y dinámico con el simulador Hysys V8.0. La investigación se realizó utilizando un equipo de cómputo bajo la supervisión del ingeniero químico Williams Guillermo Álvarez Mejía.

3.3. Recursos humanos disponibles

- Investigador: Sucely Marylena Zapeta Panjoj
- Asesor: Ing. Químico Williams Guillermo Álvarez Mejía.
- Asesor/revisor: Ing. Químico Víctor Manuel Monzón Valdez.

3.4. Recursos materiales disponibles

A continuación, se listan los materiales de apoyo para realizar la investigación.

- Referencias bibliográficas
 - Libros
 - Manuales
 - Páginas web
 - Papers
 - Publicaciones

3.5. Técnica cualitativa o cuantitativa

El desarrollo del proyecto fue de carácter cualitativo; se analizó y definió un modelo ejemplificando la aplicación del simulador Hysys V8.0 para el proceso de producción de propilenglicol. Se realizó la simulación en estado estable realizando configuraciones previas para el estudio del estado dinámico. Se representó el estado dinámico dando a conocer la configuración y el uso de controladores PID, se analizó su aplicación por medio de perturbaciones o modificaciones al sistema.

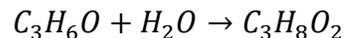
3.6. Recolección y ordenamiento de la información

A continuación, se establece el modelo para la simulación de producción de propilenglicol.

3.6.1. Representación del modelo de producción de propilenglicol

Inicialmente, se alimentan 500 kg/h de agua que se mezclan dentro del reactor con una segunda corriente (óxido) que contiene 1 085 kg/h de óxido de propileno y 1 050 kg/h de metano. El metanol se coloca en la mezcla con el fin de mejorar la solubilidad entre el óxido de propileno y le agua. Dicha mezcla ingresa a un reactor CSTR (reactor) y allí se lleva a cabo la reacción de hidrolisis de óxido de propileno. Por la parte inferior del reactor se retiran los productos de reacción en fase líquida.

- Reacción y estequiometria.



Los componentes que hacen parte de la reacción son el óxido de propileno, agua, metanol y propilenglicol (1,2-propanodiol). El modelo termodinámico correspondiente es NRTL. El reactivo limitante es el óxido de propileno. La reacción cinética se considera de primer orden respecto a la concentración de óxido de propileno; la base de la reacción es líquido combinado y las unidades son kgmol/m³ para la concentración, kgmol/h-m³ para la velocidad de reacción y °K para la temperatura. La reacción es irreversible. La energía de activación debe ir en kJ/Kgmol para la consistencia de la ecuación cinética.

- Reacción cinética

$$K = Ae^{\left(\frac{-E}{RT}\right)} \quad (\text{Ec.1})$$

$$K = 1,7X10^{13} * e^{\left(\frac{32444}{RT}\right)}$$

Tabla X. **Condiciones para las corrientes de entrada**

| Corriente | Agua (H ₂ O) | Óxido | |
|----------------------|-------------------------|--|-----------------------------|
| | | Óxido de propileno (C ₃ H ₆ O) | Metanol (CH ₄ O) |
| Temperatura (C) | 24 | 24 | 24 |
| Presión (bar) | 6 | 6 | 6 |
| Tasa de flujo (kg/h) | 500 | 1 085 | 1 050 |
| Composición | 1 | - | - |

Fuente: elaboración propia.

Tabla XI. **Configuración de válvulas Universal Gas Sizing, Lineal**

| Válvula | VLV-100 | VLV-101 | VLV-102 | VLV-103 |
|------------------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| Estimación | Cv | Cv | Cv | Cg |
| Porcentaje de apertura | 50 % | 50 % | 50 % | 50 % |
| Presión máxima (bar) | 3 | 3 | 1 | 1 |
| Diámetro (plg) | 1 | 1 | 1,5 | 1,5 |

Fuente: elaboración propia.

Tabla XII. **Condiciones para configurar el reactor CSTR**

| Parámetro | Especificación |
|---------------------------|-----------------------|
| Temperatura (C) | Adiabático |
| Volumen (m ³) | 1,14 |
| Presión (bar) | 3 |

Fuente: elaboración propia.

Para configurar el estado estable a estado dinámico es necesario establecer controladores PID. A continuación, se presenta una tabla con datos para configurar cada uno de los controladores que serán necesarios instalar en el PFD previo a iniciar la simulación dinámica.

La estrategia de control del reactor puede establecerse a través de tres grados de libertad representados en las tres válvulas de control (V1, V2 y V3).

La válvula VLV-100 se utiliza para el control de temperatura en el reactor; el flujo de agua alimentado se encarga de absorber el calor generado en la reacción y, por tanto, tiene un efecto directo sobre la temperatura. Además, la

temperatura tiene una interacción directa con la concentración y de esa manera se controla al mismo tiempo el avance de la reacción.

Tabla XIII. **Parámetros de configuración para controladores**

| Válvula | IC-100 | FIC-101 | LIC-102 |
|---------------------|---|---|--|
| Elemento de entrada | Salida de tiempo muerto (PV, tiempo muerto) | Flujo másico, corriente oxido1 (F Oxido1) | Porcentaje de nivel de líquido del reactor (Niv Reactor) |
| Elemento de salida | VLV-100 | VLV-101 | VLV-102 |
| PV mínimo | 70 | 1 500 kg/h | 0 |
| PV máximo | 140 | 2 800 kg/h | 100 |
| Acción | Directa | Inversa | Directa |
| Kc | 1 | 0.1 | 2 |
| Ti (min) | 20 | 0.2 | 10 |

Fuente: elaboración propia.

La válvula VLV-101 controla el flujo de alimentación de óxido de propileno, puesto que es el reactante limitante y de esta manera se garantiza el flujo de producción deseado de propilenglicol.

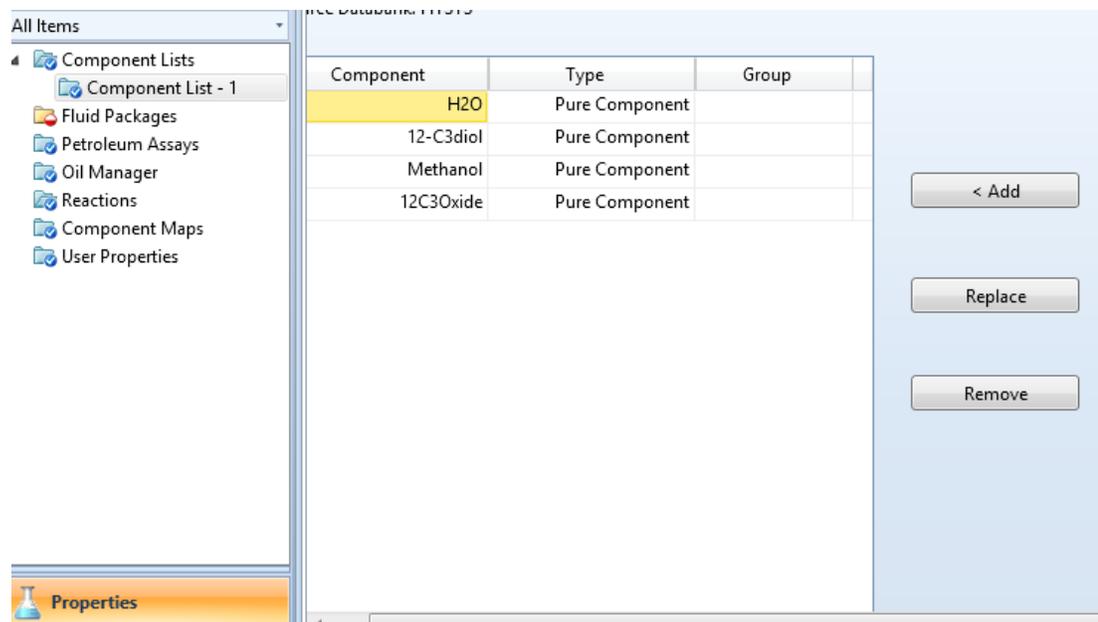
La válvula VLV-102 se utiliza para controlar el nivel de líquido en el reactor por razones de seguridad y porque el nivel es una variable que no se autorregula.

3.6.2. Ejemplo de la simulación del proceso de producción de propilenglicol en estado estacionario

Para simular y ejemplificar cada operación del proceso de producción de propilenglicol en estado estacionario se utilizó el algoritmo de 7 pasos descrito en el marco teórico.

3.6.2.1. Caso nuevo y selección de componentes

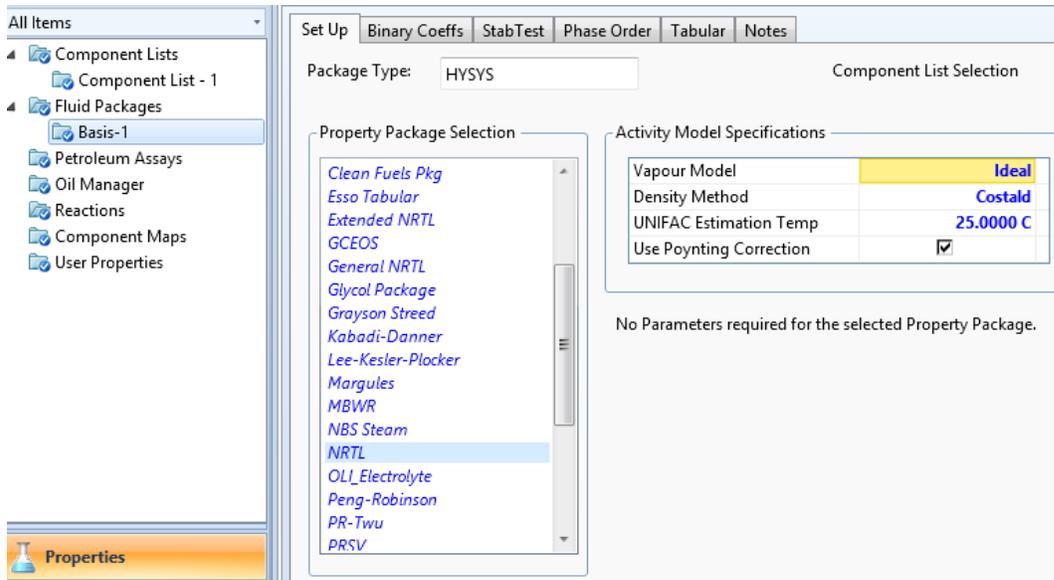
Figura 25. Selección de componentes



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

3.6.2.2. Selección del paquete termodinámico

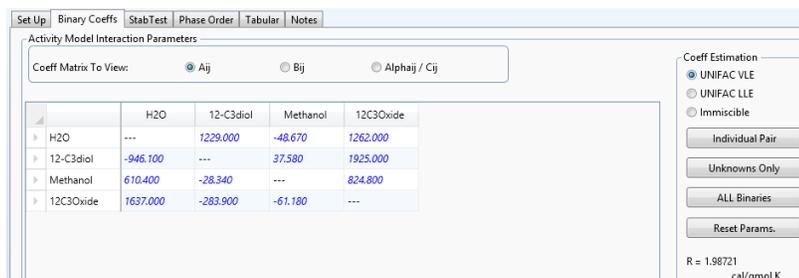
Figura 26. Selección del paquete termodinámico



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Para calcular parámetros se ubica en la pestaña 'Binary Coeffs' y se selecciona 'unknowns only'.

Figura 27. Configuración para el cálculo de componentes

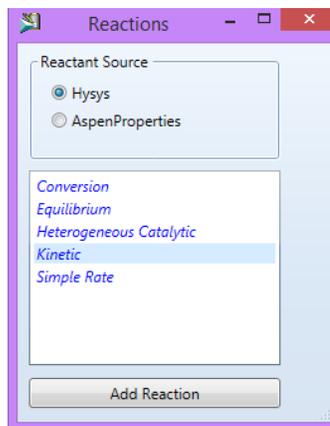


Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

3.6.2.3. Selección e introducción de datos para la reacción involucrada

En el panel de navegación, se selecciona 'Reactions'.

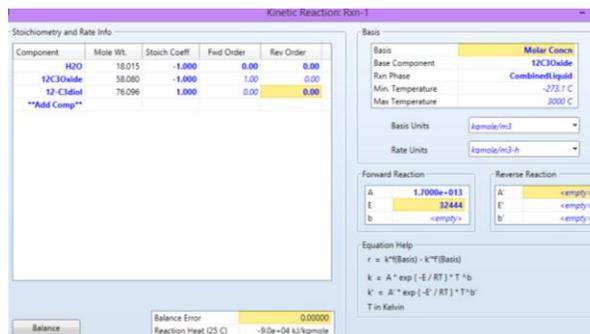
Figura 28. Selección de reacción cinética



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

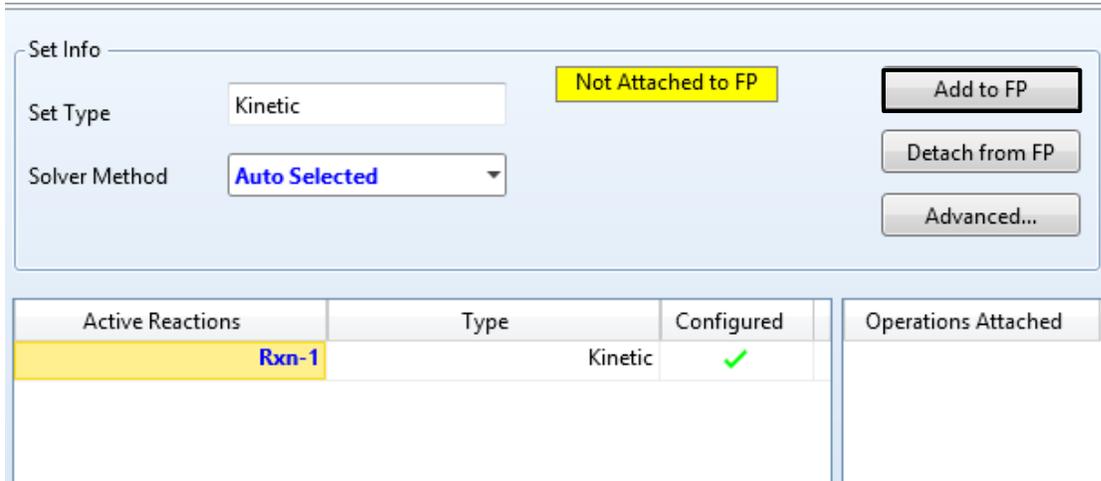
Con la ecuación No. 1 se especifica la reacción cinética.

Figura 29. Especificación de parámetros para la reacción cinética



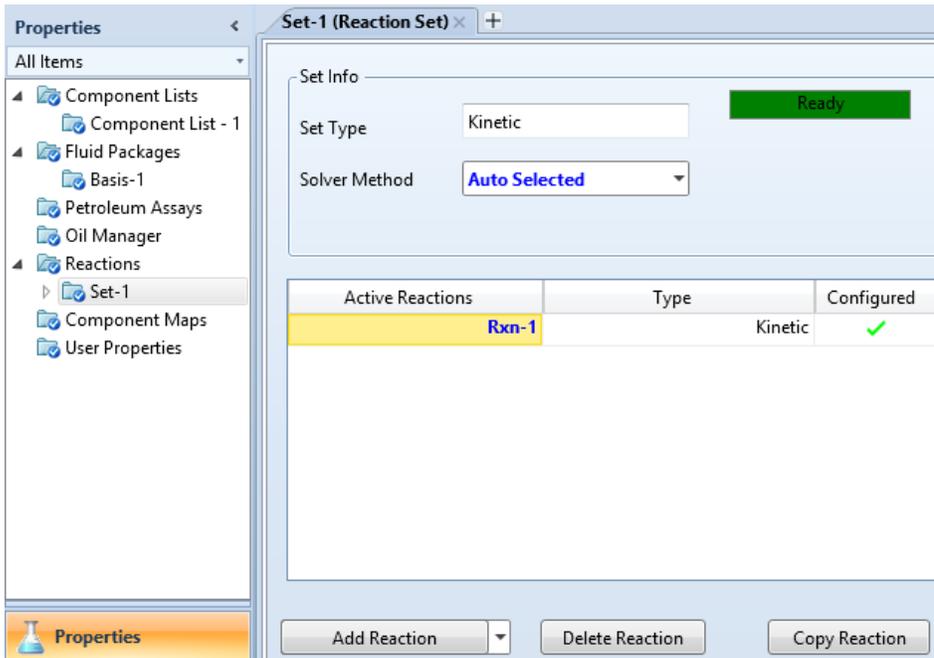
Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 30. Adición de la reacción al paquete de fluidos



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

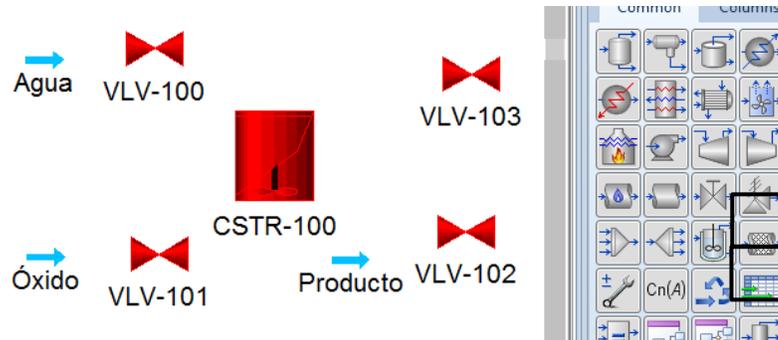
Figura 31. Reacción correctamente especificada



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

3.6.2.4. Construcción de PFD

Figura 32. Construcción del PFD



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

3.6.2.5. Condiciones para cada corriente de entrada

Con los datos de la tabla X se ingresa la información correspondiente a cada corriente.

Figura 33. Condiciones de la corriente de agua

| Material Stream: Agua | | |
|-----------------------|-------------------------------|-------------|
| Worksheet | Attachments | Dynamics |
| Worksheet | Stream Name | Agua |
| Conditions | Vapour / Phase Fraction | 0.0000 |
| Properties | Temperature [C] | 24.00 |
| Composition | Pressure [kPa] | 600.0 |
| Oil & Gas Feed | Molar Flow [kgmole/h] | 27.75 |
| Petroleum Assay | Mass Flow [kg/h] | 500.0 |
| K Value | Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h] | 0.5010 |
| User Variables | Molar Enthalpy [kJ/kgmole] | -2.850e+005 |
| Notes | Molar Entropy [kJ/kgmole-C] | 6.302 |
| Cost Parameters | Heat Flow [kJ/h] | -7.909e+006 |
| Normalized Yields | Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h] | 0.4927 |
| | Fluid Package | Basis-1 |
| | Utility Type | |

Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 34. Condiciones de la corriente de óxido

The screenshot shows the 'Material Stream: Óxido' dialog box in Hysys V8.0. The 'Worksheet' tab is selected, and the 'Mass Flows' section is visible. The table below shows the mass flow rates for different components. The total mass flow is 2135.00000 kg/h.

| Component | Mass Flows | Liquid f |
|-----------|------------|----------|
| H2O | 0.0000 | |
| 12-C3diol | 0.0000 | |
| Methanol | 1050.0000 | |
| 12C3Oxide | 1085.0000 | |

Total: 2135.00000 kg/h

Buttons: Edit..., View Properties..., Basis..., OK

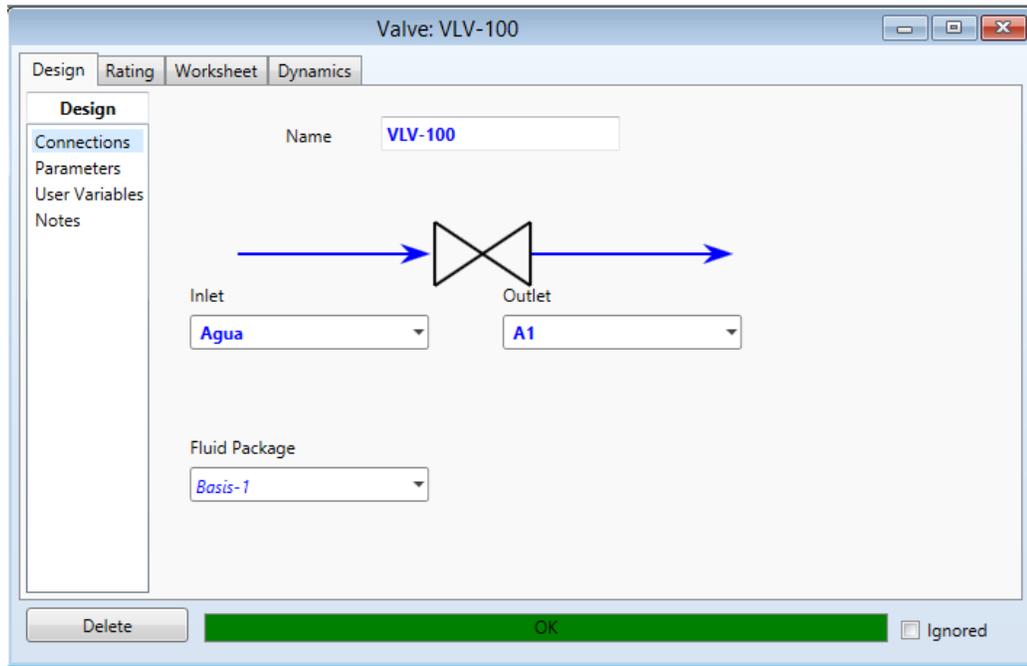
Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

3.6.2.6. Agregar condiciones de operación a equipos

Con los datos de las tablas XI y XII se configura cada válvula y equipo; el orden para la configuración fue VLV-100, VLV-101, CSTR, VLV-102 y VLV-103.

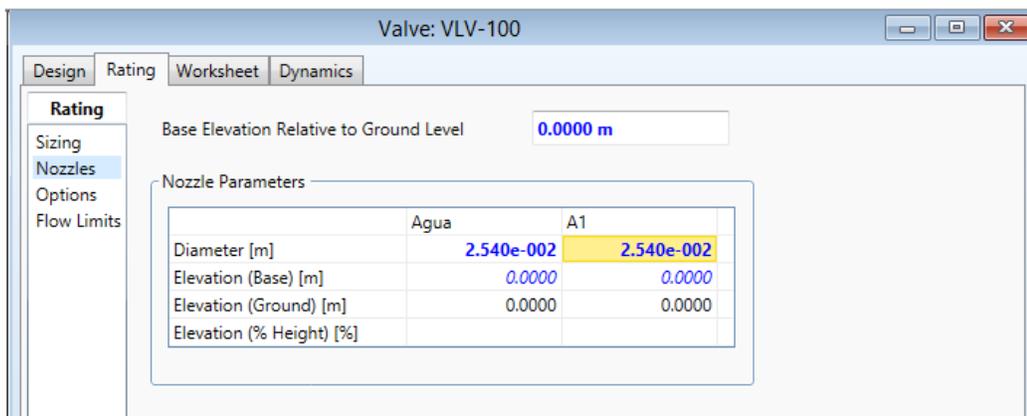
Como ejemplo se configura la válvula VLV-100; el proceso para todas las válvulas es el mismo.

Figura 35. Configuración de condiciones de entrada para las válvulas



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

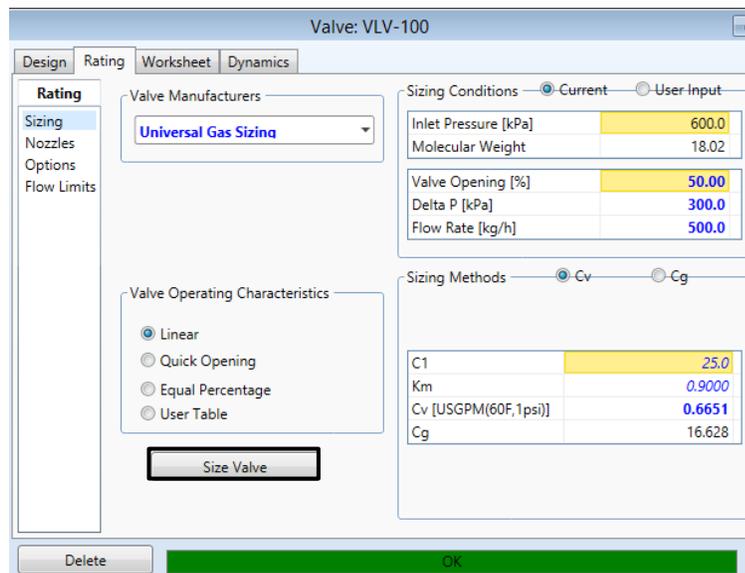
Figura 36. Configuración de diámetro de válvulas



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

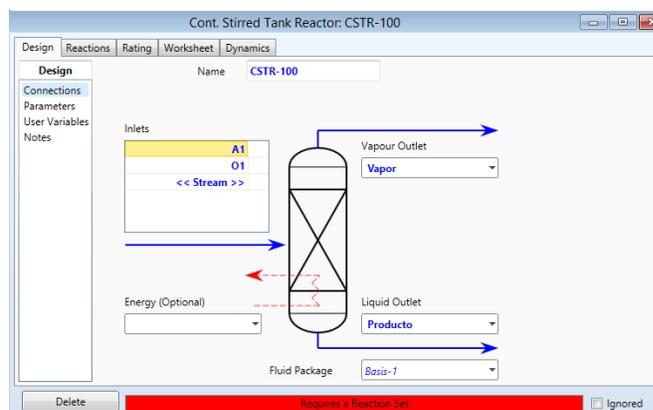
Los coeficientes de flujo se estiman dependiendo del estado del fluido en la válvula, C_v para líquidos y C_g para gases.

Figura 37. **Estimación de coeficientes de flujo**



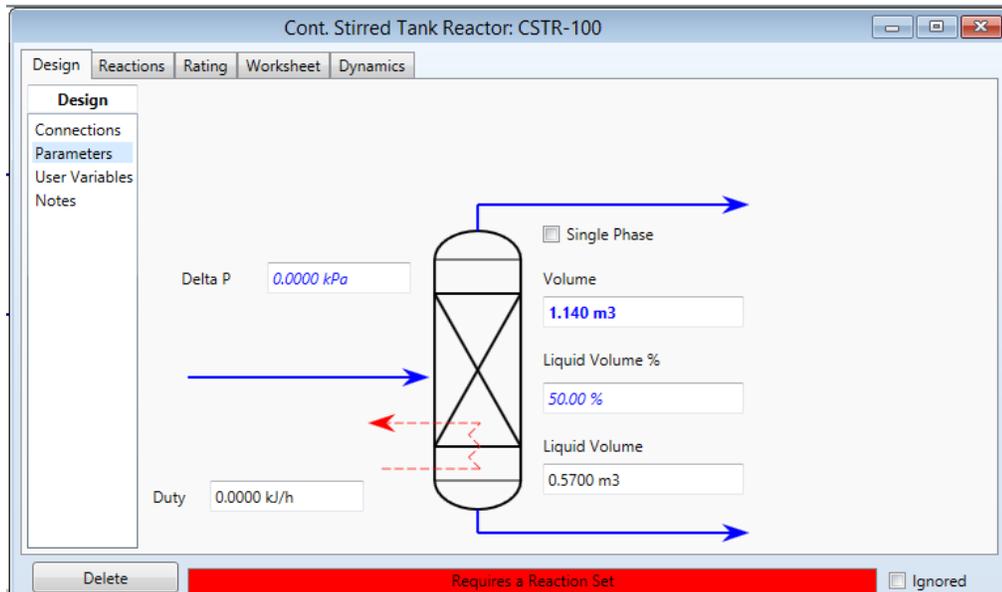
Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 38. **Configuración de corrientes de entrada al reactor**



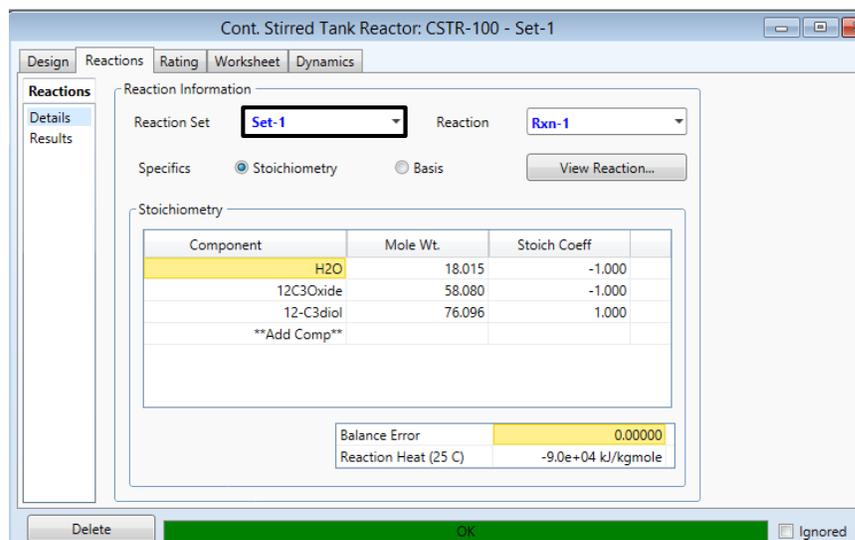
Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 39. Configuración del volumen para el reactor CSTR



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

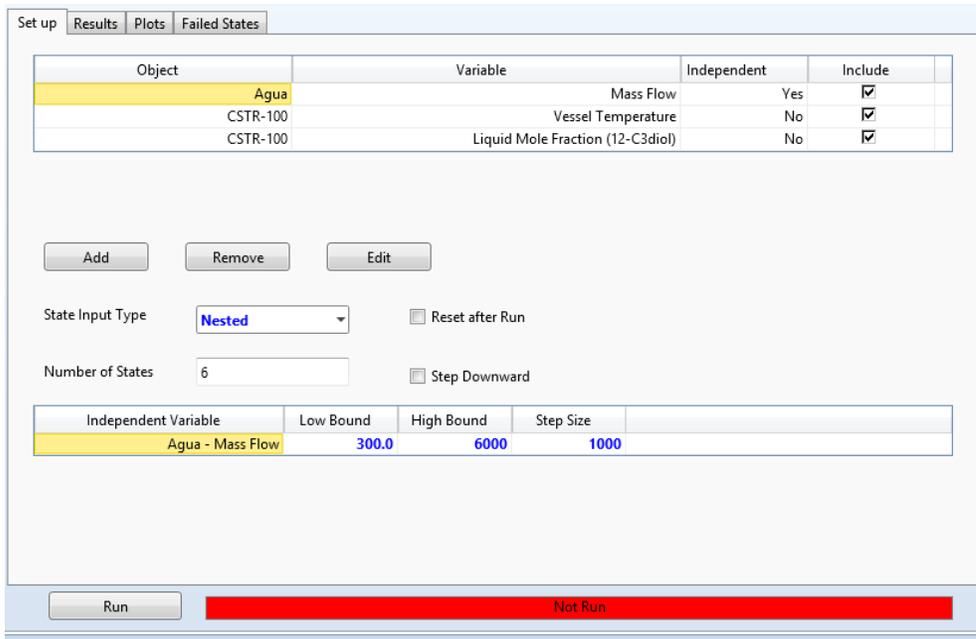
Figura 40. Selección de la reacción para el reactor CSTR



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Previamente a realizar un estudio de caso, se guardó un registro de la simulación y se utilizó una copia.

Figura 41. **Ventana con datos para estudio de caso**



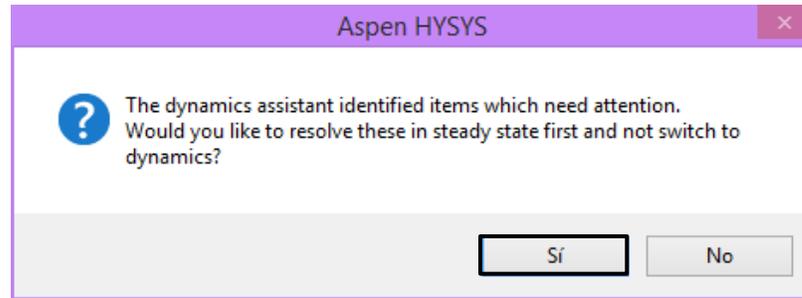
Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

El diagrama generado se presenta en la sección de resultados.

3.6.3. **Ejemplo de la simulación del proceso de producción de propilenglicol en estado dinámico**

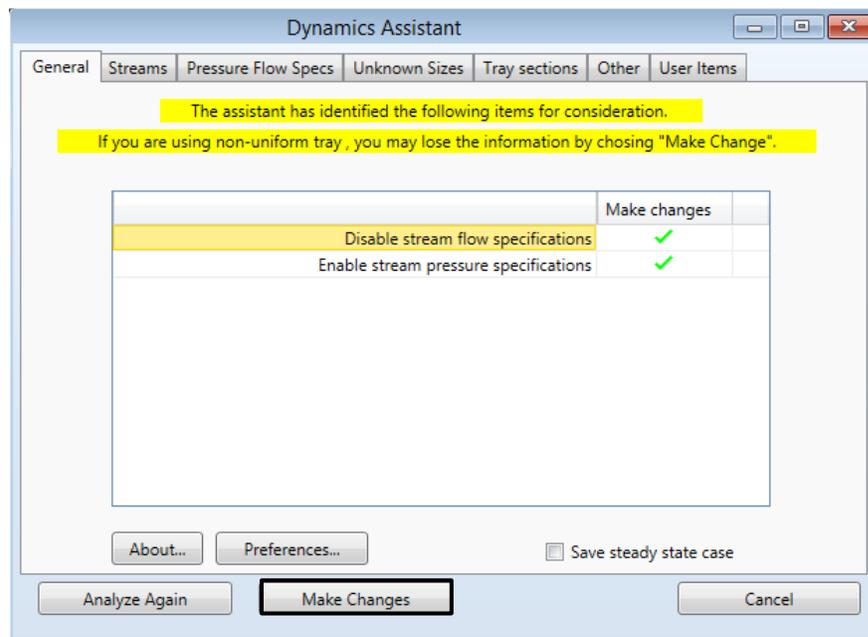
Para iniciar la simulación dinámica, en la cinta de opciones se selecciona 'Dynamics', 'Dynamics Mode' y aparecerá una ventana para confirmar la configuración a estado dinámico.

Figura 42. Ingreso al estado dinámico



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

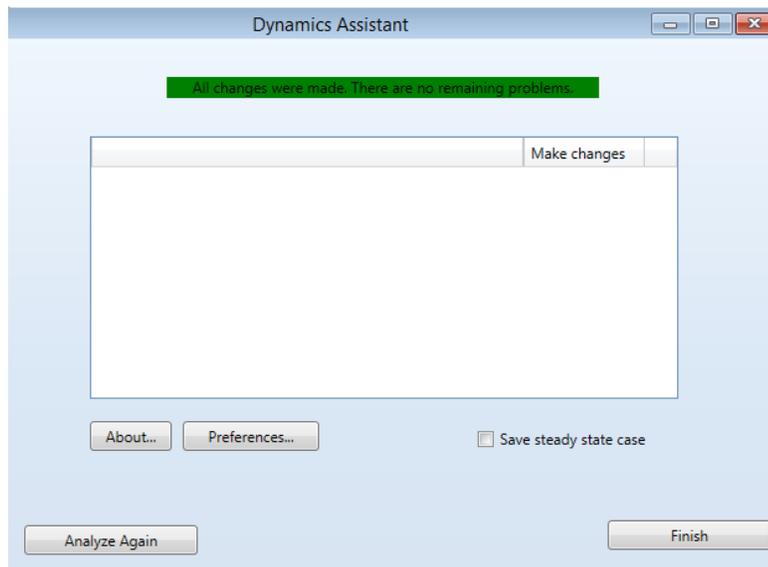
Figura 43. Asistente dinámico



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

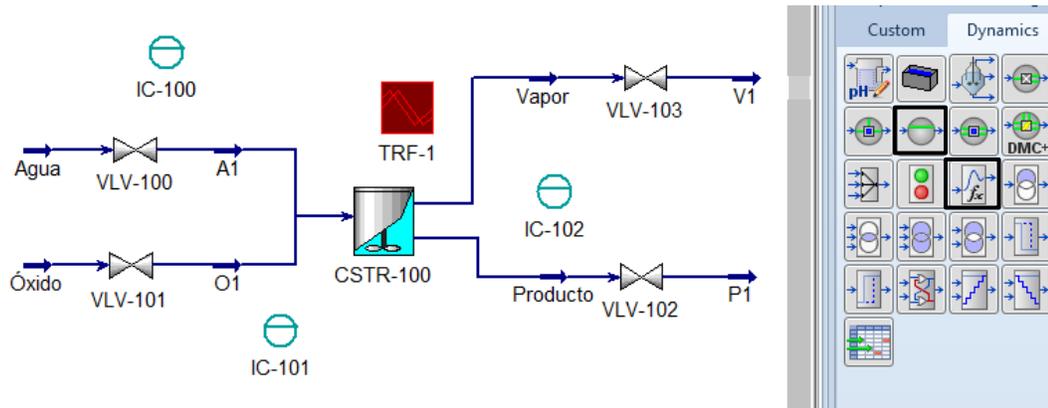
El asistente dinámico confirmará que el sistema en estado estacionario está correctamente especificado para ser simulado en estado dinámico; se selecciona 'Make Changes' y se finaliza el asistente 'Finish'.

Figura 44. **Finalización del asistente dinámico**



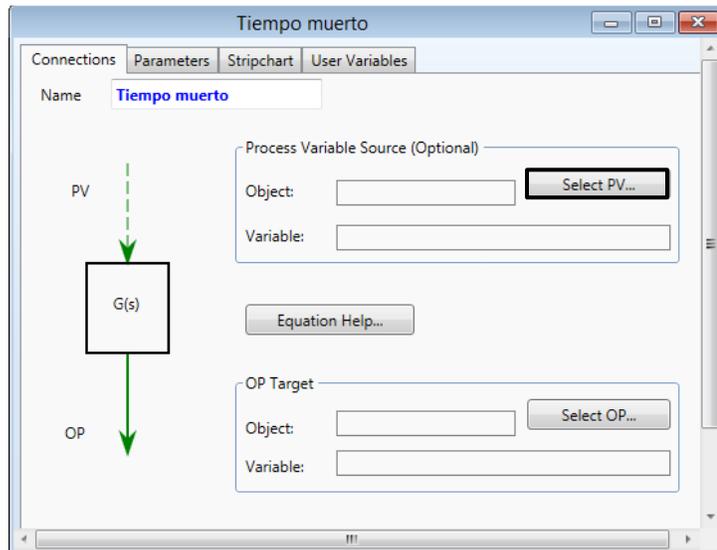
Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 45. **Instalación, bloque de función de transferencia y controladores PID**



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

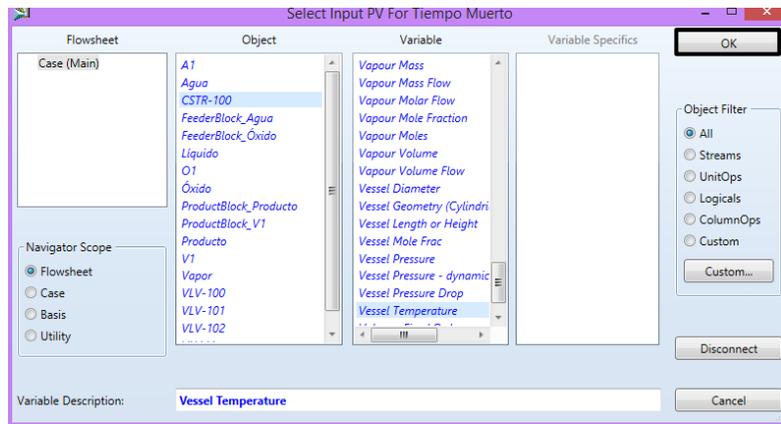
Figura 46. **Configuración de función de transferencia (tiempo muerto)**



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Para la función de transferencia (tiempo muerto) únicamente se selecciona la temperatura del reactor (*vessel temperature*) como variable de proceso PV.

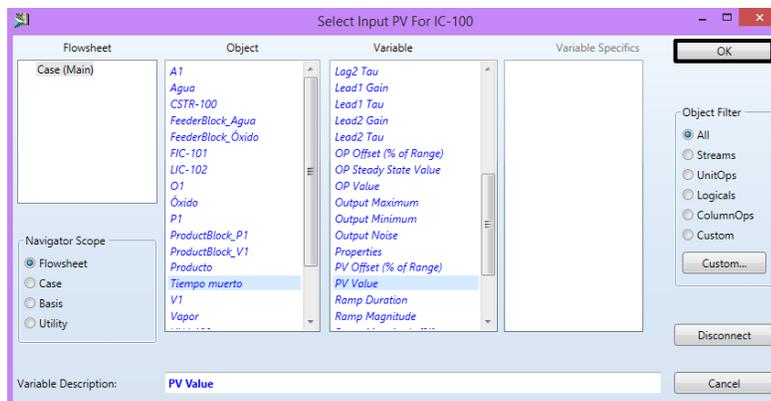
Figura 47. Selección de la temperatura del reactor como PV



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

En el bloque del controlador (IC-100), se configura como variable de proceso PV, 'PV Value' del tiempo muerto.

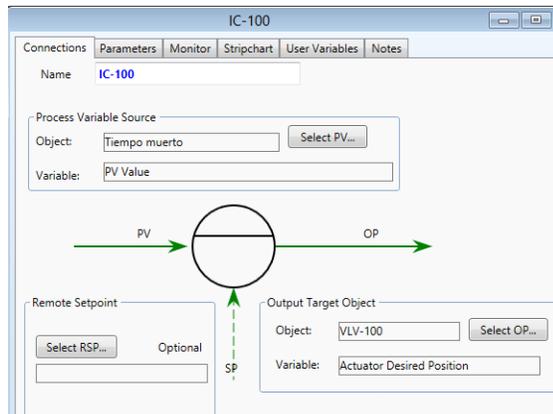
Figura 48. Selección de la temperatura del reactor como PV



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

La variable 'Output Target Object' se conecta con la VLV-100 que ajusta el flujo de agua.

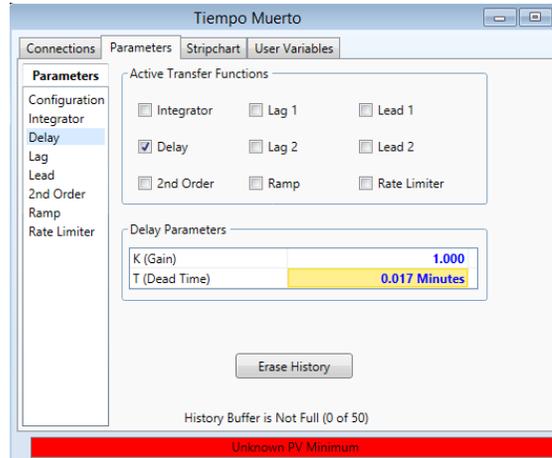
Figura 49. **Configuración de conexiones del controlador IC-100**



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

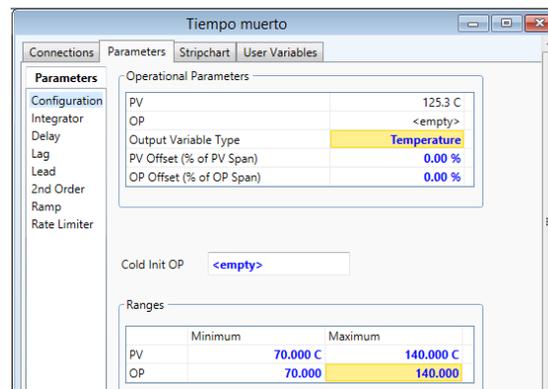
Para el tiempo muerto se activa la opción 'Delay', en la pestaña 'Parameters', 'Delay', allí se digita un tiempo muerto de 1 segundo, posteriormente se ajustan los valores de 'Ranges PV y OP' como se muestra en la figura 50.

Figura 50. **Activación de la opción ‘Delay’ en tiempo muerto**



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

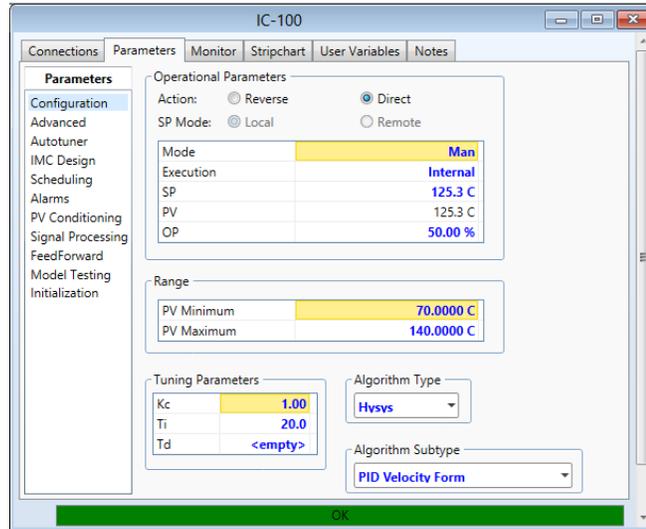
Figura 51. **Ajuste de parámetros en tiempo muerto**



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

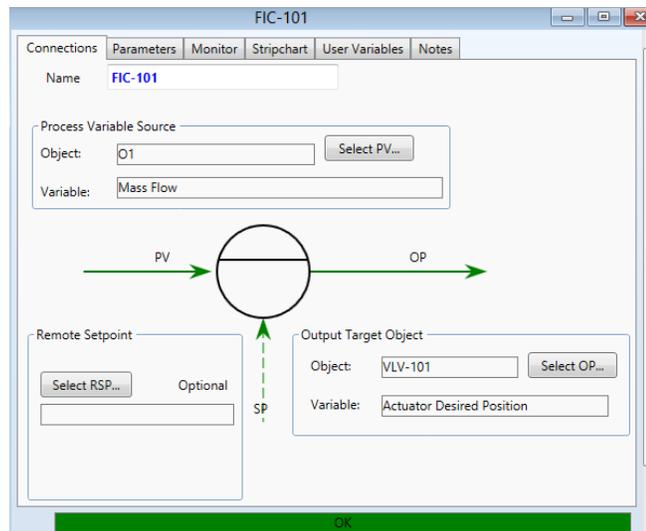
Con los datos de la tabla XIII se configura cada uno de los controladores, es recomendable iniciar con los valores ‘Tuning Parameters’ y ‘Range’.

Figura 52. **Configuración de parámetros de controlador IC-100**



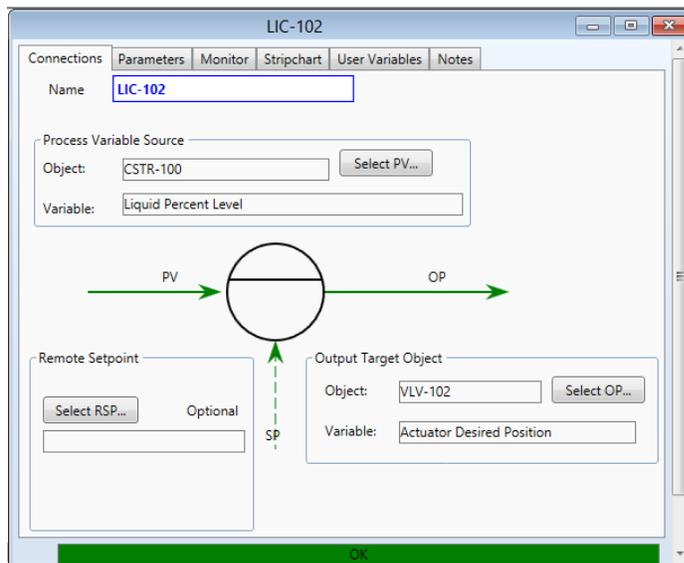
Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 53. **Configuración de conexiones de controlador FIC-101**



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

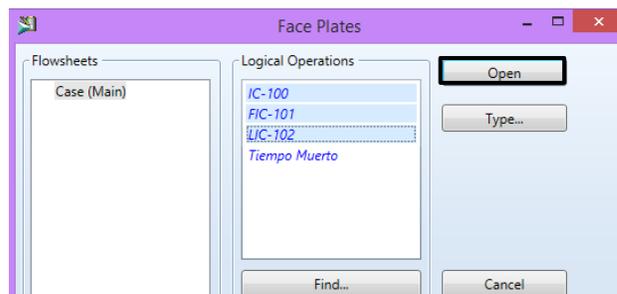
Figura 54. **Configuración de conexiones de controlador LIC-102**



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Para observar los valores de *set point* (SP), la variable de proceso (PV) y porcentaje de apertura de la válvula de control (OP) durante la simulación dinámica, en la cinta de opciones se ingresa a 'Dynamics', 'Face Plates' y se seleccionan cada uno.

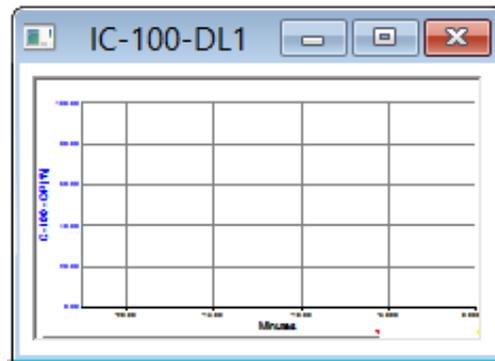
Figura 55. **Configuración de conexiones de controlador LIC-102**



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

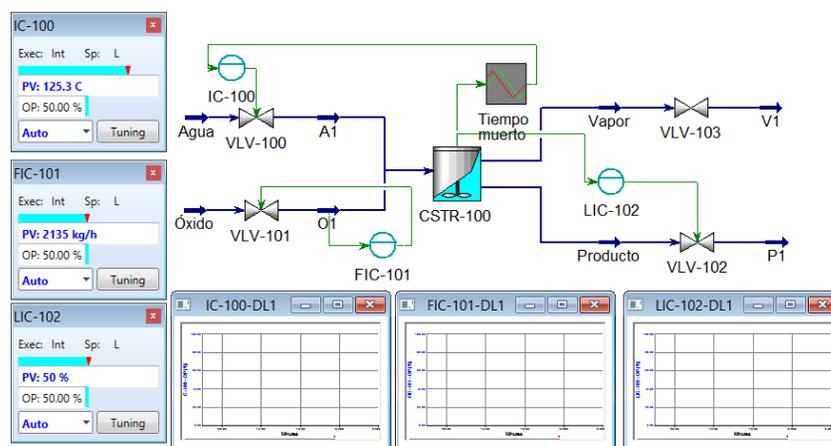
Antes de iniciar la simulación dinámica, se agrega un 'strip chart' para cada controlador. En cada 'face plate' se selecciona 'tuning', 'Stripchart', 'Variable Set', 'SP, PV, OP only', 'Create Stripchart' y 'Display', para realizar configuraciones se da click derecho sobre el monitor y se selecciona 'Graph control'.

Figura 56. 'strip chart' de controladores



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

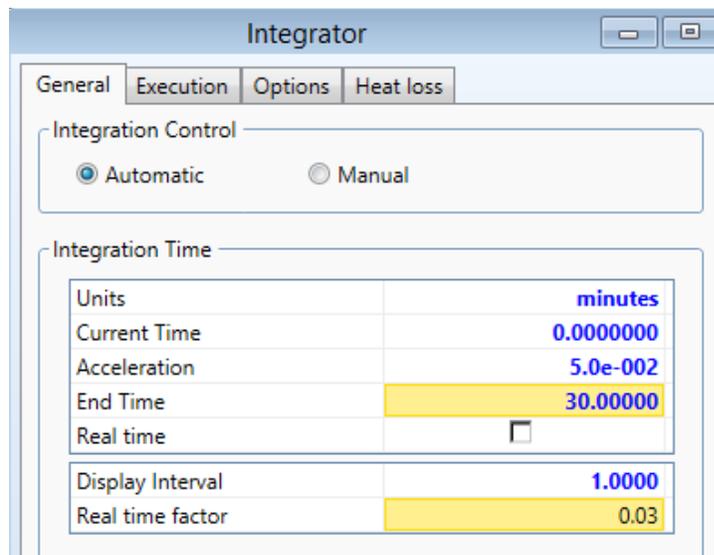
Figura 57. Diagrama previo a correr simulación dinámica en el tiempo



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Cada 'face plate' se coloca en automático 'Auto'. Para transcurrir el tiempo la simulación dinámica, en la cinta de opciones se selecciona 'Dynamics' e 'Integrator'. Para ejemplificar, se coloca en el integrador un tiempo final de 30 minutos 'End time' y una aceleración de 0,05 para observar detenidamente el proceso, el integrador se inicia 'start'.

Figura 58. Integrador



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

3.6.4. Perturbaciones al sistema

Para realizar perturbaciones al sistema, se modifican valores en las corrientes de entrada.

Dando doble clic sobre la corriente de agua, en la pestaña 'Worksheet', 'Conditions', se modifica el valor a 50°C y el integrador continúa hasta 60 min.

Figura 59. **Modificación de la temperatura en la corriente de agua**

| Worksheet | | Attachments | Dynamics |
|-------------------|-------------------------------|-------------|-------------|
| Worksheet | Stream Name | | Agua |
| Conditions | Vapour / Phase Fraction | | 0.0000 |
| Properties | Temperature [C] | | 50.00 |
| Composition | Pressure [kPa] | | 600.0 |
| Oil & Gas Feed | Molar Flow [kgmole/h] | | 27.75 |
| Petroleum Assay | Mass Flow [kg/h] | | 500.0 |
| K Value | Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h] | | 0.5010 |
| User Variables | Molar Enthalpy [kJ/kgmole] | | -2.830e+005 |
| Notes | Molar Entropy [kJ/kgmole-C] | | 12.68 |
| Cost Parameters | Heat Flow [kJ/h] | | -7.854e+006 |
| Normalized Yields | Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h] | | 0.4927 |
| | Fluid Package | | Basis-1 |

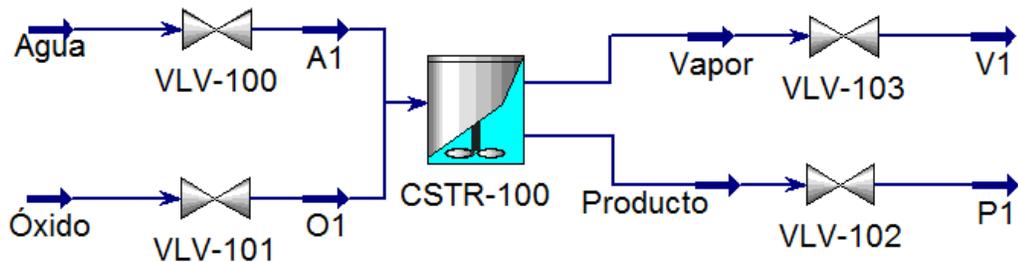
Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Para la corriente de óxido, se modifica la temperatura a 60 °C y el integrador continúa hasta 90 min.

4. RESULTADOS

4.1. Representación del modelo de producción de propilenglicol

Figura 60. Diagrama de producción de propilenglicol en estado estacionario



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

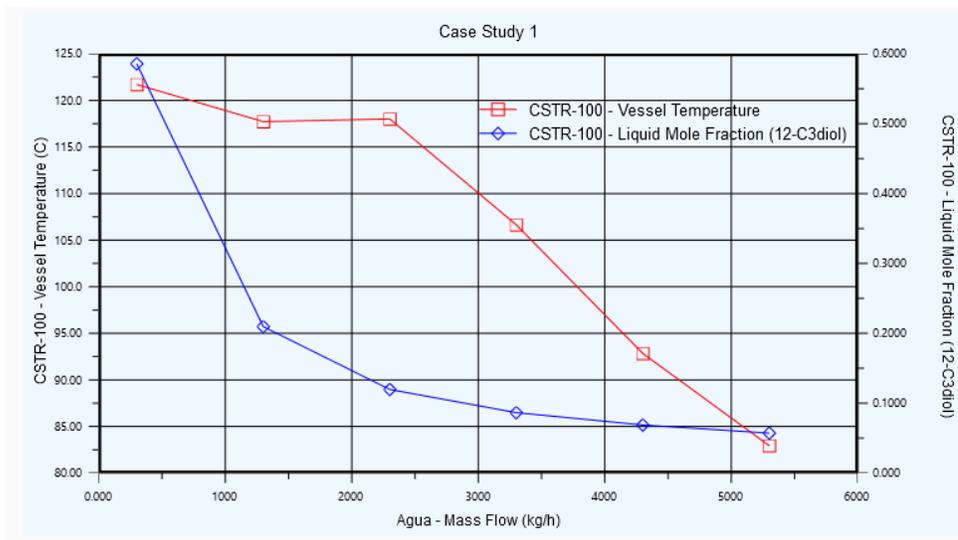
4.2. Generación de reportes y estudio de caso de producción de propilenglicol en estado estacionario

Figura 61. **Generación de reportes del estado estable del proceso de producción de propilenglicol**

| Name | Agua | Óxido | Producto | A1 |
|----------------------------|--------|------------|------------|------------|
| Comp Mole Frac (H2O) | 1.000 | 0.0000 | 0.1661 | 1.000 |
| Comp Mole Frac (Methanol) | 0.0000 | 0.6369 | 0.3240 | 0.0000 |
| Comp Mole Frac (12-C3diol) | 0.0000 | 0.0000 | 0.5099 | 0.0000 |
| Comp Mole Frac (12C3Oxide) | 0.0000 | 0.3631 | 5.893e-009 | 0.0000 |
| Name | O1 | Vapor | P1 | V1 |
| Comp Mole Frac (H2O) | 0.0000 | 0.1265 | 0.1661 | 0.1265 |
| Comp Mole Frac (Methanol) | 0.6369 | 0.8572 | 0.3240 | 0.8572 |
| Comp Mole Frac (12-C3diol) | 0.0000 | 1.629e-002 | 0.5099 | 1.629e-002 |
| Comp Mole Frac (12C3Oxide) | 0.3631 | 5.334e-008 | 5.893e-009 | 5.334e-008 |

Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

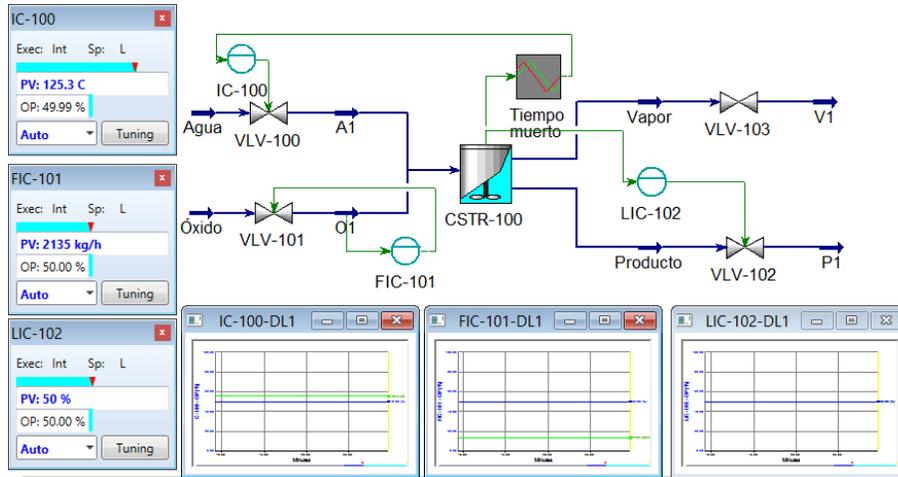
Figura 62. **Estudio de caso de producción de propilenglicol**



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

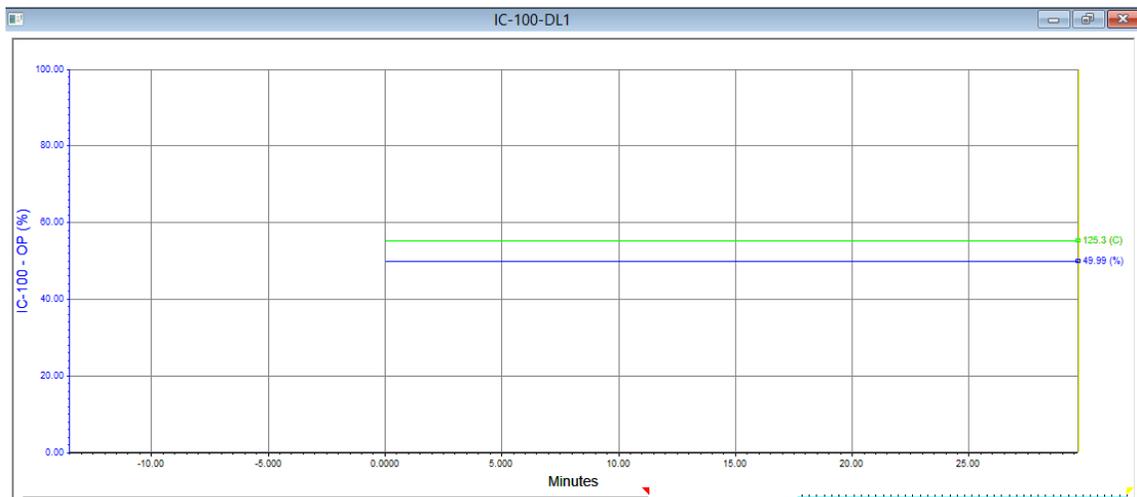
4.3. Resultados de la simulación en estado dinámico

Figura 63. PFD después de 30 minutos de simulación



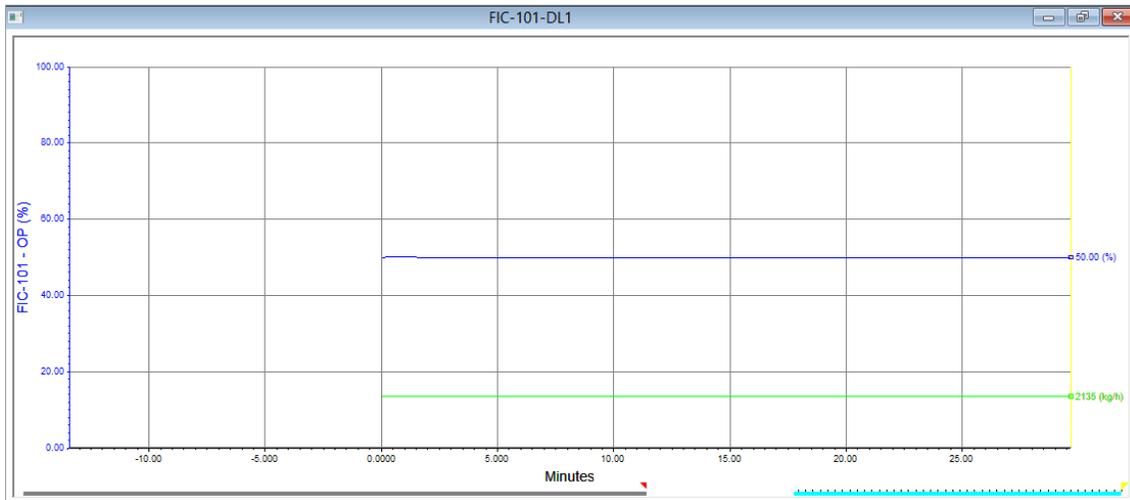
Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 64. 'Strip chart' de controlador IC-100



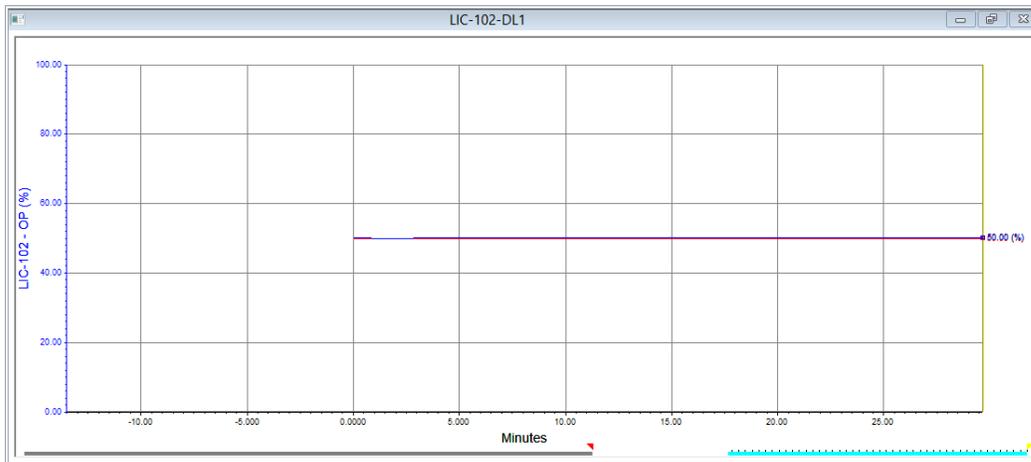
Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 65. 'Strip chart' de controlador FIC-101



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

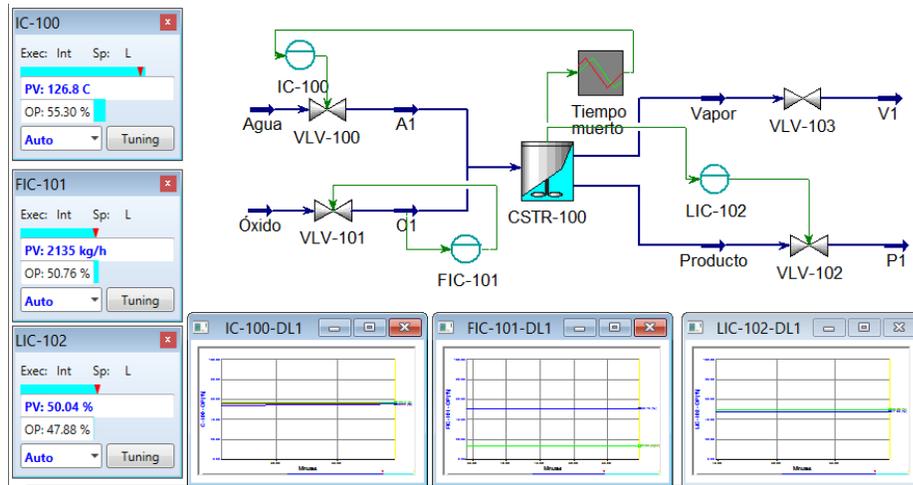
Figura 66. 'Strip chart' de controlador LIC-102



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

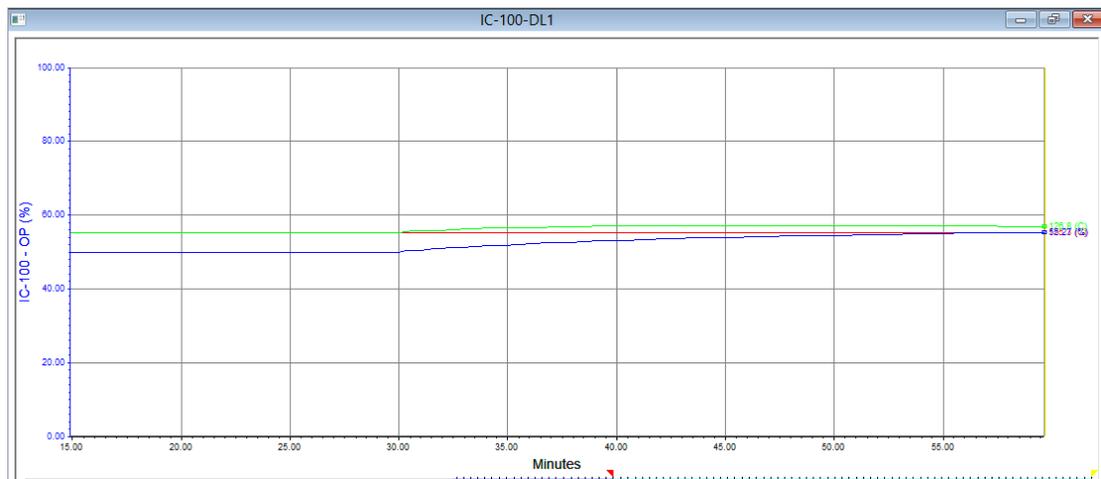
4.4. Resultados de realizar perturbaciones al sistema dinámico

Figura 67. PFD después de 60 minutos de simulación, perturbación de la temperatura en la corriente de agua



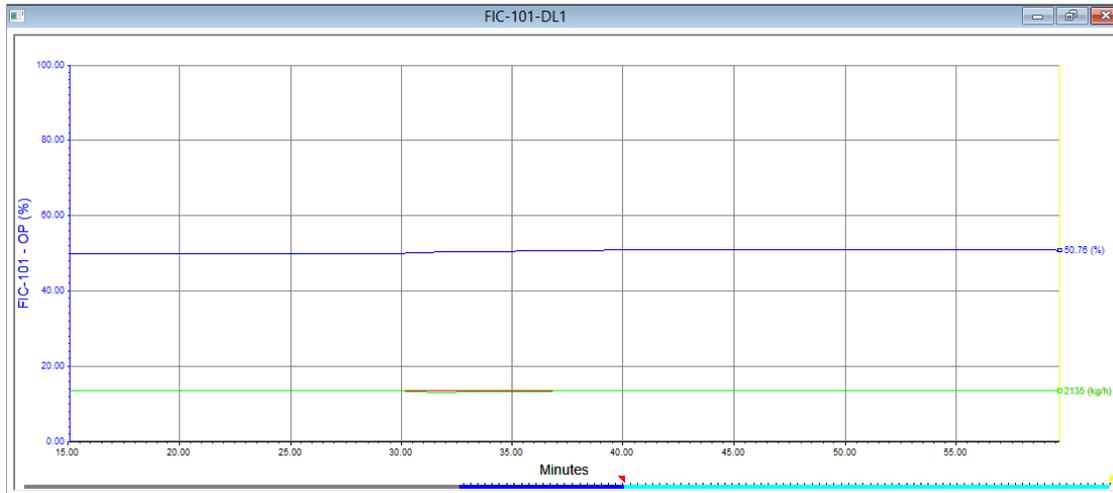
Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 68. 'Strip chart' de controlador IC-100



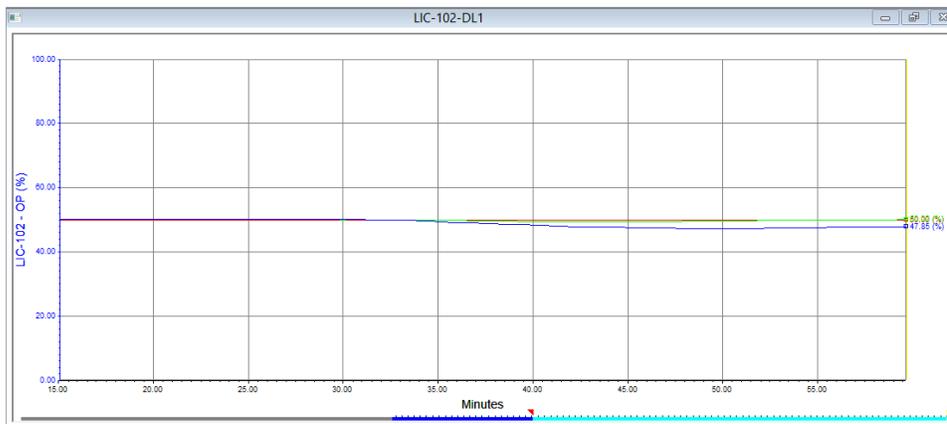
Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 69. 'Strip chart' de controlador FIC-101



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 70. 'Strip chart' de controlador LIC-102



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 71. **Composición de la corriente de salida de la corriente de productos**

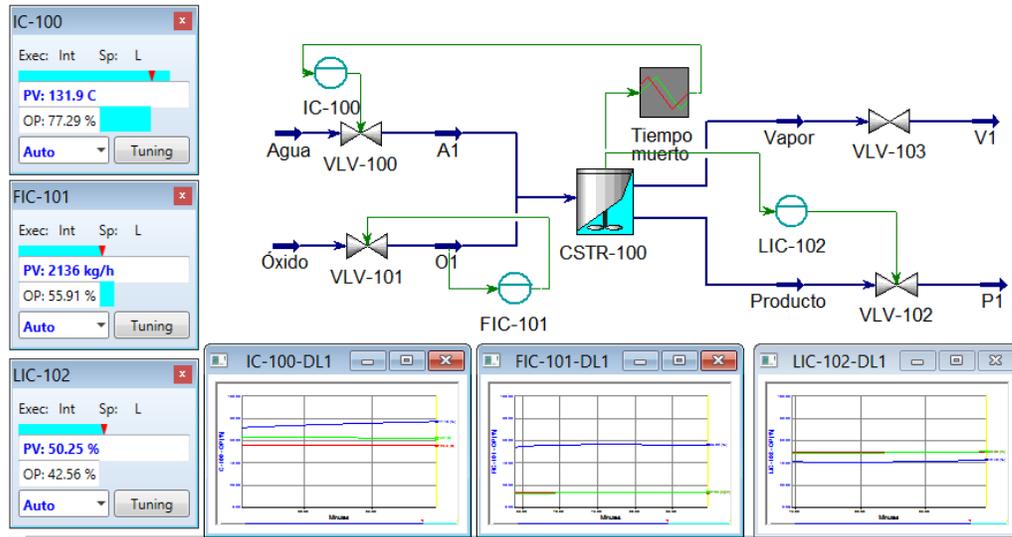
The screenshot shows the 'Material Stream: P1' dialog box with the 'Worksheet' tab selected. The table displays the following data:

| | Mole Fractions | Vapour P |
|-----------|----------------|----------|
| H2O | 0.1899 | |
| Methanol | 0.3094 | |
| 12-C3diol | 0.5007 | |
| 12C3Oxide | 0.0000 | |

Below the table, the 'Total' is set to 1.00000. At the bottom, there are buttons for 'Edit...', 'View Properties...', 'Basis...', 'Delete', and 'Define from Other Stream...'. A green 'OK' bar is also present.

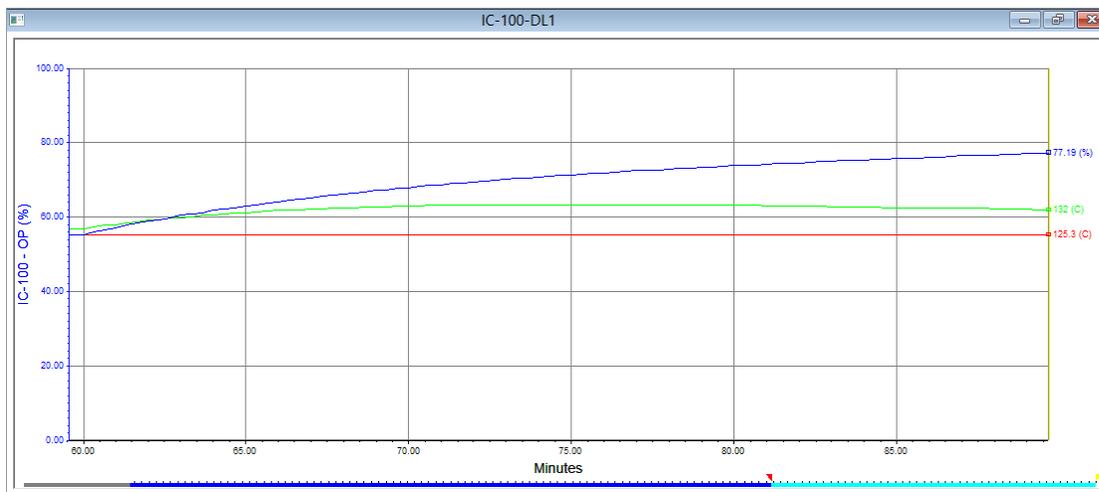
Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 72. PFD después de 90 minutos de simulación, perturbación de la temperatura en la corriente de óxido



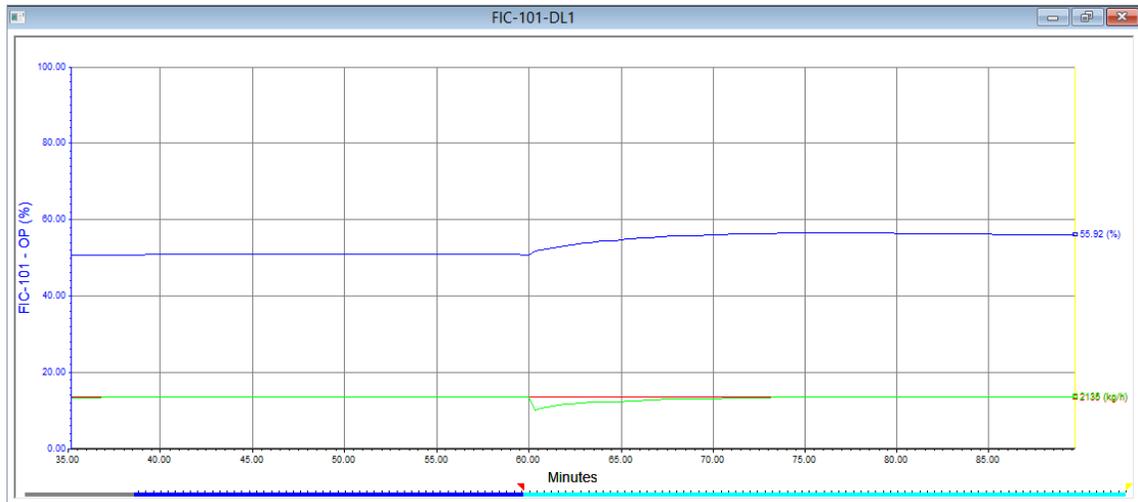
Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 73. 'Strip chart' de controlador IC-100



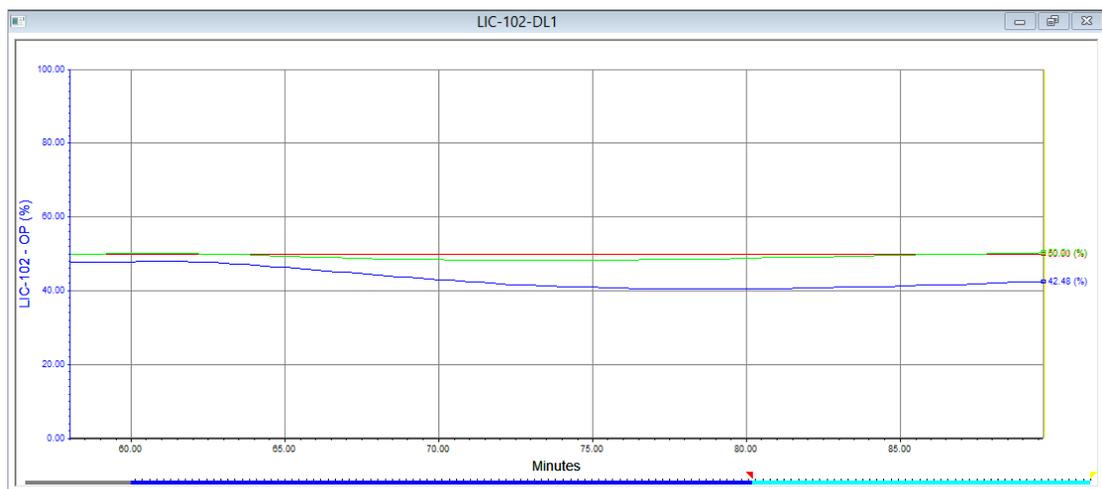
Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 74. 'Strip chart' de controlador FIC-101



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 75. 'Strip chart' de controlador LIC-102



Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

Figura 76. Composición de la corriente de salida, productos

Material Stream: P1

Worksheet Attachments Dynamics

| | Mole Fractions | Vapour P |
|-----------|----------------|----------|
| H2O | 0.2828 | |
| Methanol | 0.2617 | |
| 12-C3diol | 0.4556 | |
| 12C3Oxide | 0.0000 | |

Total 1.00000

Edit... View Properties... Basis...

OK

Delete Define from Other Stream...

Fuente: elaboración propia, utilizando Hysys V8.0.

5. INTERPRETACIÓN DE RESULTADOS

Se definió el modelo de la producción de propilenglicol, el cual integra todos los parámetros que intervienen en el proceso y las configuraciones de equipos. Con el modelo establecido se realizó la simulación con el uso programa Hysys V8.0.

Se detalló cada paso de la simulación en estado estacionario, con el objetivo de dar a conocer y ejemplificar el uso del programa. Como resultado, se construyó un PFD representado en la figura 60, este diagrama incluye las dos corrientes de entrada: válvulas y reactor CSTR. Las válvulas se incluyen con el fin de tener un buen control del sistema previo a la configuración del sistema dinámico.

En la figura 61 se presenta el resultado de la generación de reportes del estado estable, dando como resultado una composición de 0,5099 de propilenglicol a las condiciones establecidas en el modelo. La temperatura es de gran importancia en el efecto que tiene para la conversión de óxido de propileno dado que es una reacción exotérmica; para demostrarlo se realizó un estudio de caso, figura 62; se puede confirmar que a menores flujos de agua la conversión de propilenglicol es mayor.

Se detalló la configuración de la simulación a estado dinámico, definiendo 3 controladores PID en las válvulas de control: IC-100, FIC-101, LIC-102 y un tiempo muerto.

El controlador FIC-101 se utilizó para controlar el flujo de alimentación del reactivo limitante, óxido de propileno; el controlador IC-100 para controlar la temperatura del reactor por medio del flujo de agua; el controlador LIC-102 para controlar el nivel de líquido del reactor como medida de seguridad. Cada controlador fue configurado con rangos máximos y mínimos permitidos para cada variable.

Para poner a prueba la simulación dinámica y la correcta instalación de los controladores, se corrió el integrador hasta un tiempo de 30 minutos, figura 62. Se confirma que la simulación dinámica se encuentra correctamente especificada ya que durante el tiempo establecido 'End Time', los valores de SP, PV y OP para cada controlador no varían, razón por la que los 'strip chart' de los controladores PID describen un comportamiento constante, figuras 64, 65 y 66.

Las perturbaciones al sistema se realizaron para poner a prueba el modelo; la primera perturbación se realizó en el flujo de entrada del agua; se configuró la temperatura del flujo de agua de 24°C a 50°C y se corrió el integrador hasta 60 minutos; el resultado se presenta en la figura 67, donde se observa que los valores SP, PV y OP para cada controlador varían y los 'strip chart' de los controladores presentan variaciones. Los 'strip chart' para los controladores muestran la variable PV en color verde, OP en azul y SP en rojo.

El 'strip chart' del controlador IC-100, figura 68, muestra el aumento de la variable de proceso por la modificación establecida (PV), temperatura; dado que es un parámetro operacional directo se observa el aumento del porcentaje de apertura de la válvula hasta un 53,30 % (OP), ambas variables actúan para mantener el valor del Set Point en el valor establecido, esto se pudo notar al

observar que la línea roja no tuvo una gran variación, a mayor flujo de agua se controló la temperatura.

El 'strip chart' del controlador FIC-101, figura 69, mostró un pequeño aumento de la apertura de la válvula hasta un valor de 50,76 %; sin embargo, el valor de la variable de proceso que corresponde al flujo másico de óxido de propileno tuvo una pequeña variación; sin embargo, se estabilizó al minuto 41,5.

El 'strip chart' del controlador LIC-102, figura 70, respecto al porcentaje de nivel del reactor, para la variable (OP) la válvula disminuyó su porcentaje hasta 47,88 % un parámetro operacional directo; lo que indica una salida menor de producto, se puede observar en la figura 71 que la composición de propilenglicol disminuyó a 0,5007.

Se realizó una segunda perturbación en la corriente de entrada de óxido, modificando su temperatura de 24 °C a 60 °C, en la figura 74 se puede observar que los controladores tuvieron variaciones. Observando la figura 75, para el 'strip chart' del controlador IC-100, la apertura de la válvula modificó su valor hasta un 77,29 %, lo que indicó un aumento en el flujo de entrada de agua, dado que la temperatura del reactor aumentó.

El controlador FIC-101, figura 74, tuvo una pequeña variación en el flujo de entrada (PV), corriente de óxido, la apertura de la válvula aumentó a un valor de 55,91 %.

El 'strip chart' del controlador LIC-102, figura 75, mostró una disminución en la apertura de la válvula hasta 42,56 % indicando que la corriente de salida disminuyó; en la figura 78 se puede comprobar que la composición del propilenglicol es menor, 0,4556.

Las perturbaciones al sistema demostraron la función de los controladores al momento de interactuar con las variables del sistema, que proporcionan un equilibrio bajo los rangos establecidos de las variables; sin embargo, para este estudio no presentan soluciones óptimas dado que los resultados muestran concentraciones menores del producto.

6. LOGROS OBTENIDOS

- Se dio a conocer una de las herramientas importantes desarrollada con el objetivo de simular procesos industriales; es importante aplicar para la formación como profesionales de la ingeniería.
- Se dieron a conocer las herramientas básicas y un algoritmo para iniciar con la interacción del simulador Hysys V8.0.
- Se ejemplificó la aplicación del uso del simulador Hysys V8.0 que parte de la definición de un modelo del proceso de producción de propilenglicol; se dio a conocer paso a paso como simular en estado estacionario y dinámico.

CONCLUSIONES

1. Se analizó y definió el modelo de la producción de propilenglicol; se detalla cada variable y parámetro que influyen en la simulación en estado estacionario y dinámica.
2. Se simuló y ejemplificó cada operación de la simulación en estado estacionario; se analizaron los resultados por medio de una generación de reportes y un estudio de caso del proceso de producción de propilenglicol.
3. Se simuló y ejemplificó la transición a estado dinámico del proceso de producción de propilenglicol; se dio a conocer el uso de controladores PID en el diagrama (PFD).
4. Se ejemplificó el sistema dinámico realizando perturbaciones en la temperatura de las corrientes de entrada; se analizaron las variables PV,OP y SP, verificando la correcta instalación de los controladores.
5. Se dio a conocer por medio de un proceso industrial de producción de propilenglicol el modelado, simulación y uso del simulador Hysys V8.0.

RECOMENDACIONES

1. Analizar el modelo empleado en este estudio para demostrar las aplicaciones del tiempo muerto y las variaciones que se producen en los controladores PID.
2. Dar seguimiento al estudio de modelos y simulaciones que puedan ejemplificar la aplicación de procesos industriales que involucren corrientes de energía.
3. Estudiar y aplicar los conocimientos adquiridos en los distintos cursos que involucran procesos para utilizar los simuladores como una herramienta de cálculo.

BIBLIOGRAFÍA

1. CARLSON, Eric C. *Don't gamble with physical properties for simulations*, Aspen Technology. [En línea]. <<https://pdfs.semanticscholar.org/a691/8690efb562b462410b4bb82a3ec58cd694bc.pdf>>. [Consulta: 6 de abril de 2016].
2. DISSINGER, Glenn. *Getting started with aspen hysys dynamics*. [En línea]. <https://www.aspentech.com/email/email_archive/Getting_Started_with_Aspen_HYSYS_Dynamics.pdf>. [Consulta: 11 de octubre de 2016].
3. Dynamic Modeling. *Aspentech, driving process profitability*. [En línea]. <https://esupport.aspentech.com/T_coursecatalog>. [Consulta: 25 de febrero de 2017].
4. FOGLER, H. Scott. *Elementos de ingeniería de las reacciones químicas*. 4a ed. México: Pearson Educación, 2008. 183 p.
5. GIL C. Iván D.; GUEVARA L. Javier R.; GARCIA Z. José L.; LEGUIZAMÓN R. Alexander. *Análisis y simulación de proceso en ingeniería química*. Colombia: Universidad Nacional de Colombia, 2011. 535 p.
6. Hysys 3.2 Aspen Tech. *Bases de la simulación*. [En línea]. <<https://procesosbio.wikispaces.com/file/view/54224008-HYSYS-3-2-Manual-Translation.pdf>>. [Consulta: 11 de octubre de 2016].

7. *Introducción al uso del simulador Hysys.* [En línea]. <https://www.frro.utn.edu.ar/repositorio/catedras/quimica/4_anio/integracion4/trabajos_practicos_problemas_resueltos/trabajos_prcticos2001/aplicacin_metodos_numricos/Trabajo%20Prctico%20de%20Hysys%20%20tpintroduccion_hysys.pdf>. [Consulta: 4 de abril de 2016].
8. JAMANCA, Antonio y MARTIN, Edgar. *Simulación de procesos aplicado a la industria usando aspen hysys v8.0.* [En línea]. <<https://es.scribd.com/doc/227085576/Manual-Aspen-Hysys-v8-0-Espanol>>. [Consulta: 25 de febrero de 2017].
9. LOBATON, Norabuena. *Simbología y diagrama de tuberías e instrumentación.* [En línea]. <http://www.academia.edu/11637282/Simbolog%C3%ADa_y_Diagrama_de_Tuberias_e_Instrumentaci%C3%B3n_P_and_ID>. [Consulta: 4 de noviembre de 2015].
10. MEZA FABIAN, Gabriela. *Simulación en estado estacionario de la producción de propilenglicol a partir del óxido de propileno en un reactor de tipo cstr con el programa hysys.* Perú: Universidad Nacional del Centro del Perú, 2013. 316 p.
11. PEÑA, Pierre. *Teoría de simuladores.* [En línea]. <<https://es.scribd.com/document/242895107/TEORIA-DE-SIMULADORES>>. [Consulta: 4 de noviembre de 2015].
12. PIMENTEL, Ivane. *Selección de modelos termodinámicos vapor líquidos.* Maracaibo, Venezuela: Universidad Nacional Experimental de la Fuerza Armada, 2013. 259 p.

13. PORRAS AMAYA, Romel Rolando; MARTÍNEZ TRILLOS, Omar. *Simulación de sistemas de control en procesos del sector oil & gas a través del software aspen hysys y conexión a rockwell automation con el estándar de comunicación opc*. Bogotá, Colombia: Universidad Distrital Francisco José de Caldas, 2015. 103 p.
14. *Propilenglicol*. [En línea]. <<https://es.wikipedia.org/wiki/Propilenglicol>>. [Consulta: 22 de diciembre de 2016].
15. SPEIGHT, James G. *Chemical process and design handbook*. New York: McGraw-Hill, 2002. 633 p.
16. VILLEGAS VIVAR. Luis Emilio. *Simulación en hysis de los procesos productivos en enap magallanes*. Chile: Universidad de Magallanes, 2007. 109 p.

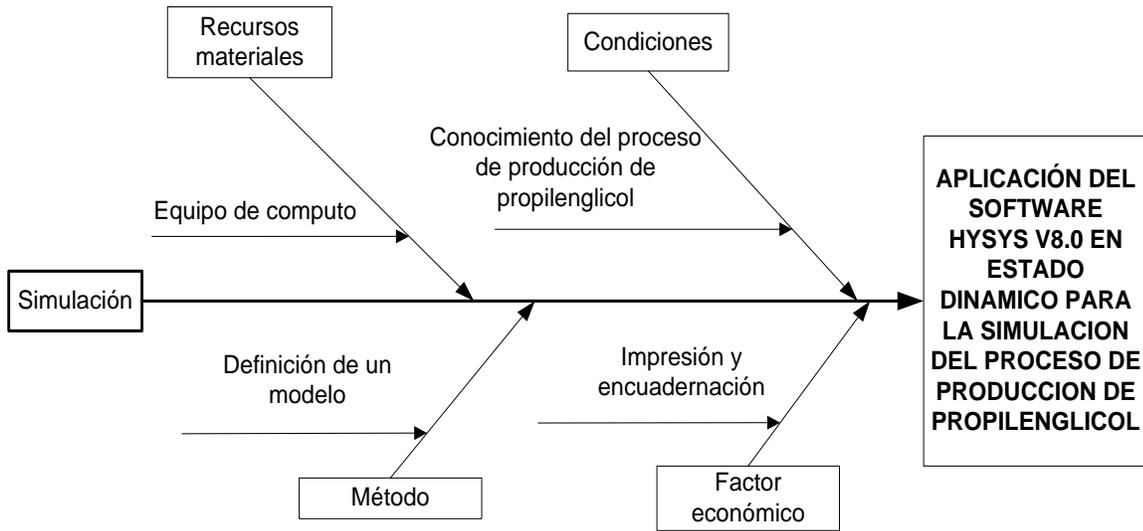
APÉNDICE

Apéndice 1. Tabla de requisitos académicos

| PASOS | | | | | | |
|------------------------------------|--|----------------------------------|---|---|--|--|
| Carrera | Área | Tema genérico | Tema específico | Especificación | Problema a resolver | Objetivo general |
| Licenciatura en ingeniería química | Química | Química inorgánica | Química 3 | Balances de reacciones | Analizar la producción de propilenglicol por medio de la hidratación de óxido de propileno y agua, definir propiedades, parámetros y condiciones para representar un modelo con los respectivos balances para cada operación en un reactor CSTR, ejemplificar y simular el proceso con el software Aspen Hysys en estado dinámico. | Representar el modelo de producción de propilenglicol, definir los balances de materia, simular el proceso en estado dinámico y ejemplificar el uso del software Hysys V8.0. |
| | | Química orgánica | Química 4 | Soluciones | | |
| | Operaciones Unitarias | Química orgánica 2 | Química orgánica 2 | Reacciones de sustitución, eliminación y adición | | |
| | | Balance de masa y energía (IQ-1) | Balance general de materia y de energía | Conservación de la materia y ecuación de entalpía | | |
| | | Flujo de flujidos (IQ-2) | Variables que describen el flujo de fluidos | Propiedades, régimen y parámetros de estado del flujo | | |
| | | Transferencia de calor (IQ-3) | Transferencia de calor en fluidos | Temperatura de fluidos | | |
| | Área de especialización | Transferencia de masa (IQ-4) | Principio de transferencia de masa | Mezclas | | |
| | | Procesos químicos industriales | Conocimiento de procesos industriales | Solución de problemas de procesos a nivel industrial | | |
| | | Diseño de equipo | Sistemas de control | Variables de control, función de instrumentos y diagramas de instrumentación y proceso. | | |
| | Área de fisicoquímica | Cinética de procesos químicos | Reactores | CSTR | | |
| | Área de ciencias básicas y complementarias | Programación de computadoras 1 | Manejo de sistemas operativos | Windows | | |

Fuente: elaboración propia.

Apéndice 2. Diagrama de ishikawa



Fuente: elaboración propia.