

MEMORIA DE LAS ACCIONES DESARROLLADAS.
PROYECTOS DE MEJORA DE LA CALIDAD DOCENTE.
VICERRECTORADO DE PLANIFICACIÓN Y CALIDAD.
XII CONVOCATORIA (2010-2011)



DATOS IDENTIFICATIVOS:

1. Título del Proyecto

Empleo de software avanzado de simulación de procesos químicos como elemento clave en los procesos de autoaprendizaje.

2. Código del Proyecto

106023

3. Resumen del Proyecto

El proyecto pretende la **actualización de la docencia** que se imparte en diversas asignaturas del área de Ingeniería Química, incentivando el empleo de software avanzado para la simulación de procesos químicos, en concreto ChemCad. Con ello se puede ir **innovando la estructura clásica** de muchas de estas asignaturas en las que la resolución de problemas numéricos es una parte fundamental de su desarrollo. El empleo de este software para la resolución de muchos de estos problemas, no sólo permite al alumno **acercarse** a los procedimientos y herramientas que se emplean en las **actuales** empresas de Ingeniería del Sector, sino que, la posibilidad de **simular** dichos problemas, le ofrece la posibilidad de llevar a cabo un **proceso de autoaprendizaje** que es uno de los elementos esenciales de la nueva estructura de los planos de estudios.

De acuerdo con la memoria presentada en su día, una vez actualizada la versión del software ChemCad, disponible en la Universidad de Córdoba, se han definido y resuelto con él una serie de problemas diversos: balance de materia, balance de materia y energía, reactor químico para reacciones múltiples y reactor químico discontinuo. Igualmente, se han realizado seminarios conjuntos para mostrar el uso y potencial del software y se han encargado trabajos individuales y por grupos. Además, se ha presentado una comunicación a un Congreso del área, que conllevaba, como capítulo de libro, la publicación correspondiente.

4. Coordinador del Proyecto

Nombre y Apellidos	Departamento	Código del Grupo Docente	Categoría Profesional
Isidoro García García	Q. Inorg. e Ing. Química	76	PDI

5. Otros Participantes

Nombre y Apellidos	Departamento	Código del Grupo Docente	Categoría Profesional
Inés M ^a Santos Dueñas	Q. Inorg. e Ing. Química	76	PDI
José L. Bonilla Venceslada	Q. Inorg. e Ing. Química	76	PDI
Carlos Martínez Pedrajas	Q. Inorg. e Ing. Química		PDI

6. Asignaturas afectadas

Nombre de la asignatura	Área de conocimiento	Titulación/es
Reactores Químicos	Ingeniería Química	Lcdo. Química
Operaciones Básicas de Transferencia de Materia	Ingeniería Química	Lcdo. Química
Bioquímica y Microbiología Industriales	Ingeniería Química, Microbiología	Lcdo. Bioquímica
Industrias Bioquímicas	Ingeniería Química	Lcdo. Bioquímica
Tecnología e Ingeniería Enológicas	Ingeniería Química, Tecnología de los Alimentos	Lcdo. Enología
Ingeniería Química I	Ingeniería Química	Grado Química
Ingeniería Química II	Ingeniería Química	Grado Química
Proyectos en Química	Ingeniería Química	Grado Química
Bioquímica y Microbiología Industriales	Ingeniería Química, Microbiología	Grado Bioquímica
Ingeniería Bioquímica	Ingeniería Química	Grado Bioquímica

MEMORIA DE LA ACCIÓN

Especificaciones

Utilice estas páginas para la redacción de la Memoria de la acción desarrollada. La Memoria debe contener un mínimo de cinco y un máximo de diez páginas, incluidas tablas y figuras, en el formato indicado (tipo y tamaño de fuente: Times New Roman, 12; interlineado: sencillo) e incorporar todos los apartados señalados (excepcionalmente podrá excluirse alguno). En el caso de que durante el desarrollo de la acción se hubieran producido documentos o material gráfico dignos de reseñar (CD, páginas Web, revistas, vídeos, etc.) se incluirá como anexo una copia de buena calidad.

Apartados

1. **Introducción** (justificación del trabajo, contexto, experiencias previas etc.)

Contexto

El documento Marco del Plan Propio de Calidad de la Enseñanza de la Universidad de Córdoba¹, publicado en 2007, establece unos objetivos y programa de acciones que pretenden “*emprender una profunda reforma, entre otros muchos aspectos, en la estructura y organización de las enseñanzas y en las metodologías de enseñanza-aprendizaje*” del sistema universitario. El documento quiere resaltar el papel de la Docencia como uno de los pilares fundamentales en los que se base la Universidad y ello, en un contexto de mejora general de la Calidad de todo el sistema.

Entre los objetivos específicos se indica el de “*Mejorar la calidad de los programas académicos (recursos y herramientas docentes)*” pretendiendo, entre otras cosas, implantar un modelo docente acorde con el Espacio Europeo de Educación Superior (EEES), que satisfaga una serie de requisitos:

- a. Autonomía del alumno ante su propio proceso de aprendizaje.
- b. Adquisición de conocimientos y desarrollo de competencias, habilidades y destrezas.
- c. Trabajo en equipo del profesorado y del alumnado.
- d. Incorporación de nuevas tecnologías, enseñanza virtual progresiva y dominio del inglés como segunda lengua comunitaria en la docencia.

Nueva situación

Por lo tanto, la nueva estructura de las enseñanzas universitarias concede una gran importancia al proceso de autoaprendizaje por parte del alumno. Sin embargo, en este contexto, el profesorado debe llevar a cabo una labor de guiado que aumente la eficacia con la que el alumno va adquiriendo los conocimientos y habilidades en un proceso progresivo: semi-autodidacta al principio y cada vez más autodidacta al final.

La intervención del profesorado deber ser, por tanto, una labor bien meditada y acotada en el tiempo para que las ventajas del proceso de autoaprendizaje puedan aflorar. El tipo de intervención que el docente debe realizar dependerá, lógicamente, de la naturaleza de las enseñanzas en cuestión. En este sentido, muchas asignaturas,

¹ <http://www.uco.es/organizacion/calidad/planPropio/planPropio.htm>

especialmente de las distintas **ingenierías**, implican la adquisición de competencias en la resolución de **problemas numéricos** como una parte fundamental de sus contenidos prácticos.

La forma clásica de abordar estas enseñanzas, en la que el profesorado explica con detalle el planteamiento y resolución de los problemas, ha ido evolucionando de manera que, cada vez más, el alumnado tiene disponible colecciones de problemas, en formato más o menos interactivo, que le permiten avanzar de forma autónoma en los conocimientos y habilidades que debe alcanzar. Ejemplos de este tipo de material, han sido desarrollados por el grupo solicitante en proyectos previos de innovación docente^{2,3,4}. En concreto, el último proyecto (05SA049) ha desarrollado una colección digital de problemas de reactores químicos que facilita bastante el autoaprendizaje del alumno. La colección es muy versátil, tanto por las alternativas para su estudio como por la forma de uso. Aun siendo muy interesante y necesario este tipo de material, en último término, lo que el alumno tiene disponible son problemas **específicos** resueltos.

Qué hacer

Un paso más en todo este contexto, puede ir en la dirección de definir algunos problemas en software avanzado de simulación de procesos químicos, lo que permite un avance significativo en la estrategia seguida para su estudio en las etapas intermedias y finales del proceso. En efecto, el empleo de estas nuevas “herramientas” (tecnologías) implican una serie de aspectos:

→ Tener un **conocimiento previo** de los aspectos físico-químicos básicos del problema a tratar.

→ Saber **qué datos** (información) son necesarios para poder definir (y por tanto resolver) adecuadamente el problema.

→ Saber **buscar la información** referida en el punto anterior. Como se sabe un elemento clave del proceso de autoaprendizaje es la capacidad para buscar por sí mismo la información.

→ "**Construir**" (definir) el problema en la estructura más o menos rígida que este tipo de software tiene. En muchos casos, son posibles diferentes alternativas lo que puede fomentar la curiosidad y el espíritu constructivo.

→ Y finalmente, una vez el problema ha sido definido adecuadamente, la posibilidad de resolverlo cuantas veces se desee, sin apenas coste de tiempo, cambiando las variables de operación así como el valor de éstas (siempre dentro del marco permitido por los principios físico-químicos que afecten al caso), abre la puerta de la **simulación** del problema. La simulación es una magnífica “herramienta” con la que

² Puesta en marcha de documentos interactivos para el estudio desasistido de asignaturas de Química. I. Tutor de problemas de química del agua y de reactores químicos. Referencia: 03NP031.

³ Puesta en marcha de documentos interactivos para el autoaprendizaje de asignaturas de Química. II. Tutor de Problemas de Reactores Químicos y de Aspectos Ambientales de la Química del Agua. Referencia: 04RS049.

⁴ Realización de documentos interactivos para el autoaprendizaje de asignaturas de Química III. Tutor de Problemas de Reactores Químicos. Referencia: 05SA049.

el alumno no sólo adquiere conocimientos y habilidades sino que promueve una actitud imaginativa y constructiva. De esta forma, **el estudiante no se limita a estudiar y comprender las colecciones de problemas resueltos sino que puede crear sus propios problemas**: comienza a ser profesor de sí mismo, auto-aprende.

Resultados esperables

Por lo tanto, con la incentivación y desarrollo de técnicas docentes como la que se ha comentado, se podrían satisfacer simultáneamente los cuatro requisitos recogidos más arriba dentro del objetivo de “*Mejorar la calidad de los programas académicos (recursos y herramientas docentes)*” en el contexto del Plan Propio de Calidad de la Enseñanza de la Universidad de Córdoba. En concreto:

→ Se promueve la **autonomía del aprendizaje**.

→ No sólo se adquieren conocimientos sino que se desarrollan de forma progresiva las **competencias** y **habilidades** exigibles.

→ Se ha de **trabajar en equipo** con el profesor, pero éste ha de realizar una planificación previa muy cuidadosa para incentivar la autonomía del alumno.

→ Se han de emplear **nuevas tecnologías**, la enseñanza-aprendizaje es **virtual** y progresa de forma personalizada para cada alumno, dependiendo de sus propias capacidades. Además, dado que este tipo de software suele estar en **inglés**, se avanza en el dominio de esta lengua (fundamental en las áreas científico-tecnológicas).

Es por todo ello, y convencidos del interés que este tipo de trabajos pueden tener, es por lo que se propone un proyecto que permita avanzar en la estrategia comentada.

2. Objetivos (concretar qué se pretendió con la experiencia)

1º.- Introducir el empleo de **software de simulación** de procesos químicos en la docencia de diversas asignaturas del Área de Ingeniería Química de esta Universidad.

2º.- Introducir un importante grado de **innovación** en la docencia de dichas asignaturas.

3º.- Avanzar, respecto a la situación de partida de la enseñanza que se imparte en la citada Área, hacia una **mejora y adaptación** al Espacio Europeo de Educación Superior y **ajustarse** a lo ordenado por el Documento Marco del Plan Propio de Calidad de la Enseñanza de la Universidad de Córdoba.

4º.- Incentivar los **procesos de autoaprendizaje**. Las habilidades y actitudes que se desarrollan con el autoaprendizaje son de especial importancia para abordar con éxito los trabajos de análisis y diseño de procesos químicos. Estos trabajos implican la necesidad de integrar conocimientos muy diversos, lo que exige una capacidad de búsqueda e interpretación de información en primer lugar, y posteriormente una capacidad constructiva para el empleo de dicha información.

5º.- Promover el empleo de las nuevas tecnologías y el dominio del inglés.

6º.- Aunque los trabajos se focalizan en el Área de Conocimiento del grupo solicitante, la distribución de la docencia en diversas titulaciones y centros del distrito, así como, el hecho de compartir algunas de estas asignaturas con otras Áreas de Conocimiento, permite considerar un objetivo adicional como es hacer llegar las ventajas de estos procedimientos a otras áreas de conocimiento. Por lo tanto, pensamos que los resultados del proyecto pueden tener un ámbito de aplicación y extrapolación mayor.

3. Descripción de la experiencia (exponer con suficiente detalle lo realizado en la experiencia)

1º.- De acuerdo con lo propuesto en su día, se han resuelto con ChemCad los siguientes problemas: uno de **Balance de Materia (BM)**, uno de **Balance de Materia y Energía (BME)**, uno de **Reactores Químicos en estado estacionario (RQ1)** y **otro en estado no estacionario (RQ2)**. Adicionalmente, aunque no se propuso en la solicitud, y como prueba del potencial, versatilidad y utilidad del software, se ha realizado una **estimación de datos de equilibrio líquido-vapor (EDELV)**.

2º.- Los problemas de balance de materia y de balance de materia y energía (**BM** y **BME**), se le han explicado y mostrado a profesores del área de Ingeniería Química, responsables, en estos momentos, de asignaturas en las que se tratan, de forma clásica, este tipo de problemas. Se ha pretendido incentivar el empleo de este software en su docencia con todas las ventajas que, tal y como se ha indicado en la introducción, se pueden obtener. La asignatura, en vigor, más importante en este sentido es la denominada INGENIERÍA QUÍMICA, impartida en 3^{er} curso de la licenciatura de Química. Una parte importante de los contenidos de esta asignatura pasarán a impartirse, en un futuro inmediato, en la asignatura INGENIERÍA QUÍMICA I, dentro del nuevo Grado en Química que empezó en esta universidad el pasado curso académico.

3º.- Los problemas de reactores químicos (**RQ1** y **RQ2**) se les ha explicado a alumnos de la asignatura REACTORES QUÍMICOS de 4º curso de la licenciatura en Química. Tras realizar una explicación previa en la que los problemas se resolvieron de forma "tradicional", a continuación, por grupos, se organizaron seminarios en los que, en un aula de informática, se definieron y resolvieron mediante el empleo de ChemCad. Una vez resueltos, se ilustraron las múltiples posibilidades que se abren al cambiar el valor de algunas de las variables de cada sistema. Se abre, de este modo, la posibilidad de simular los problemas con todo lo que ello implica. Como es lógico, al mismo tiempo, se aprovecha para presentar a los alumnos el software. Una parte de los contenidos de la asignatura de Reactores Químicos, se impartirán, en un futuro, en la asignatura INGENIERÍA QUÍMICA II, nueva asignatura en el Grado de Química.

4º.- Se encargó a los alumnos, de forma individual, la tarea de simular e investigar nuevas alternativas para los problemas indicados en el punto 4º. Dadas las facilidades de la Universidad de Córdoba, y en concreto de su servicio de informática, y el uso en red del software, esta actividad se puede realizar desde cualquier lugar y momento, facilitando la autoplanificación del trabajo del estudiante.

5°.- Se encargó a los alumnos, de forma individual, la tarea de definir, resolver y simular un nuevo problema (**RQ3**), complejo, de reactores químicos. Se trata de promover su capacidad de aplicar, a situaciones nuevas, los conocimientos alcanzados previamente. Además, este problema se propuso en inglés.

6°.- Para promover la colaboración y sinergias de unos y otros se propusieron tres nuevos problemas (**RQ4**, **RQ5** y **RQ6**) para que fueran definidos, resueltos y simulados, pero en este caso, por grupos de alumnos. Posteriormente, cada grupo, tenía que exponer al resto de los grupos su caso concreto. De esta forma, se pretendía el desarrollo de las capacidades de comunicación y explicación del trabajo realizado.

7°.- Adicionalmente, como se ha indicado, se ha resuelto el problema (**EDELV**) de obtención de los datos de equilibrio líquido-vapor de un sistema binario. Esto último ha permitido una valoración **adicional** de los resultados de una práctica prevista en la asignatura de 3° de Química OPERACIONES BÁSICAS DE TRANSFERENCIA DE MATERIA, responsabilidad de los miembros del proyecto. Los contenidos de esta asignatura se impartirán, en parte, en un futuro, en la asignatura INGENIERÍA QUÍMICA II, nueva asignatura del Grado de Química.

4. **Materiales y métodos** (describir la metodología seguida y, en su caso, el material utilizado)

En primer lugar, se procedió a la actualización del software disponible. Se ha instalado en los servidores de la Universidad de Córdoba la versión CHEMCAD 6.3.2 y, en concreto, de todos los módulos disponibles, se han instalado los siguientes: CC-STEADY STATE y CC-DYNAMICS, se dispone de 25 licencias de uso simultáneo. Con el primer módulo se pueden definir y simular múltiples situaciones en estado estacionario, mientras que con el segundo, podemos simular, además, reactores químicos en estado no estacionario.

Los problemas que se han resuelto y propuesto son los siguientes:

1°.- Problema de Balance de Materia⁵ (BM)

Una corriente (1) contiene una disolución de KCl en agua. El caudal total de la corriente es de 47.08 mol·kg/h y la fracción molar de KCl es de 0.057. Si la corriente se alimenta a la planta cuyo diagrama de flujo se representa en la figura, determinar los caudales del resto de las corrientes.

Datos adicionales sobre la composición de algunas de las corrientes:

Fracción molar de KCl de la corriente 3 (X3): 0.195; X8= 0.851 y X9= 0.05

En el diagrama, el número de cada corriente se indica dentro de los cuadrados.

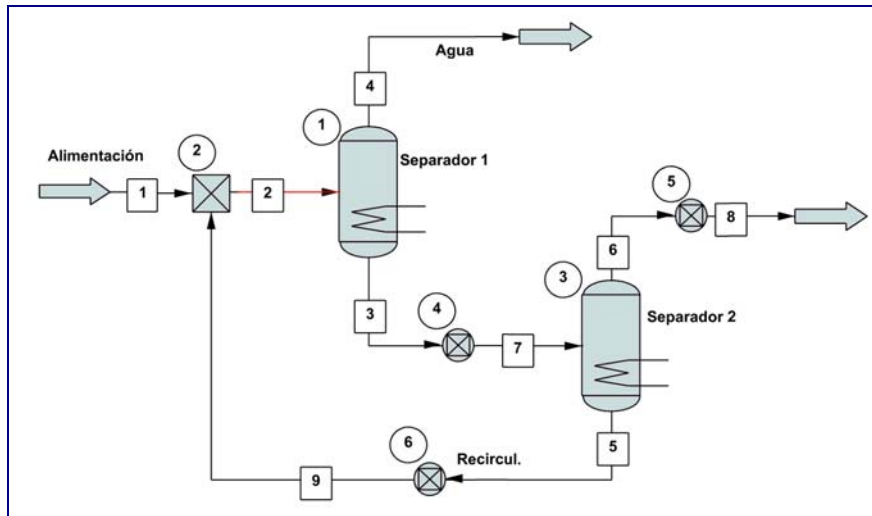
Los números que aparecen dentro de círculos, se refieren a los equipos utilizados.

Los equipos 1 y 3 representan Separadores de Componentes.

El Separador 1 hace que la corriente 4 lleve sólo agua.

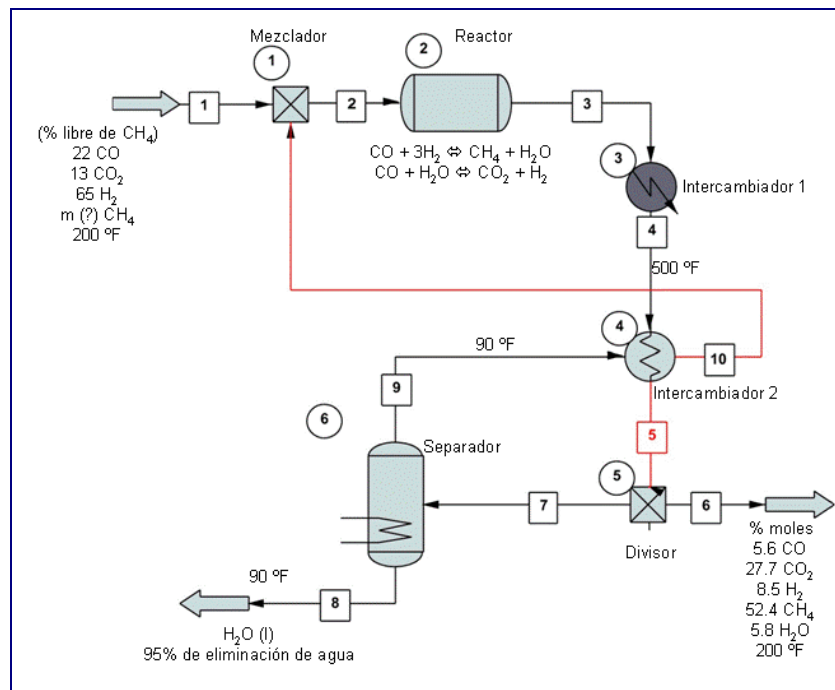
El equipo 2 es un mezclador y los numerados como 4, 5 y 6 representan los puntos de control de las concentraciones que se desean alcanzar.

⁵ Desarrollo propio



2°.- Problema de Balance de Materia y Energía⁶ (BME)

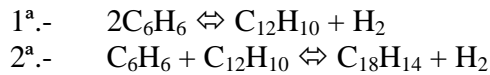
El contenido en metano de un gas de síntesis se incrementa mediante el sistema que se indica en la figura. Suponiendo que el mezclador, reactor, intercambiador 4 y el divisor trabajan en modo adiabático, determínese la composición y temperatura de corrientes que no están totalmente definidas.



⁶ Reklaitis, G.V., Schneider, D.R. (1986). Balances de materia y energía. Nueva editorial interamericana, Mexico D.F., pp 508-509

3°.- Reactor químico en estado estacionario⁷ (RQ1)

La deshidrogenación de benceno en un reactor tubular se produce de acuerdo con las siguientes dos reacciones:



Las ecuaciones de velocidad son:

$$\begin{aligned} r_1 &= 14,96 \cdot 10^6 e^{-15200/T} (p_B^2 - p_D p_H / K_1), \text{ mol-lb benceno/h ft}^3 \\ r_2 &= 8,67 \cdot 10^6 e^{-15200/T} (p_B p_D - p_T p_H / K_2), \text{ mol-lb trifenilo producido o difenilo reaccionado/h ft}^3 \end{aligned}$$

donde:

p_B , es la presión parcial de benceno, atm

p_D , idem de difenilo

p_T , idem de trifenilo

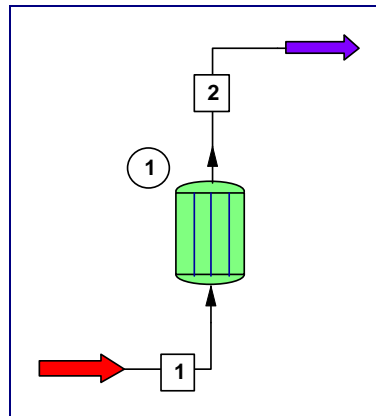
p_H , idem de hidrógeno

T , es la temperatura, K

K_1 y K_2 , son las constantes de equilibrio en términos de las presiones parciales.

Dichas ecuaciones se obtuvieron a 1 atm. y a las temperaturas de 1265 y 1400 °F, en un tubo de 0,5 in y 3 ft de largo.

Determinar la conversión total de benceno a di y trifenilo en función de la velocidad espacial. El reactor trabaja a 1 atm y a 1400 °F.

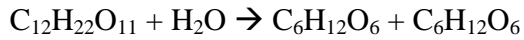


4°.- Reactor químico en estado no estacionario⁸ (RQ2)

Se ha estudiado la cinética de la hidrólisis de la sacarosa catalizada por un ácido inorgánico:

⁷ Smith, J.M. (1981). Chemical Engineering Kinetics. Third Edition. McGrawHill. pg. 159.

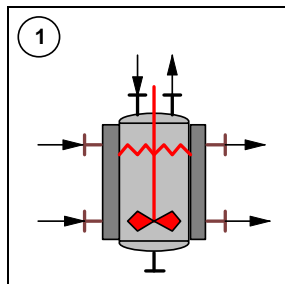
⁸ Desarrollo propio



Para ello se ha empleado un reactor discontinuo de mezcla completa en el que se ha puesto una concentración inicial de 5.47 g de sacarosa por litro de disolución. Tras investigar diferentes temperaturas de reacción (entre 45 y 65 °C), se ha encontrado la siguiente ecuación cinética:

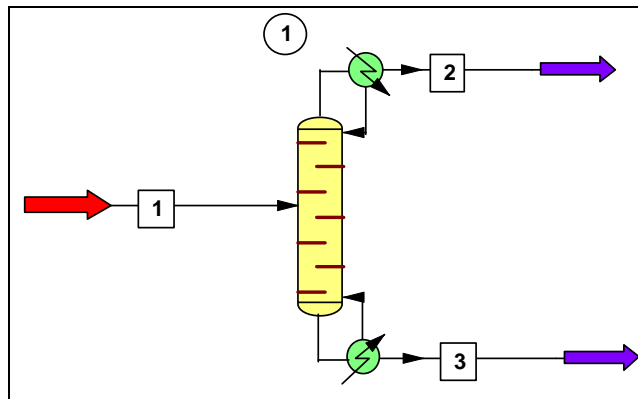
$$K = 1.1505 \cdot 10^{15} e^{-(12229/T)}, \text{ siendo las dimensiones de } [K]=1/\text{min}$$

Evalúese en ChemCad, cómo variaría la conversión con el tiempo.



5°.- Datos de equilibrio líquido-vapor para un sistema binario⁹ (EDELV)

En el contexto de una práctica sobre la determinación de un coeficiente volumétrico global de transferencia de materia en una columna de rectificación de relleno, estimense los datos de equilibrio líquido-vapor de la mezcla binaria acetona-isopropanol a una presión de 1 atm



6°.- Reactor químico en estado estacionario y condiciones no isotérmicas¹⁰ (RQ3)

It is proposed to design a pilot plant for the production of allyl chloride. The reactants consist of 4 moles propylene/mole chlorine and enter the reactor at 392 °F. The reactor will be a vertical tube of 2 in. ID. If the combined feed rate is 0.85 lb mol/h,

⁹ Desarrollo propio

¹⁰ Smith, J.M. (1981). Chemical Engineering Kinetics. Third Edition. McGrawHill. pg. 229.

determine the conversion to allyl chloride as a function of tube length. The pressure may be assumed constant and equal to 29.4 lb/m² abs.

The reactants will be preheated separately to 392 °F and mixed at the entrance to the reactor. At this low temperature explosion difficulties on mixing are not serious. The reactor will be jacketed with boiling ethylene glycol, so that the inside-wall temperature will constant and equal to 392 °F. The inside-heat-transfer coefficient may be taken as 5.0 Btu/(h·ft²·°F).

Additional data and notes. The basic development of the allyl chloride process has been reported by Groll and Hearne and Fairbairn, Cheney, and Cherniavsky. It was found that the three chief reactions were:

1. $\text{Cl}_2 + \text{C}_3\text{H}_6 \rightarrow \text{CH}_2 = \text{CH} - \text{CH}_2\text{Cl} + \text{HCl}$
2. $\text{Cl}_2 + \text{C}_3\text{H}_6 \rightarrow \text{CH}_2\text{Cl} - \text{CHCl} - \text{CH}_3$
3. $\text{Cl}_2 + \text{CH}_2 = \text{CH} - \text{CH}_2\text{Cl} \rightarrow \text{CHCl} = \text{CH} - \text{CH}_2\text{Cl} + \text{HCl}$

To simplify the kinetic treatment of the problem we shall consider only the first two reactions. The heats of reaction are shown in Table 1. The molal heat capacities cp will be assumed constant and equal to the values given in Table 2.

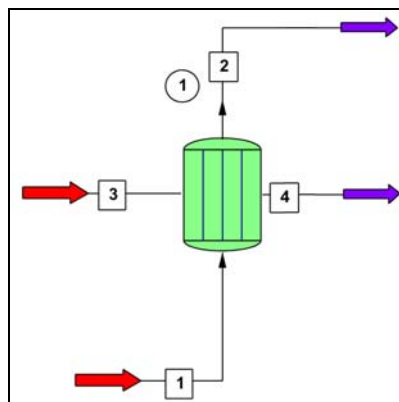
The proposed rate equations are:

$$r_1 = 206000 \exp(-27200/RgT) p_{\text{C}_3\text{H}_6} p_{\text{Cl}_2}$$

$$r_2 = 11,7 \exp(-6860/RgT) p_{\text{C}_3\text{H}_6} p_{\text{Cl}_2}$$

where r_1 and r_2 are in lb-mole of Cl₂ disappearing per hour per cubic foot, T is in degrees Rankine, and the partial pressure p is in atmospheres.

Table 1.-		Table 2.-	
H [Btu/lb-mol]	298 K	Component	cp [Btu/lb-mol R]
Reaction 1	-48000	Propylene(g)	25,3
Reaction 2	-79200	Chlorine (g)	8,6
		Hydrogen chloride (g)	7,2
		Allyl chloride (g)	28,0
		1,2-Dichloropropene (g)	30,7



7°.- Reactor químico en estado estacionario¹¹ (RQ4)

La hidrólisis del anhídrido acético: $(\text{CH}_3\text{CO})_2\text{O} + \text{H}_2\text{O} \rightarrow 2\text{CH}_3\text{COOH}$ es de pseudo primer orden cuando se realiza con una concentración en anhídrido acético menor de, aproximadamente, 0,2 M, entre 10 y 40 °C. La constante cinética para la desaparición del anhídrido en una solución diluida a 25 °C es 0,155 1/min. La energía de activación es 10,6 kcal/mol-g ($R=1,987 \text{ cal}/(\text{mol}\cdot\text{g K})$).

Calcular un reactor de flujo pistón para producir 200 kg/h de ácido acético a 35 °C y con una conversión del 95 % a partir de una alimentación 0,07 M en anhídrido.

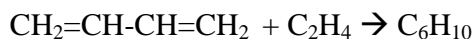
8°.- Reactor químico en estado estacionario¹² (RQ5)

Se desea llevar a cabo la deshidrogenación de etano a etileno: $\text{C}_2\text{H}_6 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_4 + \text{H}_2$ en un reactor de flujo pistón isotérmico a 750 °C y 1 atm. de presión. La constante cinética varía con la temperatura según la expresión $k(\text{s}^{-1}) = 0,602 \cdot 10^{15} \exp(-35970/T)$; el tiempo espacial es $\tau = 4 \text{ s}$. Si la alimentación es etano puro, calcular la conversión obtenida.

9°.- Reactor químico en estado estacionario (RQ6)

Aplicación de la reacción de Diels-Alder a la reacción de butadieno con etileno en un reactor homogéneo de flujo pistón.

Se sabe que el 1,3-butadieno (A) reacciona con etileno (B) en fase gaseosa y a temperatura superior a 400 °C, vía reacción Diels-Alder, para dar ciclohexeno (C).



Si se alimenta un RFP con una alimentación equimolecular de 1,3-butadieno y etileno, a 450 °C y 1 atm, calcular el tiempo espacial (τ) necesario para convertir el 10% de butadieno a ciclohexeno, mediante una operación isotérmica

Datos:

La reacción es de segundo orden

$k = 10^{7,5} \exp(-115500/RT) \text{ dm}^3/(\text{mol}\cdot\text{s})$

La reacción reversible es despreciable.

5. **Resultados obtenidos y disponibilidad de uso** (concretar y discutir los resultados obtenidos y aquéllos no logrados, incluyendo el material elaborado y su grado de disponibilidad)

Los resultados se han ajustado perfectamente a los objetivos planteados. En concreto:

1.- Se ha introducido el empleo de un software avanzado de simulación de procesos químicos. que ofrece múltiples posibilidades de innovación, mejora y autoaprendizaje para diversas asignaturas. Si bien las más afectadas son las referidas en los apartados previos, a medida que

¹¹ AIChE MI, Series E: Kinetics, vol 2, pg 45.

¹² Santamaría, J.M., y otros, Ingeniería de Reactores, Ed. Síntesis, S.A., Madrid, 1999, pg 66.

otros profesores, próximos en la especialidad, conozcan y valoren estas posibilidades, seguramente aprovecharán esta herramienta dada su disponibilidad en la red de la Universidad de Córdoba.

2.- El uso de ChemCad permite un importante grado de innovación en la forma clásica en la que se imparte la docencia en muchas asignaturas de ingeniería, especialmente en las relacionadas con la Ingeniería Química, Ingeniería Bioquímica y Tecnología de los Alimentos. Por ejemplo, la realización de problemas pasa a ser una actividad en la que éstos se pueden simular, investigando así múltiples opciones que de otra forma, o no es posible o bien requiere de un tiempo que no se tiene.

3.- La actividad y resultados permiten avanzar e el proceso de adaptación el EEES. Es importante, en este sentido, indicar que se le enseña al alumno el uso de un instrumento con el que puede avanzar, posteriormente por sí sólo, en el campo de estudio cursado e incluso en otros próximos.

4.- Se ha incentivado el uso de nuevas tecnologías y el uso del inglés. Todo el software empleado está, exclusivamente, en inglés. Además, uno de los trabajos propuestos está en inglés.

5.- Se ha incentivado el trabajo en grupo y las actividades de exposición y defensa de un trabajo realizado.

6.- Se ha hecho una comunicación a un congreso y realizado la publicación correspondiente como capítulo de libro¹³.

7.- En los ANEXOS 1 a 10, se encuentran todo el material generado. Además, los alumnos pueden acceder a él desde la página web del profesor.

6. **Utilidad** (comentar para qué ha servido la experiencia y a quiénes o en qué contextos podría ser útil)

En apartados previos podría quedar clara la utilidad de la experiencia. Los resultados no sólo son útiles para los alumnos de diversas titulaciones en las que se cursen temáticas próximas a las indicadas sino también para el profesorado responsable. En efecto, las posibilidades de preparar y comprobar nuevo material para clase se facilita mediante el uso de herramientas como ésta.

7. **Observaciones y comentarios** (comentar aspectos no incluidos en los demás apartados)

Se ha de resaltar y agradecer la colaboración económica de la empresa CHEMSTATIONS (<http://www.chemstations.com/>). El presupuesto solicitado en su día, básicamente para la actualización del software, implicaba la renovación de los dos módulos indicados

¹³ García, I., Santos, I.M., Bonilla, J.L., Martínez, C., Álvarez, C. (2010). Empleo de software de simulación como elemento clave en los procesos de autoaprendizaje. XXVIII Jornadas de Ingeniería Química. Editores: Gayubo, A., Ereña, J., Aguado, R., Aranzabal, A., López, R., Ortueta, M. Servicio de publicaciones de la Universidad del País Vasco, pp 89-92. ISBN: 978-84-9860-419-1

previamente en el apartado 4 (Materiales y métodos). El módulo CC-STEADY STATE es la estructura básica sobre la que se van añadiendo diversos complementos, como por ejemplo CC-DYNAMICS. Pues bien, al reducirse a la mitad el presupuesto concedido al proyecto, se ha conseguido que la empresa, de modo excepcional y atendiendo a la larga colaboración con la UCO, haya concedido la actualización gratuita del módulo CC-DYNAMICS (valorado en casi 900 €).

8. Autoevaluación de la experiencia (señalar la metodología utilizada y los resultados de la evaluación de la experiencia)

Al final de todas las actividades se preguntó directamente a los alumnos su opinión sobre la experiencia, éstos consideran muy interesante la actividad, no obstante opinan que les falta tiempo para realizar todas las actividades que se les están encargando en el contexto de los planes piloto de adaptación al EEES.

9. Bibliografía

La bibliografía se ha incluido en los pies de páginas.

Lugar y fecha de la redacción de esta memoria

Córdoba, 13 de septiembre de 2011

FLOWSHEET SUMMARY

Equipment	Label	Stream Numbers
1	CSEP Separador 1	2 -4 -3
2	MIXE	1 9 -2
3	CSEP Separador 2	7 -6 -5
4	CONT	3 -7
5	CONT	6 -8
6	CONT	5 -9

Stream Connections

Stream	Equipment		Stream	Equipment		Stream	Equipment	
	From	To		From	To		From	To
1		2	4	1		7	4	3
2	2	1	5	3	6	8	5	
3	1	4	6	3	5	9	6	2

Calculation mode : Sequential
Flash algorithm : Normal

Equipment Calculation Sequence

1 4 3 6 2 5

Equipment Recycle Sequence

1 4 3 6 2

Recycle Cut Streams

2

Recycle Convergence Method: Direct Substitution

Max. loop iterations 40

Recycle Convergence Tolerance

Flow rate 1.000E-003
Temperature 1.000E-003
Pressure 1.000E-003
Enthalpy 1.000E-003
Vapor frac. 1.000E-003

Recycle calculation has converged.

Overall Mass Balance	kmol/h		kg/h	
	Input	Output	Input	Output
KCl	2.683	2.678	200.020	199.670
Water	44.395	44.314	799.776	798.316

Total 47.078 46.992 999.796 997.986

CHEMCAD 6.3.2 Page 4

Simulation: Balance materia Date: 09/06/2011 Time: 14:15:44

Overall Energy Balance MMBtu/h

	Input	Output
Feed Streams	-13.4482	
Product Streams		-13.4238
Total Heating	0	
Total Cooling	0	
Power Added	0	
Power Generated	0	
Total	-13.4482	-13.4238

CHEMCAD 6.3.2 Page 5

Simulation: Balance materia Date: 09/06/2011 Time: 14:15:44

COMPONENTS

ID #	Name	Formula
1 933	KCl	ClK
2 62	Water	H2O

THERMODYNAMICS

K-value model : NRTL
 No correction for vapor fugacity
 Enthalpy model : Latent Heat
 Liquid density : Library

Std vapor rate reference temperature is 0 C.
 Atmospheric pressure is 1.0000 atm.

NRTL Parameters: $T_{ij} = A_{ij} + B_{ij}/T + C_{ij} * \ln(T) + D_{ij} * T$ (T Deg K)

I	J	Bij	Bji	Alpha	Aij	Aji	Cij	Cji	Dij	Dji
---	---	-----	-----	-------	-----	-----	-----	-----	-----	-----

Warning : BIP matrix is less than 50 % full.

CHEMCAD 6.3.2 Page 6

Simulation: Balance materia Date: 09/06/2011 Time: 14:15:44

EQUIPMENT SUMMARIES

Component Separator Summary

Equip. No.	1	3
Name	Separador 1	Separador 2
Concentration fctr.	8.6621e+034	
Percent Recovery	30.0000	
Component No. 1		0.7904
Component No. 2	0.7586	0.0335

Mixer Summary

Equip. No.	2
Name	

Controller Summary

Equip. No. Name	4	5	6
Mode	2	2	2
Output signal	0.1553		
Equip No. adj.	1	3	3
Variable No. adj.	51	50	51
Rel Step Size	0.0005	0.0050	0.0050
Tolerance	0.0100	0.0010	0.0010
Iterations	20	20	20

Measured variables:

Independent Type 1	0	0	0
Independent ID 1	3	6	5
Independent Variable 1	-601	-601	-601
Independent Type 2	0	0	0
Independent ID 2	3	0	0
Independent Variable 2	5	0	0
Target Variable	-601	0	0
Target Constant	0.1954	0.8500	0.0500
Adjusted Comp.	2	1	2
Measured Comp. A	1	1	1

CHEMCAD 6.3.2

Page 7

Simulation: Balance materia
STREAM PROPERTIES

Date: 09/06/2011 Time: 14:15:44

Stream No. Name	1 Alimentación	2	3	4 Agua
- - Overall - -				
Molar flow kmol/h	47.0780	61.2746	17.3426	43.8463
Mass flow kg/h	999.7962	1295.7062	504.0055	789.8903
Temp C	25.0000	24.9999	24.9999	24.9999
Pres atm	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Vapor mole fraction	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Enth MMBtu/h	-13.448	-17.478	-5.5804	-11.873
Tc C	1427.0374	1407.0483	2364.3057	374.2000
Pc atm	1977.8584	1958.6361	1995.2955	218.2900
Std. sp gr. wtr = 1	1.113	1.110	1.341	1.000
Std. sp gr. air = 1	0.733	0.730	1.003	0.622
Degree API	-4.3556	-4.0097	-25.9666	10.0000
Average mol wt	21.2370	21.1459	29.0617	18.0150
Actual dens lb/ft3	69.2289	69.0415	83.3591	62.2225
Actual vol ft3/hr	31.8389	41.3743	13.3296	27.9868
Std liq ft3/hr	31.7255	41.2271	13.2747	27.8948
Std vap 0 C scfh	37263.6719	48500.7305	13727.2139	34705.6484
- - Liquid only - -				
Molar flow kmol/h	47.0780	61.2746	17.3426	43.8463
Mass flow kg/h	999.7962	1295.7062	504.0055	789.8903
Average mol wt	21.2370	21.1459	29.0617	18.0150
Actual dens lb/ft3	69.2289	69.0415	83.3591	62.2225
Actual vol ft3/hr	31.8389	41.3743	13.3296	27.9868
Std liq ft3/hr	31.7255	41.2271	13.2747	27.8948
Std vap 0 C scfh	37263.6719	48500.7305	13727.2139	34705.6484
Cp Btu/lbmol-F	17.6797	17.6890	16.8828	18.0078
Z factor	0.0013	0.0012	0.0019	0.0010
Visc cP	1.382	1.367	3.689	0.9228
Th cond Btu/hr-ft-F	0.2952	0.2966	0.2007	0.3502
Surf. tens. dyne/cm	79.9113	79.6946	97.5690	72.1035

CHEMCAD 6.3.2

Page 8

Simulation: Balance materia
STREAM PROPERTIES

Date: 09/06/2011 Time: 14:15:44

Stream No. Name	5 Recircul.	6	7	8 KCl húmedo
--------------------	----------------	---	---	-----------------

```

- - Overall - -
Molar flow kmol/h      14.1966      3.1460      17.3426      3.1460
Mass flow kg/h        295.9099     208.0955     504.0055     208.0955
Temp C                24.9999     24.9999     24.9999     24.9999
Pres atm              1.0000     1.0000     1.0000     1.0000
Vapor mole fraction    0.0000     0.0000     0.0000     0.0000
Enth MMBtu/h         -4.0296     -1.5508     -5.5804     -1.5508
Tc C                 1337.9348    3147.6484    2364.3057    3147.6484
Pc atm               1887.1986    307.5923    1995.2955    307.5923
Std. sp gr. wtr = 1   1.100      1.948      1.341      1.948
Std. sp gr. air = 1   0.720      2.284      1.003      2.284
Degree API            -2.8410     -58.8510    -25.9666     -58.8510
Average mol wt        20.8437     66.1461     29.0617     66.1461
Actual dens lb/ft3    68.4160    120.9127     83.3591    120.9127
Actual vol ft3/hr     9.5353     3.7942     13.3296     3.7942
Std liq ft3/hr        9.5016     3.7730     13.2747     3.7730
Std vap 0 C scfh     11237.0605  2490.1531   13727.2139  2490.1531
- - Liquid only - -
Molar flow kmol/h      14.1966      3.1460      17.3426      3.1460
Mass flow kg/h        295.9099     208.0955     504.0055     208.0955
Average mol wt        20.8437     66.1461     29.0617     66.1461
Actual dens lb/ft3    68.4160    120.9127     83.3591    120.9127
Actual vol ft3/hr     9.5353     3.7942     13.3296     3.7942
Std liq ft3/hr        9.5016     3.7730     13.2747     3.7730
Std vap 0 C scfh     11237.0605  2490.1531   13727.2139  2490.1531
Cp Btu/lbmol-F       17.7197     13.1060     16.8828     13.1060
Z factor              0.0012     0.0051     0.0019     0.0051
Visc cP              1.316      386.6       3.689      386.6
Th cond Btu/hr-ft-F  0.3013     0.0573     0.2007     0.0573
Surf. tens. dyne/cm   78.9744    158.7410    97.5690    158.7410
CHEMCAD 6.3.2

```

Page 9

Simulation: Balance materia
STREAM PROPERTIES

Date: 09/06/2011 Time: 14:15:44

```

Stream No.              9
Name
- - Overall - -
Molar flow kmol/h      14.1966
Mass flow kg/h        295.9099
Temp C                24.9999
Pres atm              1.0000
Vapor mole fraction    0.0000
Enth MMBtu/h         -4.0296
Tc C                 1337.9348
Pc atm               1887.1986
Std. sp gr. wtr = 1   1.100
Std. sp gr. air = 1   0.720
Degree API            -2.8410
Average mol wt        20.8437
Actual dens lb/ft3    68.4160
Actual vol ft3/hr     9.5353
Std liq ft3/hr        9.5016
Std vap 0 C scfh     11237.0605
- - Liquid only - -
Molar flow kmol/h      14.1966
Mass flow kg/h        295.9099
Average mol wt        20.8437
Actual dens lb/ft3    68.4160
Actual vol ft3/hr     9.5353
Std liq ft3/hr        9.5016
Std vap 0 C scfh     11237.0605
Cp Btu/lbmol-F       17.7197
Z factor              0.0012
Visc cP              1.316
Th cond Btu/hr-ft-F  0.3013
Surf. tens. dyne/cm   78.9744

```

Simulation: Balance materia
FLOW SUMMARIES:

Date: 09/06/2011 Time: 14:15:44

Stream No.	1	2	3	4
Stream Name	Alimentación			Agua
Temp C	25.0000*	24.9999	24.9999	24.9999
Pres atm	1.0000*	1.0000	1.0000	1.0000
Enth MMBtu/h	-13.448	-17.478	-5.5804	-11.873
Vapor mass frac.	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Total kmol/h	47.0780	61.2746	17.3426	43.8463
Total kg/h	999.7962	1295.7062	504.0055	789.8903
Total std L ft3/hr	31.7255	41.2271	13.2747	27.8948
Total std V scfh	37263.67	48500.73	13727.21	34705.65
Flow rates in kg/h				
KCl	200.0204	252.9742	252.6238	0.0000
Water	799.7759	1042.7321	251.3816	789.8903

Stream No.	5	6	7	8
Stream Name	Recircul.			KCl húmedo
Temp C	24.9999	24.9999	24.9999	24.9999
Pres atm	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Enth MMBtu/h	-4.0296	-1.5508	-5.5804	-1.5508
Vapor mass frac.	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
Total kmol/h	14.1966	3.1460	17.3426	3.1460
Total kg/h	295.9099	208.0955	504.0055	208.0955
Total std L ft3/hr	9.5016	3.7730	13.2747	3.7730
Total std V scfh	11237.06	2490.15	13727.21	2490.15
Flow rates in kg/h				
KCl	52.9539	199.6699	252.6238	199.6699
Water	242.9561	8.4256	251.3816	8.4256

Stream No.	9
Stream Name	
Temp C	24.9999
Pres atm	1.0000
Enth MMBtu/h	-4.0296
Vapor mass frac.	0.00000
Total kmol/h	14.1966
Total kg/h	295.9099
Total std L ft3/hr	9.5016
Total std V scfh	11237.06
Flow rates in kg/h	
KCl	52.9539
Water	242.9561

Simulation: Balance materia_energia Date: 09/07/2011 Time: 11:36:21

FLOWSHEET SUMMARY

Equipment	Label	Stream Numbers
1	MIXE	1 10 -2
2	EREA	2 -3
3	HTXR	3 -4
4	HTXR	9 4 -10 -5
5	DIVI	5 -6 -7
6	CSEP	7 -9 -8

Stream Connections

Stream	Equipment		Stream	Equipment		Stream	Equipment	
	From	To		From	To		From	To
1		1	5	4	5	9	6	4
2	1	2	6	5		10	4	1
3	2	3	7	5	6			
4	3	4	8	6				

Simulation: Balance materia_energia Date: 09/07/2011 Time: 11:36:21

Calculation mode : Sequential
Flash algorithm : Normal

Equipment Calculation Sequence

1 2 3 5 6 4

Equipment Recycle Sequence

1 2 3 5 6 4

Recycle Cut Streams

5 10

Recycle Convergence Method: Direct Substitution

Max. loop iterations 40

Recycle Convergence Tolerance

Flow rate	1.000E-003
Temperature	1.000E-003
Pressure	1.000E-003
Enthalpy	1.000E-003
Vapor frac.	1.000E-003

Recycle calculation has converged.

Simulation: Balance materia_energia Date: 09/07/2011 Time: 11:36:21

Overall Mass Balance	lbmol/h		lb/h	
	Input	Output	Input	Output
Carbon Monoxide	22.000	2.507	616.220	70.210
Carbon Dioxide	13.000	12.387	572.130	545.137

Hydrogen	65.000	3.781	131.027	7.622
Methane	3.120	23.432	50.054	375.920
Water	0.000	20.859	0.000	375.777
Total	103.120	62.965	1369.431	1374.665

CHEMCAD 6.3.2

Page 4

Simulation: Balance materia_energia Date: 09/07/2011 Time: 11:36:21

Overall Energy Balance	MMBtu/h	
	Input	Output
Feed Streams	-3.25286	
Product Streams		-5.43247
Total Heating	0	
Total Cooling	-2.1471	
Power Added	0	
Power Generated	0	
Total	-5.39996	-5.43247

CHEMCAD 6.3.2

Page 5

Simulation: Balance materia_energia Date: 09/07/2011 Time: 11:36:21

COMPONENTS

	ID #	Name	Formula
1	48	Carbon Monoxide	CO
2	49	Carbon Dioxide	CO2
3	1	Hydrogen	H2
4	2	Methane	CH4
5	62	Water	H2O

THERMODYNAMICS

K-value model : Raoult's Law (Ideal Vapor Pressure)
 Enthalpy model : SRK
 Liquid density : Library

Std vapor rate reference temperature is 60 F.
 Atmospheric pressure is 1.0000 atm.

CHEMCAD 6.3.2

Page 6

Simulation: Balance materia_energia Date: 09/07/2011 Time: 11:36:22

EQUIPMENT SUMMARIES

Mixer Summary

Equip. No. 1
 Name

Equilibrium Reactor Summary

Equip. No. 2
 Name
 Thermal mode 1
 Reactor type 2
 Temperature F 848.7460
 Reaction phase 1
 Calc. mode 1
 Temp Units 2
 Press Units 1
 Calc IG Ht of Rxn -1.7770

(MMBtu/h)

Heat Exchanger Summary

Equip. No.	3	4
Name		
1st Stream T Out F	500.0000	
Calc Ht Duty MMBtu/h	-1.4899	1.0950
LMTD (End points) F		67.0128
LMTD Corr Factor	1.0000	1.0000
1st Stream Pout atm	1.0000	1.0000
2nd Stream Pout atm		1.0000
Delta T2 (2nd Stream) (F)		-300.0000

CHEMCAD 6.3.2

Page 7

Simulation: Balance materia_energia
EQUIPMENT SUMMARIES

Date: 09/07/2011 Time: 11:36:22

Divider Summary

Equip. No.	5
Name	
Output stream #1	0.1200
Output stream #2	0.8800

Component Separator Summary

Equip. No.	6
Name	
Top Temp Spec	90.0000
Bottom Temp Spec	90.0000
Split Destination	1
Heat duty MMBtu/h	-0.6572
Component No. 5	0.9500

CHEMCAD 6.3.2

Page 8

Simulation: Balance materia_energia
STREAM PROPERTIES

Date: 09/07/2011 Time: 11:36:22

Stream No.	1	2	3	4
Name				
- - Overall - -				
Molar flow lbmol/h	103.1200	413.0710	372.7005	372.7005
Mass flow lb/h	1369.4312	8717.0215	8717.0342	8717.0342
Temp F	200.0000	411.8385	848.7460	500.0000
Pres atm	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Vapor mole fraction	1.000	1.000	1.000	1.000
Enth MMBtu/h	-3.2529	-24.012	-24.029	-25.519
Tc F	-265.7667	-118.5824	-49.1521	-49.1521
Pc atm	47.2862	59.2605	53.0444	53.0444
Std. sp gr. wtr = 1	0.391	0.459	0.485	0.485
Std. sp gr. air = 1	0.459	0.729	0.808	0.808
Degree API	230.1445	176.7978	160.1372	160.1372
Average mol wt	13.2800	21.1030	23.3888	23.3888
Actual dens lb/ft3	0.0276	0.0332	0.0245	0.0334
Actual vol ft3/hr	49682.4648	262875.9063	356142.7188	261150.1875
Std liq ft3/hr	56.0644	304.2310	287.7906	287.7906
Std vap 60F scfh	39131.8359	156751.6250	141431.8750	141431.8750
- - Vapor only - -				

Molar flow lbmol/h	103.1200	413.0710	372.7005	372.7005
Mass flow lb/h	1369.4312	8717.0215	8717.0342	8717.0342
Average mol wt	13.2800	21.1030	23.3888	23.3888
Actual dens lb/ft3	0.0276	0.0332	0.0245	0.0334
Actual vol ft3/hr	49682.4648	262875.9063	356142.7188	261150.1875
Std liq ft3/hr	56.0644	304.2310	287.7906	287.7906
Std vap 60F scfh	39131.8359	156751.6250	141431.8750	141431.8750
Cp Btu/lbmol-F	7.3756	9.5702	12.3047	10.5930
Z factor	1.0003	1.0001	1.0003	1.0000
Visc cP	0.01816	0.02064	0.02728	0.02160
Th cond Btu/hr-ft-F	0.0610	0.0424	0.0545	0.0379

CHEMCAD 6.3.2 Page 9

Simulation: Balance materia_energia Date: 09/07/2011 Time: 11:36:22
 STREAM PROPERTIES

Stream No.	5	6	7	8
Name				
- - Overall - -				
Molar flow lbmol/h	372.7005	44.7246	327.9805	18.2408
Mass flow lb/h	8717.0342	1046.0573	7671.0874	328.6082
Temp F	200.0000	200.0000	200.0000	90.0000
Pres atm	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Vapor mole fraction	1.000	1.000	1.000	0.0000
Enth MMBtu/h	-26.614	-3.1937	-23.421	-2.2387
Tc F	-49.1521	-49.1525	-49.1524	705.5600
Pc atm	53.0444	53.0444	53.0444	218.2900
Std. sp gr. wtr = 1	0.485	0.485	0.485	1.000
Std. sp gr. air = 1	0.808	0.808	0.808	0.622
Degree API	160.1372	160.1373	160.1372	10.0000
Average mol wt	23.3888	23.3889	23.3889	18.0150
Actual dens lb/ft3	0.0486	0.0486	0.0486	62.0948
Actual vol ft3/hr	179318.6094	21518.4961	157802.3281	5.2920
Std liq ft3/hr	287.7906	34.5353	253.2590	5.2638
Std vap 60F scfh	141431.8750	16972.0313	124461.5781	6921.9971
- - Vapor only - -				
Molar flow lbmol/h	372.7005	44.7246	327.9805	
Mass flow lb/h	8717.0342	1046.0573	7671.0874	
Average mol wt	23.3888	23.3889	23.3889	
Actual dens lb/ft3	0.0486	0.0486	0.0486	
Actual vol ft3/hr	179318.6094	21518.4961	157802.3281	
Std liq ft3/hr	287.7906	34.5353	253.2590	
Std vap 60F scfh	141431.8750	16972.0313	124461.5781	
Cp Btu/lbmol-F	8.9940	9.0014	9.0014	
Z factor	0.9989	0.9989	0.9989	
Visc cP	0.01585	0.01585	0.01585	
Th cond Btu/hr-ft-F	0.0241	0.0241	0.0241	
- - Liquid only - -				
Molar flow lbmol/h				18.2408
Mass flow lb/h				328.6082
Average mol wt				18.0150
Actual dens lb/ft3				62.0948
Actual vol ft3/hr				5.2920
Std liq ft3/hr				5.2638
Std vap 60F scfh				6921.9971
Cp Btu/lbmol-F				18.0156
Z factor				0.0010
Visc cP				0.7910
Th cond Btu/hr-ft-F				0.3559
Surf. tens. dyne/cm				70.8523

CHEMCAD 6.3.2 Page 10

Simulation: Balance materia_energia Date: 09/07/2011 Time: 11:36:22
 STREAM PROPERTIES

Stream No.	9	10
Name		
- - Overall - -		

Molar flow lbmol/h	309.7397	309.7397
Mass flow lb/h	7342.4795	7342.4795
Temp F	90.0000	462.9819
Pres atm	1.0000	1.0000
Vapor mole fraction	1.000	1.000
Enth MMBtu/h	-21.839	-20.744
Tc F	-79.1969	-79.1969
Pc atm	55.6526	55.6526
Std. sp gr. wtr = 1	0.474	0.474
Std. sp gr. air = 1	0.818	0.818
Degree API	166.8565	166.8565
Average mol wt	23.7053	23.7053
Actual dens lb/ft3	0.0592	0.0352
Actual vol ft3/hr	124088.3438	208673.9688
Std liq ft3/hr	247.9952	247.9952
Std vap 60F scfh	117539.5781	117539.5781
- - Vapor only - -		
Molar flow lbmol/h	309.7397	309.7397
Mass flow lb/h	7342.4795	7342.4795
Average mol wt	23.7053	23.7053
Actual dens lb/ft3	0.0592	0.0352
Actual vol ft3/hr	124088.3438	208673.9688
Std liq ft3/hr	247.9952	247.9952
Std vap 60F scfh	117539.5781	117539.5781
Cp Btu/lbmol-F	8.4841	10.5165
Z factor	0.9982	1.0001
Visc cP	0.01374	0.02110
Th cond Btu/hr-ft-F	0.0198	0.0369

CHEMCAD 6.3.2

Page 11

Simulation: Balance materia_energia Date: 09/07/2011 Time: 11:36:22
FLOW SUMMARIES:

Stream No.	1	2	3	4
Stream Name				
Temp F	200.0000*	411.8385	848.7460	500.0000
Pres atm	1.0000*	1.0000	1.0000	1.0000
Enth MMBtu/h	-3.2529	-24.012	-24.029	-25.519
Vapor mass frac.	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Total lbmol/h	103.1200	413.0710	372.7005	372.7005
Total lb/h	1369.4312	8717.0215	8717.0342	8717.0342
Total std L ft3/hr	56.0644	304.2310	287.7906	287.7906
Total std V scfh	39131.84	156751.63	141431.88	141431.88
Flow rates in lb/h				
Carbon Monoxide	616.2200	1131.5869	585.0708	585.0708
Carbon Dioxide	572.1300	4572.4063	4542.7529	4542.7529
Hydrogen	131.0270	186.9409	63.5144	63.5144
Methane	50.0542	2808.7915	3132.6235	3132.6235
Water	0.0000	17.2963	393.0719	393.0719

Stream No.	5	6	7	8
Stream Name				
Temp F	200.0000	200.0000	200.0000	90.0000
Pres atm	1.0000	1.0000	1.0000	1.0000
Enth MMBtu/h	-26.614	-3.1937	-23.421	-2.2387
Vapor mass frac.	1.0000	1.0000	1.0000	0.00000
Total lbmol/h	372.7005	44.7246	327.9805	18.2408
Total lb/h	8717.0342	1046.0573	7671.0874	328.6082
Total std L ft3/hr	287.7906	34.5353	253.2590	5.2638
Total std V scfh	141431.88	16972.03	124461.58	6922.00
Flow rates in lb/h				
Carbon Monoxide	585.0708	70.2098	514.8720	0.0000
Carbon Dioxide	4542.7529	545.1371	3997.6724	0.0000
Hydrogen	63.5144	7.6218	55.8930	0.0000
Methane	3132.6235	375.9200	2756.7466	0.0000
Water	393.0719	47.1686	345.9033	328.6082

Simulation: Balance materia_energia Date: 09/07/2011 Time: 11:36:22
 FLOW SUMMARIES:

Stream No.	9	10
Stream Name		
Temp F	90.0000	462.9819*
Pres atm	1.0000	1.0000
Enth MMBtu/h	-21.839	-20.744
Vapor mass frac.	1.0000	1.0000
Total lbmol/h	309.7397	309.7397
Total lb/h	7342.4795	7342.4795
Total std L ft3/hr	247.9952	247.9952
Total std V scfh	117539.58	117539.58
Flow rates in lb/h		
Carbon Monoxide	514.8720	514.8720
Carbon Dioxide	3997.6724	3997.6724
Hydrogen	55.8930	55.8930
Methane	2756.7466	2756.7466
Water	17.2952	17.2952

Simulation: Balance materia_energia Date: 09/07/2011 Time: 11:36:22
 Heating Curves Summary

Eqp # 3 Unit type : HTXR Unit name:

Stream 3

NP	Temp F	Pres atm	Del H MMBtu/h	Vapor lb/h	Liquid lb/h	Vap mole frac.	Vap mass frac.
1	848.7	1.0	0.000	8717	0	1.0000	1.0000
2	816.1	1.0	0.149	8717	0	1.0000	1.0000
3	782.9	1.0	0.298	8717	0	1.0000	1.0000
4	749.4	1.0	0.447	8717	0	1.0000	1.0000
5	715.4	1.0	0.596	8717	0	1.0000	1.0000
6	680.9	1.0	0.745	8717	0	1.0000	1.0000
7	645.9	1.0	0.894	8717	0	1.0000	1.0000
8	610.3	1.0	1.04	8717	0	1.0000	1.0000
9	574.2	1.0	1.19	8717	0	1.0000	1.0000
10	537.4	1.0	1.34	8717	0	1.0000	1.0000
11	500.0	1.0	1.49	8717	0	1.0000	1.0000

Eqp # 4 Unit type : HTXR Unit name:

Stream 9

NP	Temp F	Pres atm	Del H MMBtu/h	Vapor lb/h	Liquid lb/h	Vap mole frac.	Vap mass frac.
1	90.0	1.0	0.000	7342	0	1.0000	1.0000
2	131.2	1.0	0.109	7342	0	1.0000	1.0000
3	171.4	1.0	0.219	7342	0	1.0000	1.0000
4	210.7	1.0	0.328	7342	0	1.0000	1.0000
5	249.1	1.0	0.438	7342	0	1.0000	1.0000
6	286.6	1.0	0.547	7342	0	1.0000	1.0000
7	323.3	1.0	0.657	7342	0	1.0000	1.0000
8	359.3	1.0	0.766	7342	0	1.0000	1.0000
9	394.5	1.0	0.876	7342	0	1.0000	1.0000
10	429.0	1.0	0.985	7342	0	1.0000	1.0000
11	463.0	1.0	1.09	7342	0	1.0000	1.0000

Stream 4

NP	Temp F	Pres atm	Del H MMBtu/h	Vapor lb/h	Liquid lb/h	Vap mole frac.	Vap mass frac.
----	--------	----------	---------------	------------	-------------	----------------	----------------

1	200.0	1.0	0.000	8717	0	1.0000	1.0000
2	232.4	1.0	0.109	8717	0	1.0000	1.0000
3	264.1	1.0	0.219	8717	0	1.0000	1.0000
4	295.3	1.0	0.328	8717	0	1.0000	1.0000
5	326.0	1.0	0.438	8717	0	1.0000	1.0000
6	356.1	1.0	0.547	8717	0	1.0000	1.0000

CHEMCAD 6.3.2

Page 14

Simulation: Balance materia_energia
Heating Curves Summary

Date: 09/07/2011 Time: 11:36:22

7	385.8	1.0	0.657	8717	0	1.0000	1.0000
8	415.0	1.0	0.766	8717	0	1.0000	1.0000
9	443.7	1.0	0.876	8717	0	1.0000	1.0000
10	472.1	1.0	0.985	8717	0	1.0000	1.0000
11	500.0	1.0	1.09	8717	0	1.0000	1.0000

ANEXO 3 - RQ1

CHEMCAD 6.3.2

Page 1

Simulation: RFP 2010_ver_6

Date: 09/09/2011 Time: 19:29:08

FLWSHEET SUMMARY

Equipment Label Stream Numbers

1 KREA 1 -2

Stream Connections

Stream	Equipment From	To
1		1
2	1	

CHEMCAD 6.3.2

Page 2

Simulation: RFP 2010_ver_6

Date: 09/09/2011 Time: 19:29:08

Calculation mode : Sequential
Flash algorithm : Normal

Equipment Calculation Sequence

1

No recycle loops in the flowsheet.

CHEMCAD 6.3.2

Page 3

Simulation: RFP 2010_ver_6

Date: 09/09/2011 Time: 19:29:08

Overall Mass Balance	lbmol/h		lb/h	
	Input	Output	Input	Output
Benzene	100.000	42.637	7811.400	3330.537
Diphenyl	0.000	17.762	0.000	2739.027
Hydrogen	0.000	32.322	0.000	65.154
M-Terphenyl	0.000	7.280	0.000	1676.652
Total	100.000	100.000	7811.400	7811.370

CHEMCAD 6.3.2

Page 4

Simulation: RFP 2010_ver_6

Date: 09/09/2011 Time: 19:29:08

Overall Energy Balance	MMBtu/h	
	Input	Output
Feed Streams	8.72866	
Product Streams		9.15648
Total Heating	0.427825	
Total Cooling	0	
Power Added	0	
Power Generated	0	
Total	9.15648	9.15648

CHEMCAD 6.3.2

Page 5

Simulation: RFP 2010_ver_6

Date: 09/09/2011 Time: 19:29:08

COMPONENTS

ID #	Name	Formula
1	Benzene	C6H6
2	Diphenyl	C12H10
3	Hydrogen	H2
4	M-Terphenyl	C18H14

THERMODYNAMICS

K-value model : UNIFAC
 No correction for vapor fugacity
 Enthalpy model : Latent Heat
 Liquid density : Library

Std vapor rate reference temperature is 60 F.
 Atmospheric pressure is 1.0000 atm.

UNIF Group Interaction Parameters:

Formula: $X_{ij} = A_{ij} + B_{ij} * T + C_{ij} * T * T$ (T in deg K)

Grpi Grpj Aij Aji Bij Bji Cij Cji

* Component ID 1 does not have UNIFAC subgroups.

CHEMCAD 6.3.2

Page 6

Simulation: RFP 2010_ver_6

Date: 09/09/2011 Time: 19:29:08

EQUIPMENT SUMMARIES

Kinetic Reactor Summary

Equip. No. 1
 Name
 Reactor type 2
 Reaction phase 1
 Thermal mode 1
 Q MMBtu/h 0.4278
 Reactor volume ft3 34.0000
 Concentration Flag 1
 No. of Reactions 4
 Overall IG Ht of Rxn 0.1847
 (MMBtu/h)
 Edit Reaction No. -1
 Partial P unit 2

Reaction Stoichiometrics and Parameters for unit no. 1

Reaction 1

RateConst = 1.4960e+007 Act.E = 5.4370e+004 Hrxn = 0.0000e+000

Comp	Stoich.	Exp.factor	AdsorbFac.	AdsorbE	AdsorbExp.
1	-2.00e+000	2.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
2	1.00e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
3	1.00e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000

Reaction 2

RateConst = 4.7900e+007 Act.E = 5.4370e+004 Hrxn = 0.0000e+000

Comp	Stoich.	Exp.factor	AdsorbFac.	AdsorbE	AdsorbExp.
1	2.00e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
2	-1.00e+000	1.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
3	-1.00e+000	1.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000

Reaction 3

RateConst = 8.6700e+006 Act.E = 5.4370e+004 Hrxn = 0.0000e+000

Comp	Stoich.	Exp.factor	AdsorbFac.	AdsorbE	AdsorbExp.
1	-1.00e+000	1.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
2	-1.00e+000	1.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
4	1.00e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
3	1.00e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000

Reaction 4
 RateConst = 1.8100e+007 Act.E = 5.4370e+004 Hrxn = 0.0000e+000
 Comp Stoich. Exp.factor AdsorbFac. AdsorbE AdsorbExp.
 1 1.00e+000 0.0000e+000 0.0000e+000 0.0000e+000 0.0000e+000
 2 1.00e+000 0.0000e+000 0.0000e+000 0.0000e+000 0.0000e+000
 4 -1.00e+000 1.0000e+000 0.0000e+000 0.0000e+000 0.0000e+000
 CHEMCAD 6.3.2 Page 7

Simulation: RFP 2010_ver_6 Date: 09/09/2011 Time: 19:29:08
 EQUIPMENT SUMMARIES

3 -1.00e+000 1.0000e+000 0.0000e+000 0.0000e+000 0.0000e+000

Plug Flow Profile for unit no. 1

Vol ft3	Temp F	Press atm	Total lbmol/h	Mole frac Benzene	Mole frac Diphenyl
0.00	1400.03	1.00	100.00	1.000E+000	0.000E+000
1.70	1400.03	1.00	100.00	8.279E-001	8.251E-002
3.40	1400.03	1.00	100.00	7.103E-001	1.339E-001
5.10	1400.03	1.00	100.00	6.294E-001	1.656E-001
6.80	1400.03	1.00	100.00	5.733E-001	1.848E-001
8.50	1400.03	1.00	100.00	5.340E-001	1.959E-001
10.20	1400.03	1.00	100.00	5.064E-001	2.017E-001
11.90	1400.03	1.00	100.00	4.866E-001	2.042E-001
13.60	1400.03	1.00	100.00	4.723E-001	2.045E-001
15.30	1400.03	1.00	100.00	4.619E-001	2.034E-001
17.00	1400.03	1.00	100.00	4.541E-001	2.015E-001
18.70	1400.03	1.00	100.00	4.481E-001	1.991E-001
20.40	1400.03	1.00	100.00	4.435E-001	1.965E-001
22.10	1400.03	1.00	100.00	4.399E-001	1.938E-001
23.80	1400.03	1.00	100.00	4.369E-001	1.911E-001
25.50	1400.03	1.00	100.00	4.344E-001	1.885E-001
27.20	1400.03	1.00	100.00	4.324E-001	1.860E-001
28.90	1400.03	1.00	100.00	4.306E-001	1.837E-001
30.60	1400.03	1.00	100.00	4.290E-001	1.815E-001
32.30	1400.03	1.00	100.00	4.276E-001	1.795E-001
34.00	1400.03	1.00	100.00	4.264E-001	1.776E-001

Vol ft3	Temp F	Press atm	Total lbmol/h	Mole frac Hydrogen	Mole frac M-Terphenyl
0.00	1400.03	1.00	100.00	0.000E+000	0.000E+000
1.70	1400.03	1.00	100.00	8.721E-002	2.349E-003
3.40	1400.03	1.00	100.00	1.485E-001	7.309E-003
5.10	1400.03	1.00	100.00	1.919E-001	1.313E-002
6.80	1400.03	1.00	100.00	2.229E-001	1.904E-002
8.50	1400.03	1.00	100.00	2.453E-001	2.472E-002
10.20	1400.03	1.00	100.00	2.618E-001	3.005E-002
11.90	1400.03	1.00	100.00	2.742E-001	3.501E-002
13.60	1400.03	1.00	100.00	2.836E-001	3.958E-002
15.30	1400.03	1.00	100.00	2.910E-001	4.379E-002
17.00	1400.03	1.00	100.00	2.968E-001	4.767E-002
18.70	1400.03	1.00	100.00	3.016E-001	5.124E-002
20.40	1400.03	1.00	100.00	3.055E-001	5.452E-002
22.10	1400.03	1.00	100.00	3.088E-001	5.753E-002
23.80	1400.03	1.00	100.00	3.117E-001	6.030E-002
25.50	1400.03	1.00	100.00	3.142E-001	6.285E-002
27.20	1400.03	1.00	100.00	3.164E-001	6.519E-002

CHEMCAD 6.3.2 Page 8

Simulation: RFP 2010_ver_6 Date: 09/09/2011 Time: 19:29:08
 EQUIPMENT SUMMARIES

28.90	1400.03	1.00	100.00	3.184E-001	6.734E-002
30.60	1400.03	1.00	100.00	3.202E-001	6.932E-002
32.30	1400.03	1.00	100.00	3.218E-001	7.113E-002

Simulation: RFP 2010_ver_6 Date: 09/09/2011 Time: 19:29:08
 STREAM PROPERTIES

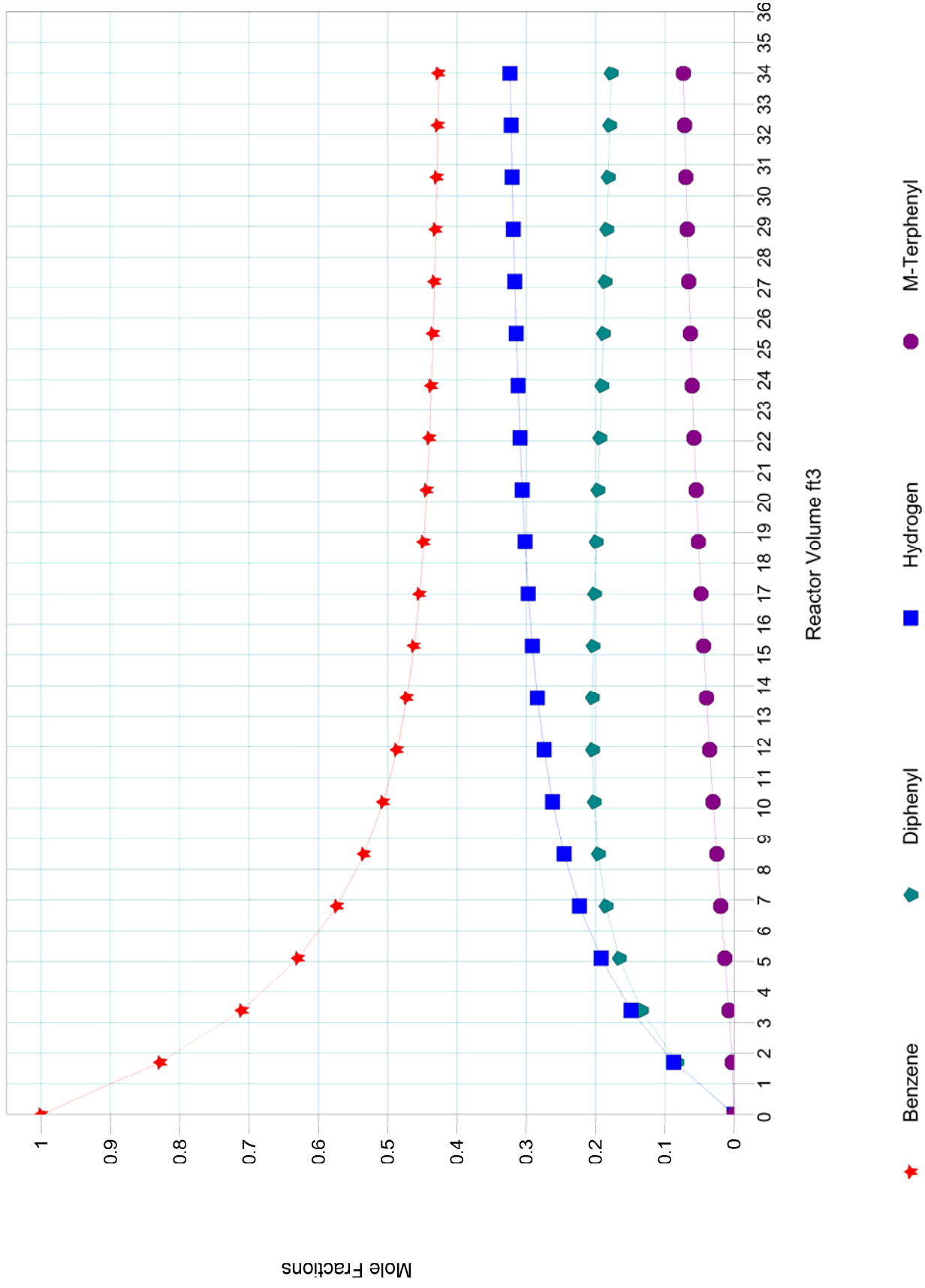
Stream No.	1	2
Name		
- - Overall - -		
Molar flow lbmol/h	100.0000	100.0000
Mass flow lb/h	7811.3999	7811.3701
Temp F	1400.0000	1400.0000
Pres atm	1.0000	1.0000
Vapor mole fraction	1.0000	1.0000
Enth MMBtu/h	8.7287	9.1565
Tc F	552.0200	714.1920
Pc atm	48.3099	125.6184
Std. sp gr. wtr = 1	0.884	0.877
Std. sp gr. air = 1	2.697	2.697
Degree API	28.4955	29.7819
Average mol wt	78.1140	78.1137
Actual dens lb/ft3	0.0576	0.0575
Actual vol ft3/hr	135732.1406	135749.0000
Std liq ft3/hr	141.4821	142.6191
Std vap 60F scfh	37947.8633	37947.8750
- - Vapor only - -		
Molar flow lbmol/h	100.0000	100.0000
Mass flow lb/h	7811.3999	7811.3701
Average mol wt	78.1140	78.1137
Actual dens lb/ft3	0.0576	0.0575
Actual vol ft3/hr	135732.1406	135749.0000
Std liq ft3/hr	141.4821	142.6191
Std vap 60F scfh	37947.8633	37947.8750
Cp Btu/lbmol-F	51.2845	51.8964
Z factor	0.9996	0.9998
Visc cP	0.02566	0.02256
Th cond Btu/hr-ft-F	0.0582	0.0609

Simulation: RFP 2010_ver_6 Date: 09/09/2011 Time: 19:29:08
 FLOW SUMMARIES:

Stream No.	1	2
Stream Name		
Temp F	1400.0000*	1400.0000
Pres atm	1.0000*	1.0000
Enth MMBtu/h	8.7287	9.1565
Vapor mass frac.	1.0000	1.0000
Total lbmol/h	100.0000	100.0000
Total lb/h	7811.3999	7811.3701
Total std L ft3/hr	141.4821	142.6191
Total std V scfh	37947.86	37947.88
Flow rates in lb/h		
Benzene	7811.3999	3330.5374
Diphenyl	0.0000	2739.0266
Hydrogen	0.0000	65.1538
M-Terphenyl	0.0000	1676.6521

Plug Flow Reactor 1

Job: RFP
2010_ver_6
Date: 09/09/2011
Time: 19:28:24



ANEXO 4 - RQ2

CHEMCAD 6.3.2

Page 1

Job Name: reactor disc_corregido Dynamic Time: 150.00 min Date: 09/12/2011

FLWSHEET SUMMARY

Equipment Label Stream Numbers

1 BREA

Stream Connections

Stream Equipment From To

CHEMCAD 6.3.2

Page 2

Job Name: reactor disc_corregido Dynamic Time: 150.00 min Date: 09/12/2011

Calculation mode : Sequential
Flash algorithm : Normal

Equipment Calculation Sequence

1

No recycle loops in the flowsheet.

CHEMCAD 6.3.2

Page 3

Job Name: reactor disc_corregido Dynamic Time: 150.00 min Date: 09/12/2011

Warning: This is a dynamic simulation, and the mass balance does not include accumulation terms.

Overall Mass Balance	gmol/h		g/h	
	Input	Output	Input	Output
Alpha-D-Glucose	0.000	0.000	0.000	0.000
HydrogenChloride	0.000	0.000	0.000	0.000
Sucrose	0.000	0.000	0.000	0.000
Water	0.000	0.000	0.000	0.000
Total	0.000	0.000	0.000	0.000

CHEMCAD 6.3.2

Page 4

Job Name: reactor disc_corregido Dynamic Time: 150.00 min Date: 09/12/2011

COMPONENTS

ID #	Name	Formula
1 776	Alpha-D-Glucose	C6H12O6
2 104	HydrogenChloride	HCl
3 1730	Sucrose	C12H22O11
4 62	Water	H2O

THERMODYNAMICS

K-value model : PPAQ
Enthalpy model : SRK
Heat of solution for enthalpy correction
Liquid density : Library

Std vapor rate reference temperature is 0 C.
Atmospheric pressure is 1.0000 atm.

Job Name: reactor disc_corregido Dynamic Time: 150.00 min Date: 09/12/2011
EQUIPMENT SUMMARIES

Batch Reactor

Equip. No.	1
Name	
Batch time h	2.5000
Thermal mode:	1
Pressure atm	1.0000
Integration steps	50
Tout C	45.0000
Calc reactor T C	45.0000
Calc overall heat (MMBtu)	5.7391e-005
Calc overall H of rxns (MMBtu)	-7.9069e-007
Calc reactor P atm	1.0000
No. of Reactions	1
No. of records	152.0000
Calc liquid volume (liter)	1.0176
Calc heat rate (MMBtu/h)	-3.6562e-008
Calc Hrate of rxns (MMBtu/h)	-3.6562e-008
Charge temp C	30.0000
Charge pressure atm	1.0000
Comp/expn effect	1.0000

The rate equations are defined in the following units:

Mole unit = mol
Activation/Heat of reaction unit = Cal
Volume unit = liter
Time unit = min

Reaction Stoichiometrics and Parameters for unit no. 1

Reaction	1				
RateConst =	2.0918e+013	Act.E =	2.4300e+004	Hrxn =	0.0000e+000
Comp	Stoich.	Exp.factor	AdsorbFac.	AdsorbE	AdsorbExp.
3	-1.00e+000	1.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
1	2.00e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
4	-1.00e+000	1.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000

Reactor Specifications:

Wall therm. cond. (Btu/hr-ft-F)	27.5000
Coefficient a	0.6700

CHEMCAD 6.3.2

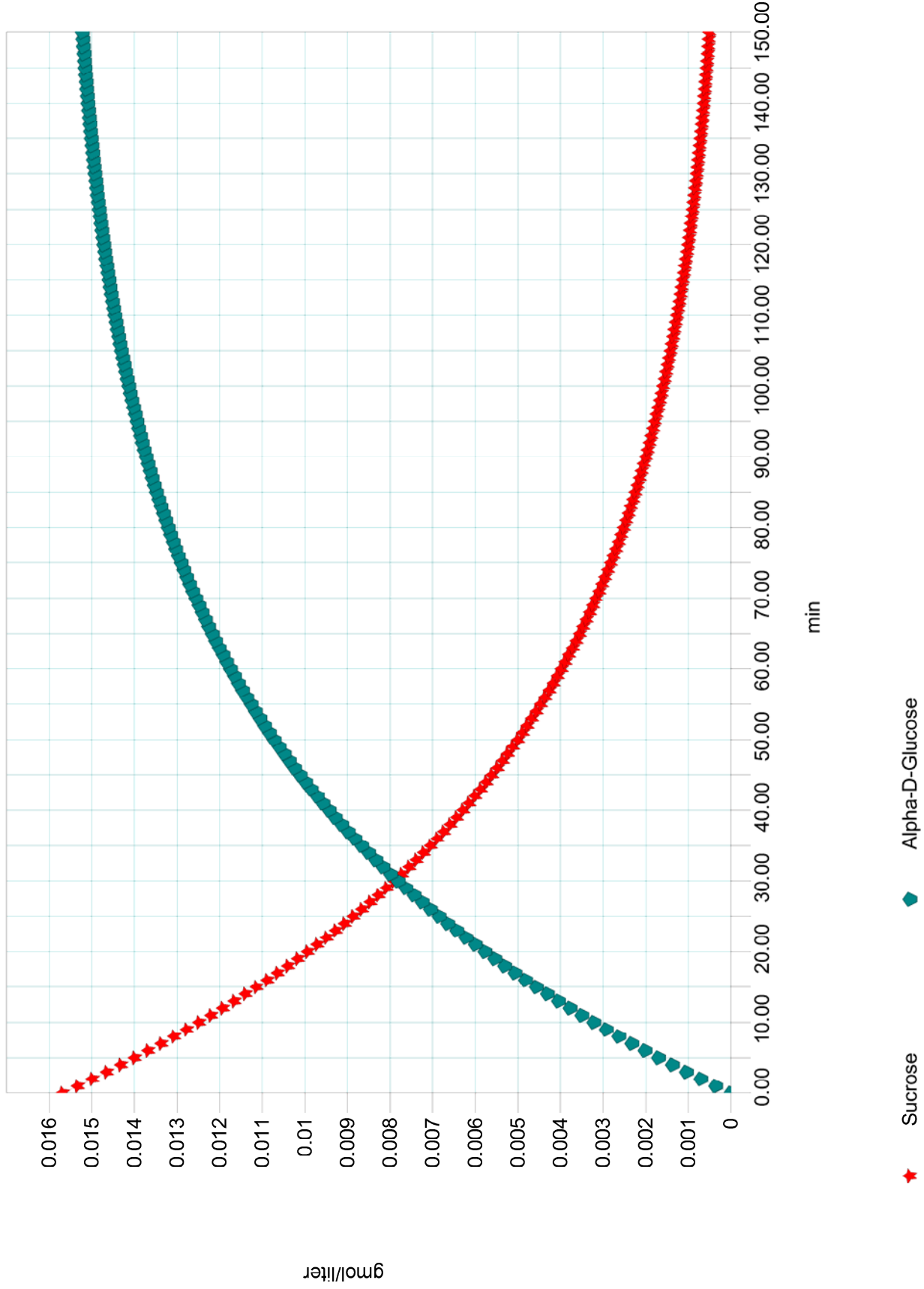
Page 6

Job Name: reactor disc_corregido Dynamic Time: 150.00 min Date: 09/12/2011
EQUIPMENT SUMMARIES

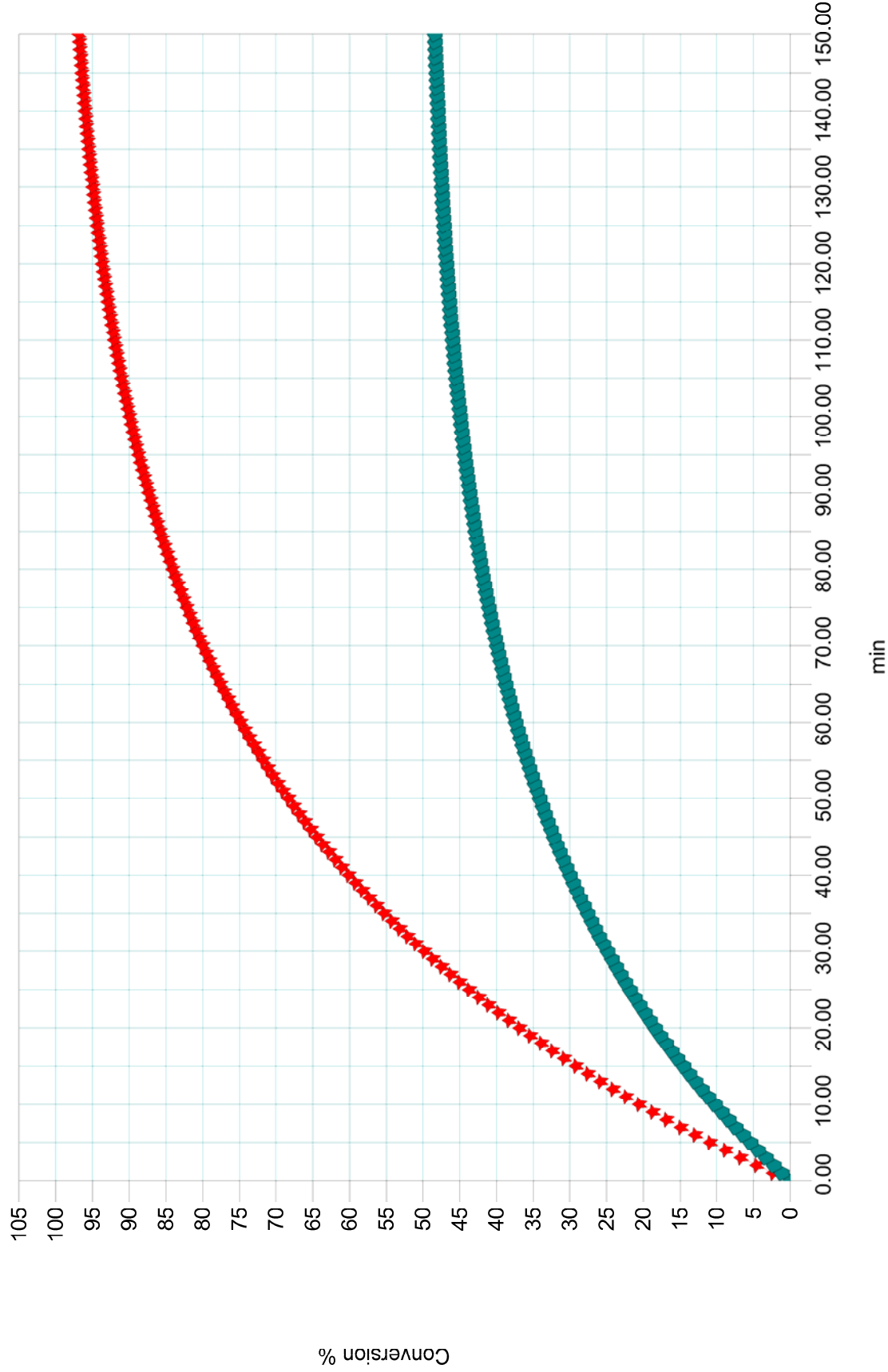
Coefficient b	0.3300
Coefficient c	0.1400
Coefficient f	0.3300
Coefficient a	0.6200
Coefficient b	0.3300
Coefficient c	0.1400
Coefficient f	0.8700
Vessel model	2

Batch Reactor 1 Compositions in gmol/liter

Job: reactor
disc_corregido
Date: 09/12/2011
Time: 16:23:25



Batch Reactor 1, % Conversion



Job: reactor
disc_corregido
Date: 09/12/2011
Time: 16:21:50

★ Sucrose ◆ Alpha-D-Glucose

Simulation: acetona_isopropanol

Date: 09/10/2011

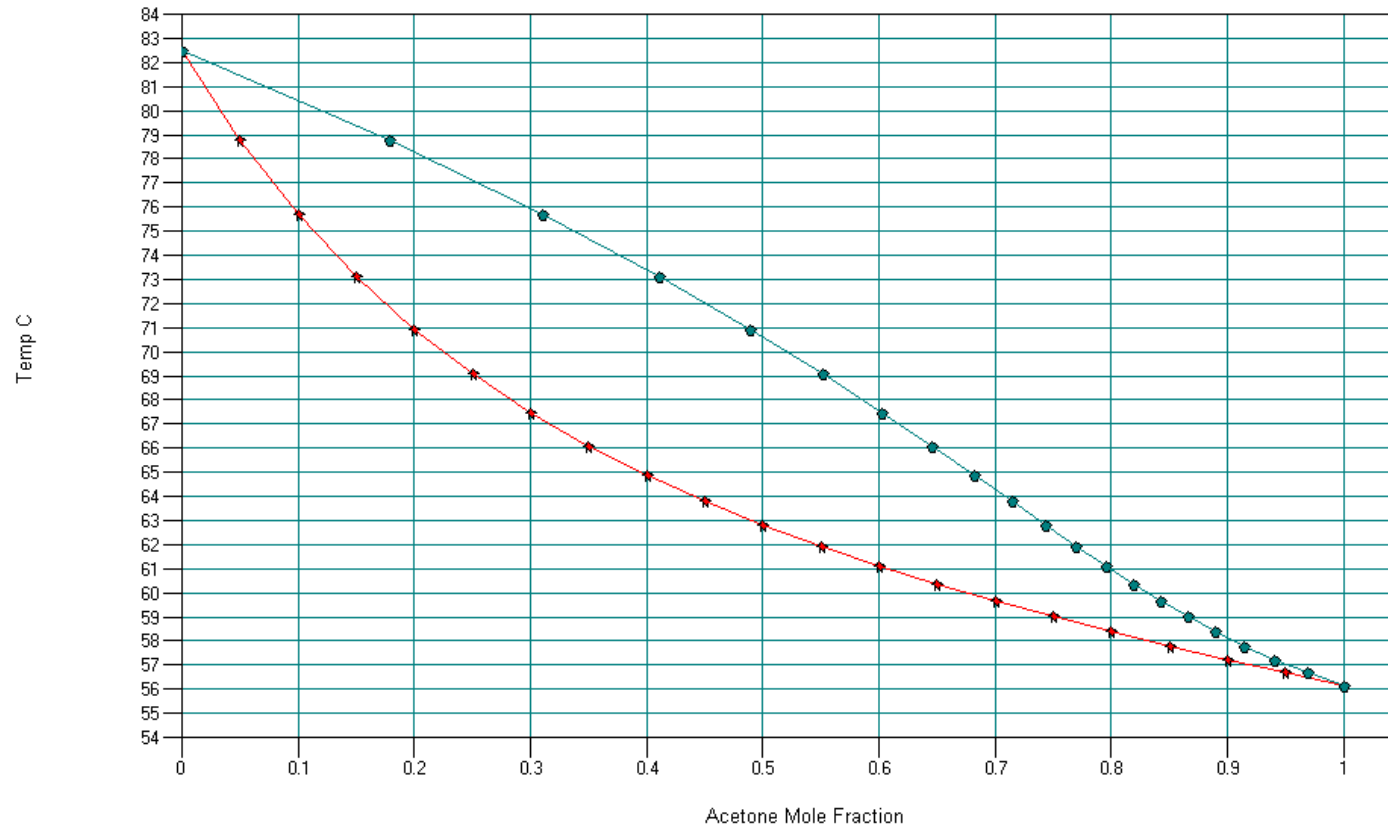
Time: 19:58:12

XY data for Acetone / Isopropanol

K-value model: UNIF

T Deg C	P atm	Mole Fractions					
		X1	Y1	Gamma1	Gamma2	Phi1	Phi2
82.471	1.000	0.00000	0.00000	1.818	1.000	1.000	1.000
78.798	1.000	0.05000	0.17806	1.735	1.001	1.000	1.000
75.721	1.000	0.10000	0.31009	1.656	1.006	1.000	1.000
73.135	1.000	0.15000	0.41049	1.580	1.013	1.000	1.000
70.947	1.000	0.20000	0.48878	1.510	1.024	1.000	1.000
69.083	1.000	0.25000	0.55136	1.444	1.039	1.000	1.000
67.480	1.000	0.30000	0.60259	1.383	1.057	1.000	1.000
66.088	1.000	0.35000	0.64553	1.328	1.080	1.000	1.000
64.868	1.000	0.40000	0.68235	1.277	1.106	1.000	1.000
63.786	1.000	0.45000	0.71465	1.231	1.138	1.000	1.000
62.816	1.000	0.50000	0.74361	1.190	1.175	1.000	1.000
61.936	1.000	0.55000	0.77018	1.153	1.218	1.000	1.000
61.130	1.000	0.60000	0.79508	1.121	1.268	1.000	1.000
60.382	1.000	0.65000	0.81893	1.093	1.325	1.000	1.000
59.683	1.000	0.70000	0.84228	1.068	1.391	1.000	1.000
59.022	1.000	0.75000	0.86562	1.047	1.466	1.000	1.000
58.394	1.000	0.80000	0.88942	1.030	1.553	1.000	1.000
57.795	1.000	0.85000	0.91418	1.017	1.653	1.000	1.000
57.222	1.000	0.90000	0.94043	1.008	1.768	1.000	1.000
56.676	1.000	0.95000	0.96879	1.002	1.901	1.000	1.000
56.160	1.000	1.00000	1.00000	1.000	2.055	1.000	1.000

Acetone / Isopropanol at 1.00 atm By UNIF

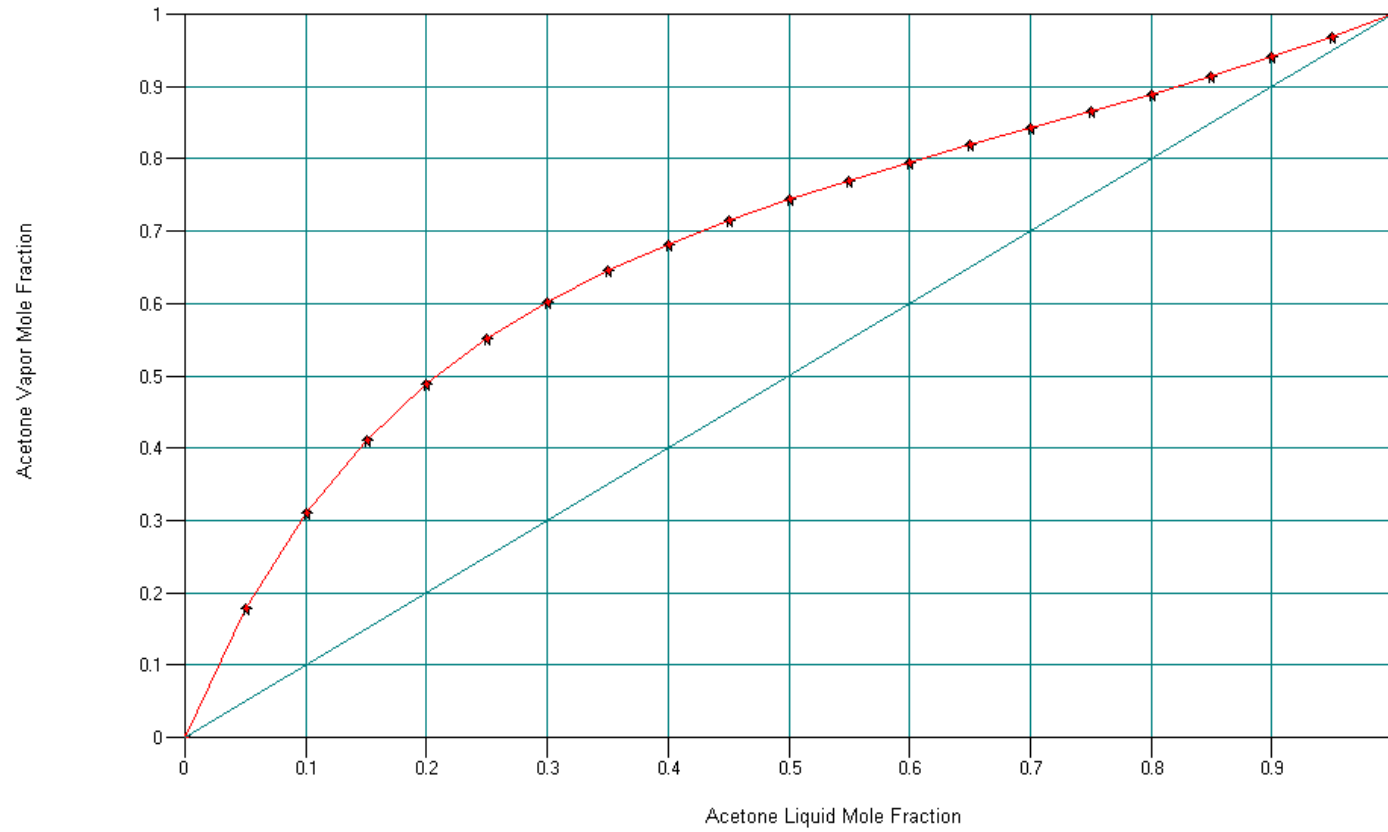


Job:
acetona_isoprop

Date: 09/06/2011
Time: 17:58:23

★ Liquid ◆ Vapor

Acetone / Isopropanol at 1.00 atm By UNIF



Job:
acetona_isoprop
Date: 09/06/2011
Time: 17:58:23

★ XY Data

ANEXO 6 - RQ3

CHEMCAD 6.3.2

Page 1

Simulation: RFP-NI

Date: 09/10/2011 Time: 13:10:23

FLWSHEET SUMMARY

Equipment	Label	Stream Numbers
1	KREA	1 3 -2 -4

Stream Connections

Stream	Equipment From	To
1		1
2	1	
3		1
4	1	

CHEMCAD 6.3.2

Page 2

Simulation: RFP-NI

Date: 09/10/2011 Time: 13:10:23

Calculation mode : Sequential
Flash algorithm : Normal

Equipment Calculation Sequence
1

No recycle loops in the flowsheet.

CHEMCAD 6.3.2

Page 3

Simulation: RFP-NI

Date: 09/10/2011 Time: 13:10:23

Overall Mass Balance	lbmol/h		lb/h	
	Input	Output	Input	Output
Propylene	0.680	0.553	28.615	23.260
Allyl Chloride	0.000	0.029	0.000	2.187
HydrogenChloride	0.000	0.029	0.000	1.042
1,2-DiCl-Propane	0.000	0.099	0.000	11.148
Chlorine	0.170	0.043	12.054	3.031
Ethylene Glycol	1.000	1.000	62.068	62.068
Total	1.850	1.751	102.737	102.737

CHEMCAD 6.3.2

Page 4

Simulation: RFP-NI

Date: 09/10/2011 Time: 13:10:23

Overall Energy Balance	MMBtu/h	
	Input	Output
Feed Streams	-0.173813	
Product Streams		-0.173813
Total Heating	0	
Total Cooling	0	
Power Added	0	
Power Generated	0	
Total	-0.173813	-0.173813

CHEMCAD 6.3.2

Page 5

COMPONENTS

	ID #	Name	Formula
1	23	Propylene	C3H6
2	255	Allyl Chloride	C3H5Cl
3	104	HydrogenChloride	HCl
4	259	1,2-DiCl-Propane	C3H6Cl2
5	105	Chlorine	Cl2
6	135	Ethylene Glycol	C2H6O2

THERMODYNAMICS

K-value model : SRK
 Enthalpy model : SRK
 Liquid density : Library

Std vapor rate reference temperature is 60 F.

Atmospheric pressure is 1.0000 atm.

CHEMCAD 6.3.2

Page 6

Simulation: RFP-NI

Date: 09/10/2011 Time: 13:10:23

EQUIPMENT SUMMARIES

Kinetic Reactor Summary

Equip. No.	1
Name	
Reactor type	2
Reaction phase	1
Thermal mode	5
Pressure In atm	2.0000
Tout R	887.8679
Q MMBtu/h	-0.0084
Reactor volume ft ³	0.9987
Length of Tubes ft	44.0000
Diameter of Tubes ft	0.1700
Number of Tubes	1.0000
Concentration Flag	1
No. of Reactions	2
U Btu/hr-ft ² -F	5.0000
Util dir	1
Util T at L R	850.2708
Overall IG Ht of Rxn (MMBtu/h)	-0.0091
Edit Reaction No.	-1
Partial P unit	2

Reaction Stoichiometrics and Parameters for unit no. 1

Reaction 1

RateConst = 2.0600e+005 Act.E = 2.7200e+004 Hrxn = 0.0000e+000

Comp	Stoich.	Exp.factor	AdsorbFac.	AdsorbE	AdsorbExp.
5	-1.00e+000	1.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
1	-1.00e+000	1.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
2	1.00e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
3	1.00e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000

Reaction 2

RateConst = 1.1700e+001 Act.E = 6.8600e+003 Hrxn = 0.0000e+000

Comp	Stoich.	Exp.factor	AdsorbFac.	AdsorbE	AdsorbExp.
5	-1.00e+000	1.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
1	-1.00e+000	1.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
4	1.00e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000

Plug Flow Profile for unit no. 1

CHEMCAD 6.3.2

Vol ft3	Temp R	Press atm	Total lbmol/h	Mole frac Propylene	Mole frac Allyl Chloride
------------	-----------	--------------	------------------	------------------------	-----------------------------

Page 7

Simulation: RFP-NI
EQUIPMENT SUMMARIES

Date: 09/10/2011 Time: 13:10:23

0.00	849.10	2.00	0.85	8.000E-001	0.000E+000
0.05	881.44	2.00	0.84	7.977E-001	7.633E-004
0.10	906.41	2.00	0.84	7.947E-001	2.103E-003
0.15	925.65	2.00	0.83	7.909E-001	4.083E-003
0.20	940.01	2.00	0.82	7.865E-001	6.671E-003
0.25	949.98	2.00	0.81	7.815E-001	9.743E-003
0.30	955.81	2.00	0.81	7.763E-001	1.311E-002
0.35	957.91	2.00	0.80	7.710E-001	1.655E-002
0.40	956.74	2.00	0.79	7.660E-001	1.987E-002
0.45	952.94	2.00	0.79	7.614E-001	2.292E-002
0.50	947.22	2.00	0.78	7.573E-001	2.561E-002
0.55	940.30	2.00	0.78	7.537E-001	2.792E-002
0.60	932.82	2.00	0.77	7.505E-001	2.988E-002
0.65	925.31	2.00	0.77	7.478E-001	3.153E-002
0.70	918.12	2.00	0.77	7.454E-001	3.292E-002
0.75	911.47	2.00	0.76	7.433E-001	3.410E-002
0.80	905.48	2.00	0.76	7.414E-001	3.511E-002
0.85	900.16	2.00	0.76	7.398E-001	3.599E-002
0.90	895.49	2.00	0.76	7.383E-001	3.676E-002
0.95	891.42	2.00	0.75	7.369E-001	3.744E-002
1.00	887.87	2.00	0.75	7.357E-001	3.805E-002

Vol ft3	Temp R	Press atm	Total lbmol/h	Mole frac HydrogenChloride	Mole frac 1,2-DiCl-Propane
0.00	849.10	2.00	0.85	0.000E+000	0.000E+000
0.05	881.44	2.00	0.84	7.633E-004	7.460E-003
0.10	906.41	2.00	0.84	2.103E-003	1.590E-002
0.15	925.65	2.00	0.83	4.083E-003	2.498E-002
0.20	940.01	2.00	0.82	6.671E-003	3.441E-002
0.25	949.98	2.00	0.81	9.743E-003	4.389E-002
0.30	955.81	2.00	0.81	1.311E-002	5.320E-002
0.35	957.91	2.00	0.80	1.655E-002	6.213E-002
0.40	956.74	2.00	0.79	1.987E-002	7.054E-002
0.45	952.94	2.00	0.79	2.292E-002	7.835E-002
0.50	947.22	2.00	0.78	2.561E-002	8.554E-002
0.55	940.30	2.00	0.78	2.792E-002	9.211E-002
0.60	932.82	2.00	0.77	2.988E-002	9.810E-002
0.65	925.31	2.00	0.77	3.153E-002	1.036E-001
0.70	918.12	2.00	0.77	3.292E-002	1.085E-001
0.75	911.47	2.00	0.76	3.410E-002	1.131E-001
0.80	905.48	2.00	0.76	3.511E-002	1.173E-001
0.85	900.16	2.00	0.76	3.599E-002	1.212E-001
0.90	895.49	2.00	0.76	3.676E-002	1.248E-001
0.95	891.42	2.00	0.75	3.744E-002	1.282E-001
1.00	887.87	2.00	0.75	3.805E-002	1.313E-001

CHEMCAD 6.3.2

Vol ft3	Temp R	Press atm	Total lbmol/h	Mole frac Chlorine Ethylene	Mole frac Glycol
------------	-----------	--------------	------------------	--------------------------------	---------------------

Page 8

Simulation: RFP-NI
EQUIPMENT SUMMARIES

Date: 09/10/2011 Time: 13:10:23

0.00	849.10	2.00	0.85	2.000E-001	0.000E+000
0.05	881.44	2.00	0.84	1.933E-001	0.000E+000
0.10	906.41	2.00	0.84	1.852E-001	0.000E+000
0.15	925.65	2.00	0.83	1.759E-001	0.000E+000
0.20	940.01	2.00	0.82	1.658E-001	0.000E+000
0.25	949.98	2.00	0.81	1.551E-001	0.000E+000

0.30	955.81	2.00	0.81	1.443E-001	0.000E+000
0.35	957.91	2.00	0.80	1.338E-001	0.000E+000
0.40	956.74	2.00	0.79	1.237E-001	0.000E+000
0.45	952.94	2.00	0.79	1.144E-001	0.000E+000
0.50	947.22	2.00	0.78	1.060E-001	0.000E+000
0.55	940.30	2.00	0.78	9.839E-002	0.000E+000
0.60	932.82	2.00	0.77	9.164E-002	0.000E+000
0.65	925.31	2.00	0.77	8.562E-002	0.000E+000
0.70	918.12	2.00	0.77	8.024E-002	0.000E+000
0.75	911.47	2.00	0.76	7.540E-002	0.000E+000
0.80	905.48	2.00	0.76	7.102E-002	0.000E+000
0.85	900.16	2.00	0.76	6.703E-002	0.000E+000
0.90	895.49	2.00	0.76	6.338E-002	0.000E+000
0.95	891.42	2.00	0.75	6.001E-002	0.000E+000
1.00	887.87	2.00	0.75	5.689E-002	0.000E+000

CHEMCAD 6.3.2

Page 9

Simulation: RFP-NI
STREAM PROPERTIES

Date: 09/10/2011 Time: 13:10:23

Stream No.	1	2	3	4
Name				
- - Overall - -				
Molar flow lbmol/h	0.8500	0.7513	1.0000	1.0000
Mass flow lb/h	40.6691	40.6690	62.0680	62.0680
Temp R	852.0000	887.8679	852.0000	850.2708
Pres atm	2.0000	2.0000	1.0962	1.0962
Vapor mole fraction	1.000	1.000	0.0000	0.3850
Enth MMBtu/h	0.010134	0.0016842	-0.18395	-0.17550
Tc R	670.3289	746.3330	1296.0000	1296.0000
Pc atm	49.1257	60.5022	80.9278	80.9278
Std. sp gr. wtr = 1	0.643	0.680	1.119	1.119
Std. sp gr. air = 1	1.652	1.869	2.143	2.143
Degree API	88.5631	76.5154	-5.0761	-5.0761
Average mol wt	47.8460	54.1294	62.0680	62.0680
Actual dens lb/ft3	0.1548	0.1682	60.4895	0.2893
Actual vol ft3/hr	262.7600	241.7453	1.0261	214.5220
Std liq ft3/hr	1.0132	0.9577	0.8883	0.8883
Std vap 60F scfh	322.5569	285.1135	379.4786	379.4786
- - Vapor only - -				
Molar flow lbmol/h	0.8500	0.7513		0.3850
Mass flow lb/h	40.6691	40.6690		23.8962
Average mol wt	47.8460	54.1294		62.0680
Actual dens lb/ft3	0.1548	0.1682		0.1117
Actual vol ft3/hr	262.7600	241.7453		213.8916
Std liq ft3/hr	1.0132	0.9577		0.3420
Std vap 60F scfh	322.5569	285.1135		146.0992
Cp Btu/lbmol-F	19.0952	22.4958		25.4676
Z factor	0.9939	0.9927		0.9810
Visc cP	0.01500	0.01474		0.01312
Th cond Btu/hr-ft-F	0.0198	0.0203		0.0147
- - Liquid only - -				
Molar flow lbmol/h			1.0000	0.6150
Mass flow lb/h			62.0680	38.1718
Average mol wt			62.0680	62.0680
Actual dens lb/ft3			60.4895	60.5457
Actual vol ft3/hr			1.0261	0.6305
Std liq ft3/hr			0.8883	0.5463
Std vap 60F scfh			379.4786	233.3795
Cp Btu/lbmol-F			42.4621	42.4118
Z factor			0.0022	0.0022
Visc cP			0.6014	0.6052
Th cond Btu/hr-ft-F			0.1402	0.1403
Surf. tens. dyne/cm			32.3893	32.4748

CHEMCAD 6.3.2

Page 10

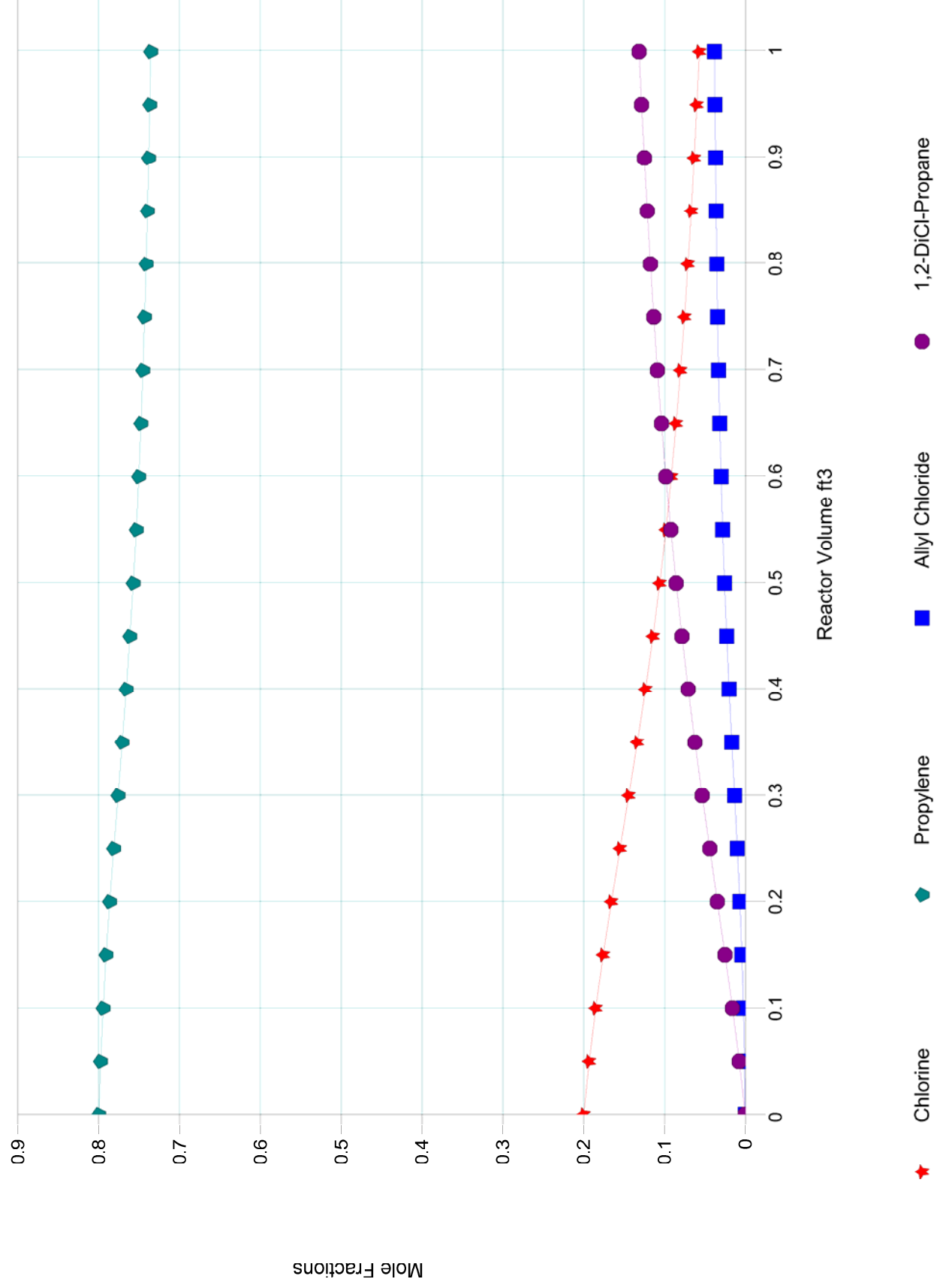
Simulation: RFP-NI

Date: 09/10/2011 Time: 13:10:23

FLOW SUMMARIES:

Stream No.	1	2	3	4
Stream Name				
Temp R	852.0000*	887.8679	852.0000*	850.2708
Pres atm	2.0000*	2.0000	1.0962	1.0962
Enth MMBtu/h	0.010134	0.0016842	-0.18395	-0.17550
Vapor mass frac.	1.0000	1.0000	0.00000*	0.38500
Total lbmol/h	0.8500	0.7513	1.0000	1.0000
Total lb/h	40.6691	40.6690	62.0680	62.0680
Total std L ft3/hr	1.0132	0.9577	0.8883	0.8883
Total std V scfh	322.56	285.11	379.48	379.48
Flow rates in lb/h				
Propylene	28.6151	23.2600	0.0000	0.0000
Allyl Chloride	0.0000	2.1875	0.0000	0.0000
HydrogenChloride	0.0000	1.0422	0.0000	0.0000
1,2-DiCl-Propane	0.0000	11.1484	0.0000	0.0000
Chlorine	12.0540	3.0308	0.0000	0.0000
Ethylene Glycol	0.0000	0.0000	62.0680	62.0680

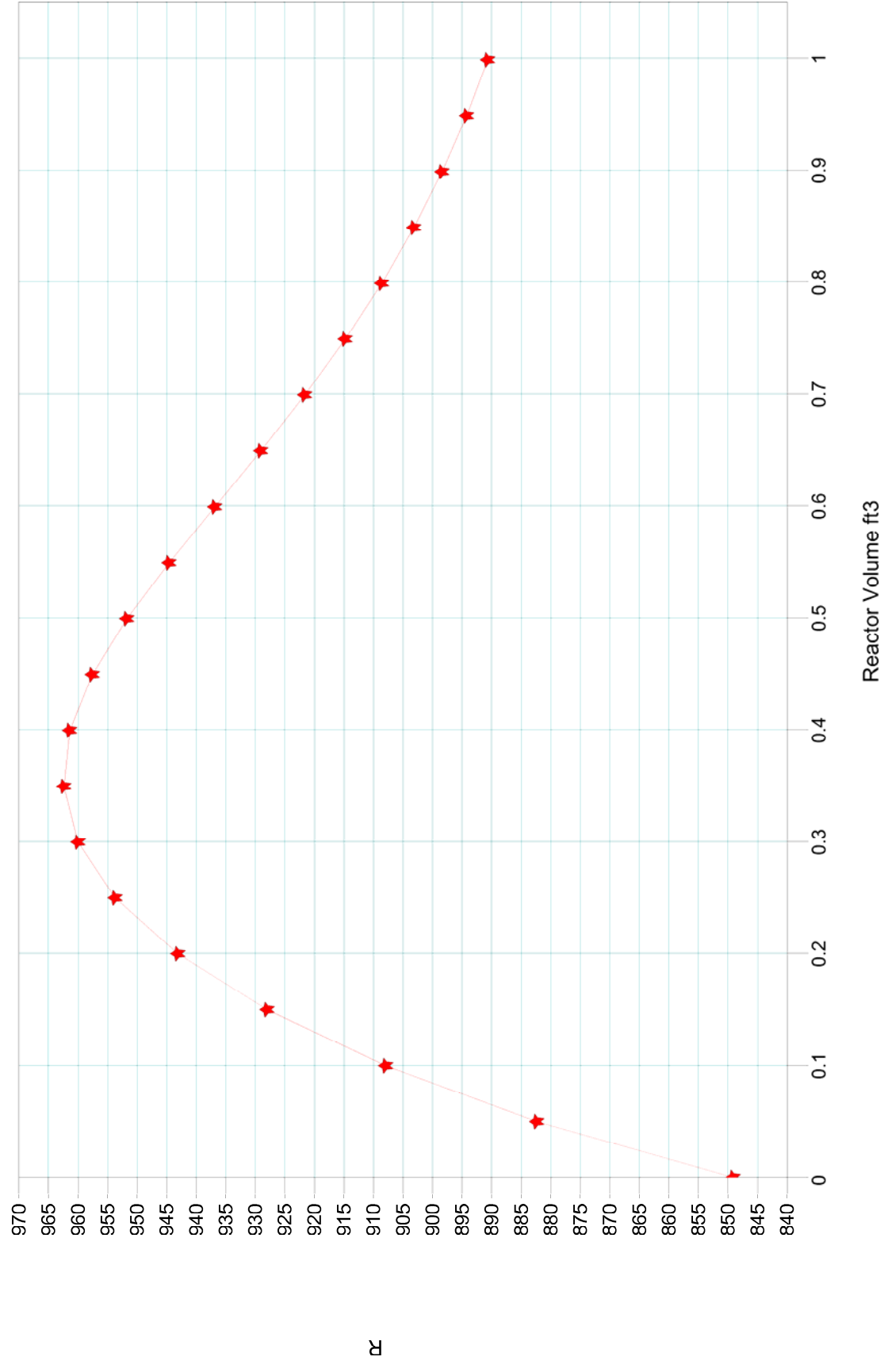
Plug Flow Reactor 1



Job: RFP-NI
Date: 09/10/2011
Time: 13:04:38

Job: RFP-NI
Date: 09/10/2011
Time: 12:53:00

Plug Flow Reactor 1



★ Reactor T

CHEMCAD 6.3.2

Page 1

Simulation: D15_2010_ver_6

Date: 09/11/2011 Time: 12:53:30

FLOWSHEET SUMMARY

Equipment Label Stream Numbers

1 KREA 1 -2

Stream Connections

Stream	Equipment From	To
1		1
2	1	

CHEMCAD 6.3.2

Page 2

Simulation: D15_2010_ver_6

Date: 09/11/2011 Time: 12:53:30

Calculation mode : Sequential

Flash algorithm : Normal

Equipment Calculation Sequence

1

No recycle loops in the flowsheet.

CHEMCAD 6.3.2

Page 3

Simulation: D15_2010_ver_6

Date: 09/11/2011 Time: 12:53:30

Overall Mass Balance	kmol/h		kg/h	
	Input	Output	Input	Output
Acetic Anhydride	1.740	0.087	177.637	8.882
Water	1380.000	1378.347	24860.699	24830.920
Acetic Acid	0.000	3.306	0.000	198.535
Total	1381.740	1381.740	25038.336	25038.336

CHEMCAD 6.3.2

Page 4

Simulation: D15_2010_ver_6

Date: 09/11/2011 Time: 12:53:30

Overall Energy Balance	MMBtu/h	
	Input	Output
Feed Streams	-373.72	
Product Streams		-373.729
Total Heating	0	
Total Cooling	-0.00927	
Power Added	0	
Power Generated	0	
Total	-373.729	-373.729

CHEMCAD 6.3.2

Page 5

Simulation: D15_2010_ver_6

Date: 09/11/2011 Time: 12:53:30

COMPONENTS

ID #	Name	Formula
------	------	---------

1	447	Acetic Anhydride	C4H6O3
2	62	Water	H2O
3	130	Acetic Acid	C2H4O2

THERMODYNAMICS

K-value model : NRTL
 Enthalpy model : Latent Heat
 Liquid density : Library

Std vapor rate reference temperature is 0 C.
 Atmospheric pressure is 1.0000 atm.

NRTL Parameters: $T_{ij} = A_{ij} + B_{ij}/T + C_{ij} * \ln(T) + D_{ij} * T$ (T Deg K)

I	J	Bij	Bji	Alpha	Aij	Aji	Cij	Cji	Dij	Dji
1	2	-356.96	289.85	0.310	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
1	3	282.84	21.64	0.299	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	3	424.02	-110.57	0.300	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00

CHEMCAD 6.3.2 Page 6

Simulation: D15_2010_ver_6 Date: 09/11/2011 Time: 12:53:30
 EQUIPMENT SUMMARIES

Kinetic Reactor Summary

Equip. No.	1
Name	
Reactor type	2
Thermal mode	1
Q MMBtu/h	-0.0093
Reactor volume liter	4565.3799
Specify calc. mode	1
Conversion	0.9500
Key	1
No. of Reactions	1
Molar Flow Unit	2
Activ. E/H of Rxn Unit	6
Volume Unit	2
Time Unit	1
Overall IG Ht of Rxn (MMBtu/h)	-0.0803
Mass unit	2
Overall Liq H of Rxn (MMBtu/h)	-0.0090

Reaction Stoichiometrics and Parameters for unit no. 1

Reaction	1				
RateConst =	1.6602e+005	Act.E =	1.0600e+004	Hrxn =	0.0000e+000
Comp	Stoich.	Exp.factor	AdsorbFac.	AdsorbE	AdsorbExp.
1	-1.00e+000	1.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
2	-1.00e+000	1.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
3	2.00e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000

Plug Flow Profile for unit no. 1

Vol	Temp	Press	Total	Mole frac	Mole frac
liter	C	atm	kmol/h	Acetic Anhydride	Water
0.00	35.00	1.00	1381.73	1.259E-003	9.987E-001
228.27	35.00	1.00	1381.73	1.084E-003	9.986E-001
456.54	35.00	1.00	1381.73	9.331E-004	9.984E-001
684.81	35.00	1.00	1381.73	8.032E-004	9.983E-001
913.08	35.00	1.00	1381.73	6.914E-004	9.982E-001
1141.30	35.00	1.00	1381.73	5.952E-004	9.981E-001

1369.60	35.00	1.00	1381.73	5.124E-004	9.980E-001
1597.90	35.00	1.00	1381.73	4.411E-004	9.979E-001
1826.20	35.00	1.00	1381.73	3.798E-004	9.979E-001
2054.40	35.00	1.00	1381.73	3.269E-004	9.978E-001

CHEMCAD 6.3.2 Page 7

Simulation: D15_2010_ver_6 Date: 09/11/2011 Time: 12:53:30
EQUIPMENT SUMMARIES

2282.70	35.00	1.00	1381.73	2.815E-004	9.978E-001
2511.00	35.00	1.00	1381.73	2.423E-004	9.977E-001
2739.20	35.00	1.00	1381.73	2.086E-004	9.977E-001
2967.50	35.00	1.00	1381.73	1.796E-004	9.977E-001
3195.80	35.00	1.00	1381.73	1.546E-004	9.976E-001
3424.00	35.00	1.00	1381.73	1.331E-004	9.976E-001
3652.30	35.00	1.00	1381.73	1.146E-004	9.976E-001
3880.60	35.00	1.00	1381.73	9.867E-005	9.976E-001
4108.80	35.00	1.00	1381.73	8.495E-005	9.976E-001
4337.10	35.00	1.00	1381.73	7.314E-005	9.976E-001
4565.40	35.00	1.00	1381.73	6.297E-005	9.975E-001

Vol liter	Temp C	Press atm	Total kmol/h	Mole frac Acetic Acid	Mole frac
0.00	35.00	1.00	1381.73	0.000E+000	
228.27	35.00	1.00	1381.73	3.507E-004	
456.54	35.00	1.00	1381.73	6.524E-004	
684.81	35.00	1.00	1381.73	9.122E-004	
913.08	35.00	1.00	1381.73	1.136E-003	
1141.30	35.00	1.00	1381.73	1.328E-003	
1369.60	35.00	1.00	1381.73	1.494E-003	
1597.90	35.00	1.00	1381.73	1.636E-003	
1826.20	35.00	1.00	1381.73	1.759E-003	
2054.40	35.00	1.00	1381.73	1.865E-003	
2282.70	35.00	1.00	1381.73	1.956E-003	
2511.00	35.00	1.00	1381.73	2.034E-003	
2739.20	35.00	1.00	1381.73	2.101E-003	
2967.50	35.00	1.00	1381.73	2.159E-003	
3195.80	35.00	1.00	1381.73	2.209E-003	
3424.00	35.00	1.00	1381.73	2.252E-003	
3652.30	35.00	1.00	1381.73	2.289E-003	
3880.60	35.00	1.00	1381.73	2.321E-003	
4108.80	35.00	1.00	1381.73	2.349E-003	
4337.10	35.00	1.00	1381.73	2.372E-003	
4565.40	35.00	1.00	1381.73	2.393E-003	

CHEMCAD 6.3.2 Page 8

Simulation: D15_2010_ver_6 Date: 09/11/2011 Time: 12:53:30
STREAM PROPERTIES

Stream No.	1	2
-- Overall --		
Molar flow kmol/h	1381.7399	1381.7400
Mass flow kg/h	25038.3359	25038.3340
Temp C	35.0000	35.0000
Pres atm	1.0000	1.0000
Vapor mole fraction	0.0000	0.0000
Enth MMBtu/h	-373.72	-373.73
Tc C	373.9632	373.8148
Pc atm	217.5967	217.2598
Std. sp gr. wtr = 1	1.001	1.000
Std. sp gr. air = 1	0.626	0.626
Degree API	9.9183	9.9382
Average mol wt	18.1209	18.1209
Actual dens lb/ft3	62.0667	62.0577
Actual vol ft3/hr	889.3668	889.4967
Std liq liter/hr	25023.9102	25027.4316
Std vap 0 C scfh	1093689.2500	1093689.3750


```

- - Liquid only - -
Molar flow kmol/h      1381.7399      1381.7400
Mass flow kg/h         25038.3359      25038.3359
Average mol wt         18.1209         18.1209
Actual dens kg/liter   0.9942          0.9941
Actual vol liter/hr    25184.0625      25187.7422
Std liq liter/hr       25023.9102      25027.4316
Std vap 0 C scfh       1093689.2500    1093689.3750
Cp Btu/lbmol-F        18.0122         18.0074
Z factor               0.0010          0.0010
Visc cP               0.7476          0.7481
Th cond Btu/hr-ft-F   0.3552          0.3546
Surf. tens. dyne/cm   70.0173         69.8799

```

CHEMCAD 6.3.2

Page 9

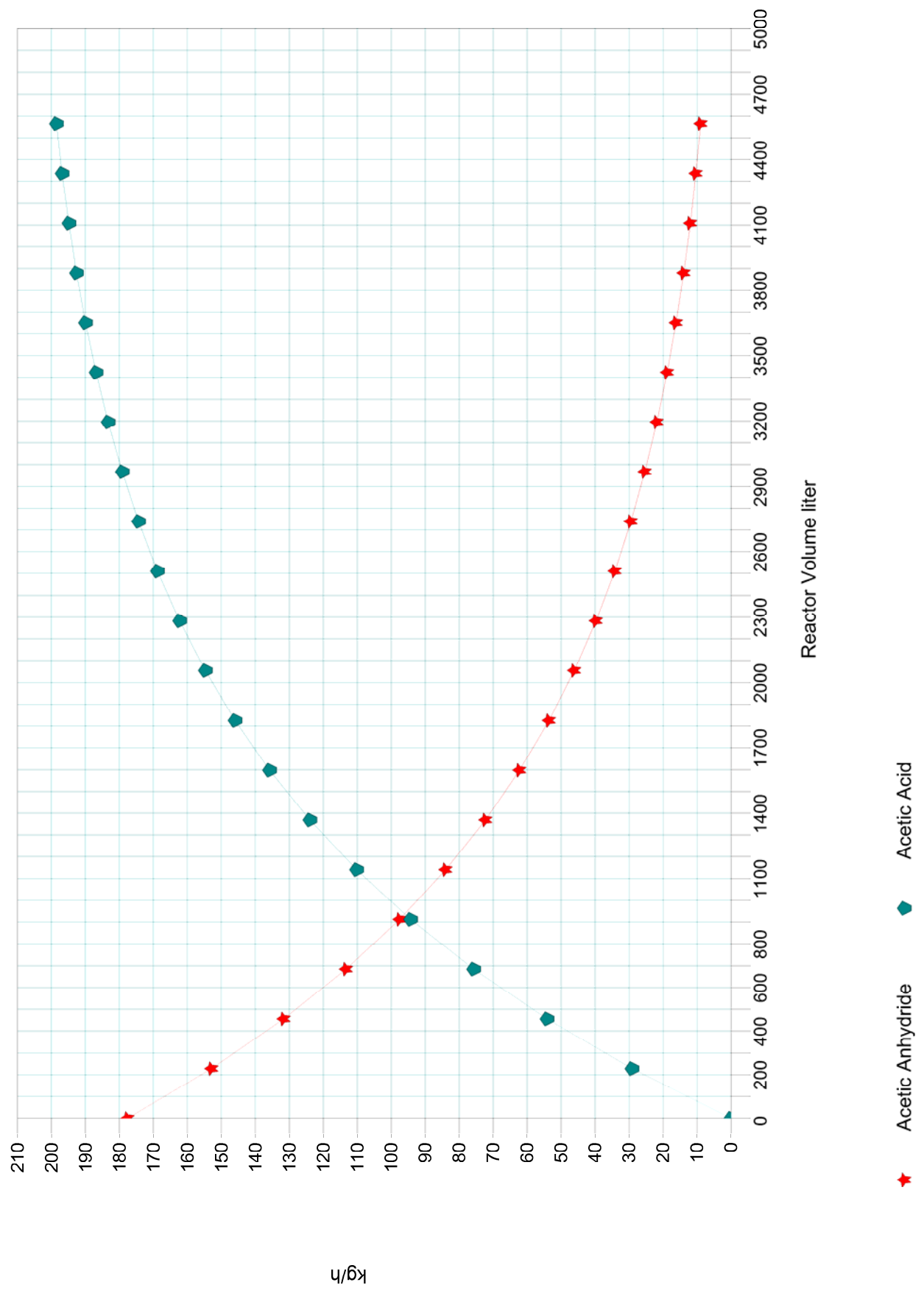
Simulation: D15_2010_ver_6
FLOW SUMMARIES:

Date: 09/11/2011 Time: 12:53:30

Stream No.	1	2
Stream Name		
Temp C	35.0000*	35.0000
Pres atm	1.0000*	1.0000
Enth MMBtu/h	-373.72	-373.73
Vapor mass frac.	0.00000	0.00000
Total kmol/h	1381.7399	1381.7400
Total kg/h	25038.3359	25038.3359
Total std L liter/	25023.9121	25027.4297
Total std V scfh	1093689.25	1093689.38
Flow rates in kg/h		
Acetic Anhydride	177.6366	8.8822
Water	24860.6973	24830.9199
Acetic Acid	0.0000	198.5348

Job: D15_2010_ver_1
Date: 09/11/2011
Time: 12:53:45

Plug Flow Reactor 1



CHEMCAD 6.3.2

Page 1

Simulation: D18

Date: 09/11/2011 Time: 19:11:04

FLOWSHEET SUMMARY

Equipment	Label	Stream Numbers
1	KREA	1 -2

Stream Connections

Stream	Equipment From	To
1		1
2	1	

CHEMCAD 6.3.2

Page 2

Simulation: D18

Date: 09/11/2011 Time: 19:11:04

Calculation mode : Sequential
Flash algorithm : Normal

Equipment Calculation Sequence

1

No recycle loops in the flowsheet.

CHEMCAD 6.3.2

Page 3

Simulation: D18

Date: 09/11/2011 Time: 19:11:04

Overall Mass Balance	gmol/sec		g/sec	
	Input	Output	Input	Output
Ethane	1.000	0.391	30.070	11.751
Ethylene	0.000	0.609	0.000	17.091
Hydrogen	0.000	0.609	0.000	1.228
Total	1.000	1.609	30.070	30.070

CHEMCAD 6.3.2

Page 4

Simulation: D18

Date: 09/11/2011 Time: 19:11:04

Overall Energy Balance	MMBtu/sec	
	Input	Output
Feed Streams	-1.56748e-005	
Product Streams		6.70942e-005
Total Heating	8.2769e-005	
Total Cooling	0	
Power Added	0	
Power Generated	0	
Total	6.70942e-005	6.70942e-005

CHEMCAD 6.3.2

Page 5

Simulation: D18

Date: 09/11/2011 Time: 19:11:04

COMPONENTS

ID #	Name	Formula
1	Ethane	C2H6

2	22	Ethylene	C2H4
3	1	Hydrogen	H2

THERMODYNAMICS

K-value model : SRK
 IPP flag on
 Enthalpy model : SRK
 Liquid density : Library

Std vapor rate reference temperature is 0 C.
 Atmospheric pressure is 1.0000 atm.

SRK Parameters:
 BIP = A + B * T + C * T * T T = Temperature in degree K

I	J	A	B	C
1	2	0.01230	0.00000	0.00000
1	3	-0.01400	0.00000	0.00000
2	3	0.05400	0.00000	0.00000

CHEMCAD 6.3.2

Page 6

Simulation: D18 Date: 09/11/2011 Time: 19:11:04
 EQUIPMENT SUMMARIES

Kinetic Reactor Summary

Equip. No.	1
Name	
Reactor type	2
Reaction phase	1
Thermal mode	1
Tout C	750.0000
Q MMBtu/sec	8.2769e-005
Reactor volume liter	290.0865
Specify calc. mode	1
Conversion	0.6100
Key	1
No. of Reactions	1
Molar Flow Unit	2
Activ. E/H of Rxn Unit	6
Volume Unit	2
Time Unit	2
Overall IG Ht of Rxn (MMBtu/sec)	7.8606e-005

Reaction Stoichiometrics and Parameters for unit no. 1

Reaction	1				
RateConst =	6.0200e+014	Act.E =	7.1220e+004	Hrxn =	0.0000e+000
Comp	Stoich.	Exp.factor	AdsorbFac.	AdsorbE	AdsorbExp.
1	-1.00e+000	1.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
2	1.00e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000
3	1.00e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000	0.0000e+000

Plug Flow Profile for unit no. 1

Vol	Temp	Press	Total	Mole frac	Mole frac
liter	C	atm	gmol/sec	Ethane	Ethylene
0.00	750.02	1.00	1.00	1.000E+000	0.000E+000
14.50	750.02	1.00	1.06	8.872E-001	5.640E-002
29.01	750.02	1.00	1.11	7.967E-001	1.016E-001
43.51	750.02	1.00	1.16	7.222E-001	1.389E-001
58.02	750.02	1.00	1.21	6.596E-001	1.702E-001
72.52	750.02	1.00	1.25	6.061E-001	1.970E-001

87.03	750.02	1.00	1.28	5.598E-001	2.201E-001
101.53	750.02	1.00	1.32	5.192E-001	2.404E-001
116.03	750.02	1.00	1.35	4.834E-001	2.583E-001
130.54	750.02	1.00	1.38	4.514E-001	2.743E-001
145.04	750.02	1.00	1.41	4.228E-001	2.886E-001

CHEMCAD 6.3.2

Page 7

Simulation: D18
EQUIPMENT SUMMARIES

Date: 09/11/2011 Time: 19:11:04

159.55	750.02	1.00	1.43	3.970E-001	3.015E-001
174.05	750.02	1.00	1.46	3.735E-001	3.133E-001
188.56	750.02	1.00	1.48	3.521E-001	3.239E-001
203.06	750.02	1.00	1.50	3.325E-001	3.337E-001
217.56	750.02	1.00	1.52	3.146E-001	3.427E-001
232.07	750.02	1.00	1.54	2.980E-001	3.510E-001
246.57	750.02	1.00	1.56	2.826E-001	3.587E-001
261.08	750.02	1.00	1.58	2.684E-001	3.658E-001
275.58	750.02	1.00	1.59	2.552E-001	3.724E-001
290.09	750.02	1.00	1.61	2.428E-001	3.786E-001

Vol liter	Temp C	Press atm	Total gmol/sec	Mole frac Hydrogen	Mole frac
0.00	750.02	1.00	1.00	0.000E+000	
14.50	750.02	1.00	1.06	5.640E-002	
29.01	750.02	1.00	1.11	1.016E-001	
43.51	750.02	1.00	1.16	1.389E-001	
58.02	750.02	1.00	1.21	1.702E-001	
72.52	750.02	1.00	1.25	1.970E-001	
87.03	750.02	1.00	1.28	2.201E-001	
101.53	750.02	1.00	1.32	2.404E-001	
116.03	750.02	1.00	1.35	2.583E-001	
130.54	750.02	1.00	1.38	2.743E-001	
145.04	750.02	1.00	1.41	2.886E-001	
159.55	750.02	1.00	1.43	3.015E-001	
174.05	750.02	1.00	1.46	3.133E-001	
188.56	750.02	1.00	1.48	3.239E-001	
203.06	750.02	1.00	1.50	3.337E-001	
217.56	750.02	1.00	1.52	3.427E-001	
232.07	750.02	1.00	1.54	3.510E-001	
246.57	750.02	1.00	1.56	3.587E-001	
261.08	750.02	1.00	1.58	3.658E-001	
275.58	750.02	1.00	1.59	3.724E-001	
290.09	750.02	1.00	1.61	3.786E-001	

CHEMCAD 6.3.2

Page 8

Simulation: D18
STREAM PROPERTIES

Date: 09/11/2011 Time: 19:11:04

Stream No.	1	2
-- Overall --		
Molar flow gmol/sec	1.0000	1.6092
Mass flow q/sec	30.0700	30.0699
Temp C	750.0000	750.0000
Pres atm	1.0000	1.0000
Vapor mole fraction	1.000	1.000
Enth MMBtu/sec	-1.5675E-005	6.7094E-005
Tc C	32.2800	-39.4197
Pc atm	48.2000	76.8505
Std. sp gr. wtr = 1	0.356	0.303
Std. sp gr. air = 1	1.038	0.645
Degree API	265.5258	335.9930
Average mol wt	30.0700	18.6860
Actual dens lb/ft3	0.0224	0.0139
Actual vol ft3/hr	10675.9639	17179.3320
Std liq liter/hr	303.7378	357.6461
Std vap 0 C scfh	2849.5095	4585.4775

```

- - Vapor only - -
Molar flow gmol/sec      1.0000      1.6092
Mass flow g/sec          30.0700     30.0699
Average mol wt           30.0700     18.6860
Actual dens lb/ft3       0.0224      0.0139
Actual vol ft3/hr        10675.9639   17179.3320
Std liq liter/hr         303.7378     357.6461
Std vap 0 C scfh         2849.5095     4585.4775
Cp Btu/lbmol-F          29.7758     18.6322
Z factor                  1.0004      1.0003
Visc cP                   0.02687     0.02813
Th cond Btu/hr-ft-F      0.0691      0.1153

```

CHEMCAD 6.3.2

Page 9

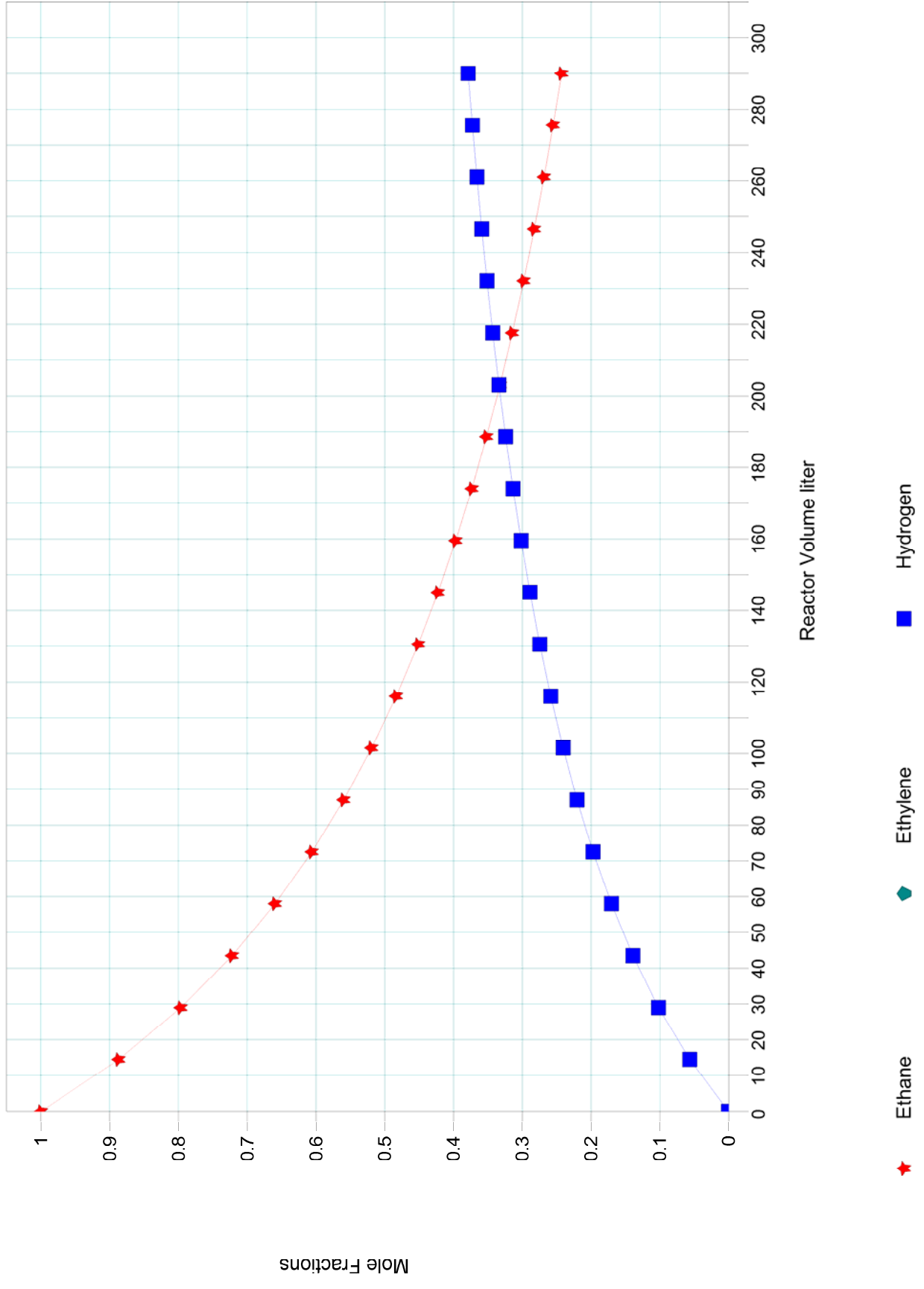
Simulation: D18
FLOW SUMMARIES:

Date: 09/11/2011 Time: 19:11:04

Stream No.	1	2
Stream Name		
Temp C	750.0000*	750.0000
Pres atm	1.0000*	1.0000
Enth MMBtu/sec	-1.5675E-005	6.7094E-005
Vapor mass frac.	1.0000	1.0000
Total qmol/sec	1.0000	1.6092
Total g/sec	30.0700	30.0699
Total std L liter/	303.7378	357.6461
Total std V scfh	2849.51	4585.48
Flow rates in g/sec		
Ethane	30.0700	11.7509
Ethylene	0.0000	17.0910
Hydrogen	0.0000	1.2281

Plug Flow Reactor 1

Job: D18
Date: 09/11/2011
Time: 19:10:06



CHEMCAD 6.3.2

Page 1

Simulation: D23

Date: 09/12/2011 Time: 18:58:22

FLOWSHEET SUMMARY

Equipment	Label	Stream Numbers
1	KREA	1 -2

Stream Connections

Stream	Equipment	
	From	To
1		1
2	1	

CHEMCAD 6.3.2

Page 2

Simulation: D23

Date: 09/12/2011 Time: 18:58:22

Calculation mode : Sequential
Flash algorithm : Normal

Equipment Calculation Sequence

1

No recycle loops in the flowsheet.

CHEMCAD 6.3.2

Page 3

Simulation: D23

Date: 09/12/2011 Time: 18:58:22

Overall Mass Balance	gmol/sec		g/sec	
	Input	Output	Input	Output
1,3-Butadiene	1.000	0.900	54.092	48.695
Ethylene	1.000	0.900	28.054	25.255
Cyclohexene	0.000	0.100	0.000	8.196
Total	2.000	1.900	82.146	82.146

CHEMCAD 6.3.2

Page 4

Simulation: D23

Date: 09/12/2011 Time: 18:58:22

Overall Energy Balance	cal/sec	
	Input	Output
Feed Streams	57389.1	
Product Streams		53277.1
Total Heating	0	
Total Cooling	-4112.04	
Power Added	0	
Power Generated	0	
Total	53277.1	53277.1

CHEMCAD 6.3.2

Page 5

Simulation: D23

Date: 09/12/2011 Time: 18:58:22

COMPONENTS

ID #	Name	Formula
1	28	1,3-Butadiene
		C4H6

2	22	Ethylene	C2H4
3	325	Cyclohexene	C6H10

THERMODYNAMICS

K-value model : SRK
 Enthalpy model : SRK
 Liquid density : Library

Std vapor rate reference temperature is 0 C.
 Atmospheric pressure is 1.0000 atm.
 CHEMCAD 6.3.2

Simulation: D23 Date: 09/12/2011 Time: 18:58:22
 EQUIPMENT SUMMARIES

Kinetic Reactor Summary

Equip. No.	1
Name	
Reactor type	2
Reaction phase	1
Thermal mode	1
Pressure In atm	1.0000
Tout C	450.0000
Q cal/sec	-4112.0444
Reactor volume liter	10194.9023
Specify calc. mode	1
Conversion	0.1000
Key	1
No. of Reactions	1
Molar Flow Unit	2
Activ. E/H of Rxn Unit	3
Volume Unit	2
Time Unit	2
Overall IG Ht of Rxn (cal/sec)	-3999.1714

Reaction Stoichiometrics and Parameters for unit no. 1

Reaction	1
RateConst =	3.1620e+007 Act.E = 1.1550e+005 Hrxn = 0.0000e+000
Comp	Stoich. Exp.factor AdsorbFac. AdsorbE AdsorbExp.
1	-1.00e+000 1.0000e+000 0.0000e+000 0.0000e+000 0.0000e+000
2	-1.00e+000 1.0000e+000 0.0000e+000 0.0000e+000 0.0000e+000
3	1.00e+000 0.0000e+000 0.0000e+000 0.0000e+000 0.0000e+000

Plug Flow Profile for unit no. 1

Vol liter	Temp C	Press atm	Total qmol/sec	Mole frac 1,3-Butadiene	Mole frac Ethylene
0.00	450.02	1.00	2.00	5.000E-001	5.000E-001
509.75	450.02	1.00	1.99	4.987E-001	4.987E-001
1019.50	450.02	1.00	1.99	4.974E-001	4.974E-001
1529.20	450.02	1.00	1.98	4.961E-001	4.961E-001
2039.00	450.02	1.00	1.98	4.947E-001	4.947E-001
2548.70	450.02	1.00	1.97	4.934E-001	4.934E-001
3058.50	450.02	1.00	1.97	4.921E-001	4.921E-001
3568.20	450.02	1.00	1.96	4.908E-001	4.908E-001
4078.00	450.02	1.00	1.96	4.895E-001	4.895E-001
4587.70	450.02	1.00	1.95	4.882E-001	4.882E-001

Simulation: D23 Date: 09/12/2011 Time: 18:58:22
 EQUIPMENT SUMMARIES

5097.50	450.02	1.00	1.95	4.869E-001	4.869E-001
5607.20	450.02	1.00	1.94	4.855E-001	4.855E-001
6116.90	450.02	1.00	1.94	4.842E-001	4.842E-001
6626.70	450.02	1.00	1.93	4.829E-001	4.829E-001
7136.40	450.02	1.00	1.93	4.816E-001	4.816E-001
7646.20	450.02	1.00	1.92	4.803E-001	4.803E-001
8155.90	450.02	1.00	1.92	4.790E-001	4.790E-001
8665.70	450.02	1.00	1.91	4.777E-001	4.777E-001
9175.40	450.02	1.00	1.91	4.764E-001	4.764E-001
9685.20	450.02	1.00	1.90	4.751E-001	4.751E-001
10195.00	450.02	1.00	1.90	4.737E-001	4.737E-001

Vol liter	Temp C	Press atm	Total gmol/sec	Mole frac Cyclohexene	Mole frac
0.00	450.02	1.00	2.00	0.000E+000	
509.75	450.02	1.00	1.99	2.630E-003	
1019.50	450.02	1.00	1.99	5.260E-003	
1529.20	450.02	1.00	1.98	7.890E-003	
2039.00	450.02	1.00	1.98	1.052E-002	
2548.70	450.02	1.00	1.97	1.315E-002	
3058.50	450.02	1.00	1.97	1.578E-002	
3568.20	450.02	1.00	1.96	1.841E-002	
4078.00	450.02	1.00	1.96	2.104E-002	
4587.70	450.02	1.00	1.95	2.366E-002	
5097.50	450.02	1.00	1.95	2.629E-002	
5607.20	450.02	1.00	1.94	2.892E-002	
6116.90	450.02	1.00	1.94	3.154E-002	
6626.70	450.02	1.00	1.93	3.417E-002	
7136.40	450.02	1.00	1.93	3.679E-002	
7646.20	450.02	1.00	1.92	3.941E-002	
8155.90	450.02	1.00	1.92	4.203E-002	
8665.70	450.02	1.00	1.91	4.465E-002	
9175.40	450.02	1.00	1.91	4.727E-002	
9685.20	450.02	1.00	1.90	4.989E-002	
10195.00	450.02	1.00	1.90	5.251E-002	

CHEMCAD 6.3.2

Page 8

Simulation: D23
STREAM PROPERTIES

Date: 09/12/2011 Time: 18:58:22

Stream No.	1	2
Name		
- - Overall - -		
Molar flow gmol/sec	2.0000	1.9002
Mass flow g/sec	82.1460	82.1459
Temp C	450.0000	450.0000
Pres atm	1.0000	1.0000
Vapor mole fraction	1.000	1.000
Enth cal/sec	57389.	53277.
Tc C	99.4869	115.3337
Pc atm	62.0948	65.5564
Std. sp gr. wtr = 1	0.494	0.514
Std. sp gr. air = 1	1.418	1.493
Degree API	155.1275	143.8306
Average mol wt	41.0730	43.2297
Actual dens lb/ft3	0.0432	0.0455
Actual vol liter/h	427095.4375	405749.3125
Std liq liter/hr	599.0333	575.4225
Std vap 0 C liter/h	161378.2500	153327.1250
- - Vapor only - -		
Molar flow gmol/sec	2.0000	1.9002
Mass flow g/sec	82.1460	82.1459
Average mol wt	41.0730	43.2297
Actual dens lb/ft3	0.0432	0.0455
Actual vol liter/h	427095.4375	405749.3125
Std liq liter/hr	599.0333	575.4225
Std vap 0 C liter/h	161378.2500	153327.1250

Cp Btu/lbmol-F	27.5890	29.0240
Z factor	0.9998	0.9997
Visc cP	0.01976	0.01951
Th cond Btu/hr-ft-F	0.0515	0.0502

CHEMCAD 6.3.2

Page 9

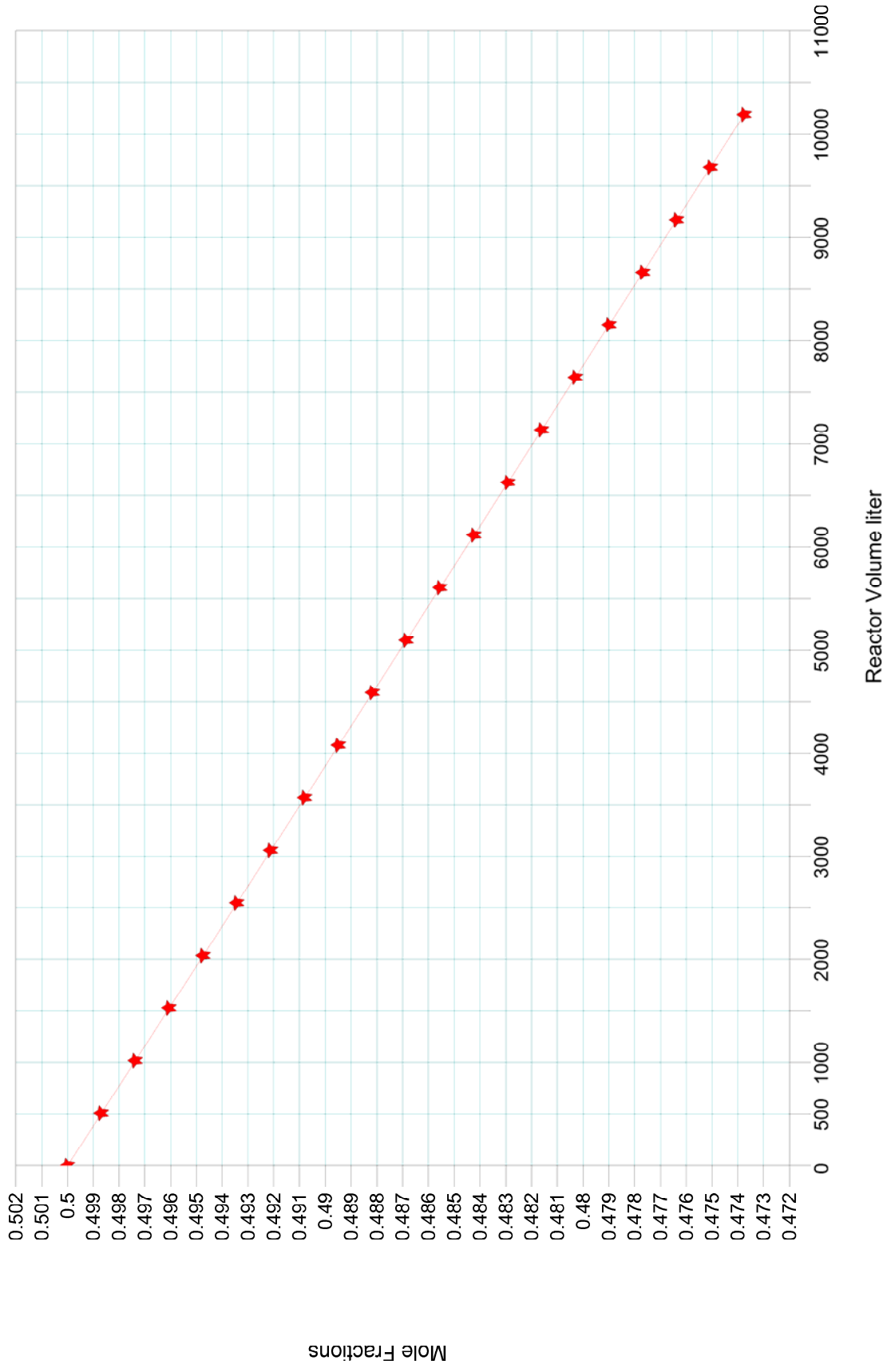
Simulation: D23
FLOW SUMMARIES:

Date: 09/12/2011 Time: 18:58:22

Stream No.	1	2
Stream Name		
Temp C	450.0000*	450.0000
Pres atm	1.0000*	1.0000
Enth cal/sec	57389.	53277.
Vapor mass frac.	1.0000	1.0000
Total gmol/sec	2.0000	1.9002
Total g/sec	82.1460	82.1459
Total std L liter/	599.0333	575.4225
Total std V liter/	161378.25	153327.13
Flow rates in g/sec		
1,3-Butadiene	54.0920	48.6947
Ethylene	28.0540	25.2548
Cyclohexene	0.0000	8.1964

Plug Flow Reactor 1

Job: D23
Date: 09/12/2011
Time: 18:29:57



★ 1,3-Butadiene

EMPLEO DE SOFTWARE DE SIMULACIÓN COMO ELEMENTO CLAVE EN LOS PROCESOS DE AUTOAPRENDIZAJE

Isidoro García García, Inés M. Santos Dueñas, José L. Bonilla Venceslada, Carlos Martínez Pedrajas, Carmen Álvarez Cáliz
Área de Ingeniería Química, Universidad de Córdoba. Campus Universitario de Rabanales, Edificio Marie Curie. Ctra.(a) de Madrid, km 396. 14071 Córdoba

Resumen

El empleo de software de simulación de procesos químicos permite avanzar en la innovación de la estructura clásica de asignaturas del área de Ingeniería Química en las que la resolución de problemas numéricos es una parte fundamental de su desarrollo. La definición y resolución de muchos de estos problemas con estas herramientas, permite al alumno acercarse a los procedimientos que se emplean en las actuales empresas de Ingeniería del Sector. Además, la posibilidad de simularlos, le permite llevar a cabo un proceso de autoaprendizaje que es uno de los elementos esenciales de la nueva estructura de los planes de estudios y fundamental para poder adquirir las competencias que se exigen.

Introducción

La adquisición de competencias como resultado del proceso de aprendizaje se ha convertido en uno de los aspectos fundamentales sobre los que se está realizando la adaptación de los planes de estudio universitarios al Espacio Europeo de Educación Superior (EEES).

Las universidades desarrollan documentos marco para sus planes propios de calidad de la enseñanza¹. En estos planes se establecen objetivos y programas de acciones que pretenden emprender una profunda reforma en la estructura y organización de las enseñanzas y en las metodologías de enseñanza-aprendizaje del sistema universitario. Entre algunos de los objetivos específicos se suele hacer referencia al de la mejora de la calidad de los programas académicos y de los recursos y herramientas docentes de manera que se satisfagan una serie de requisitos: a) autonomía del alumno ante su propio proceso de aprendizaje, b) adquisición de conocimientos y desarrollo de competencias, habilidades y destrezas, c) trabajo en equipo del profesorado y del alumnado y d) incorporación de nuevas tecnologías, enseñanza virtual progresiva y dominio del inglés como segunda lengua comunitaria en la docencia.

Por lo tanto, entre los requisitos de la nueva estructura de las enseñanzas universitarias se concede una gran importancia al proceso de **autoaprendizaje**. Sin embargo, el profesorado debe intervenir de manera que se aumente la eficacia con la que el alumno va adquiriendo los conocimientos y habilidades en un proceso progresivo: semi-autodidacta al principio y cada vez más autodidacta al final. El tipo de intervención que el docente debe realizar dependerá, lógicamente, de la naturaleza de las enseñanzas en cuestión. En este sentido, muchas asignaturas, especialmente de las distintas ingenierías, implican la adquisición de competencias en la resolución de problemas numéricos como una parte fundamental de sus contenidos prácticos.

¹ <http://www.uco.es/organizacion/calidad/planPropio/planPropio.htm>

La forma clásica de abordar estas enseñanzas, en la que el profesorado explica con detalle el planteamiento y resolución de los problemas, ha ido evolucionando de manera que, cada vez más, el alumnado tiene disponible colecciones de problemas, en formato más o menos interactivo, que le permiten avanzar de forma autónoma en los conocimientos y habilidades que debe alcanzar. Aun siendo muy interesante y necesario este tipo material, en último término, lo que el alumno tiene disponible son problemas específicos resueltos.

Un paso más en todo este contexto, puede ir en la dirección de definir algunos problemas en software avanzado de simulación de procesos químicos, lo que permite un avance significativo en la estrategia seguida para su estudio en las etapas intermedias y finales del proceso. Esto implica:

- Tener un conocimiento previo de los aspectos físico-químicos básicos del problema a tratar.
- Saber qué datos (información) son necesarios para poder definir (y por tanto resolver) adecuadamente el problema y saber buscar esta información. Como se sabe, un elemento clave del proceso de autoaprendizaje es la capacidad para buscar por sí mismo la información.
- "Construir" (definir) el problema en la estructura más o menos rígida que este tipo software tiene. En muchos casos, son posibles diferentes alternativas lo que puede fomentar la curiosidad y el espíritu constructivo.
- Y finalmente, una vez el problema ha sido definido adecuadamente, la posibilidad de resolverlo cuantas veces se desee, sin apenas coste de tiempo, cambiando las variables de operación así como el valor de éstas (siempre dentro del marco permitido por los principios físico-químicos que afecten al caso), abre la puerta de la simulación del problema. La simulación² es una magnífica "herramienta" con la que el alumno no sólo adquiere conocimientos y habilidades sino que promueve una actitud imaginativa y constructiva. De esta forma, el estudiante no se limita a estudiar y comprender las colecciones de problemas resueltos sino que puede crear sus propios problemas.

Por lo tanto, con la incentivación y desarrollo de técnicas docentes como la que se ha comentado, se podrían satisfacer simultáneamente los cuatro requisitos recogidos más arriba dentro del objetivo de mejora de la calidad de los programas académicos y de los recursos y herramientas docentes. En concreto:

- Se promueve la autonomía del aprendizaje.
- No sólo se adquieren conocimientos sino que se desarrollan de forma progresiva las competencias³ y habilidades exigibles.
- Se ha de trabajar en equipo con el profesor, pero éste ha de realizar una planificación previa muy cuidadosa para incentivar la autonomía del alumno.
- Se han de emplear nuevas tecnologías, la enseñanza-aprendizaje es virtual y progresa de forma personalizada para cada alumno, dependiendo de sus propias capacidades. Además, dado que este tipo de software suele estar en inglés, se avanza en el dominio de esta lengua (fundamental en las áreas científico-tecnológicas).

² Horwitz, B.A. Hardware, software, nowhere. Chemical Engineering Progress, September 1998, 69-74

³ Orden CIN/351/2009, de 9 de febrero, BOE, 44, de 20 de Febrero de 2009

Software

Uno de los programas más conocidos para la simulación de procesos químicos es ChemCad⁴. De hecho, es un paquete de software al que se le pueden añadir más o menos módulos dependiendo de las necesidades que se tengan. El módulo básico incluye una base de datos de compuestos químicos, capacidad para estimación de propiedades físicas, equilibrios entre fases y algoritmos de cálculo de operaciones unitarias que permiten llevar a cabo simulaciones de procesos químicos en estado estacionario. Otros módulos permiten el estudio de condiciones no estacionarias así como el análisis detallado de cambiadores de calor, redes de conducciones o destilaciones discontinuas. Aunque el objetivo fundamental de este tipo de programas es ayudar en el diseño y análisis de procesos, su enorme potencial didáctico está fuera de toda duda.

Introducir al estudiante en el manejo de este tipo de software puede serle de gran ayuda desde diferentes puntos de vista:

- Puede utilizarlo como elemento de consulta para acceder a información sobre propiedades de compuestos químicos.
- Puede estimar propiedades de mezclas. Si encontrar información sobre compuestos puros puede ser, relativamente, fácil, hacerlo para el caso de mezclas muy diversas así como en diferentes condiciones ya no lo es tanto.
- Puede estimar datos de equilibrio entre fases.
- Puede analizar y comparar diferentes métodos termodinámicos para la estimación de las propiedades mencionadas previamente.
- Puede definir y simular tanto operaciones por sí solas como plantas completas. De este modo no sólo puede consolidar sus conocimientos sobre todas las operaciones habituales de la Ingeniería Química sino que, además, se le facilita la comprensión sobre las complejas interrelaciones que aparecen cuando las operaciones se conectan entre sí en el contexto de una planta de proceso.
- Dado que el uso del software por parte de personas que carezcan de la mínima formación básica sobre los problemas que se pueden resolver es absolutamente inútil, puede ayudar al alumno a evaluar el grado de avance que éste va consiguiendo en las asignaturas.
- En definitiva, en opinión de los autores, todo lo anterior puede contribuir a *“conseguir un aprendizaje profundo y eficaz que garantice el desarrollo de las competencias pretendidas en los nuevos grados de Ingeniería Química”*

Un ejemplo: Reactor para reacciones múltiples en condiciones no isotérmicas

A modo de ejemplo de lo comentado previamente y para ilustrar sucintamente algunas de las posibilidades que ofrece este tipo de software, se puede resolver un problema de ingeniería de la reacción química, en concreto, se trata de la producción de cloruro de alilo a partir de cloro y propileno⁵.

⁴ <http://www.chemstations.com/>

⁵ Smith, J.M. Chemical Engineering Kinetics 3rd Edition. McGraw-Hill, 1981, 229-246.

Como se sabe, la reacción entre el cloro y propileno no sólo produce cloruro de alilo y ácido clorhídrico sino que se producen otras reacciones también irreversibles: una reacción paralela a la comentada que da lugar a 1,2-dicloropropano y una tercera por la que la reacción entre el cloro y el cloruro de alilo da lugar a 1,2-dicloropropeno y ácido clorhídrico. Sin embargo, y al objeto de simplificar el problema, pueden considerarse sólo las dos primeras reacciones cuyas ecuaciones cinéticas son las siguientes:

$$r_1 = 206000 \cdot e^{-\frac{27200}{RT}} \cdot (p_{C_3H_6} \cdot p_{Cl_2}) \quad (1)$$

$$r_2 = 11.7 \cdot e^{-\frac{6860}{RT}} \cdot (p_{C_3H_6} \cdot p_{Cl_2}) \quad (2)$$

Dependiendo del tipo y modo de funcionamiento del reactor que se emplee, la solución del problema es más o menos compleja. Por ejemplo, si se utiliza un reactor de flujo pistón se ha de resolver un sistema de tres ecuaciones diferenciales formado por dos balances de materia y el balance de energía. Si bien es recomendable que el alumno (para que comprenda bien lo que hay que hacer) aborde previamente esta tarea de forma “semi-manual”, la solución es fácil y rápida si se acude al referido software. En la Figura 1 se muestra parte de la definición del problema.

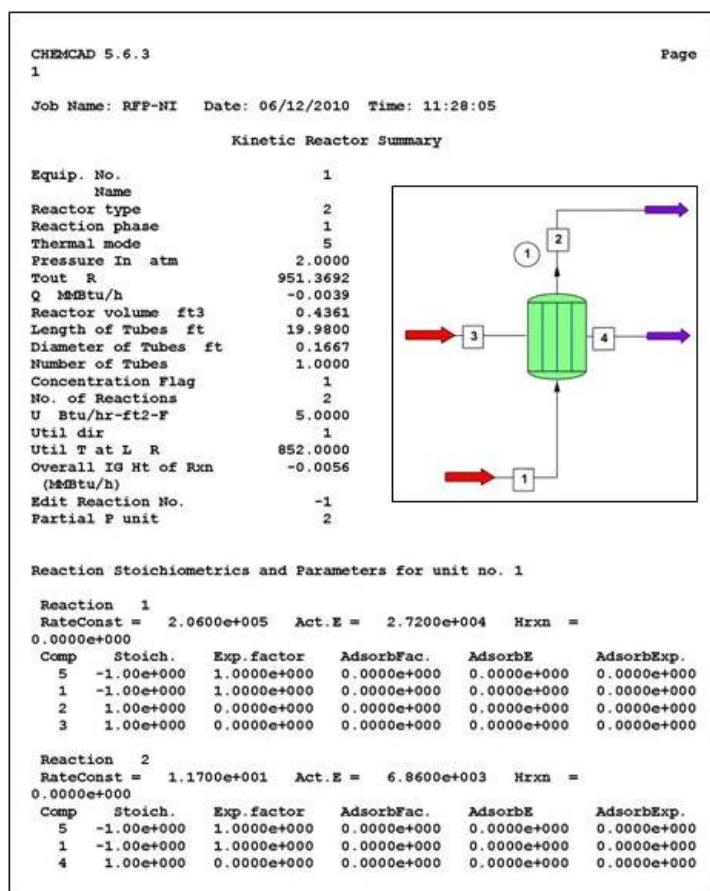


Figura 1. Definición del reactor en ChemCad 5.6.3

La citada definición, como se ha comentado previamente, implica el conocimiento de sus aspectos físico-químicos fundamentales. De este modo, el alumno, puede ir evaluando diferentes aspectos tales como: los métodos termodinámicos, para la estimación de propiedades, adecuados a la naturaleza y condiciones de las corrientes involucradas, viabilidad de las posibles estrategias de solución, necesidad de integración de conocimientos, etc. A partir de ahí, se puede iniciar un trabajo de simulación que, junto con las etapas previas, le permite llevar a cabo un proceso de autoaprendizaje con el que, de forma eficaz, profundiza en el conocimiento de los diferentes aspectos de la Ingeniería Química y va adquiriendo las competencias necesarias para el desarrollo de su profesión.

Agradecimientos: a la Universidad de Córdoba y su Vicerrectorado de Planificación y Calidad.