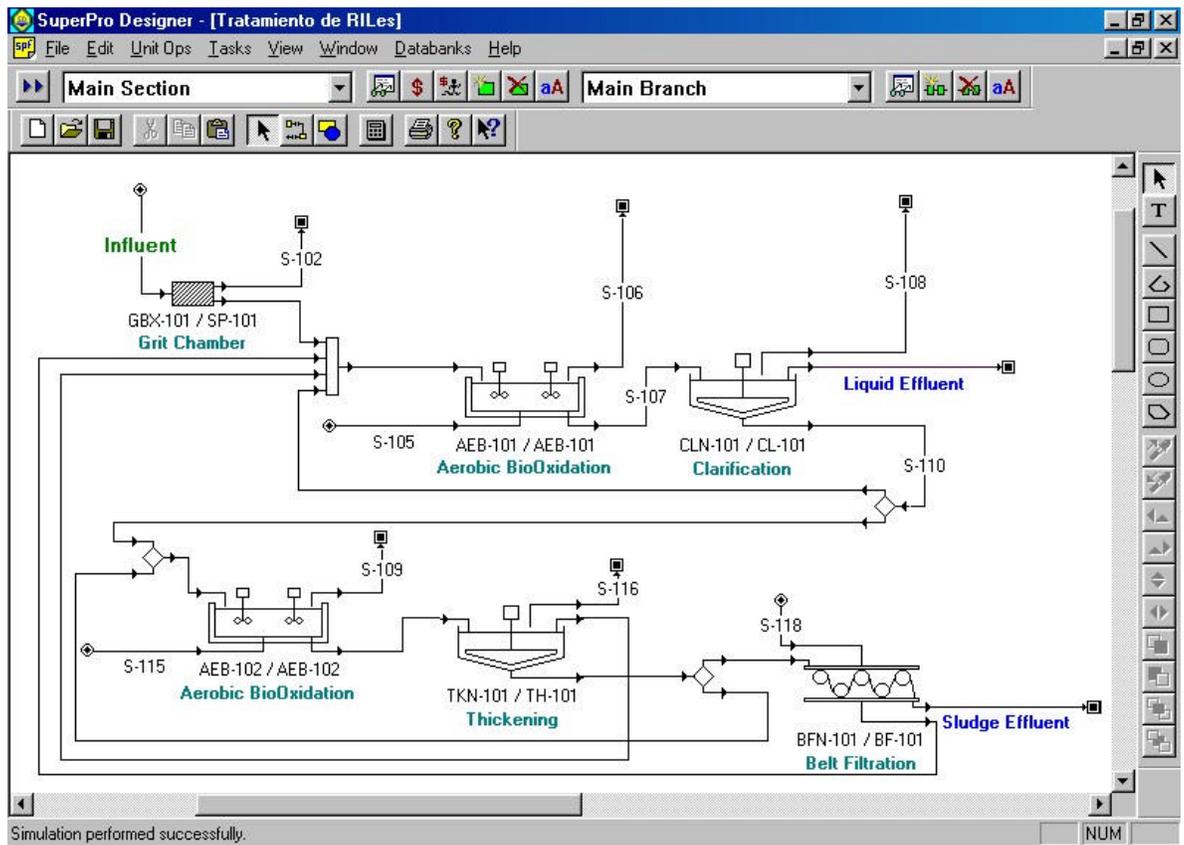


El Programa Computacional

SuperPro Designer[®]



Índice

<i>1 Introducción</i>	<i>1</i>
<i>2 Equipos Presentes</i>	<i>6</i>
<i>3 Modalidad de Trabajo</i>	<i>9</i>
<i>4 Información Práctica</i>	<i>10</i>
<i>4.1 Ingreso de Componente a la Base de Datos</i>	<i>10</i>
<i>4.2 Modificando Propiedades Termodinámicas de los Componentes....</i>	<i>11</i>
<i>4.3 Propiedades Necesarias en cada Operación Unitaria.....</i>	<i>12</i>
<i>4.4 Uso de Ayuda en Línea</i>	<i>14</i>
<i>4.5 Ejemplo N°1: Simulación de una operación de neutralización.</i>	<i>16</i>

1 Introducción

SuperPro Designer es un programa computacional para realizar simulación de procesos en estado estacionario.

El problema matemático que surge como consecuencia de una simulación corresponde a la solución de un conjunto de ecuaciones algebraicas no lineales del tipo:

$$f(x) = 0$$

donde:

x : vector real de dimensión n .

f : conjunto de funciones reales de dimensión m , con $m \leq n$.

La función f representa el modelo matemático del proceso.

La simulación permite predecir la operación de un proceso cuando se han alcanzado condiciones de estacionalidad, esto facilita el estudio de la sensibilidad del sistema frente a cambios en los distintos parámetros y variables de operación. De esta manera éstos pueden ser ajustados usando técnicas de optimización para determinar las mejores condiciones operacionales.

SuperPro Designer es una herramienta computacional amigable, especialmente formulada para funcionar en ambiente Windows. SuperPro Designer, cuenta con modelos matemáticos para las siguientes 17 operaciones unitarias:

☞ *Reacción estequiométrica.*

☞ *Cambio de fase.*

☞ *Reacción cinética.*

☞ *Absorción/Adsorción.*

☞ *Reacción ambiental.*

☞ *Almacenamiento.*

☞ *Rompimiento celular.*

☞ *Cromatografía.*

☞ *Sedimentación.*

☞ *Filtración.*

☞ *Secado.*

☞ *Centrifugación.*

☞ *Destilación.*

☞ *Extracción.*

☞ *Intercambio de calor.*

☞ *Cambio de presión.*

☞ *Mezcla y separación de corrientes.*

Cada operación unitaria cuenta con una serie de equipos, los más representativos de dicha operación, los cuales se encuentran representados por un ícono especial y único, los equipos disponibles son los siguientes:

1. Reacción estequiométrica.

- Well Mixed Reactor
- Fermentor
- Seed Fermentor
- Air Lift Fermentor
- Plug Flow Reactor

2. Reacción cinética.

- Continuously Stirred Reactor
- Batch Reactor.
- Plug Flow Reactor
- Equilibrium Reactor
- Batch Fermentor
- Continuous Fermentor

3. Rompimiento celular.

- Homogenizer

- Bead Mill

4. Sedimentación.

- Decanter
- Clarifier
- Thickener
- Flotation Tank
- Oil Separator

5. Secado

- Spray Dryer
- Fluid Bed Dryer
- Freeze Dryer
- Tray Dryer
- Drum Dryer
- Rotary Dryer
- Sludge Dryer

6. Cambio de fase.

- Condenser
- Crystallizer
- Evaporator

7. Absorción/Adsorción.

- Absorber
- Stripper
- Adsorber

8. Almacenamiento.

- Blending Tank
- Horizontal Tank
- Vertical on Legs Tank
- Flat Bottom Tank
- Receiver Tank
- Equalizer
- Junction Box

9. Cromatografía.

- Gel Filtration
- Ion Exchanger
- Multi-Step Ion Exchanger
- Affinity Column

- Multi-Step Affinity Column

10. Filtración.

- Microfilter
- Ultrafilter
- Diafilter
- Reverse Osmosis Filter
- Rotary Vacuum Filter
- Plate & Frame Filter
- Nutsche Filter/Dryer
- Dead End Filter
- Air Filter
- Belt Filter
- Granular Media Filter
- Baghouse Filter
- Electrostatic Precipitator

11. Centrifugación.

- Disk Stack Centrifuge
- Decanter Centrifuge
- Bowl Centrifuge
- Basket Filter Centrifuge
- Centritech Centrifuge
- Hidrocyclone

- Cyclone

12. Destilación.

- Short Cut Distillation
- Batch Distillation
- Flash Drum

13. Extracción.

- Centrifugal Extractor
- Mixer Settler Extractor
- Differential Extractor

14. Intercambio de calor.

- Heater
- Cooler
- Heat Sterilizer

15. Cambio de presión.

- Pump
- Compressor

- Fan

16. Reacción ambiental.

- Neutralizer
- Wet Air Oxidation Reactor
- Incinerator
- Aeration Basin
- Plug Flow Aeration Basin
- Anaerobic Digester
- Trickling Filter
- Anoxic Reactor

17. Mezcla y división de corrientes.

- n-Stream Mixer
- n-Stream Flow Splitter
- n-Stream Component Splitter
- Custom Mixer
- Custom Splitter

Además de las operaciones mencionadas, el programa cuenta con una biblioteca (base de propiedades) de aproximadamente 370 componentes, la que puede ser complementada mediante el ingreso, por parte del usuario, de nuevas especies químicas y sus respectivas propiedades. Gracias a lo anterior, es posible el cálculo de los balances de masa y energía, y con ello el dimensionamiento de los equipos. Además, posee bases de datos con materiales de construcción y agentes de transferencia de calor.

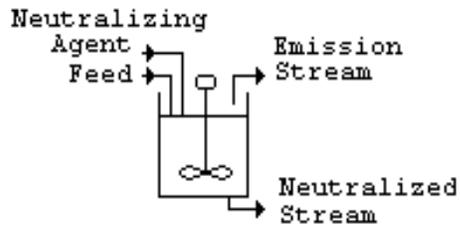
Los resultados son entregados en forma de reportes, los que pueden imprimirse directamente o ser exportados a Microsoft Excel. A su vez, los diagramas de flujos pueden imprimirse directamente o ser exportados a AutoCad, donde es posible mejorarlos, incorporando alguna gráfica no existente en el programa. El programa también cuenta con una biblioteca de ejemplos, los que permiten una rápida familiarización con el sistema. Además el programa permite realizar evaluación de costos, evaluación de impacto ambiental y calcular propiedades termodinámicas.

Las características anteriores hacen que este software sea muy utilizado en el mundo por universidades y compañías principalmente de la industria de procesos bioquímicos, farmacéuticos, químicos, alimentos, tratamiento y purificación de agua, entre otras.

2 Equipos Presentes

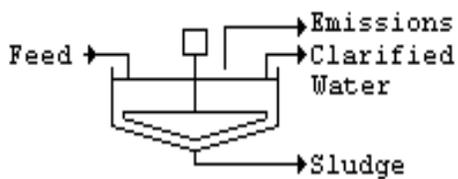
Algunos equipos interesantes para el desarrollo de este trabajo, que se encuentran disponibles en este programa son los siguientes:

Neutralizador



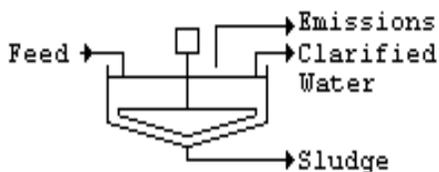
Esta unidad simula un neutralizador modelado como un reactor estequiométrico. Se necesita especificar el modo de operación, las etapas de neutralización, la estequiometría y la conversión de cada reacción. El sistema realiza los balances de masa y calcula el volumen total del neutralizador.

Espesador



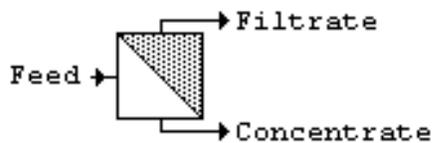
Este modelo simula un espesador usando la teoría de sedimentación de sólidos. También realiza cálculos rigurosos de emisiones de compuestos orgánicos volátiles.

Clarificador



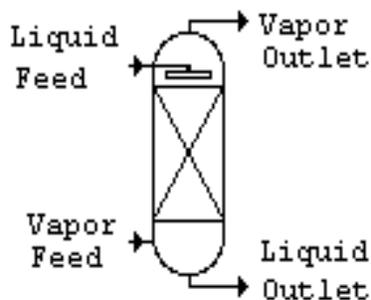
Este modelo simula un clarificador basándose en la teoría de sedimentación. Se necesita especificar las características de la partícula, la concentración de sólidos en el sedimento y el porcentaje de remoción de cada componente particulado. El modelo estima el área de sedimentación requerida y los flujos y composición de las corrientes de salida.

Microfiltro



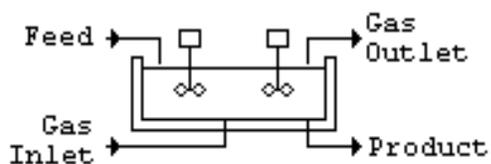
Esta unidad simula el funcionamiento de un filtro de membrana tangencial semicontinuo.

Absorbedor



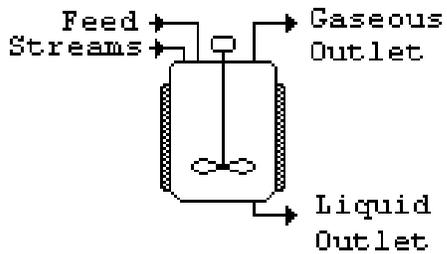
Esta unidad simula un absorbedor. Se necesita ingresar las propiedades físicas del gas y del líquido, las características del material de relleno y la fracción de cada componente que es absorbida. El modelo estima los flujos y composición de las corrientes de salida, así como también la altura, el diámetro de la columna y la presión total.

Bioreactor



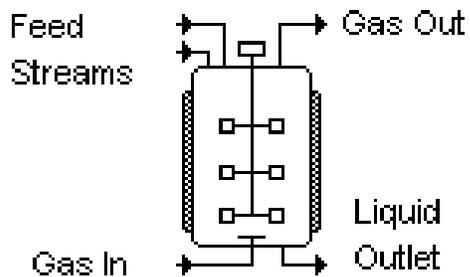
Esta operación unitaria simula la transformación (*e.g.* biooxidación, oxidación química, hidrólisis, fotólisis, nitrificación, etc) de compuestos orgánicos y otros compuestos, en un reactor aeróbico perfectamente agitado. Es posible especificar un gran número de reacciones químicas con sus respectivas expresiones cinéticas. El modelo también ejecuta un riguroso cálculo de emisiones de VOC.

Reactor de Equilibrio



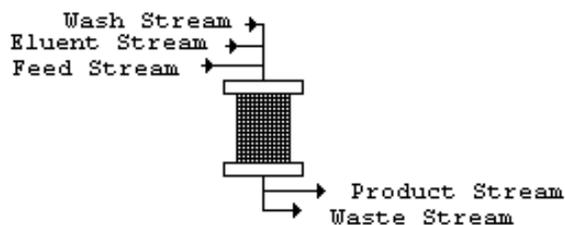
Esta operación unitaria simula varias reacciones de equilibrio que se realizan en un reactor agitado. Es útil para simular reacciones de precipitación, especiación iónica y otras reacciones de equilibrio. Este reactor puede operar isotérmicamente, adiabáticamente o con algún grado de calentamiento o refrigeración.

Fermentador Estequiométrico



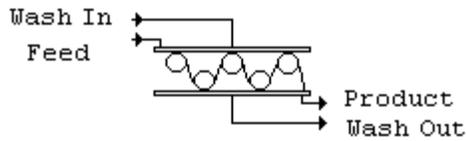
Se simula el proceso de fermentación en un reactor agitado. Representa las biotransformaciones cuando la cinética es desconocida pero la estequiometría es conocida y su conversión es especificada o calculada a partir de un componente de referencia.

Cromatografía de Intercambio Iónico



Esta operación unitaria simula una cromatografía de intercambio iónico. También simula el lavado y la regeneración de la matriz.

Filtro Banda



Esta operación unitaria simula la deshidratación de sólidos mediante un filtro manga. Los balances de material se basan en el porcentaje de remoción de componentes particulados y el contenido de sólidos de la torta.

3 Modalidad de Trabajo

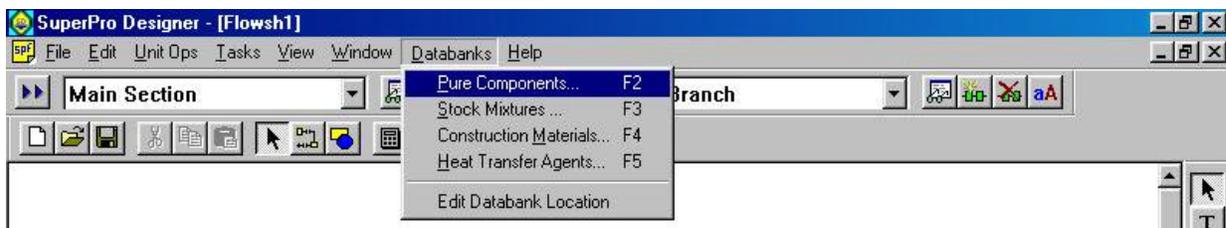
La modalidad de trabajo de SuperPro Designer, no difiere en grandes rasgos de los otros simuladores, esto se observa en la siguiente secuencia:

- ☞ *Especificación de la modalidad de operación, esto es batch o continua.*
- ☞ *Construir el diagrama de Flujos.*
- ☞ *Registrar los componentes.*
- ☞ *Inicializar los procesos.*
- ☞ *Inicializar las corrientes de entrada.*
- ☞ *Resolver los balances de masa y energía*
- ☞ *Generar los reportes correspondientes.*

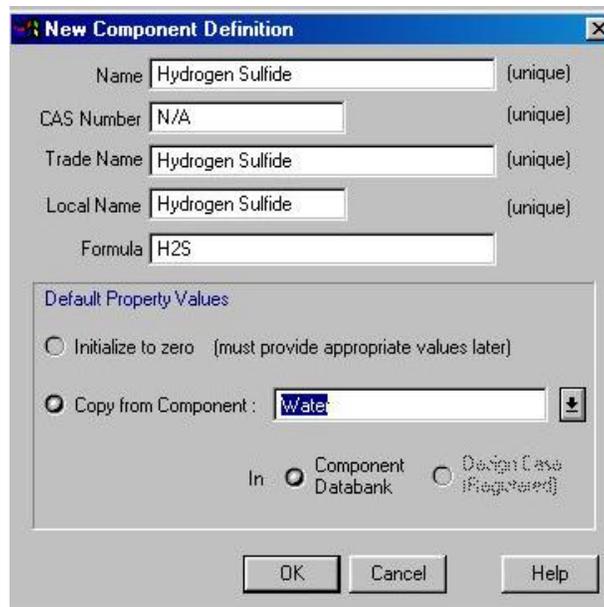
4 Información Práctica

4.1 Ingreso de Componente a la Base de Datos

Una de las grandes desventajas que poseen algunos simuladores son sus bases de datos, lo anterior se debe a que no es posible tener una base de datos que contenga todos los elementos que se ocupan durante el desarrollo de una simulación. Será tarea recurrente entonces agregar las especies faltantes en la biblioteca de la base de datos para poder así realizar la simulación. Para agregar un nuevo componente a la biblioteca de SuperPro Designer, se debe ir a *Databanks* del menú de opciones:



Es posible incluir el compuesto en cuatro áreas: en la biblioteca de compuestos puros, de mezclas, en materiales de construcción y dentro de los compuestos para la transferencia de calor. Una vez realizado esto se tiene acceso a los componentes de la base de datos y para agregar uno nuevo se debe hacer clic en el cuadro *New*. Teniendo acceso a la ventana *New Component Definition*:

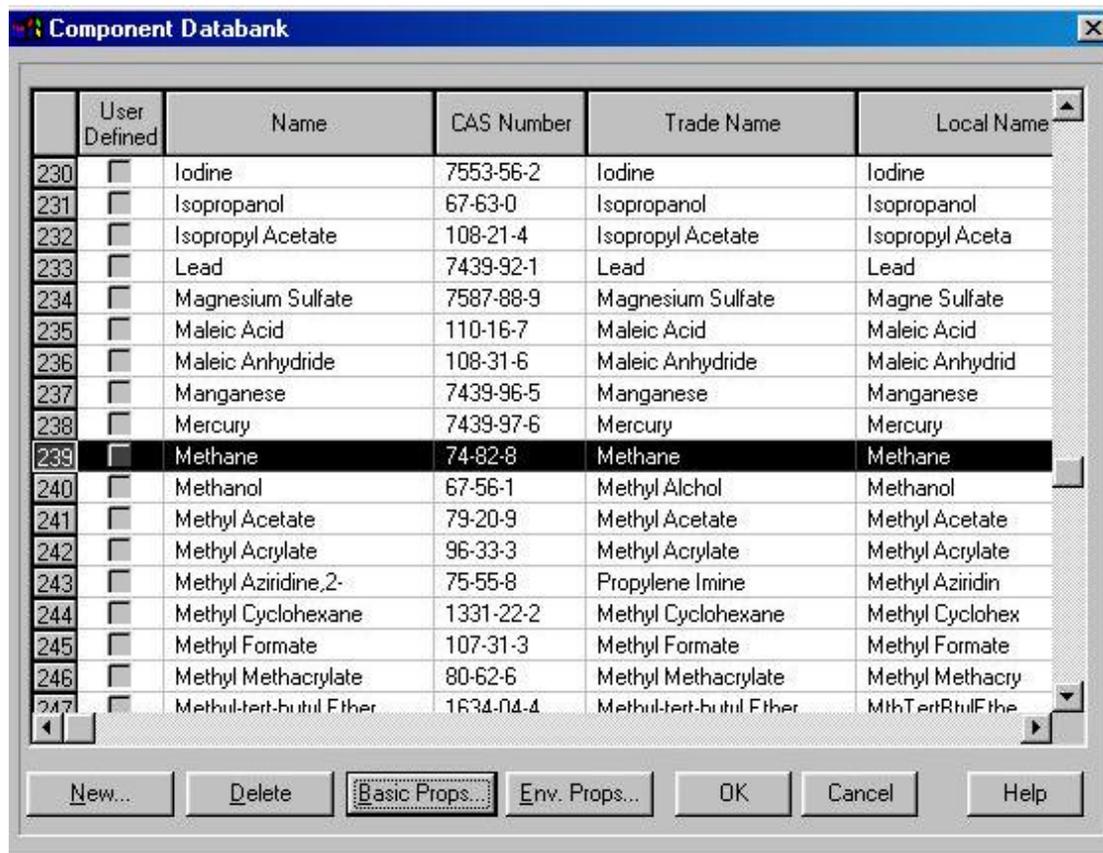
The image shows a screenshot of the "New Component Definition" dialog box. The dialog has a title bar with a close button. It contains several input fields: "Name" (Hydrogen Sulfide), "CAS Number" (N/A), "Trade Name" (Hydrogen Sulfide), "Local Name" (Hydrogen Sulfide), and "Formula" (H2S). Each field has a "(unique)" label to its right. Below these fields is a section titled "Default Property Values" with two radio buttons: "Initialize to zero (must provide appropriate values later)" and "Copy from Component : Water". At the bottom, there are two radio buttons: "In Component Databank" (selected) and "Design Case (Required)". The dialog ends with "OK", "Cancel", and "Help" buttons.

Este cuadro se completa con información única del componente. Es posible iniciar todos los valores de las propiedades termodinámicas del componente de cero, para lo cual se debe marcar *Initialize to zero* en *Default Property Values*, o también determinar un componente de referencia en donde las propiedades termodinámicas de este componente se copian al nuevo compuesto. Una vez completo el cuadro se presiona OK quedando el componente guardado en la base de datos del programa de manera global.

4.2 Modificando Propiedades Termodinámicas de los Componentes

Una vez ingresado el componente a la base de datos del programa, se deben actualizar sus propiedades termodinámicas (también se pueden modificar las propiedades medioambientales) o agregar una propiedad no existente y que es necesaria para la operación unitaria a simular.

Para modificar las propiedades se debe primero abrir la base de datos del tipo de compuesto. Para posteriormente marcar el número del componente a modificar y finalmente accionar el ícono de propiedades básicas (*Basic Props*) o de propiedades medioambientales (*Env. Props*).



Una vez realizado lo anterior se tiene el cuadro de propiedades básicas de los componentes (*Basic Component Properties*), en donde se encuentran los valores de densidad, capacidades caloríficas, presión de vapor, fórmula, peso molecular, propiedades críticas y valores económicos del componente elegido.

Basic Component Properties

Name: Methane
 Trade Name: Methane
 Formula: CH4

Density
 Liquid/Solid Density (g/L) = a + bT, where T is in K.
 a: 716.80 and b: 0.0000
 Gaseous Density: Ideal Gas Law Is Used

Heat Capacity
 Liquid/Solid Cp: 100.0000 J/gmol-K
 Gaseous Cp (J/gmol-K) = a + bT + cT² + dT³, where T is in K and.
 a: 19.2500
 b: 5.2130 x 1.0E-2
 c: 0.1197 x 1.0E-4
 d: -1.1320 x 1.0E-8

Saturated Vapor Pressure (Antoine)
 log Pi (in mmHg) = a - b/(c+T), where T is in K.
 a: 6.6956
 b: 405.4200
 c: -5.4200

Local Name: Methane
 CAS Number: 74-82-8
 User Defined? Is Biomass?
 MW: 16.04 kg/kmol
 Particle Size: 0.00 micron
 Normal Boiling Point: 111.70 K
 Omega: 0.0110
 Henry's Const. x10⁴: 6370.00000 atm-m3/gmol

Critical Properties
 Temperature: 190.40 K
 Pressure: 46.00 bar
 Compressibility Factor: 0.2880

Economics
 Purchasing Price: 0.0000 \$/kg
 Selling Price: 0.0000 \$/kg

OK Cancel Help

Este paso es de real importancia para una correcta simulación y conviene siempre revisar las propiedades que están presentes en la base de datos de cada uno de los componentes. También resulta necesario revisar las propiedades o actualizarlas si es necesario.

4.3 Propiedades Necesarias en cada Operación Unitaria

Para un correcto funcionamiento de cada uno de los equipos presentes en la simulación es necesario aportarle las propiedades que necesita para realizar los cálculos respectivos. Con ello no es necesario tener todas las propiedades sino sólo basta tener las necesarias, con ello se evita una pérdida de tiempo.

Las propiedades necesarias en cada operación unitaria son las siguientes:

Propiedades	Observaciones
Peso Molecular	: Destilación, Evaporación Flash, Condensación, Absorción/Stripping, Precipitación electrostática y todas las reacciones químicas. También se utiliza en los flujos molares que son desplegados sobre la corriente (o diálogos) y el reporte de corrientes.
Es Biomasa [Boleana]	: Un simple verdadero o falso que identifica los componentes que pueden ser tratados como biomasa. Usado en la designación de los componentes de biomasa primaria y en todos los reactores biológicos medioambientales.
Tamaño de partícula [micrón]	: Usada en filtros y centrifugas.
Densidad [Kg/m ³]	: Usada para la conversión de flujos máscicos y volumétricos y para el cálculo de concentración de las especies en las corrientes. La densidad se aplica a cualquiera de las fases sólida o líquida. Se estima utilizando la fórmula $d=a+bT$ con T en [K]. Si el sistema necesita la densidad de un componente en fase vapor (i.e. su temperatura T es mayor que su punto normal de ebullición) el sistema usa la ley de los gases ideales para estimar el volumen molar, luego la densidad es tomada como la inversa del volumen molar a la temperatura T.
Capacidad calorífica del líquido [J/gmol-K]	: Usada en balances de Energía.
Capacidad Calorífica del vapor [J/gmol-K]	: Usada para balances de energía. Se estima por la fórmula: $C_p = a + bT + cT^2 + dT^3$, T en [K].
Punto de ebullición normal [K]	: Destilación, Evaporación Flash, Condensación. Se usa para determinar la fase de un componente (gas v/s líquido/sólido). Con ella el programa decide el uso de la correlación para la densidad (aplicable para la fase líquida o sólida) o el uso de la ley de gases ideales para determinar la densidad.

Temperatura Crítica : Destilación, Evaporación Flash, Condensación.
[K].

Presión Crítica [bar] : Destilación, Evaporación Flash, Condensación.

Factor de compresibilidad : Destilación, Evaporación Flash, Condensación,

Presión de vapor : Evaporación Flash, Condensación.
basada en la ecuación Es basada en la ecuación de Antoine:
de Antoine [mmHg] $\text{Log}_{10}[P_{\text{vap}}] = a + [b/(c+T)]$ T en [K].

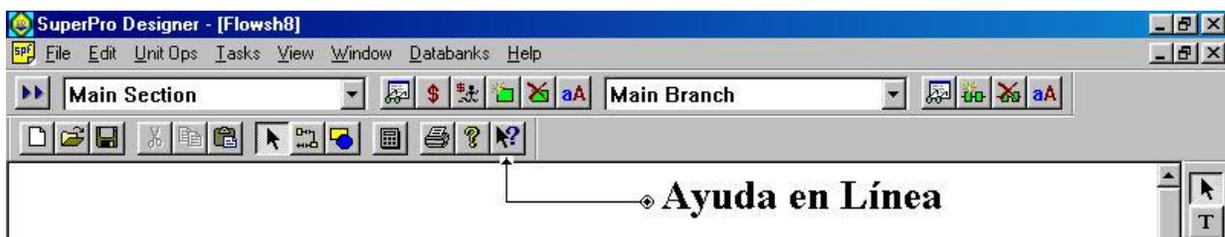
Cte Ley de Henry : Usada en absorción/Stripping y cálculo de emisiones de VOC.
[atm-m³/mol]

Precio de Venta [\$ /kg] : Usada en cálculos económicos.

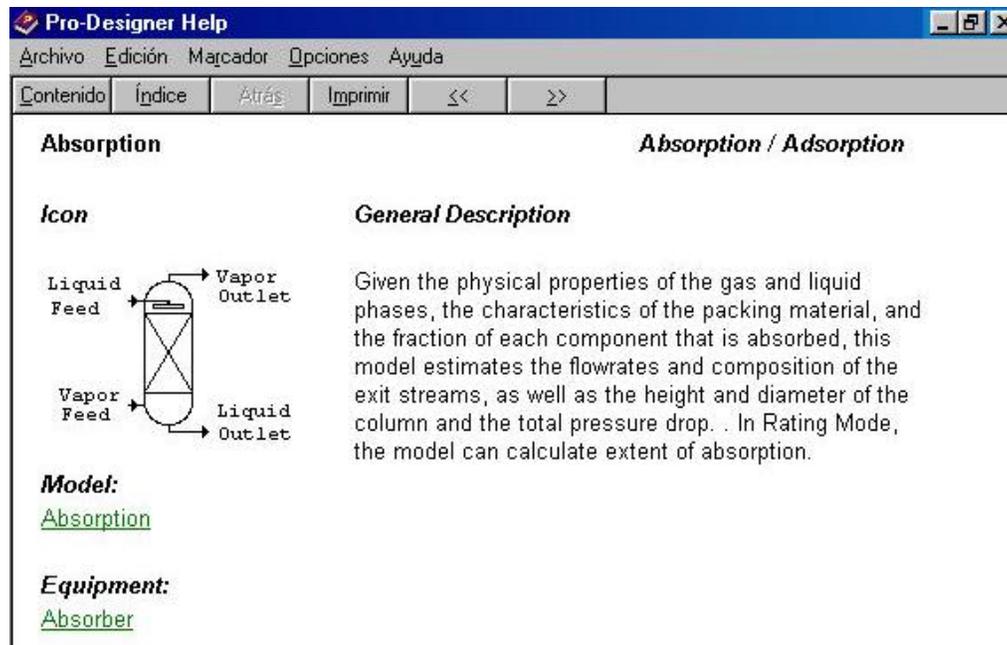
Precio de Compra : Usada en cálculos económicos.
[\$ /kg]

4.4 Uso de Ayuda en Línea

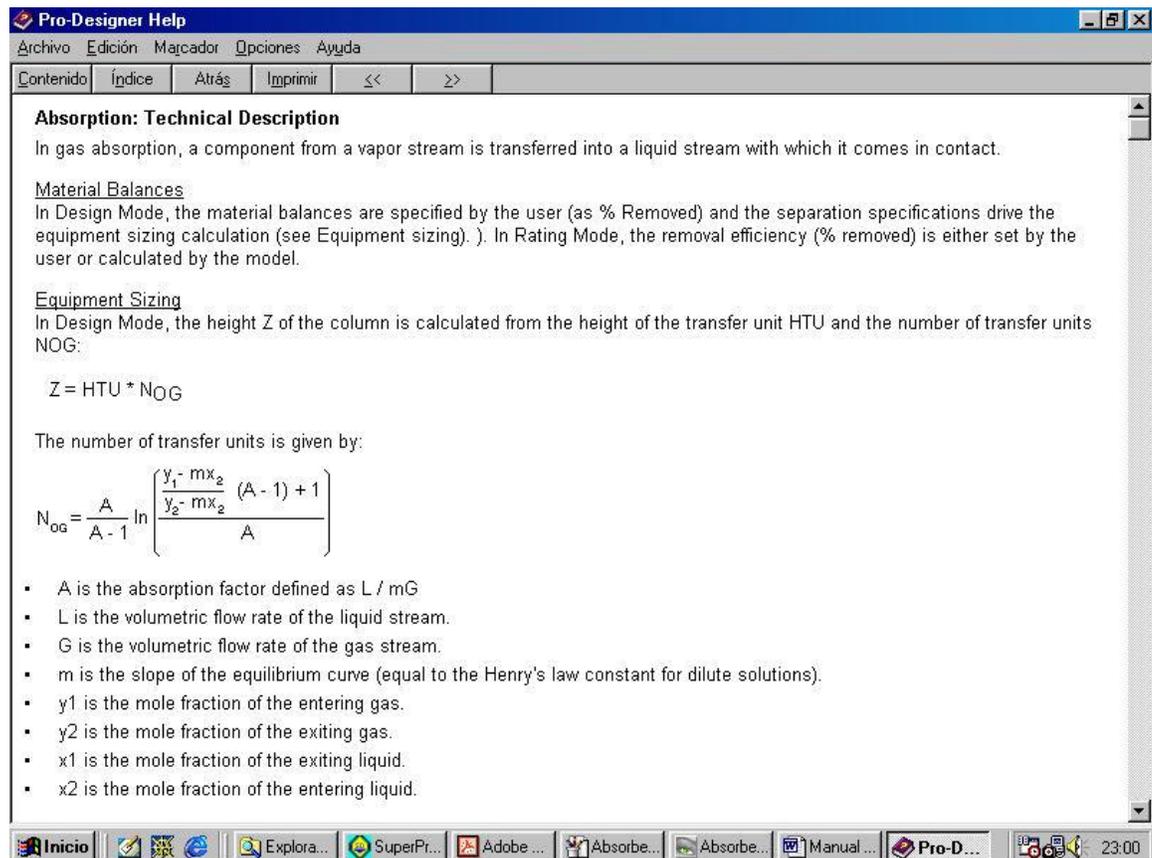
Para comprender e funcionamiento de cada equipo de la simulación es necesario conocer la forma en que se lleva a cabo los cálculos en cada operación unitaria. Una forma rápida de obtener esta información es utilizar la ayuda en línea que posee el programa.



Esta ayuda en línea se realiza una vez presionado el botón de ayuda en línea colocando el cursor sobre el equipo en cuestión, desplegándose así toda la información correspondiente a su funcionamiento y dimensionamiento.



Existiendo variados links para obtener la información del equipo. Como ejemplo en el link *Absorption* se tiene:



Con ello se logra comprender como funciona cada equipo y por ende el funcionamiento de la simulación.

4.5 Ejemplo N°1: Simulación de una operación de neutralización.

Datos:

Especies : H_2SO_4 , $Ca(OH)_2$, $CaSO_4$ y H_2O .

Reacción química : $H_2SO_4 + Ca(OH)_2 \rightarrow CaSO_4 + 2H_2O$

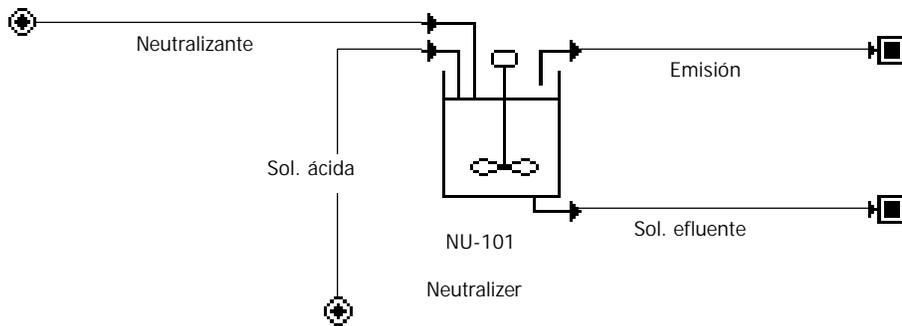


TABLA N° 1: Balance de masa.

COMPONENTE	IN	OUT
	[kg/hr]	[kg/hr]
$Ca(OH)_2$	90.6	15.1
$CaSO_4$	0	138.8
H_2SO_4	100	0
H_2O	1715.8	1752.5
TOTAL	1906.4	1906.4

TABLA N° 2: Especificación del equipo.

INPUT DATA		Módulo de cálculo	
Número de etapas	1	Tiempo de residencia [hr]	0.5
Líquido/Total (volumen)	0.85	Volumen máximo por etapa [m ³]	500
Tasa de agitación [kW/m ³]	0.05	Volumen de líquido por etapa [m ³]	0.95
Temperatura [°C]	25	Número de unidades	1
Profundidad [m]	1		
Datos de neutralización		OUTPUT DATA	
Agente	Ca(OH) ₂	Volumen total por etapa [m ³]	1.12
Exceso [%]	20	Potencia [kW]	0.05
		Área [m ²]	1.12