



UNIVERSIDAD MICHOACANA DE
SAN NICOLAS DE HIDALGO
FACULTAD DE INGENIERIA QUÍMICA

“SIMULACIÓN DE UN CRISTALIZADOR BATCH
POR ENFRIAMIENTO”

TESIS

PARA OBTENER EL TITULO DE:
INGENIERO QUÍMICO

PRESENTA:
ALEJANDRA IVETH BARRÓN FRANCO

ASESOR:
DR. LUIS IGNACIO SALCEDO ESTRADA

MORELIA, MICHOACAN, NOVIEMBRE DEL 2005



INDICE

Índice	iii
Lista de Tablas	vi
Lista de Figuras	vii
Nomenclatura	ix
Resumen	xiii
Agradecimientos	xvi
Objetivo	xviii
CAPITULO 1. INTRODUCCIÓN	1
1.1 Modelación de procesos	1
1.1.1 Desarrollo de un modelo matemático	1
1.1.2 Variables y ecuaciones de estado para un proceso químico	2
1.1.3 Modelo	3
1.1.3.1 Propósitos de los modelos	5
1.1.4 Elementos adicionales de los modelos matemáticos	5
1.1.5 Dificultades de la modelación	6
1.2 Simulación.	6
1.2.1 Ventajas y desventajas de la simulación	8
1.2.2 Etapas de un estudio de simulación	8
1.2.3 Ventajas de los lenguajes de simulación	9
1.2.4 Simuladores	10
1.2.5 Ventajas de tener un simulador	11
1.3 Paquetes matemáticos	11
1.3.1 Matlab	11
1.3.2 Simulik	12
1.4 Simuladores comerciales	14
1.5 Cristalización	16
1.5.1 Conceptos básicos	18

1.5.2 Proceso de Cristalización	19
1.5.3 Nucleación	19
1.5.3.1 Nucleación primaria	20
1.5.3.2 Nucleación secundaria	21
1.5.4 Crecimiento del cristal	21
1.5.5 Etapas de crecimiento del cristal	22
CAPITULO 2. ANTECEDENTES	25
2.1 Modelo Matemático	25
2.1.1 Balance de población	25
2.1.2 Balance de masa	29
2.1.3 Balance de energía	34
2.2 Simuladores Comerciales	40
CAPITULO 3. DESARROLLO	43
3.1 Modelo matemático para el cristalizador tipo batch por enfriamiento	43
3.2 Solución del modelo matemático	46
3.3 Procedimiento para la solución del modelo	51
3.4 Creación del Simulador con Matlab y Simulink	56
3.5 Simulador de un cristalizador tipo batch por enfriamiento	62
3.6 Como manejar el simulador	63
3.7 Archivos que contiene el simulador	67
CAPITULO 4. RESULTADOS	69
4.1 Resultados obtenidos por el simulador	69
4.2 Comparación de resultados	73
CAPITULO 5. CONCLUSIONES	79
CAPITULO 6. BIBLIOGRAFÍA	80

CAPITULO 7. APÉNDICES

APENDICE A. Propiedades Físicas y Datos del Cristalizador	82
APENDICE B. Programas de Cómputo	87
APENDICE C. Datos Iniciales del Cristalizador	105

Lista de Tablas

2.1 Costo por tener acceso a Chemcad	41
3.1 Archivos del simulador	68
C.1 Distribución de tamaño de cristal	105
C.2 Parámetros de ajuste para las cinéticas	108
C.3 Condiciones iniciales del cristalizador	108
C.4 Tamaño de Cristales (L)	108

Lista de Figuras

1.1 Diagrama de Flujo de Modelación-Simulación	9
1.2 Librería de Simulink	14
1.3 Nucleación en una partícula extraña	20
1.4 Zonas en la cristalización	22
1.5 Etapas de crecimiento de un cristal	23
3.1 Cristalizador tipo batch por enfriamiento	43
3.2 Red de puntos que caracteriza la discretización de la EDP	50
3.3 Ventana del Set Path en Matlab	57
3.4 Ventana Start→Matlab→Import Wizard en Matlab	58
3.5 Ventana Import Wizard	59
3.6 Ventana para abrir un archivo en Import Wizard	60
3.7 Ventana de los datos almacenados en el Workspace	61
3.8 Interfaz Grafica del Cristalizador	62
3.9 Icono de acceso a Matlab	63
3.10 Ventana del menú GUIDE Quick Start	63
3.11 Ventana de la interfase grafica de main.fig	64
3.12 Botón run	64
3.13 Ventana del simulador	65
3.14 Ventana después de la simulación	66
4.1 Temperatura del cristalizador a 200rpm	69
4.2 Concentración del cristalizador para 200rpm	70
4.3 Media del cristalizador a 200rpm	70
4.4 Desviación Estándar para cristalización a 200rpm	70
4.5 Temperatura del Cristalizador a 300rpm	71
4.6 Concentración del Cristalizador para 300rpm	71
4.7 Media del cristalizador a 300rpm	71
4.8 Desviación Estándar para cristalización a 300rpm	72
4.9 Temperatura del cristalizador a 400rpm	72

4.10 Concentración del cristalizador a 400rpm	72
4.11 Media del cristalizador a 400rpm	73
4.12 Desviación Estándar para cristalización a 400rpm	73
4.13 Temperatura para 200rpm	74
4.14 Concentración para 200rpm	74
4.15 Media para 200rpm	74
4.16 Desviación estándar para 200rpm	75
4.17 Temperatura para 300rpm	75
4.18 Concentración a 300rpm	75
4.19 Media para 300rpm	76
4.20 Desviación estándar para 300rpm	76
4.21 Temperatura a 400rpm	76
4.22 Concentración a 400rpm	77
4.23 Media para 400rpm	77
4.24 Desviación estándar para 400rpm	77
B.1 Programa CONSTANTES.mdl	91
B.2 Programa PROPIEDADES.mdl	92

NOMENCLATURA

A	Área de transferencia de calor.
A ₀	Área de transferencia de calor del sistema al medio de enfriamiento.
A _{0A}	Área de transferencia para el sistema agua – aire.
B	Velocidad total de nucleación.
B(L)	Función de nacimiento de cristales de tamaño L.
B ^o	Velocidad de nacimiento de cristales de tamaño cero.
B _a	Velocidad de nacimiento de cristales debido a la aglomeración.
B _c	Velocidad de nucleación debida a los contactos cristal – cristal.
B _e	Velocidad de nucleación debida a los contactos del impulsor con los cristales.
B _{ss}	Velocidad de nucleación debida a la fuerza impulsora de sobresaturación (supersaturación).
\hat{C}	Concentración de soluto (masa de soluto / masa solvente).
\hat{C}_o	Concentración de soluto inicial (t = 0).
C	Concentración de soluto.
C _K	Concentración de soluto en la corriente K.
C _o	Concentración de soluto inicial (t = 0).
C _p	Capacidad calorífica de la suspensión.
C _{pa}	Capacidad calorífica del agua.
C _{paire}	Capacidad calorífica del aire.
C _{pc}	Capacidad calorífica de los cristales.
C _{pk}	Capacidad calorífica de la corriente k.
C _{ps}	Capacidad calorífica de sulfato sólido.
C _{psA}	Capacidad calorífica de la solución saturada del sulfato de amonio.
C _s	Concentración de Saturación (gr sulfato / gr de agua).
C _{sat}	Concentración de Saturación (gr sulfato / gr de agua).
D(L)	Función de muerte de cristales.

$E_g, E_b,$	
K_g, K_b	Constantes experimentales características del material.
F_a	Flujo de agua que entra a la chaqueta.
FTM	Factor de transferencia de malla.
G	Velocidad de crecimiento.
H	Entalpía.
$H_K^*(T_K)$	Entalpía específica de la corriente K.
h	Relación entre V y M_{SL} .
H_{ext}	Calor neto removido.
\tilde{H}_i	Entalpía molar parcial del componente i en el cristizador.
KE	Energía cinética.
K_v	Factor de forma de volumen del cristal.
L	Longitud o tamaño de cristal.
L_o	Tamaño de cristal al nacer.
M	Masa del solvente.
$m_3(t)$	Momento 3.
M_C	Masa de cristales en suspensión.
M_L	Masa de la fase líquida libre de sólidos.
M_p	Masa por capacidad calorífica de la suspensión (δVC_p).
m_p	Peso de cada partícula.
M_S	Masa de soluto disuelto en el solvente.
M_{SL}	Masa de solvente.
M_T	Densidad de cristales en suspensión (gr/L).
M_{T0}	Masa total inicial (sulfato y agua).
M_{TC}	Masa total de cristales.
N_r	Revoluciones por minuto del agitador.
N	Densidad de población en número por unidad de masa del solvente.
n	Densidad de población en número.
n_0	Densidad de población al inicio ($t = 0$).
n_T	Número total de partículas.

P	Presión.
PE	Energía potencial.
PI	Valor constante de 3.1416.
Q	Flujo volumétrico.
Q _K	Flujo volumétrico de la corriente K.
Q _z	Flujo volumétrico de la corriente z.
R	Velocidad global de transferencia de masa del soluto al cristal o velocidad de cristalización.
RPM	Revoluciones por minuto del agitador.
rpm	Velocidad de agitación.
S	Sobresaturación.
S _r	Sobresaturación relativa.
T	Temperatura de la suspensión.
t	Tiempo.
T ₀	Temperatura de la solución al tiempo inicial.
T _{aire}	Temperatura del aire.
Tr	Temperatura del medio de enfriamiento.
T _{r0}	Temperatura del agua al entrar a la chaqueta.
U	Coeficiente global de transferencia de calor.
U	Energía interna.
U ₀	Coeficiente global de transferencia de calor con referencia externa del sistema al medio de enfriamiento.
U _{0A}	Coeficiente global de transferencia de calor para el sistema agua – aire.
V	Volumen total de cristizador.
V _a	Volumen del agua en la chaqueta.
VL	Volumen de líquido libre de sólidos.
W	Velocidad neta de trabajo.
Y	Solubilidad del sulfato de amonio (gr sulfato / 100gr agua).
Ys	Porcentaje de sulfato de amonio disuelto.
z	numero de entradas y salidas.
*	Propiedad por unidad de masa.

Símbolos Griegos

Π	Constante 3.1416
δ_l	Delta de tamaño de partícula.
δ	Densidad de la suspensión.
δ_{sol}	Densidad de solvente.
σ	Desviación estándar.
ε	Fracción libre de sólidos.
μ	Media.
$\alpha(L)$	Función de producción de cristales de tamaño L, excepto los de tamaño L_0 por sobresaturación.
$\delta(L - L_0)$	Función delta Dirac.
γ_d, γ_g	Constantes de ajuste experimental.
μ_3	Momento 3 de la DTC.
δ_a	Densidad del agua.
δ_c	Densidad del cristal.
ΔH	Cambio de entalpía debido al cambio de fase.
ΔH_c	Calor de cristalización.
μ_J	Momento J de la DTC.
μ_k	Momento k-esimo de la DTC.
ε_K	Fracción del líquido de la corriente K.
δ_{sat}	Densidad de la solución saturada (gr / cm ³).
δ_{sol}	Densidad del solvente. Densidad de la solución.

SIMULACIÓN DE UN CRISTALIZADOR BATCH POR ENFRIAMIENTO

Realizada por: Alejandra Iveth Barrón Franco

Dirigida por: Dr. Luís Ignacio Salcedo Estrada

RESUMEN

Se desarrollo un simulador para un cristalizador tipo batch por enfriamiento utilizando su modelo matemático riguroso, el cual es obtenido mediante los balances de energía, masa y población. Para elaborarlo se utilizó como herramienta principal MATLAB, y sus toolboxes Simulink y GUIDE's.

La solución del modelo matemático se efectuó mediante el método de líneas, el cual requiere de la discretización del término espacial del balance de población para obtener un sistema de ecuaciones diferenciales ordinarias.

Se usaron datos experimentales para el sulfato de amonio obtenidos para esta operación unitaria, tales como, Distribución de Tamaño de Cristal (DTC), perfiles de temperatura, agitación y concentración, también se usaron los parámetros cinéticos de nucleación, crecimiento y producción-reducción para cristalización obtenidos mediante la optimización de los parámetros de ajuste del modelo matemático del proceso.

La cristalización del sistema se controló siguiendo la trayectoria de enfriamiento que da el tanque de enfriamiento-calentamiento y se manejaron tres velocidades de agitación 200, 300 y 400 rpm.

Se comprobó la eficiencia del simulador con los datos experimentales del Sulfato de amonio.

El simulador es general, ya que es capaz de simular cualquier otro soluto, con solo cambiar las condiciones iniciales y algunas ecuaciones específicas para cada sustancia, los resultados que obtenemos son las DTC, Temperatura del Cristalizador, temperatura del agua de enfriamiento y concentración de la solución. Este simulador ocupa un espacio en disco de 587 Kb, es necesario MATLAB versión 7.0 para su funcionamiento y su velocidad de simulación es en promedio de 13 seg. Y es capaz

de optimizar el proceso, logrando la disminución de los costos de producción y del tiempo de corrida.

SIMULATION OF A COOLING BATCH CRYSTALLIZER

By: Alejandra Iveth Barrón Franco

Directed by: Dr Luís Ignacio Salcedo Estrada

SUMMARY

We developed simulator for a cooling batch crystallizer, using its rigorous mathematical model which consists of the solution of the balance of energy, mass and population. In order to elaborate it, MATLAB was used as the main tool, and its toolboxes Simulink and GUIDÉs.

The solution of the mathematical model take place by means of the method of lines, which requires the descretization of the space term of the population balance to obtain a system of ordinary differentials equations.

Were used experimental datas obtained for Ammonium Sulphate for this unitary operation, such as, Crystal Size Distribution (CSD), profiles of temperature, agitation and concentration, as well as the kinetic parameters such as nucleation, growth and production-reduction for crystallization obtained by means of the optimization of the adjustment parameters of the mathematical model of the process.

The crystallization of the system was controlled following the cooling trajectory that gives the cooling-heating tank and three speeds of agitation, 200, 300 and 400 rpm were handled

The efficiency of the simulator with the experimental datas of Ammonium Sulphate was verified.

The simulator in general, able to simulate any other solutes, by single changing the initial conditions and some specific equations for each substance, the results that we obtain are the CSD, Temperature of the Crystallizer, temperature of the cooling water and concentration of the solution. This simulator occupies a disc space of 587 Kb and is necessary MATLAB version 7.0 for its operation and its speed of simulation is in average of 13 seg. And it is capable of optimizing of process, achieving the decrease of the costs of production and of the process time.

AGRADECIMIENTOS

A Dios por darme la oportunidad de vivir y rodearme de seres maravillosos que han formado parte de mi vida.

A mi Madre por darme la vida, por ser un ejemplo de fuerza y lucha, por su apoyo y su amor infinito...Por ser la madre que ha sido.

A mi hermana Vianney y mi sobrina por ser una parte muy importante de mi vida y que con mi Madre son las personas que mas amo.

A mi Asesor ayuda y paciencia al momento de elaborar este trabajo. Y ser un ejemplo de trabajo.

A mis maestros por brindarme sus conocimientos.

A mi amiga Josefina Hurtado por escucharme y ser mi amiga de toda la vida.

A mis amigas Iohana, Iorheni, Diana y Liliana por su compañerismo, amistad, apoyo y momentos divertidos que hemos pasado juntas.

A Gladis Jiménez por su amistad y apoyo.

A mis compañeros y amigos de la universidad por cuidarme y escucharme Martín Látigo, Arturo Ayala, Jesús Peralta, Eduardo Núñez, Carlos Alvarado y Oscar Ramírez.

Y a todas esas personas que han pasado por mi vida y aunque algunas ya no están conmigo, pero me han brindado momentos de felicidad, aprendizaje y

diversión. Y que han dejado un bello recuerdo en mi corazón. A todas ellas gracias...

OBJETIVO

El objetivo de este trabajo es crear un simulador para un cristalizador tipo batch por enfriamiento con el fin de disminuir costos y tiempo de proceso y facilitar al usuario la resolución del modelo matemático.

CAPITULO 1

INTRODUCCIÓN

El análisis de las distintas situaciones problemáticas que pueden ocurrir en la vida profesional de un ingeniero químico, el planteamiento de posibles alternativas para solucionar estas situaciones, y la selección de la mejor alternativa son habilidades que un ingeniero químico debe adquirir cuanto antes si quiere tener éxito en su profesión.

Para resolver cualquier problema en ingeniería química es necesario plantear un modelo de la situación problemática (modelación), y estudiar con este modelo (simulación) las posibles vías de solución de modo que se determine la mejor (optimización) [1].

1.1 MODELACIÓN DE PROCESOS

La representación de fenómenos físicos y químicos de un proceso constituye el “modelo” del sistema y las actividades que llevan a la construcción del modelo se refieren como “modelación”.

La modelación de un proceso químico requiere del uso de todos los principios básicos de la ciencia de Ingeniería Química, tales como termodinámica, cinética, fenómenos de transporte, etc. Para la simulación de procesos químicos la modelación es un paso muy crítico [2].

1.1.1 DESARROLLO DE UN MODELO MATEMATICO

Para investigar como el funcionamiento del proceso químico cambia con el tiempo por influencia de cambios en los disturbios externos y variables manipuladas y consecuentemente como diseñar un simulador, se pueden usar dos diferentes aproximaciones:

- a) Aproximación Experimental.
- b) Aproximación Teórica.

a) **APROXIMACIÓN EXPERIMENTAL**

En este caso el equipo físico del proceso químico esta disponible. Consecuentemente, se cambia deliberadamente los valores de las entradas (disturbios y variables manipuladas) y a través de mediciones apropiadas observamos los cambios en las salidas (temperaturas, presiones flujos, concentraciones, etc.) del proceso químico con el tiempo. Este procedimiento consume mucho tiempo y esfuerzo y es extremadamente costoso ya que se necesitan varios experimentos.

b) **APROXIMACIÓN TEORICA**

Este es el caso que con frecuencia se tiene para diseñar un equipo antes de que el proceso sea construido. En este caso no se puede experimentar y se necesita una representación diferente del proceso químico para estudiar su funcionamiento dinámico. Esta representación esta dada por ecuaciones matemáticas (diferenciales o algebraicas) cuya solución nos lleva al funcionamiento dinámico o estable del proceso químico examinado.

1.1.2 VARIABLES Y ECUACIONES DE ESTADO PARA UN PROCESO QUÍMICO

Para caracterizar un sistema de procesamiento y su funcionamiento se necesita:

1. Una cantidad de variables fundamentales cuyos valores describen el estado natural del sistema.
2. Una cantidad de ecuaciones con las variables que describen como el estado natural del sistema cambia con el tiempo.

Para la mayoría de los procesos existen tres variables fundamentales: masa, energía y momento. Pero estas cantidades no pueden ser medidas directamente. En tal caso se seleccionan otras variables que puedan ser medibles y cuando son agrupadas perfectamente determinan el valor de las variables fundamentales. Así masa, energía y momento pueden ser caracterizados por variables tales como

densidad, concentración, temperatura, presión, flujo, etc. Estas variables son llamadas “variables de estado” y sus valores definen el estado de un sistema.

Las ecuaciones que relacionan las variables de estado (variables dependientes) con variables independientes son obtenidas por la aplicación del principio de conservación de las cantidades fundamentales y son llamadas “ecuaciones de estado”.

Las ecuaciones de estado con las variables de estado asociadas y las ecuaciones adicionales, constituyen el modelo matemático de un proceso [3].

1.1.3 MODELO

Un modelo es una descripción del mundo real; es una representación simple de formas más complejas, procesos, y funciones de fenómenos físicos o ideas.

El ingeniero habla ordinariamente de modelos gráficos, modelos esquemáticos, modelos matemáticos, etc. Esto requiere ampliar el significado o interpretación de la palabra modelo más allá del concepto ordinario. Para un ingeniero un modelo es algo que describe la naturaleza o comportamiento de un proceso real. Tal descripción puede efectuarse por medio de palabras, números, símbolos, esquemas, gráficas, diagramas, ecuaciones, etc., o bien pareciéndose al objeto representado, o comportándose como él. Los ingenieros utilizan diferentes modelos que pueden ser tangibles o intangibles. Duderstadt define un modelo como "cualquier descripción simplificada de un sistema o proceso de ingeniería que puede usarse como un apoyo en el análisis o en el diseño".

Los principales tipos de modelos utilizados por los ingenieros se centran en:

1. Modelos físicos
2. Modelos gráficos
3. Modelos esquemáticos
4. Modelos matemáticos

1. Modelos físicos

Los ingenieros han utilizado los modelos físicos para obtener un mayor conocimiento de los fenómenos complejos. Estos modelos probablemente constituyen el método más antiguo de diseño estructural.

2. Modelos gráficos

Las gráficas y diagramas son muy útiles para visualizar las relaciones y las magnitudes relativas. Uno de las ocasiones en que es muy útil el modelado gráfico, es cuando se necesita conocer o predecir el comportamiento de un sistema o proceso bajo condiciones que nunca fueron estudiadas con anterioridad, o fuera del rango de validez de los datos publicados.

3. Modelos esquemáticos

Un esquema suele representar, en forma simbólica, un objeto real. En cada caso una configuración de líneas y símbolos representa la disposición estructural o el comportamiento de un objeto real.

4. Modelos matemáticos

En lugar de construir un modelo físico del sistema, uno puede traducir el diseño a ecuaciones matemáticas. Las ecuaciones pueden usarse entonces para predecir la actuación del sistema bajo distintas condiciones de operación.

En otras palabras, el modelado matemático implica traducir a ecuaciones la descripción física o química de un sistema. Un modelo matemático consiste en una ecuación o grupo de ecuaciones que representan un sistema físico y muchos de los fenómenos físicos pueden describirse mediante modelos matemáticos. Tales modelos pueden estar basados en teorías o leyes científicas que siguen siendo válidas con el paso del tiempo. Otros tienen una base empírica, sustentados en las observaciones y los experimentos, o derivados de éstos.

Los modelos matemáticos diseñados para describir sistemas en ingeniería incluyen a menudo ecuaciones y sistemas de ecuaciones algebraicas y diferenciales en varias variables. En ingeniería química y de alimentos, los modelos matemáticos

tienen numerosas aplicaciones. Entre ellas se puede mencionar que permiten seleccionar el mejor diseño entre varias alternativas o predecir la actuación de un proceso dado en función de las condiciones de operación (concentraciones, temperatura, presión, etc.).

Para traducir la descripción del sistema (el diseño) al modelo matemático (las ecuaciones) uno apela a las distintas leyes de la naturaleza. Un componente clave de la ingeniería química y de alimentos es el desarrollo de descripciones matemáticas de las operaciones unitarias y de los procesos [3].

1.1.3.1 PROPÓSITO DE LOS MODELOS

Un modelo se construye para facilitar la comprensión y mejorar la predicción de un proceso. Nosotros entendemos un evento o una idea cuando lo identificamos como parte de un marco más grande por lo que se refiere a la estructura, relaciones funcionales, relaciones de causa-efecto, o combinaciones de estos marcos. Hay un eslabón definido entre entender y predecir. Cuando podemos identificar las relaciones funcionales o relaciones de causa-efecto entre los eventos, podemos construir mejores modelos para predecir la ocurrencia de eventos futuros, y en algunos casos, nosotros podemos causar la ocurrencia de eventos futuros a través del control de parámetros pertinentes.

1.1.4 ELEMENTOS ADICIONALES DE LOS MODELOS MATEMATICOS

En adición a las ecuaciones de balance, necesitamos otras relaciones para expresar el equilibrio termodinámico, velocidades de transporte de calor, masa, momentum y de reacción, etc. Tales relaciones son necesarias para completar el modelo matemático y son clasificadas como [2]:

1. **Ecuaciones de Transporte:** Son necesarias para describir la velocidad de transferencia de masa, energía y momentum, entre el sistema y los alrededores.

2. **Ecuaciones Cinéticas:** Son necesarias para describir las velocidades de reacción dadas en un sistema.
3. **Reacción y Fases de Equilibrio:** Son necesarias para describir las situaciones del equilibrio durante una reacción o por dos o más fases.
4. **Ecuaciones de Estado:** Son necesarias para describir la relación de las variables intensivas que describen el estado termodinámico del sistema. La ley de los gases ideales y las ecuaciones de Van der Waals son algunos ejemplos.

1.1.5 DIFICULTADES DE LA MODELACIÓN

Estas se clasifican en tres categorías:

1. Pobre entendimiento del proceso.
2. Conocimiento impreciso de parámetros.
3. Tamaño y complejidad de un modelo.

1. Pobre Entendimiento del Proceso

Entender completamente el fenómeno que ocurre en un proceso es prácticamente imposible.

2. Conocimiento Impreciso de Parámetros

Algunos parámetros no son disponibles y muchos de ellos no permanecen constantes como el coeficiente global de transferencia de calor, la actividad de un catalizador, etc.

3. Tamaño y Complejidad de un Modelo

Cuando se quiere desarrollar un modelo preciso, su tamaño aumenta y su complejidad también. Se debe tener cuidado de no exceder ciertos niveles.

1.2 SIMULACIÓN

La simulación consiste básicamente en construir modelos informáticos que describen la parte esencial del comportamiento de un sistema de interés, así como

en diseñar y realizar experimentos con el modelo y extraer conclusiones de sus resultados para apoyar la toma de decisiones.

Típicamente, se utiliza en el análisis de sistemas tan complejos que no es posible su tratamiento analítico o mediante métodos de análisis numérico.

Una vez detectado que cierto sistema de interés no opera de forma adecuada, se le plantea al científico o al ingeniero la forma de mejorar el funcionamiento del mismo.

En ocasiones, es posible experimentar con el sistema real e intentar por medio de observaciones y con ayuda de estadística, llegar a conclusiones válidas que permitan mejorar el funcionamiento del mismo.

Experimentar con el sistema real puede plantear problemas éticos o económicos, por lo que puede procederse a construir una versión simplificada, o prototipo del sistema.

Por ejemplo, en la construcción de un nuevo programa informático previo al diseño completo del mismo, es conveniente probar versiones simplificadas que orienten sobre la factibilidad del proyecto o las direcciones a seguir en su desarrollo.

Sin embargo muchas veces no es necesario, no es posible, o no es económico, construir un prototipo, pero podemos construir un modelo lógico-matemático que describa mediante una serie de ecuaciones y relaciones el comportamiento básico del sistema. El estudio, análisis, validación y verificación del modelo puede hacerse en muchos casos por métodos analíticos, por ejemplo la resolución de un sistema de ecuaciones diferenciales que describa la evolución de una población, o por métodos numéricos, por ejemplo utilizando un algoritmo de programación.

Sin embargo, cuando queremos estudiar modelos más realistas o detallados podemos llegar a situaciones en las que no somos capaces de resolver analítica o numéricamente el problema. En tales casos, es posible utilizar la simulación. Esencialmente la simulación consistirá en construir un programa de cómputo que describa el comportamiento del sistema de interés, o refleja el modelo que lo representa, y proceder a experimentar con el programa o modelo para llegar a conclusiones que apoyen la toma de decisiones [5].

1.2.1 VENTAJAS Y DESVENTAJAS DE LA SIMULACIÓN

Las ventajas son las siguientes:

1. Se puede estudiar el efecto de cambios internos y externos del sistema, al hacer alteraciones en el modelo, observado los efectos de esas alteraciones en el comportamiento del sistema.
2. Una observación detallada del sistema que se está simulando puede conducir a un mejor entendimiento del mismo y por consiguiente a sugerir estrategias que mejoren la operación y eficiencia del sistema.
3. La simulación de sistemas complejos puede ayudar a entender mejor la operación del sistema, a detectar las variables más importantes que interactúan en el sistema y a entender mejor las interrelaciones entre estas variables.
4. La técnica de simulación puede ser usada para experimentar con nuevas situaciones, sobre las cuales se tiene poco o ninguna información. A través de esta experimentación se puede anticipar mejor a posibles resultados no previstos.

A diferencia de las ventajas mencionadas, la técnica de simulación presenta las siguientes desventajas:

1. El problema de adquirir el equipo computacional.
2. El tiempo que se requiere para que el modelo de simulación sea desarrollado y perfeccionado.

1.2.2 ETAPAS DE UN ESTUDIO DE SIMULACIÓN

Los pasos necesarios para llevar a cabo un experimento de simulación son:

1. Definición del Sistema.
2. Formulación del Modelo.
3. Colección de Datos.
4. Implementación del Modelo en la Computadora.
5. Validación.
6. Experimentación.

La Figura 1.1 nos muestra la ruta modelación – simulación para cualquier proceso [2].

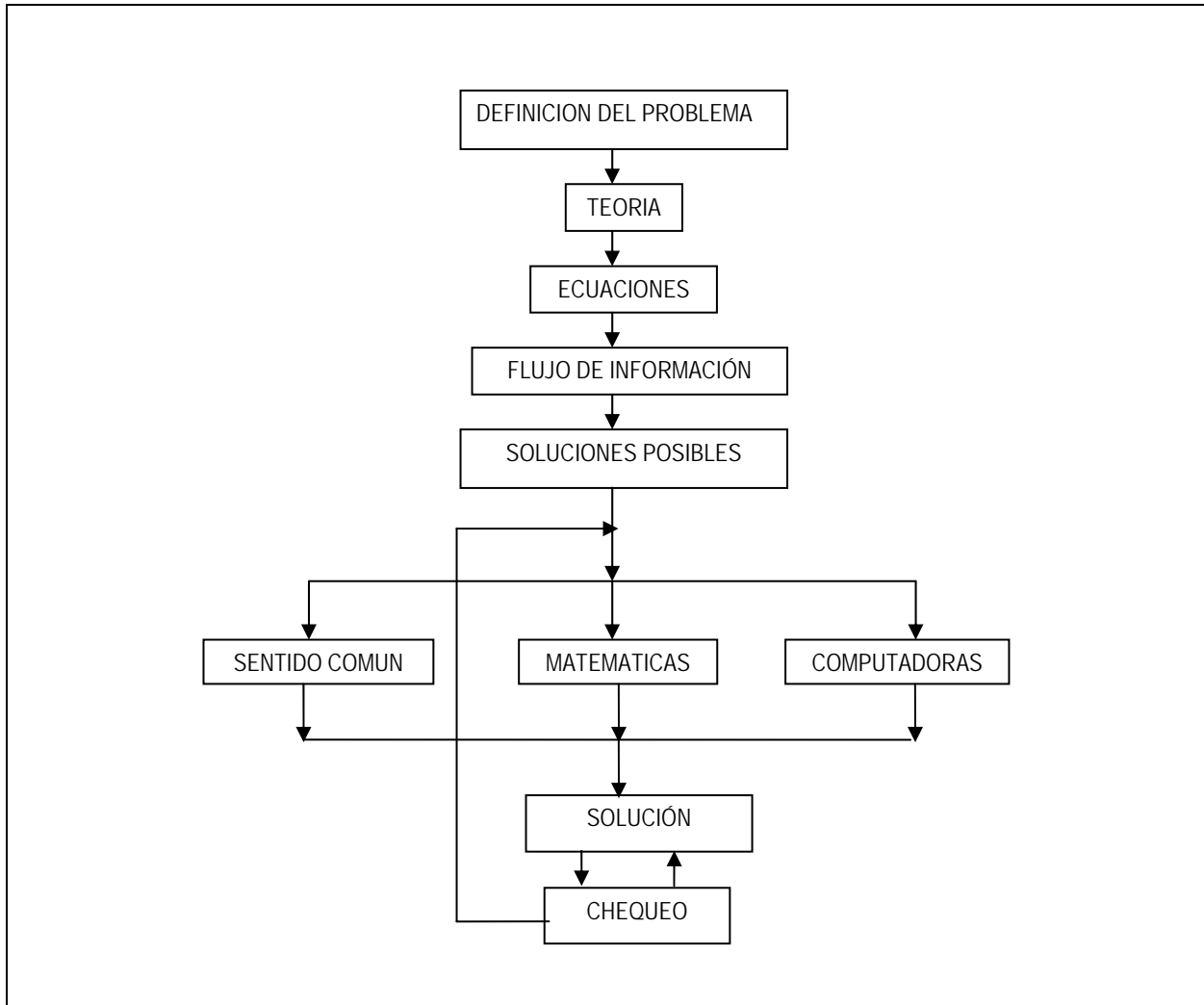


Figura 1.1 Diagrama de Flujo de Modelación-Simulación

1.2.3 VENTAJAS DE LOS LENGUAJES DE SIMULACIÓN

El proceso evolutivo de los lenguajes de simulación ha sido largo y extenso; empezó a finales de la década de los 50's en un principio los lenguajes que se desarrollaron eran de propósito general, posteriormente se desarrollaron los lenguajes de propósito especial, los cuales en la actualidad tienen una gran demanda. Entre las ventajas principales de estos lenguajes de simulación, se pueden mencionar las siguientes:

- a) **Reducción en la tarea de programación:** Con los lenguajes de simulación, el tiempo dedicado a la programación del modelo se reduce considerablemente. Existen algunos paquetes como GPSS, en los que con un número muy reducido de estatutos, se pueden simular sistemas que otro lenguaje como Fortran, requerirían una gran cantidad de estatutos y subrutinas.
- b) **Mejor definición del sistema:** A través de los lenguajes de simulación, se facilita la tarea de definir las diferentes variables que interactúan dentro del sistema. También, con estos lenguajes se determina con mayor facilidad las interrelaciones que existen entre las entidades que forman el sistema.
- c) **Mayor flexibilidad para cambios:** Con los lenguajes generales como Fortran, el proceso de cambios puede ser largo y tedioso. Sin embargo, con el uso de lenguajes de simulación, los cambios son una tarea simple y rutinaria.
- d) **Mejor diferenciación de las entidades que forman el sistema:** El uso de lenguajes de simulación facilita determinar o definir las características y atributos de una variable. Con las variables bien definidas y diferenciadas, se aumenta y mejora el entendimiento del sistema a simular.
- e) **Se relacionan mejor las entidades:** Se determina más fácilmente las relaciones que las variables guardan entre sí y el análisis de cada una de ellas.

1.2.4 SIMULADORES

En términos generales, un simulador es la representación de un proceso en una computadora por medio de modelos matemáticos.

Estos modelos se construyen a partir de ecuaciones que expresan leyes físicas fundamentales y correlaciones empíricas.

Los modelos se manejan a través del software, es decir, un conjunto de programas que indican a la computadora los pasos a seguir; el software coordina la ejecución de los modelos y efectúa las distintas funciones del simulador de acuerdo con lo que haga el usuario. Así, el corazón de un simulador es una computadora con un software específico [6].

1.2.5 VENTAJAS DE TENER UN SIMULADOR

Entre los beneficios que nos aportan el uso de un simulador destacan:

- a) La considerable disminución de fallas y paros forzados atribuibles a errores humanos.
- b) La reducción en los costos de operación y mantenimiento de los equipos.
- c) El aumento en la confiabilidad.

1.3 PAQUETES MATEMATICOS

Muchos tipos de cálculos de ingeniería pueden ser llevados a cabo rápida y eficazmente con paquetes matemáticos, numéricos y simbólicos, ejemplo de ellos son los análisis de sistemas lineales (MATLAB), manipulaciones simbólicas en algebra y calculo (MATHEMATICA, MAPLE), integración numérica de ecuaciones diferenciales ordinarias (COLNEW, ODEPACK), solución numérica de ecuaciones diferenciales parciales (PDECOL), solución de programas matemáticos en optimización (GAMS), y análisis estadístico [7].

1.3.1 MATLAB

Matlab constituye actualmente un estándar dentro de las herramientas de simulación de sistemas, tanto por su gran capacidad y sencillez de manejo como por su enorme versatilidad y difusión.

Es un ambiente de programación interactivo que resuelve, entre otros, problemas de análisis numérico, álgebra matricial y simbólica, análisis de señales, e integración de ecuaciones diferenciales. Provee además herramientas gráficas para la visualización de resultados en dos o tres dimensiones. Matlab se utiliza en docencia y en investigación en ambientes universitarios, fundamentalmente en escuelas de ingeniería. Gracias a su esquema interactivo y lenguaje de programación simple, Matlab puede ejecutar subrutinas creadas por el usuario para la solución de problemas específicos. De esta manera se han creado las denominadas cajas de herramientas (toolboxes), que se definen como conjunto de funciones que posibilitan la solución de problemas de distintas disciplinas [8].

MATLAB puede considerarse como un lenguaje de programación, como Fortran o C, aunque sería difícil describirlo en unas cuantas palabras. He aquí algunas de sus características notables para los análisis numéricos [4]:

- a) La programación es mucho más sencilla.
- b) Hay continuidad entre valores enteros, reales y complejos.
- c) La amplitud de intervalo y la exactitud de los números son mayores.
- d) Cuenta con una biblioteca matemática amplia.
- e) Abundantes herramientas graficas, incluidas funciones de interfaz gráfica con el usuario.
- f) Capacidad de vincularse con los lenguajes de programación tradicionales.
- g) Transportabilidad de los programas MATLAB.

Una característica extraordinaria de los números en MATLAB es que no hay distinción entre reales, complejos, enteros, de precisión sencilla y de doble precisión. En MATLAB, todos estos números están conectados continuamente, como debe ser. Esto significa que en MATLAB cualquier variable puede contener números de cualquier tipo sin una declaración especial durante la programación, con lo cual esta última se hace más rápida y productiva. En Fortran se requiere una subrutina distinta para cada variable sencilla o doble, real o compleja, o entera, mientras que en MATLAB no hay necesidad de separarlas.

La biblioteca matemática de MATLAB facilita los análisis matemáticos. Además, el usuario puede crear rutinas matemáticas adicionales con mucha mayor facilidad que en otros lenguajes de programación, gracias a la continuidad entre las variables reales y complejas. Entre las numerosas funciones matemáticas, los solucionadores de álgebra lineal desempeñan un papel crucial; de hecho, todo el sistema MATLAB se basa en estos solucionadores.

1.3.2 SIMULINK

Simulink es una herramienta para el modelaje, análisis y simulación de una amplia variedad de sistemas físicos y matemáticos, inclusive aquellos con elementos

no lineales y aquellos que hacen uso de tiempos continuos y discretos. Como una extensión de Matlab, Simulink adiciona muchas características específicas a los sistemas dinámicos, mientras conserva toda la funcionalidad de propósito general de Matlab. Así Simulink no es completamente un programa separado de Matlab, sino un anexo a él. El ambiente de Matlab está siempre disponible mientras se ejecuta una simulación en Simulink [9].

Simulink tiene dos fases de uso:

1. **Definición del Modelo:** Construir el modelo a partir de elementos básicos contruidos previamente, tal como, integradores, bloques de ganancia o servomotores.
2. **Análisis del Modelo:** Significa realizar la simulación, linealización y determinar el punto de equilibrio de un modelo previamente definido.

Para simplificar la definición del modelo Simulink usa diferentes clases de ventanas llamadas ventanas de diagramas de bloques. En estas ventanas se puede crear y editar un modelo gráficamente usando el mouse. Simulink usa un ambiente gráfico lo que hace sencillo la creación de los modelos de sistemas.

Después de definir un modelo este puede ser analizado seleccionando una opción desde los menús de Simulink o entrando comandos desde la línea de comandos de Matlab.

Simulink puede simular cualquier sistema que pueda ser definido por ecuaciones diferenciales continuas y ecuaciones diferenciales discretas. Esto significa que se puede modelar sistemas continuos en el tiempo, discretos o sistemas híbridos.

Simulink usa diagramas de bloques para representar sistemas dinámicos. Mediante una interfase gráfica con el usuario se pueden arrastrar los componentes desde una librería de bloques existentes y luego interconectarlos mediante conectores y alambre. La ventana principal de Simulink se activa escribiendo Simulink en la línea de comandos de Matlab, y se muestra en la Figura 1.2.

Haciendo doble click en cualquiera de las librerías presentes en esta ventana se abrirá otra ventana conteniendo una cantidad de bloques relativos a dicha librería.

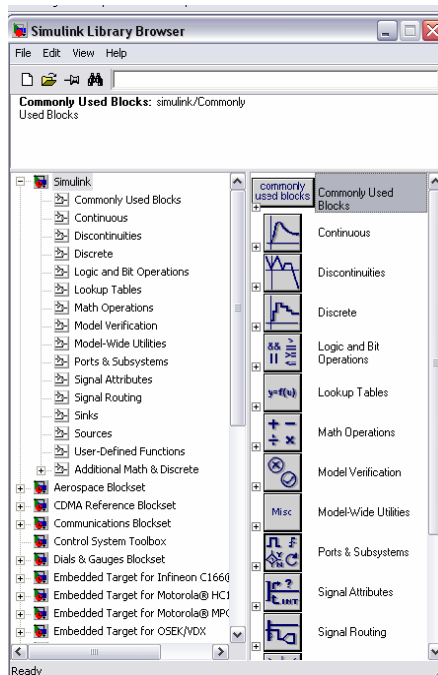


Figura 1.2 Librería de Simulink

Para realizar un sistema debe abrirse una nueva ventana de diagrama de bloques seleccionando la opción file del menú principal de Simulink y allí la opción new. En esta nueva ventana se colocarán todos los bloques interconectados que formarán el sistema deseado.

1.4 SIMULADORES COMERCIALES

Durante la última década, los programas de simulación de procesos se han implantado de forma generalizada en la industria química llegando a convertirse en herramientas indispensables para el diseño, modificación y evaluación de equipos y plantas, dada la gran versatilidad que ofrecen en cuanto a la manipulación de las variables involucradas en los procesos, y el ahorro económico que proporcionan al permitir realizar el análisis de diversas alternativas para mejorar un proceso, sin necesidad de materializar los cambios propuestos antes de obtener conclusiones confiables acerca de la conveniencia a implementar, o no, la alternativa en cuestión.

Estos paquetes están compuestos por bancos de datos, modelos de propiedades físicas y modelos de dimensionamiento y operación de equipos. Los extensos bancos de datos contienen información acerca de constantes y propiedades termofísicas y de transporte para cientos de sustancias, equipos, medidas de beneficio, costo de operación y capital. Los simuladores contienen muchos modelos de reactores y operaciones unitarias que pueden ser usados para calcular los balances de materia y energía. Otros modelos calculan propiedades de mezclas, dimensionan equipos entre otros muchos cálculos. Consecuentemente los simuladores de procesos son usados para llevar a cabo muchos tipos de cálculos a lo largo del diseño del un proceso.

Por esta razón los simuladores de proceso están reemplazando los experimentos a escala piloto en muchos casos y está jugando un rol complementario en muchos otros [10].

Algunos de los simuladores comerciales más importantes con que se disponen actualmente para asistir al ingeniero químico:

- a) Aspen
- b) ChemCad

a) ASPEN

Aspen Plus es un simulador estacionario orientado a la industria de proceso química y petroquímica. Modela y simula cualquier tipo de proceso para el cual hay un flujo continuo de materiales y energía de una unidad de proceso a otra. Su empleo está muy extendido a escala mundial por su facilidad de manejo, sus potentes bancos de datos y las múltiples utilidades que ofrece: manejo de sólidos, electrolitos y polímeros, incorporación de módulos de optimización de cálculos de costos.

Es un simulador secuencial modular que en sus últimas versiones permite la estrategia orientada a ecuaciones [11].

b) CHEMCAD

CHEMCAD es un paquete de software de simulación de procesos en

Ingeniería Química, muy rigurosa que junto a sus diferentes módulos integrados logran resolver el 95% de los problemas en la ingeniería química en tiempo récord y con resultados confiables.

Comparaciones importantes a escala global han hecho de CHEMCAD su estándar gracias a su Alta Sofisticación Tecnológica y Excelente servicio de Soporte Técnico. Más de mil empresas clientes disfrutan de CHEMCAD y de los softwares integrados de la familia CHEMCAD

Este programa permite al usuario diseñar Diagramas de Flujo de Procesos (Process Flowsheet Diagrams, PFD), regular y editar virtualmente cada aspecto de estos incluyendo composiciones de alimentación y parámetros de los equipos. Funciones más complicadas de este programa incluyen dimensionamiento de tuberías, cálculo de precios, ensayos de crudos, y formulación de estrategias de control. Uno encontrará que la principal ventaja usando este programa o cualquier otro tipo de software simulador de procesos es no tener la molestia de realizar los innumerables y tediosos cálculos repetitivos.

Para usar este programa, un extenso conocimiento del estudiante de ingeniería química es útil pero no necesario. Mientras este programa es complicado, con la práctica, cualquier persona podrá usarlo y posteriormente dominarlo [12].

1.5 CRISTALIZACIÓN

La cristalización es una de las más antiguas operaciones unitarias de la ingeniería química y una técnica primaria de procesamiento en la industria química, se fabrican comercialmente vastas cantidades de sustancias cristalinas, por ejemplo, el cloruro de sodio, los sulfatos de sodio y amonio y la sacarosa. Una alta proporción de los productos de las industrias farmacéutica y de productos químicos selectos son cristalinos. Muchos líquidos orgánicos se purifican a gran escala por cristalización,

La cristalización es la conversión de una sustancia o algunas sustancias de un estado sólido amorfo, líquido o gas al estado cristalino. La cristalización es particularmente importante como un proceso de separación térmico debido a que

requiere menos energía para la separación que otros métodos de purificación que se emplean frecuentemente y se puede realizar a temperaturas bajas y en escalas que varían de unos cuantos gramos a toneladas al día.

En la cristalización la solución se concentra y casi siempre se enfría hasta que la concentración del soluto es superior a su solubilidad a dicha temperatura, entonces el soluto sale de la solución formando cristales casi puros.

Otras aplicaciones exigen obtener materiales de tamaños y formas específicas (partículas homogéneas en lugar de masas amorfas), ejemplos de este segundo caso son la producción de cristales individuales largos y perfectos para instrumentos ópticos y eléctricos, y la producción de cristales cúbicos de sal de mesa. Otro requerimiento es la producción de sólidos con propiedades físicas específicas (metales, polímeros, etc.).

La cristalización es empleada ampliamente como un proceso de separación en la industria química, particularmente donde un soluto es recuperado de un medio acuoso. La alimentación a un sistema de cristalización consiste de una solución de la cual el soluto es cristalizado (o precipitado). Los sólidos son normalmente separados del líquido en el cristizador, lavados y enviados a otro equipo para un tratamiento adicional. Normalmente la recuperación alta del soluto refinado es el objetivo deseado.

Un cristizador debe tener un tiempo de residencia que permita que las corrientes del proceso lleguen al equilibrio, la capacidad de seleccionar o remover finos de un producto granular tosco, un régimen de mezclado o contacto que permita un crecimiento uniforme, y equipos adicionales que permitan incluir adición o remoción de calor.

Una fase líquida (solución o material en fusión) debe estar sobresaturada para que los cristales puedan ser formados o exista su crecimiento. La sobresaturación puede ser alcanzada por diferentes formas [13]:

1. Por enfriamiento de una solución (cristalización por enfriamiento).
2. Por evaporación de solventes (cristalización por evaporación).
3. Por adición de otra sustancia (cristalización con agente de desplazamiento).
4. Por reacción química (cristalización por reacción).

5. Por vacío (cristalización por vacío).
6. Por congelamiento (cristalización por congelamiento).
7. Por combinación de técnicas (cristalización por combinación).

Aunque no hay distinción entre el límite general de una solución y un material en fusión, es necesario distinguir entre la cristalización a partir de soluciones y la cristalización a partir de la fusión.

Cristalización de una solución: Es la cristalización de solo la sustancia disuelta, la cual frecuentemente existe a baja concentración. La cinética es frecuentemente controlada por la transferencia de masa.

Cristalización a partir de la fusión: por otro lado, aplica cuando ambos componentes (o en sistemas multicomponentes a todos los componentes) cambian de la fase líquida a la fase sólida.

1.5.1 CONCEPTOS BASICOS

Algunos conceptos básicos en la cristalización por enfriamiento de la solución son:

a) SOLUBILIDAD

Cada sistema tiene una solubilidad en equilibrio que denota la cantidad de material que puede ser disuelto en un solvente o solución a una temperatura dada. Las características de solubilidad son la primera información que se debe conocer acerca del sistema y son con frecuencia la clave de un proceso industria [14].

La solubilidad de un compuesto en un disolvente concreto y a una temperatura y presión dadas se define como la cantidad máxima de ese compuesto que puede ser disuelta en la disolución. En la mayoría de las sustancias, la solubilidad aumenta al aumentar la temperatura del disolvente. Esto ocurre porque con el incremento en temperatura, el movimiento molecular incrementa y la “tendencia de escape”, así como la solubilidad se incrementa. Pero existen otros sistemas donde la concentración de saturación permanece casi constante o decrece cuando se

incrementa la temperatura.

b) SOBRESATURACIÓN

Una solución sobresaturada contiene más soluto disuelto que el necesario para la saturación en equilibrio. Ostwald (1897) y Miers (1906) sugirieron que podían reconocerse dos tipos de sobresaturación, a saber:

1. Los estados metaestables.
2. El estado labil.

1. **Los estados metaestable:** Que se encuentran en la zona metaestable (sobresaturada), en donde es improbable la nucleación espontánea (si bien un cristal es localizado en una solución metaestable podría crecer)
2. **El estado labil:** Se da en la zona inestable o lábil (sobresaturada), en donde es probable la nucleación espontánea, más no inevitable.

1.5.2 PROCESO DE CRISTALIZACIÓN

Para que la cristalización tome lugar primero que nada debe existir cierto grado de sobresaturación, sin embargo, la sobresaturación por sí misma no basta para que se provoque el crecimiento de los cristales. Antes de que pueda comenzar el crecimiento, debe existir un proceso llamado nucleación el cual se puede definir como la formación de un número de moléculas en agregados, hasta que la tendencia para más crecimiento es mayor que la tendencia de perder moléculas. El número de moléculas para formar el cristal varía ampliamente, dependiendo del compuesto y las condiciones de operación.

Durante el curso de la cristalización de nuevas partículas, la nucleación parece ser generalmente el factor dominante que influye en la Distribución del Tamaño de Cristales (DTC) y es también el proceso menos entendido hasta hoy [15].

1.5.3 NUCLEACIÓN

Hay tres categorías principales de nucleación: primaria homogénea, primaria heterogénea y secundaria. Los mecanismos que gobiernan estas tres categorías son

diferentes, las ecuaciones son diferentes y su importancia varía con la operación particular de cristalización.

1.5.3.1 NUCLEACIÓN PRIMARIA

La nucleación primaria es el resultado de fluctuaciones rápidas y localizadas a escala molecular en una fase homogénea. Las partículas o moléculas del soluto entran en contacto y forman aglomeraciones; algunas de éstas adicionan más moléculas de soluto y comienzan a crecer, mientras que otras se desprenden y vuelven a su situación de moléculas individuales. El crecimiento de las aglomeraciones las transforma en cristales que continúan absorbiendo moléculas de soluto de la solución.

Este tipo de nucleación se llama nucleación homogénea o primaria. Cuando mayor es el cristal, menor es su solubilidad. La solubilidad de los cristales pequeños del orden de micrómetros es mayor que la de los cristales grandes. Los datos comunes de solubilidad se refieren a cristales grandes. Por consiguiente, un cristal pequeño puede estar en equilibrio en una solución sobresaturada. Si también está presente un cristal grande, éste crecerá y el pequeño se disolverá. El efecto del tamaño de las partículas es un factor importante en la nucleación. En la cristalización de magmas también hay un cierto grado de nucleación primaria [16].

La nucleación primaria homogénea ocurre en la ausencia de una interfase sólida (caso de este trabajo), y se presenta cuando llegamos a la región inestable.

La nucleación primaria heterogénea ésta ocurre en presencia de una interfase diferente que el soluto (tal como arenilla, moho, etc.) en la solución sobresaturada es ilustrado en la Figura 1.3 [13].

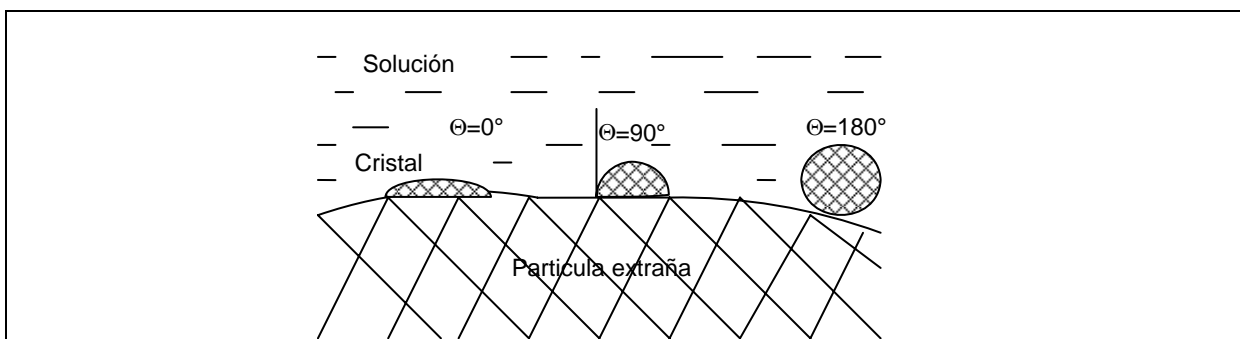


Figura 1.3 Nucleación en una partícula extraña

Y requiere supersaturaciones significativamente más bajas que las usadas en la nucleación homogénea, y por lo tanto el espesor de la zona metaestable es reducido. La nucleación primaria es la dominante a altas supersaturaciones.

1.5.3.2 NUCLEACIÓN SECUNDARIA

La nucleación secundaria o de contacto, que es el método de nucleación más efectivo, se presenta cuando los cristales chocan entre si, con las aspas del mezclador, o con las paredes de la tubería o del recipiente de proceso. Es claro que esta nucleación depende de la intensidad de la agitación, pues se presenta a sobresaturación baja, donde la velocidad de crecimiento de los cristales tiene un valor óptimo para un buen tamaño de los mismos. Diversos experimentos han demostrado la existencia de este tipo de cristalización y también la han verificado en forma aislada. Es el método de nucleación más efectivo y común en la cristalización de magmas. Se desconocen los mecanismos precisos de la nucleación de contacto y no se dispone de una teoría para predecir las velocidades.

1.5.4 CRECIMIENTO DEL CRISTAL

Una vez que los cristales han sido producidos por el proceso de nucleación, estos crecerán y muchos problemas relacionados a la cristalización son arraigados en el proceso de crecimiento del cristal.

El crecimiento se da si se mantiene el sistema en la zona metaestable una vez que se tiene núcleos (ver Figura 1.4), por eso es recomendable mantener el sistema en esta zona.

El tamaño de cristal, es de mucha importancia, y la forma o hábito del cristal son propiedades comunes del cristal, relacionadas al proceso de crecimiento. La pureza del cristal, la perfección, la dureza y la resistencia a la abrasión, son otros parámetros de la partícula que son también relacionados al proceso de crecimiento, aunque estos últimos han recibido poca atención en la literatura [14].

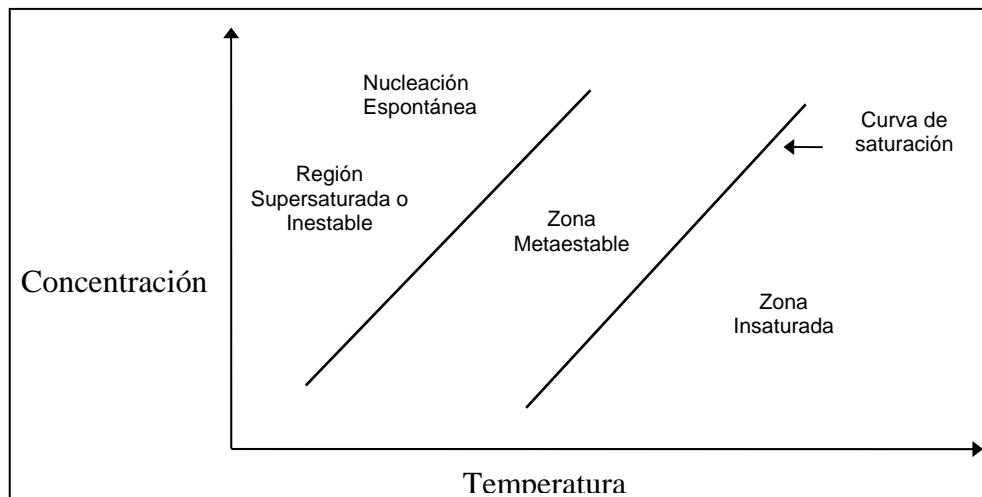


Figura 1.4 Zonas en la cristalización

1.5.5 ETAPAS DEL CRECIMIENTO DEL CRISTAL

Elwell y Scheel (1975) describen dos tipos de sitios superficiales donde los átomos (o unidades de crecimiento) pueden ser integradas en la estructura del cristal creciente: un sitio escalón y un sitio de pliegue. Como se ilustra en la Figura 1.5, un sitio escalón es una localización donde dos uniones cercanas pueden ser hechas por un átomo y un cristal. Un sitio de pliegue es una localización donde tres uniones cercanas pueden ser hechas con el cristal. El proceso de crecimiento del cristal ocurre en las siguientes etapas:

1. Transporte del soluto de la solución a la superficie del cristal.
2. Adsorción en la superficie del cristal.
3. Difusión sobre la superficie
4. Unión en un escalón.
5. Difusión a través del escalón.
6. Integración en el cristal en un punto de pliegue.
7. Difusión de moléculas de solvente lejos de la superficie del cristal.
8. Liberación del calor de cristalización y su transporte lejos del cristal.

El proceso de crecimiento del cristal puede ser descrito a diferentes niveles: molecular, microscópico y macroscópico [17].

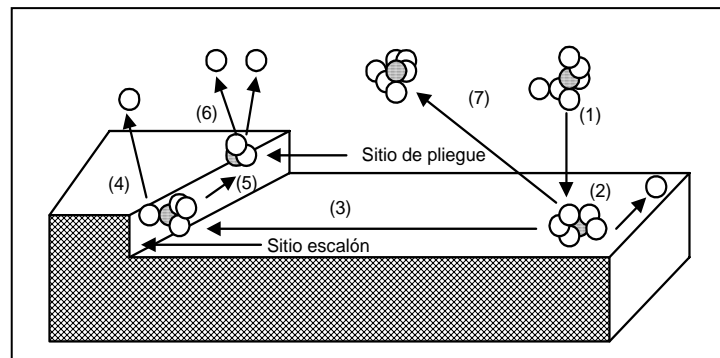


Figura 1.5 Etapas de crecimiento de un cristal

Nivel Molecular: Las unidades de crecimiento se unen a la superficie del cristal, se difunden sobre su superficie y eventualmente se integran en un solo sitio de pliegue o regresan al fluido. La oportunidad de alcanzar tales sitios depende de la concentración de los sitios de pliegue en la superficie y así el mecanismo de velocidad de crecimiento depende de la naturaleza de la superficie del cristal a su nivel molecular; en una superficie rugosa hay muchos sitios de pliegue y la difusión en la superficie no es importante. Bajo tales circunstancias los modelos de crecimiento continuo o normal son aplicados. En el otro extremo, cuando la superficie es no rugosa, es más difícil el modelo para la velocidad de crecimiento. Los sitios de pliegue están solamente presentes en los bordes de núcleos bidimensionales o en los escalones de la superficie. Aquí la difusión es importante y la topografía de la superficie debe ser definida, y los modelos de crecimiento de capa son aplicables.

Escala Microscópica: Se observan capas en la superficie o “racimos de escalones”. Estas son cientos de alturas en dimensiones atómicas que están hechas de grupos de escalones pequeños que se han puesto en forma de racimos.

Escala Macroscópica: Se observan los efectos de las limitaciones en el crecimiento. La transferencia de calor rara vez controla la velocidad de crecimiento del cristal, pero las limitaciones de transferencia de masa son frecuentemente importantes. Los gradientes de supersaturación en la solución pueden influir en el proceso de crecimiento. La relación de todos estos factores, finalmente resulta en la morfología y tamaño global del cristal.

El crecimiento del cristal es un proceso capa por capa y, ya que el crecimiento sólo puede ocurrir en la cara del cristal, es necesario transportar material a la cara desde la solución. Por consiguiente, debe considerarse la resistencia de difusión al desplazamiento de las moléculas (o iones) hacia la cara creciente del cristal y la resistencia a la integración de estas moléculas a la cara [18].

Si L es la dimensión característica de un cristal de material y forma seleccionados, la velocidad de crecimiento de una cara de cristal perpendicular a L es por definición, se muestra en la ecuación 1:

$$G \equiv \lim_{\Delta L \rightarrow 0} \frac{\Delta L}{\Delta t} = \frac{dL}{dt} \quad (1.1)$$

Donde G representa la velocidad de crecimiento en el tiempo interno t .

McCabe [18], demostró que todos los cristales geoméricamente similares, del mismo material, suspendidos en la misma solución crecen a la misma velocidad, si la velocidad de crecimiento es definida como la ecuación anterior. La velocidad es independiente del diámetro del cristal, siempre y cuando todos los cristales suspendidos en la solución se traten de la misma manera. Esta generalización se conoce como ley delta L . A pesar de que existen algunas excepciones bien conocidas [19], éstas ocurren por lo general cuando los cristales son muy grandes o cuando el movimiento de los mismos en la solución es tan rápido que se presentan cambios substanciales en el crecimiento de las caras, limitado por la difusión.

Se recalca que la ley delta L no se aplica cuando a los cristales similares se les da un tratamiento preferencial, basado en el tamaño. También da resultados erróneos cuando los defectos o dislocaciones de la superficie alteran, en forma significativa, la velocidad de crecimiento de la cara del cristal. Sin embargo, es una generalización razonablemente precisa para un gran número de casos industriales. Cuando es así, es importante porque simplifica el tratamiento matemático en el modelado de los cristalizadores y es útil para calcular la distribución del diámetro del cristal.

CAPITULO 2

ANTECEDENTES

En este capítulo se estudia el modelo matemático de un cristizador tipo batch por enfriamiento, así como los beneficios que nos da el contar con un simulador y el costo actual que se tiene que cubrir por la adquisición de la licencia de un simulador comercial y el porque es importante poder crear nuestros propios simuladores con las herramientas computacionales que dispongamos.

2.1 MODELO MATEMATICO

Las ecuaciones que modelan un cristizador tipo batch por enfriamiento, sin reacción química, sin sembrado o disolución de finos se muestran a continuación en los siguientes balances [14].

2.1.1 Balance de Población

De la ecuación obtenida por Randolph y Larson en 1971:

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial(G'n)}{\partial L} + n \frac{d(\log V)}{dt} = -\sum_z \frac{n_z Q_z}{V} + B(L) - D(L) \quad (2.1)$$

Consideraremos que el volumen de la suspensión en el cristizador batch por enfriamiento es prácticamente constante, por lo tanto:

$$\frac{d(\log V)}{dt} = 0 \quad (2.2)$$

Como en sistemas batch no hay entradas ni salidas, la Ecuación 2.1 se reduce a:

$$\frac{\partial nV}{\partial t} + V \frac{\partial(G'n)}{\partial L} = V(B(L) - D(L)) \quad (2.3)$$

Al suponer que el volumen de la suspensión es constante, se puede realizar la definición de una densidad de población N (en número) por unidad de masa del solvente, al multiplicar la Ecuación 2.3 por $\delta_{sol} \varepsilon$, donde δ_{sol} es la densidad del solvente y $(1 - \varepsilon)$ es la fracción de sólidos en la suspensión y ε es la fracción volumen de solvente, obteniendo la ecuación:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial(GN)}{\partial L} = V(B(L) - D(L)) \quad (2.4)$$

Con la condición frontera:

$$N(L_0, t) = \frac{B^0}{G_{L=L_0}} \quad (2.5)$$

Donde B^0 es la velocidad de nacimiento de cristales de tamaño cero (L_0) por unidad de volumen. N puede ser definido como:

$$N = n M \quad (2.6)$$

Donde M es la masa del solvente. Con la condición inicial:

$$N(L_0, 0) = \text{constante} \quad (2.7)$$

Donde la constante es igual a cero si no hay sembrado y si lo hay es diferente de cero. Con esto queda definido el balance de población. Para nuestro caso $B(L)$ se define por la ecuación:

$$B(L) = B_e + B_c + B_a \quad (2.8)$$

La Ecuación 2.9 es valida para cuando L es mayor que L_0 , y para cuando L es igual a L_0 se tiene que:

$$B(L) = B_{ss} = B(L_0) = B^0 \quad (2.9)$$

Donde B_{ss} es el nacimiento o nucleación debido a la sobresaturación, cabe hacer notar que este tipo de nucleación es el mas estudiado, ya que se desprecian los otros términos (B_e , B_c y B_a), definido como $B_{ss} = B^0\delta(L-L_0)$, donde $\delta(L-L_0)$ es la función delta Dirac (cuando $L=L_0$ vale 1, y cuando $L>L_0$ vale cero). B_e es el nacimiento debido al contacto cristal-impulsor, y B_c es el nacimiento debido al contacto cristal-cristal y B_a es la nucleación debido a la aglomeración.

Qiu y Rasmuson, 1991, 1994, han estudiado todos los tres efectos proponiendo la siguiente ecuación:

$$G' = K_g S^g N_r^h \quad B^0 = K_b S^b M_T^j N_r^p \quad (2.10)$$

Si G depende del tamaño de partícula, la ecuación a utilizar es:

$$G = K S N_r (\gamma + \phi L) \quad (2.11)$$

Del balance de masa y utilizando la Ecuación 2.4:

$$\frac{\partial(nV)}{\partial t} + V \frac{\partial(G' n)}{\partial L} = V B^0 + V(B_e + B_c + B_a - D(L)) \quad (2.12)$$

Donde:

$$\alpha(L) = B_e + B_c + B_a - D(L) \quad (2.13)$$

Por lo tanto sustituyendo la Ecuación 2. 13 en la Ecuación 2.12 tenemos:

$$\frac{\partial(nV)}{\partial t} + V \frac{\partial(G' n)}{\partial L} = V B^0 + V \alpha(L) \quad (2.14)$$

Donde finalmente:

$$B^0 = k_b S_r^b M_T^o N_r^p \quad (2.15)$$

$$\alpha(L) = k_a S_r^c M_T^k N_r^d \quad (2.16)$$

$$G = k_g S_r^g N_r^h (\gamma_g + \phi_g L)^a \quad (2.17)$$

$$M_T = \delta_C K_V m_3(t) \quad (2.18)$$

$$m_3(t) = \int_0^{\infty} L^3 n(t,L) dL \quad (2.19)$$

Donde:

M_T = Densidad de cristales en la suspensión (gr/L)

$m_3(t)$ = Momento 3

n = número de partículas por volumen de suspensión (V)

S_r = Sobresaturación relativa para cristalización = $(C - C_{sat})/C_{sat}$

N_r = Revoluciones por minuto del agitador

G = Velocidad de crecimiento

$k_b, k_g, k_a, b, o, p, g, h, a, c, k, d, \gamma_g$ y ϕ_g = Parámetros cinéticos

En la Ecuación 2.16 se propuso usar un factor de transformación de malla FTM (Bolaños, 2000) definido por:

$$FTM = \Delta L \left(\frac{n_i}{n_0} \right) * 1000 \quad (2.16a)$$

Salcedo en el 2000, encontró que la Ecuación 2.16-a tenía que ser modificada de la siguiente manera:

$$FTM = \Delta L \left(\frac{n_i}{n_T} \right) * 1000 \quad (2.16b)$$

Esto fue debido porque en ocasiones no existen cristales de tamaño L_0 como es nuestro caso y se presentan problemas en la solución del balance. De esta manera se asegura que existirá siempre una solución.

En la solución del modelo por el método de líneas este factor debe de multiplicar la Ecuación 2.16, pero si se usa otro método para su solución posiblemente se debe de usar la Ecuación 2.16 como tal. Para nuestro caso la Ecuación 2.16 se transforma en:

$$\alpha(L) = k_a S_r^c M_T^k N_r^d * FTM \quad (2.16c)$$

Donde:

ΔL = Incremento de tamaño de partícula en la solución del balance

n_i = Número de partículas de tamaño i

n_T = Número de partículas totales

Modelo para cristalización

Condición frontera: $L = L_0 \rightarrow n(L_0, t) = \frac{B^0}{G|_{L_0}} \quad (2.20)$

Condición inicial: $t = 0 \rightarrow n_0(L) = n(L, t) = n(L, 0) = 0 \quad (2.21)$

$$\frac{\partial(nV)}{\partial t} + V \frac{\partial(Gn)}{\partial L} = V\alpha(L) \quad (2.22)$$

Esta última ecuación valida para cuando L es mayor que L_0 . Para cuando L es igual a L_0 se usa la condición frontera.

2.1.2 Balance de Masa

El balance de masa para el soluto en un proceso de cristalización es:

$$\frac{dM_s}{dt} = \frac{d(V_L C)}{dt} = - \sum_K \varepsilon_K Q_K C_K - R' \quad (2.23)$$

Donde:

V_L = Volumen de liquido libre de sólidos

C = Concentración del soluto = M_S/V_L

M_S = Masa del soluto disuelto en el solvente

V = Volumen total de la suspensión

R' = Velocidad global de transferencia de masa entre el soluto y los cristales

ε_K = Fracción del líquido de la corriente $K = (V_L/V)_K$

Q_K = Flujo volumétrico de la corriente $K = (V)_K$ (signo (+) denota salida de flujo)

C_K = Concentración del soluto en la corriente $K = (M_S/V_L)_K$

Usando la definición de ε , la Ecuación 2.23 se escribe:

$$\frac{d(\varepsilon VC)}{dt} = -\sum_K \varepsilon_K Q_K C_K - R' \quad (2.24)$$

Para nuestro caso (Cristalizador batch) no hay entradas ni salidas, por lo que la Ecuación 2.24 se reduce a:

$$\frac{d(\varepsilon VC)}{dt} = -R' \quad (2.25)$$

Para examinar el término R' , consideraremos el balance de población para un cristalizador batch:

$$\frac{\partial(nV)}{\partial t} + V \frac{\partial(G'n)}{\partial L} = V \alpha(L) + VB^0 \quad (2.26)$$

Donde $\alpha(L)$ es la función de la diferencia de lo que nace y muere de un tamaño L por todos los mecanismos dentro del sistema, excepto nucleación, crecimiento y disolución (aglomeración y rompimiento):

$$\alpha(L) = B(L) - D(L) \quad (2.27)$$

Sustituyendo la definición de la Ecuación 2.27 con todos sus términos en la Ecuación 2.13 resulta:

$$\frac{\partial(nV)}{\partial t} + V \frac{\partial(G' n)}{\partial L} = V B^0 + V(B_e + B_c + B_a - D(L)) \quad (2.28)$$

Multiplicando la Ecuación 2.28 por L^J ($J=1,2,\dots$), e integrando sobre todas las L :

$$\int_0^{\infty} \frac{\partial(nV)}{\partial t} L^J dL + V \int_0^{\infty} \frac{\partial(G' n)}{\partial L} L^J dL = V \int_0^{\infty} B^0 L^J dL + V \int_0^{\infty} (B_e + B_c + B_a - D(L)) L^J dL \quad (2.29)$$

Como:

$$\mu_J = \text{Momento } J = \int_0^{\infty} n L^J dL \quad (2.30)$$

$$[B_e + B_c + B_a - D(L)] = \alpha(L) \quad (2.31)$$

Sustituyendo la Ecuación 2.30 y 2.31 en 2.29 nos da como resultado la siguiente expresión:

$$\frac{d(V\mu_J)}{dt} + V \int_0^{\infty} \frac{\partial(G' n)}{\partial L} L^J dL = V \int_0^{\infty} B^0 L^J dL + V \int_0^{\infty} \alpha(L) L^J dL \quad (2.32)$$

Donde:

$\alpha(L)$ = Función de producción de cristales de tamaño L , excepto los de tamaño L_0 por sobresaturación y por disolución.

μ_J = Momento J^{th} de distribución.

Usando integración por partes para el segundo término de la Ecuación 2.32 nos queda:

$$\int_0^{\infty} \frac{\partial(G' n)}{\partial L} L^J dL = -J \int_0^{\infty} G' n L^{J-1} dL \quad (2.33)$$

Para el tercer termino de la Ecuación 2.32, B^0 es igual a cero para cualquier valor diferente de L_0 . Por lo tanto:

$$\int_0^{\infty} B^0 L^J dL = B^0 L_0^J \quad (2.34)$$

Sustituyendo la Ecuaciones (2.34) y (2.33) en la ecuación 2.32 nos queda:

$$\frac{d(V\mu_j)}{dt} = JV \int_0^{\infty} G' n L^{J-1} dL + VB^0 L_0^J + V \int_0^{\infty} \alpha(L) L^J dL \quad (2.35)$$

Como:

$$\delta_c K_V \mu_3 = \frac{M_C}{V} = \text{Masa de cristales por volumen de suspensión} \quad (2.36)$$

Donde:

M_C = Masa de cristales en la suspensión

K_V = Factor de forma de volumen del cristal

δ_c = Densidad del cristal

μ_3 = Momento 3

Sustituyendo la Ecuación 2.36 en 2.35 y con un valor para J de 3, nos queda:

$$\frac{d(M_C)}{dt} = \delta_c K_V V \left[3 \int_0^{\infty} G' n L^2 dL + B^0 L_0^3 + \int_0^{\infty} \alpha(L) L^3 dL \right] \quad (2.37)$$

Los dos primeros términos están relacionados con la transferencia de masa entre las dos fases (sólido y líquido) y el tercero a la producción de cristales debido a otros factores. Por lo tanto los dos primeros términos corresponden a la definición de R' , esto es:

$$R' = \delta_c K_V V \left[3 \int_0^{\infty} G' n L^2 dL + B^0 L_0^3 \right] \quad (2.38)$$

De la Ecuación 2.25 y para procesos batch llegamos a la conclusión de que:

$$\frac{d(\varepsilon VC)}{dt} = -R' \quad (2.39)$$

Sustituyendo la Ecuación 2.38 en 2.39 y dividiendo entre V, nos queda:

$$\frac{d(\varepsilon C)}{dt} = -\frac{R'}{V} = -\delta_c K_V \left[3 \int_0^{\infty} G n L^2 dL + B^0 L_0^3 \right] \quad (2.40)$$

Como:

$$\hat{C} = \varepsilon C h = \frac{V_L}{V} \frac{M_S}{V_L} \frac{V}{M_{SL}} = \frac{M_S}{M_{SL}} = \frac{\text{Masa soluto}}{\text{Masa solvente}} \quad (2.41)$$

Sustituyendo la Ecuación 2.41 en 2.40, llegamos a:

$$\frac{d(\hat{C})}{dt} = -\delta_c K_V h \left[3 \int_0^{\infty} G' n L^2 dL + B^0 L_0^3 \right] \quad (2.42)$$

Con condición inicial: $t = 0 \rightarrow \hat{C}(0) = \hat{C}_0$ (2.43)

Para unidades en masa de soluto se manejan las siguientes ecuaciones:

$$\varepsilon VC = \frac{V_L}{V} V \frac{M_S}{V_L} = M_S \quad (2.44)$$

Con la Ecuación 2.44 y la 2.40 se llega a:

$$\frac{d(\varepsilon VC)}{dt} = -\delta_c K_V V \left[3 \int_0^{\infty} G'nL^2 dL + B^0 L_0^3 \right] \quad (2.45)$$

Con condición inicial: $t = 0 \rightarrow M_S(0) = M_{S0} \rightarrow C(0) = C_0$ (2.46)

Modelo para cristalización

$R' = R_c =$ Transferencia del soluto a los cristales.

$$R_c = \delta_c K_V V \left[3 \int_0^{\infty} G'nL^2 dL + B^0 L_0^3 \right] \quad (2.47)$$

$$\frac{d(\hat{C})}{dt} = -\delta_c K_V h \left[3 \int_0^{\infty} G'nL^2 dL + B^0 L_0^3 \right] \quad (2.48)$$

$$\frac{d(\varepsilon VC)}{dt} = -\delta_c K_V V \left[3 \int_0^{\infty} G'nL^2 dL + B^0 L_0^3 \right] \quad (2.49)$$

2.1.3 Balance de Energía

El balance de energía para un cristalizador es:

$$\frac{d}{dt}(U + KE + PE) = -\sum_K \delta_K Q_K (U_K^* + KE_K^* + PE_K^*) - H_{ext} + W \quad (2.50)$$

Donde U es la energía interna; KE y PE son las energías cinética y potencial respectivamente; Q_K y δ_K son el flujo volumétrico y la densidad de la corriente K^{th} respectivamente; H_{ext} es el calor neto removido (incorporando efectos del sistema de enfriamiento, perdidas a los alrededores y entradas de energía por mezclado); W es la velocidad neta de trabajo efectuado en el sistema por el transporte de fluido; el superíndice (*) denota por unidad de masa. Los términos KE y PE son insignificantes cuando un cambio de temperatura ocurre.

La entalpía es definida como:

$$H = U + PV \quad (2.51)$$

Donde P es la presión y V el volumen. En base por unidad de masa la Ecuación 2.51 queda:

$$H^* = U^* + \frac{P}{\delta} \quad (2.52)$$

Una expresión para el trabajo es:

$$W = \sum_K Q_K P_K \quad (2.53)$$

Sustituyendo la Ecuación 2.53 en la Ecuación 2.50, y despreciando KE y PE:

$$\frac{dU}{dt} = -\sum_K \delta_K Q_K \left(U_K^* + \frac{P_K}{\delta_K} \right) - H_{ext} \quad (2.54)$$

Sustituyendo definiciones de entalpía y entalpía específica en la Ecuación 2.54:

$$\frac{dH}{dt} - \frac{d(PV)}{dt} = -\sum_K \delta_K Q_K H_K^*(T_K) - H_{ext} \quad (2.55)$$

Nótese que el término $d(PV)/dt$ es despreciable para cristalización por enfriamiento, debido a que es insignificante para sistemas líquidos, por lo tanto la Ecuación 2.55 se transforma:

$$\frac{dH}{dt} = -\sum_K \delta_K Q_K H_K^*(T_K) - H_{ext} \quad (2.56)$$

Para expresar el balance de energía en términos de temperatura, la siguiente expresión puede ser usada para relacionar la temperatura inicial del cristalizador:

$$H_K^*(T_K) = H_K^*(T_0) + \int_{T_0}^{T_K} C_{p_K} dT \quad (2.57)$$

Donde $H_K^*(T_K)$ es la entalpía específica de la corriente K^{th} evaluada a la temperatura inicial del cristalizador.

Haciendo C_{p_K} independiente de la temperatura (suposición válida para rangos de temperatura pequeños), y sustituyendo la Ecuación 2.57 en la Ecuación 2.56:

$$\frac{dH}{dt} = -\sum_K \delta_K Q_K C_{p_K} (T_K - T_0) - \sum_K \delta_K Q_K H_K^*(T_0) - H_{\text{ext}} \quad (2.58)$$

Nótese que H es función de la composición y temperatura, y usando la definición de la capacidad calorífica ($\delta C_p V = \partial H / \partial T$):

$$\frac{dH}{dt} = \delta V C_p \frac{dT}{dt} + \sum_i H_i \frac{dn_i}{dt} \quad (2.59)$$

Donde H_i es la entalpía molar parcial del componente i^{th} en el cristalizador y n_i es el número de moles del componente i^{th} .

Usando el balance de masa para definir n_i en términos de concentraciones y sustituyendo la Ecuación 2.59 en la Ecuación 2.58 y simplificando obtenemos:

$$\delta V C_p \frac{dT}{dt} = -\sum_K \delta_K Q_K C_{p_K} (T_K - T_0) - \Delta H' R' - H_{\text{ext}} \quad (2.60)$$

Donde R' es la velocidad de transferencia entre la fase sólida y líquida y $\Delta H'$ es el cambio de entalpía debido al cambio de fase (Calor de cristalización o disolución) donde $\Delta H'$ es negativo para cambios exotérmicos. Supondremos que el calor de cristalización es igual al calor de dilución pero con signo diferente. Esta expresión también requiere la suposición de que la contribución de la diferencia entre

la entalpía molar de una especie a una temperatura dada en dos mezclas diferentes es despreciable con respecto a los otros términos.

Para un cristalizador batch la Ecuación 2.60 se reduce:

$$\delta V C_p \frac{dT}{dt} = -\Delta H' R' - H_{ext} \quad (2.61)$$

Donde:

H_{ext} = Calor neto removido o adicionado (sistema de enfriamiento, sistema de calentamiento, perdidas por los alrededores y entradas por mezclado (en nuestro caso no hay)).

δ = Densidad de la suspensión.

C_p = Capacidad calorífica de la suspensión.

Para nuestro caso:

$$H_{ext} = U_0 A_0 (T - Tr) \quad (2.62)$$

Donde:

U_0 = Coeficiente global de transferencia del sistema al medio de enfriamiento.

A_0 = Área de transferencia del sistema al medio de enfriamiento.

T = Temperatura de la suspensión.

Tr = Temperatura del medio de enfriamiento

Sustituyendo la Ecuación 2.62 y 2.38 en 2.61, se llega a la siguiente expresión:

$$\delta V C_p \frac{dT}{dt} = -\Delta H' \left[\delta_c K_v V \left(3 \int_0^\infty G' n L^2 dL + B^0 L_0^3 \right) \right] - U_0 A_0 (T - Tr) \quad (2.63)$$

Como la masa de la producción de cristales es muy pequeña en comparación con la masa de la solución saturada (para nuestro caso 3.74% de la masa original de cristales) se considerara que la capacidad calorífica de mezcla es igual a la de la

solución saturada:

$$\delta V C_p = (M_{TC} + M_L) * C_p = M_p = M_{T0} C_p \quad (2.64)$$

$$M_L = M_S + M_{SL} \quad (2.65)$$

Donde:

M_{T0} = Masa total inicial (sulfato y agua) = 3580 gr

M_{TC} = Masa total de cristales en la suspensión.

C_p = Capacidad calorífica de la mezcla.

M_L = Masa de la fase líquida libre de sólidos.

M_{SL} = Masa del solvente (constante en nuestro caso).

Haciendo algunos arreglos a la Ecuación 2.63 y sustituyendo la Ecuación 2.64:

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{\Delta H'}{M_p} \delta_c K_v V \left(3 \int_0^\infty G' n L^2 dL + B^0 L_0^3 \right) - \frac{U_0 A_0}{M_p} (T - T_r) \quad (2.66)$$

Con la condición inicial: $t = 0 \rightarrow T(0) = T_0$ (2.67)

La Ecuación 2.66 queda:

$$\frac{dT}{dt} = -\frac{\Delta H_c}{M_p} \delta_c K_v V \left(3 \int_0^\infty G n L^2 dL + B^0 L_0^3 \right) - \frac{U_0 A_0}{M_p} (T - T_r) \quad (2.68)$$

El peso de cada partícula se relaciona al cubo con la siguiente ecuación:

$$m_p = \delta_c K_v L^3 = \delta_c \frac{1}{6} \pi L^3 \quad (2.69)$$

Para una esfera $K_v = 1/6 \pi$, que es el caso del Master Sizer. Si fuera un cubo la partícula sólida el valor de K_v sería de la unidad. Para nuestro caso la forma del

crystal es rómbica por lo que K_v cambiaría, pero los datos experimentales están basados en una esfera, así que se usara K_v de una esfera.

Para el balance de energía del fluido dentro de la chaqueta del cristizador y considerando que las propiedades del agua no cambian drásticamente en el rango de temperatura que se maneja de 30 a 40 grados Celsius, tenemos:

$$\delta_a V_a C_{p_a} \frac{dTr}{dt} = F_a \delta_a C_{p_a} (Tr_0 - Tr) + U_0 A_0 (T - Tr) - U_{0A} A_{0A} (Tr - T_{aire}) \quad (2.70)$$

Donde:

δ_a = Densidad del agua

V_a = Volumen que ocupa la chaqueta de agua = 820 mL

C_{p_a} = Capacidad calorífica del agua

F_a = Flujo del agua que entra a la chaqueta = cte = 7447 mL/min.

Tr_0 = Temperatura del agua al entrar a la chaqueta

T = Temperatura dentro del cristizador

U_{0A} = Coeficiente global de transferencia de calor para el sistema agua-aire

A_{0A} = Área de transferencia para el sistema agua-aire

T_{aire} = Temperatura del aire

Para el cálculo de los coeficientes globales de transferencia de calor por el área se utilizaron los valores encontrados experimentalmente por Salcedo en el 2000:

$$U_0 A_0 = 0.0337 RPM + 199.58 \quad (2.71)$$

Donde:

RPM = Revoluciones por minuto del agitador.

$$U_{0A} A_{0A} = 0.0 \quad (2.72)$$

Se utilizara el valor de $U_0 A_0$ para evitar el error al calcular A_0 . Como el valor de la Ecuación 2.72 es nulo, el último término de la Ecuación 2.70 se anulara también,

quedándonos:

$$\delta_a V_a C_{p_a} \frac{dTr}{dt} = F_a \delta_a C_{p_a} (Tr_0 - Tr) + U_0 A_0 (T - Tr) \quad (2.73)$$

Con la condición inicial: $Tr(0) = Tr_0$ (2.74)

2.2 SIMULADORES COMERCIALES

Los simuladores comerciales son muy utilizados por los grandes beneficios que proporcionan, en ingeniería química el utilizar un simulador nos ayuda disminuir tiempos y costos al no tener que hacer el proceso en planta para mejorar el rendimiento de la misma o crear una nueva, a nivel universitario el tener un simulador nos dará una idea mas clara de cómo son los procesos y el diseño de una planta.

Los simuladores de procesos están compuestos por bancos de datos, modelos de propiedades físicas y modelos de dimensionamiento y operación de equipos. Los extensos bancos de datos contienen información acerca de constantes y propiedades termofísicas y de transporte para cientos de sustancias, equipos medidas de beneficio, costo de operación y capital. Los simuladores contienen muchos modelos de reactores y operaciones unitarias que pueden ser usados para calcular, los balances de materia y energía. Otros modelos calculan propiedades de mezclas, dimensionan equipos entre otros muchos cálculos. Consecuentemente los simuladores de procesos son usados para llevar a cabo muchos tipos de cálculos a lo largo del diseño de un proceso.

Existen cuatro simuladores que son los principalmente usados en la industria química en la actualidad. Estos son:

1. ASPE N PLUS Y DYNAPLUS (Aspen Technology, Inc)
2. HYSYS (HYPROTECH Ltd.)
3. PRO/II (Simulation Sciences, Inc)
4. CHEMCAD (ChemStations, Inc)

Son simuladores muy poderosos con una gran cantidad de ventajas, la

principal sería el minimizar el tiempo necesario para realizar cálculos; más aun, minimizar las fuentes de error humano, generando de este modo resultados mas precisos, que permiten al ingeniero preocuparse de otras tareas tales como el análisis de datos, y modificación de condiciones de operación que le permitan tener un conocimiento mas profundo de lo que sucede en el proceso.

Por ello resulta de gran importancia que los estudiantes de ingeniería química se familiaricen con el uso de simuladores, de tal modo que puedan hacer un uso más efectivo y sacar el máximo provecho de estas poderosas herramientas.

Pero la gran desventaja es su alto costo de adquisición, ya que aunque las universidades obtienen las licencias a un costo más bajo que las industrias, este sigue siendo alto, por lo que no pueden estar al alcance de cualquier persona.

Por ejemplo diez licencias de Hysys para una universidad tienen un costo alrededor de \$6000dls y su renovación tiene un costo de \$2500dls, mientras que quince licencias de ASPEN PLUS tienen un costo de \$6000dls y su renovación aproximadamente \$1200dls.

En el caso del CHEMCAD estos serian los costos de las licencias que se tienen actualmente, mostrados en la tabla 2.1:

Tabla 2.1 Costo por tener acceso a CHEMCAD

RENTA	COSTO
1 AÑO	\$2115dls
3 AÑOS	\$4125dls
5 AÑOS	\$5125dls

Por lo cual al considerar estos inconvenientes, se cae en la cuenta que los estudiantes al empezar a hacer uso de los simuladores deben de contar con un conocimiento previo que les permita aprovecharlos al máximo.

Es por esta razón que es recomendable ser capaces de desarrollar nuestro

propio software, de tal modo que se pueda comprender con claridad, el tipo de procedimientos y algoritmos que lleva a cabo un simulador.

CAPITULO 3

DESARROLLO

En el siguiente apartado se muestra el procedimiento que se llevo a cabo para realizar el simulador, empezando con el modelo matemático del mismo, la solución del modelo para que quede en forma de ecuaciones diferenciales, como fueron introducidas y resueltas todas ellas en simulink y el manejo del simulador.

3.1 MODELO MATEMATICO PARA EL CRISTALIZADOR TIPO BATCH POR ENFRIAMIENTO

En la Figura 3.1 se muestra el esquema de un cristalizador tipo batch por enfriamiento sin reacción química ni sembrado o disolución de finos, con las variables que intervienen para la solución de su modelo matemático.

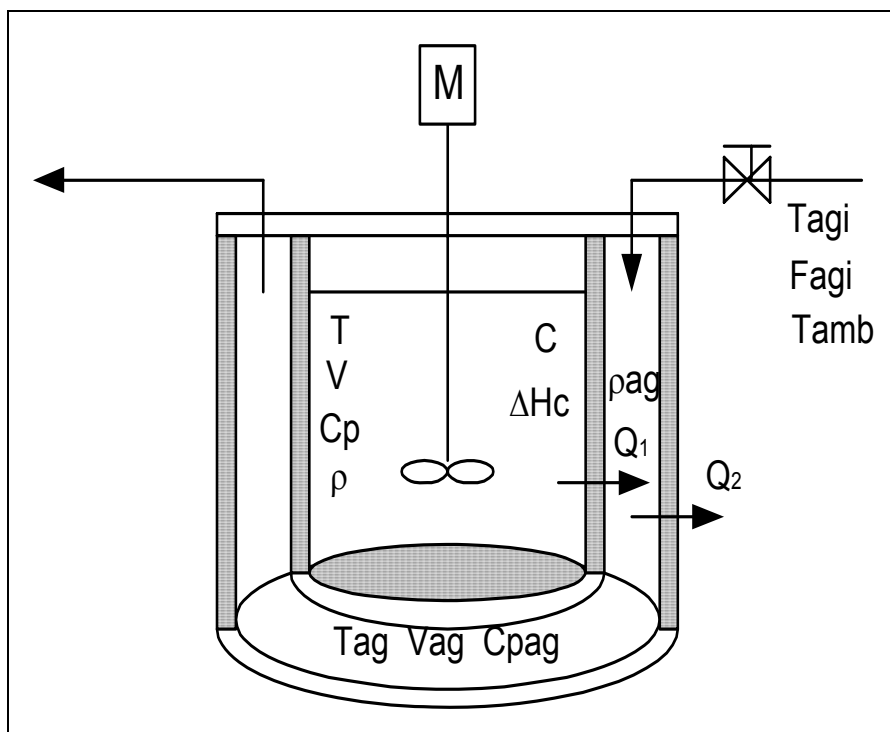


Figura 3.1 Cristalizador tipo batch por enfriamiento

El modelo matemático usado es el siguiente:

Balance de Masa

$$\frac{d(\widehat{C})}{dt} = -\rho_c K_v h \left[3 \int_0^{\infty} G n L^2 dL + B^0 L_0^3 \right] \quad (3.1)$$

Con la condición inicial:

$$\widehat{C}(t) = \widehat{C}_0 \quad \text{a } t = 0 \quad (3.2)$$

Balance de Energía

- Para el Cristalizador

$$\rho V C_p \frac{dT}{dt} = -\Delta H_c \rho_c K_v V \left[3 \int_0^{\infty} G n L^2 dL + B^0 L_0^3 \right] - U_{G1} A_{T1} (T - T_{ag}) \quad (3.3)$$

Con la condición inicial:

$$T(t) = T_0 \quad \text{a } t = 0 \quad (3.4)$$

- Para la Chaqueta de enfriamiento

$$\rho_{ag} C_{p_{ag}} V_{ag} \frac{d(T_{ag})}{dt} = \rho_{ag} F_{agi} C_{p_{ag}} (T_{agi} - T_{ag}) + U_{G1} A_{T1} (T - T_{ag}) + U_{G2} A_{T2} (T_{amb} - T_{ag}) \quad (3.5)$$

Con la condición inicial:

$$T_{ag}(t) = T_{ago} \quad \text{a } t = 0 \quad (3.6)$$

Balance de Población

$$\frac{\partial(nV)}{\partial t} + V \frac{\partial(Gn)}{\partial L} = V(\alpha(L)) \quad (3.7)$$

Donde:

$$\alpha(L) = B_e + B_c + B_a - D(L) \quad (3.8)$$

Con la condición frontera:

$$n(L_0, t) = \frac{B^o}{G_{L=L_0}} \quad \text{a } L = 0 \quad (3.9)$$

La condición inicial:

$$n(L, t) = n_0(L, 0) \quad \text{a } t=0 \quad (3.10)$$

Relaciones consecutivas

- Velocidad de nucleación

$$B^o = K_b Sr^b M_T^j N_r^p \quad (3.11)$$

- Velocidad de crecimiento

$$G = K_g Sr^g N_r^q \quad (3.12)$$

- Velocidad de producción – reducción

$$\alpha(L) = B_e + B_c + B_a - D(L) = K_a Sr^a M_T^k N_r^r FTM \quad (3.13)$$

Donde:

$$M_T = \rho_c K_v \mu_3(t) \quad (3.14)$$

$$\mu_3(t) = \int_0^{\infty} nL^3 dL \quad (3.15)$$

$$FTM = \Delta L \left(\frac{n_i}{n_0} \right) * 1000 \quad (3.16)$$

3.2 Solución del Modelo Matemático

El modelo matemático para el cristalizador tipo batch por enfriamiento, consiste de una serie de ecuaciones integro-diferenciales no lineales. El balance de población es una ecuación diferencial parcial hiperbólica. La solución analítica del modelo no lineal de interés no existe y aunque algunas ecuaciones pueden ser tratadas con modelos lineales, la solución del modelo completo requiere ser obtenida numéricamente (Rawlings et al., 1993).

Para la solución del modelo se han utilizado diferentes esquemas numéricos para resolver la no-linealidad del balance de población. En la literatura se han propuesto muchos esquemas para aproximar las ecuaciones resultantes a un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias. Los métodos más efectivos pueden ser divididos en esquemas de discretización y esquemas basados en la aproximación por polinomios de la función de densidad de población. En este último grupo se encuentran métodos como colocación ortogonal, el método de momentos y el método de características. Una descripción de estos métodos es realizada por Miller (1993) y Jager et al. (1991).

En la investigación hecha por Salcedo (2000), en la cual por medio de la determinación experimental de la distribución de tamaño de cristal, perfil de temperatura y de concentración, se obtiene la solución real del balance de población, incluyendo los resultados optimizados para las ecuaciones cinéticas de nucleación y crecimiento. Se emplea el método de líneas, el cual fue utilizado por Tsuruoka y Randolph (1987) en un cristalizador continuo con disolución de finos y está basado en la discretización del balance de población. Las ventajas de este método consisten en que es posible la recuperación de la DTC (Cuellar, 1994), disminuye el tiempo empleado por la computadora para efectuar los cálculos (Mejía, 1999) y la

optimización de los parámetros de las relaciones constitutivas es factible. Además, las ecuaciones discretizadas pueden ser usadas para el diseño de un control digital del proceso.

El método de líneas es una técnica conveniente para aproximar la solución de problemas de valor inicial en ecuaciones diferenciales ordinarias lineales y no lineales. El método consiste en conservar el término del tiempo continuo y discretizar el término espacial, para reducir la ecuación diferencial parcial en un conjunto de ecuaciones diferenciales ordinarias (EDO) (Vemuri y Karplus 1980). En el caso de la cristalización, la coordenada espacial corresponde a la longitud característica del cristal. Hay dos aspectos cruciales del método de líneas que determinan el éxito del método (Hyman 1976). El primero se refiere a la selección del método usado para aproximar la derivada espacial (orden de discretización) y la forma de manejar las condiciones frontera. El segundo involucra a la selección del método usado para resolver los EDOs resultantes. Cuéllar (1994) menciona que un incremento en el número de divisiones espaciales incrementa la precisión, pero también incrementa la rigidez de la ecuación, requiriéndose un tamaño de paso de integración menor. Debido a lo anterior, se empleó una discretización central de cuarto orden para el término espacial en el balance de población y un tamaño de paso pequeño (0.125 minutos) para la solución del sistema de EDOs.

Discretización del Termino Espacial de la Ecuación Diferencial Parcial

Partiendo de la ecuación del balance de población:

$$\frac{\partial(nV)}{\partial t} + V \frac{\partial(Gn)}{\partial L} = V(\alpha(L)) \quad (3.17)$$

Donde la velocidad de crecimiento se ha considerado independiente del tamaño de cristal, el término espacial es discretizado usando 5 puntos para obtener una ecuación de diferencias finitas centrales de cuarto orden (Constantinides, 1987):

$$\frac{\partial n_{i,j+1}}{\partial L} = \frac{n_{i-2,j} - 8n_{i-1,j} + 8n_{i+1,j} - n_{i+2,j}}{12\delta} + O(h^4) \quad (3.18)$$

Donde:

$$\delta = L_{i+1} - L_i = \Delta L \quad (3.19)$$

El subíndice i se refiere a las coordenadas del tamaño del cristal y el subíndice j se refiere a las coordenadas del tiempo (ver Figura 3.2). La Ecuación 3.18 es aplicable a todos los puntos de la red, excepto aquellos que están a una malla de la frontera y los que están sobre las fronteras. Este problema es rectificado por medio de dos puntos ficticios fuera de cada frontera de la red en la dirección de L y usando una formula de extrapolación cúbica. Considerando que n_0 y n_L son las fronteras para el mínimo y máximo valor de L , respectivamente, los puntos ficticios quedan definidos de la siguiente forma:

$$n_{0-2} = 4n_{0-1} - 6n_0 + 4n_1 - n_2 \quad (3.20)$$

$$n_{0-1} = 4n_0 - 6n_1 + 4n_2 - n_3 \quad (3.21)$$

$$n_{L+1} = 4n_L - 6n_{L-1} + 4n_{L-2} - n_{L-3} \quad (3.22)$$

$$n_{L+2} = 4n_{L+1} - 6n_L + 4n_{L-1} - n_{L-2} \quad (3.23)$$

Sustituyendo la Ecuación 3.20 y 3.21 en la Ecuación 3.18 para el punto n_0 , se obtiene:

$$\frac{\partial n_{0,j+1}}{\partial L} = \frac{-22n_{0,j} + 36n_{1,j} - 18n_{2,j} + 4n_{3,j}}{12\delta} + O(h^4) \quad (3.24)$$

Sustituyendo la Ecuación 3.21 en la Ecuación 3.18 para el punto n_1 , se obtiene:

$$\frac{\partial n_{1,j+1}}{\partial L} = \frac{-4n_{0,j} - 6n_{1,j} + 12n_{2,j} - 2n_{3,j}}{12\delta} + O(h^4) \quad (3.25)$$

Sustituyendo la Ecuación 3.22 en la Ecuación 3.18 para el punto $n_{L_{\max-1}}$, se obtiene:

$$\frac{\partial n_{L_{\max-1},j+1}}{\partial L} = \frac{4n_{L,j} + 6n_{L-1,j} - 12n_{L-2,j} + 2n_{L-3,j}}{12\delta} + O(h^4) \quad (3.26)$$

Sustituyendo la Ecuación 3.22 y 3.23 en la Ecuación 3.18 para el punto $n_{L_{\max}}$, se obtiene:

$$\frac{\partial n_{L_{\max},j+1}}{\partial L} = \frac{22n_{L,j} - 36n_{L-1,j} + 18n_{L-2,j} - 4n_{L-3,j}}{12\delta} + O(h^4) \quad (3.27)$$

Finalmente, sustituyendo la Ecuación 3.18 en la 3.17 y considerando el volumen de suspensión constante, se obtiene el balance de población en su forma discreta:

$$\frac{dn_{i,j+1}}{dt} = -G_j \left[\frac{n_{i-2,j} - 8n_{i-1,j} + 8n_{i+1,j} - n_{i+2,j}}{12\delta} \right] + \alpha(L)_j \quad (3.28)$$

Con las excepciones para el término espacial en los puntos n_1 , $n_{L_{\max-1}}$ y $n_{L_{\max}}$, dadas por las Ecuaciones 3.25, 3.26 y 3.27. La Ecuación 3.24 no es considerada en su forma discreta para el punto n_0 , debido a que este punto está limitado por la condición frontera del balance de población:

$$L = L_0 \rightarrow n(L_0, t) = n_0 = \frac{B^0}{G|_{L_0}} \quad (3.29)$$

El balance de población discretizado también es expresado en la forma matriz-vector como a continuación se presenta:

$$\dot{\underline{n}}(t) = \underline{A}(t) \cdot \underline{n}(t) + \underline{\alpha}(t) \quad (3.30)$$

Donde el vector $\underline{n}(t)$ y $\underline{\alpha}(t)$ están dados por la Ecuación 3.31 y 3.32, respectivamente.

$$\underline{n}(t)^T = [n_1 \ n_2 \ n_3 \ n_4 \ \dots \ n_{L_{\max}}] \quad (3.31)$$

$$\underline{\alpha}(t)^T = [\alpha_1 \ \alpha_2 \ \alpha_3 \ \alpha_4 \ \dots \ \alpha_{t_{\max}}] \quad (3.32)$$

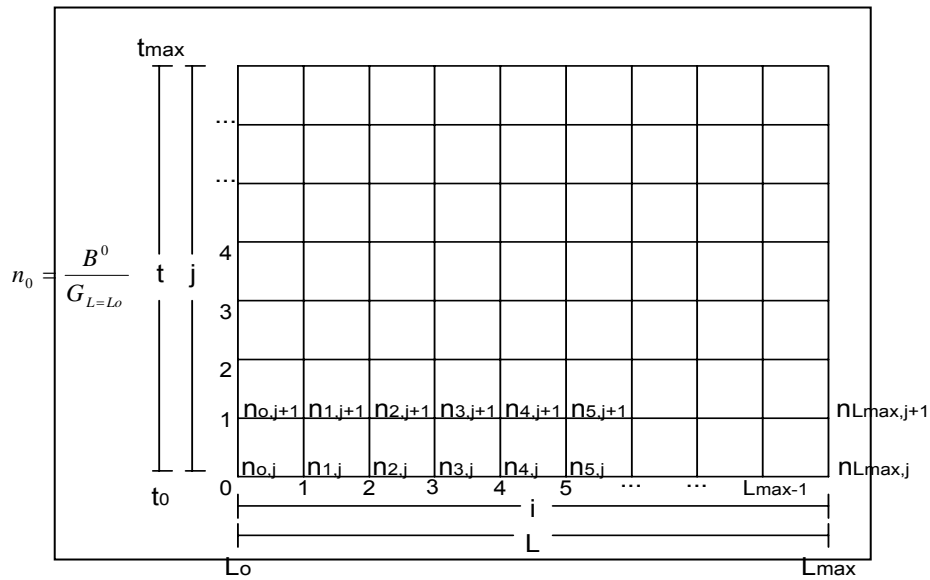


Figura 3.2 Red de puntos que caracteriza la discretización de la EDP

La Matriz A esta dada por la Ecuación 3.33, la cual no incluye el punto n_0 debido a que este punto está limitado por la condición frontera del balance de población.

Así, a partir de la solución simultánea del balance de población discretizado, las relaciones constitutivas, el balance de masa y el balance de energía, se obtiene la distribución de cristales a través del tiempo de proceso. En este trabajo, la coordenada del tamaño de cristal L tiene como condición frontera inicial el valor de 15.126 micras (L_0) y como condición frontera final el valor de 1999.875 micras (L_{\max}) con un incremento de tamaño de 20.25253 micras (δ). Lo anterior origina una red 98 subintervalos de L y hace que el balance de población discretizado, Ecuación 3.28, esté comprendido por 98 EDOs. Considerando que el balance de masa está dado

por una EDO y el balance de energía por dos, el sistema total de EDOs que se resuelve simultáneamente está formulado por 101 EDOs. El método de integración del sistema de EDOs utilizado en este trabajo es el de Runge-Kutta de 4° orden, debido a que utiliza un menor tiempo de computo con respecto a otros métodos y es capaz de reproducir la distribución de tamaño de cristal (Mejía, 1999).

$$\underline{A}(t) = \frac{-G}{12\delta} \begin{bmatrix} -4 & -6 & 12 & -2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 1 & -8 & 0 & -8 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & -8 & 0 & -8 & -1 & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & -8 & 0 & 8 & -1 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -2 & -12 & 6 & 4 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & -4 & 18 & -36 & 22 \end{bmatrix} \quad (3.33)$$

3.3 PROCEDIMIENTO PARA LA SOLUCIÓN DEL MODELO

El procedimiento para la solución del modelo matemático en forma discreta esta conformado por 101 EDO's. y requiere de las condiciones iniciales para la DTC (No. de part/cm³ licor cm), temperatura del cristalizador (°C), temperatura del agua de enfriamiento (°C) y la concentración en el cristalizador (gr de soluto/gr de solvente) todas las condiciones iniciales cambian de acuerdo a la solución que se este manejando, en nuestro caso utilizaremos como datos iniciales los obtenidos por Salcedo, 2000 para el sulfato de amonio. El sistema de EDO's se resuelve mediante el método de Runge Kutta de 4to orden y se utilizan parámetros de ajuste. Finalmente se comparan los resultados obtenidos del simulador, con los resultados experimentales y teóricos obtenidos por Salcedo, 2000.

A continuación se muestran las ecuaciones necesarias para realizar el simulador.

1. Se definen la temperatura del cristalizador T(°C), la temperatura inicial del agua de enfriamiento TAGI(°C), la concentración inicial C(gr de sulfato/gr de agua) y la velocidad de agitación (rpm).

2. Se introducen los valores iniciales de número de partículas distribuidos en forma espacial en cm, así como L y las constantes cinéticas en función de las revoluciones por minuto.

3. Subrutina de momentos

➤ Calculamos la función FM3 con la Ecuación 3.34.

Como tomaremos 5 momentos de distribución $j = 1, 2, 3, 4, 5$.

$$FM3 = nL^j \quad (3.34)$$

➤ Se separan en números pares e impares y se procede a obtener las sumatorias de S1 y S2.

Se suponen valores iniciales de S1 y S2 igual con cero para el inicio del ciclo.

$$S1 = S1 + FM3(i, j) \quad (3.35)$$

$$S2 = S2 + FM3(i+1, j) \quad (3.36)$$

➤ Se calculan los momentos de distribución.

$$AREA(j) = \left(\frac{HSIM}{3} \right) [4S1 + FM3(1, j) + 2S2 + FM3(99, j)] \quad (3.37)$$

4. Subrutina CONSTANTES

Esta subrutina calcula algunas de las propiedades físicas de la sustancia, como este va a ser un simulador general todas están cambiando de acuerdo con la solución que maneje el usuario.

➤ Calculando la concentración de saturación:

$$C_{sat} = \frac{(73.6 + 0.002T + 0.004T^2)}{100} \quad (3.38)$$

- Calcular la sobresaturación relativa.

$$S_R = \frac{(C - C_{sat})}{C_{sat}} \quad (3.39)$$

- Capacidad calorífica (cambia dependiendo la sustancia)

$$CP = 3.95(T^{-0.5042}) \quad (3.40)$$

5. Subrutina PROPIEDADES

- Calculamos la forma del cristal.

$$AKV = \frac{\pi}{6} \quad (3.41)$$

- Masa total de sólidos por volumen de licor:

$$AMT = DENSC * AKV * AMOM3 \quad (3.42)$$

- Masa total de cristales formados.

$$AMCF = AMT(2873.42) \quad (3.43)$$

- Calcular el coeficiente de transferencia (cambia dependiendo la sustancia).

$$UA1 = 0.0337 * RPM + 199.58 \quad (3.44)$$

- Calor de cristalización por masa (cambia dependiendo la sustancia).

$$DCH = -0.136 * T - 7.54 \quad (3.45)$$

6. Calculando las Propiedades Cinéticas

- Velocidad de nucleación.

$$B0 = kgS_R^b M_T^o RPM^p \quad (3.46)$$

- Velocidad de nucleación reducción.

$$\alpha = kaS_R^c AMT^k RPM^d \quad (3.47)$$

- Calculando la velocidad e crecimiento.

$$G = kgS_R^g RPM^h \quad (3.48)$$

7. Balance de población

- Con la condición frontera.

$$L = L_0 \rightarrow n(L_0, t) = \frac{B^0}{G|_{L_0}} \quad (3.49)$$

- Calculo de nT.

La ' i ' significa el numero de veces que se realizara el ciclo en este caso es desde la partícula 2 hasta la 99.

- Para i=2:99

$$nT(1) = n0 + n1 \quad (3.50)$$

$$nT(i) = nT(i-1) + n(i) \quad (3.51)$$

- Para i=1

$$FN(i) = -\left(\frac{G}{(12\Delta L)}\right) * (-4n0) - (6n1) + (12n2) + (2n3) + \left(\alpha * \Delta L * \left(\frac{n1}{nT}\right) * 1000\right) \quad (3.52)$$

- Para i=2

$$FN(i) = -\left(\frac{G}{(12\Delta L)}\right) * (n0 - (8n1) + (8n3) - n4) + \left(\alpha * \Delta L * \left(\frac{n2}{nT}\right) * 1000\right) \quad (3.53)$$

- Para i=3-96

$$FN(i) = -\left(\frac{G}{(12\Delta L)}\right) * (n(i-2) - (8n(i-1)) + (8n(i+1)) - n(i+2)) + \left(\alpha * \Delta L * \left(\frac{n(i)}{nT}\right) * 1000\right) \quad (3.54)$$

- Para $i=97$

$$FN(97) = -\left(\frac{G}{(12\Delta L)}\right) * ((4n97) + (6n96) - (12n95) + (2n94)) + \left(\alpha * \Delta L * \left(\frac{n97}{nT}\right) * 1000\right) \quad (3.55)$$

- Para $i=98$

$$FN(98) = -\left(\frac{G}{(12\Delta L)}\right) * ((22n98) - (36n97) + (18n96) - (4n95)) + \left(\alpha * \Delta L * \left(\frac{n98}{nT}\right) * 1000\right) \quad (3.56)$$

8. Balance de energía en el cristalizador

- Masa total del sistema:

$$AMT = 1600 + AMAGUA \quad (3.57)$$

- Ecuación general del balance de energía en el cristalizador:

$$FN(99) = \frac{-(DCH * DENSC * AKV * VP * ((3 * G * AMOM2) + (B0 * AL0^3))) - (UA1 * (T - TAG))}{CP * AMT} \quad (3.58)$$

9. Balance de energía en el agua de enfriamiento

- Calcular la capacidad calorífica del agua:

$$CPAG = 7 \times 10^{-5} T + 0.9989 \quad (3.59)$$

- Densidad del agua:

$$DENSAG = 4 \times 10^{-6} T^2 - 6 \times 10^{-5} T + 1.001 \quad (3.60)$$

- Ecuación general del balance de energía en el agua de enfriamiento:

$$FN(100) = \left(\left(\frac{FAGI}{VAG} \right) * (TAGI - TAG) \right) + \left(\frac{(UA1 * (T - TAG))}{VAG * DENSAG * CPAG} \right) + \left(\frac{(UA2 * (TAMB - TAG))}{(VAG * DENSAG * CPAG)} \right) \quad (3.61)$$

10. Balance de Masa

- Calcular el factor de conversión h:

$$FCH = \frac{VP}{AMAGUA} \quad (3.62)$$

- Ecuación general del balance de masa:

$$FN(101) = -(DENSAG * AKV * FCH * (3 * G * AMOM2)) + (B0 * (AL0^3)) \quad (3.63)$$

3.4 CREACIÓN DEL SIMULADOR CON MATLAB Y SIMULINK

Para solucionar este modelo haremos uso de Matlab y sus toolboxes como son Simulink y el GUIDE, para así obtener un simulador que sea amigable cuando tenga que ser utilizado por el usuario.

1. Creamos una carpeta que contenga todos los archivos que estarán siendo utilizadas por el simulador, para ello haremos lo siguiente en la ventana principal de MATLAB, nos iremos al menú File→SetPath→Add with Subfolders→Buscar Carpeta. Aquí buscamos la carpeta en la cual queremos tener guardada nuestra información y le damos un nombre en este caso nova, le damos aceptar y save.

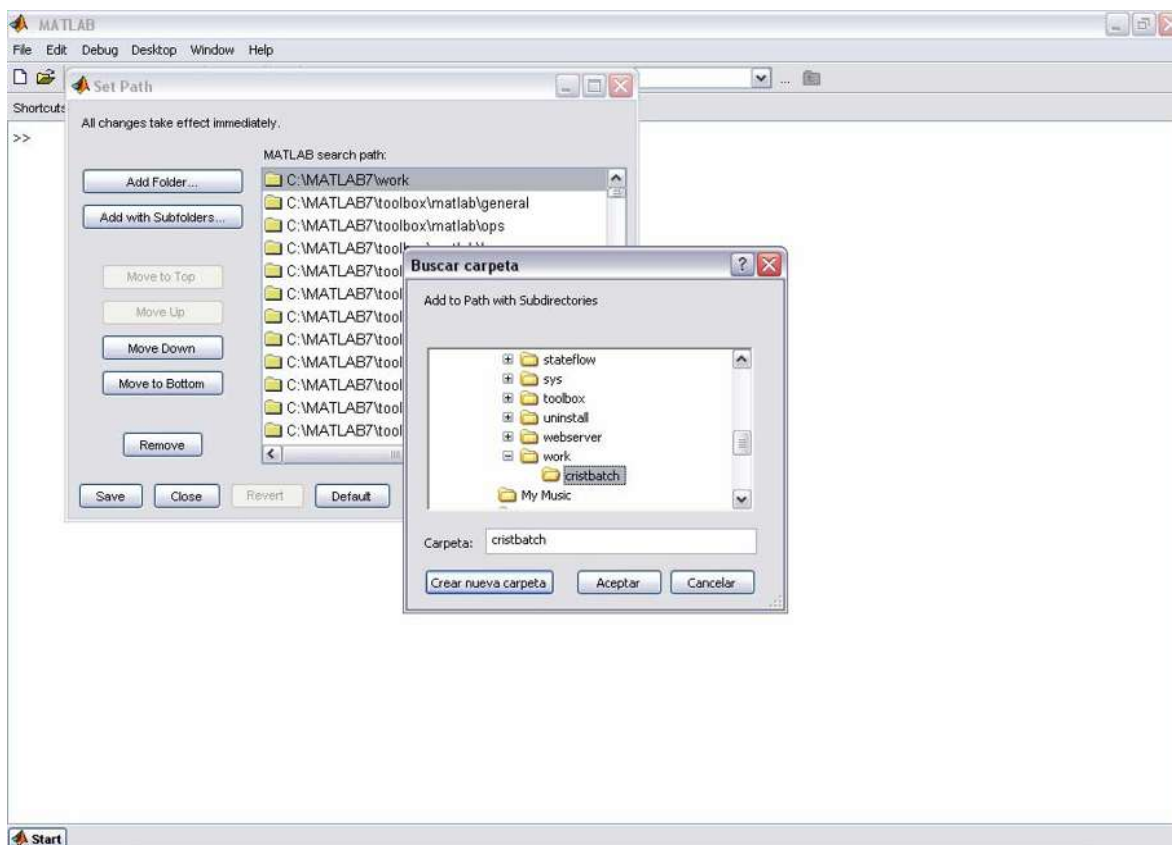


Figura 3.3 Ventana del Set Path en Matlab

2. El siguiente paso es obtener los datos iniciales como son el número de partículas (n), (L) y los valores de las constantes cinéticas que están en función de la velocidad de agitación, para ello utilizaremos el Import Wizard que encontraremos en Start→MATLAB→Import Wizard, en la Figura 3.4 se ilustra como seguir estos pasos.

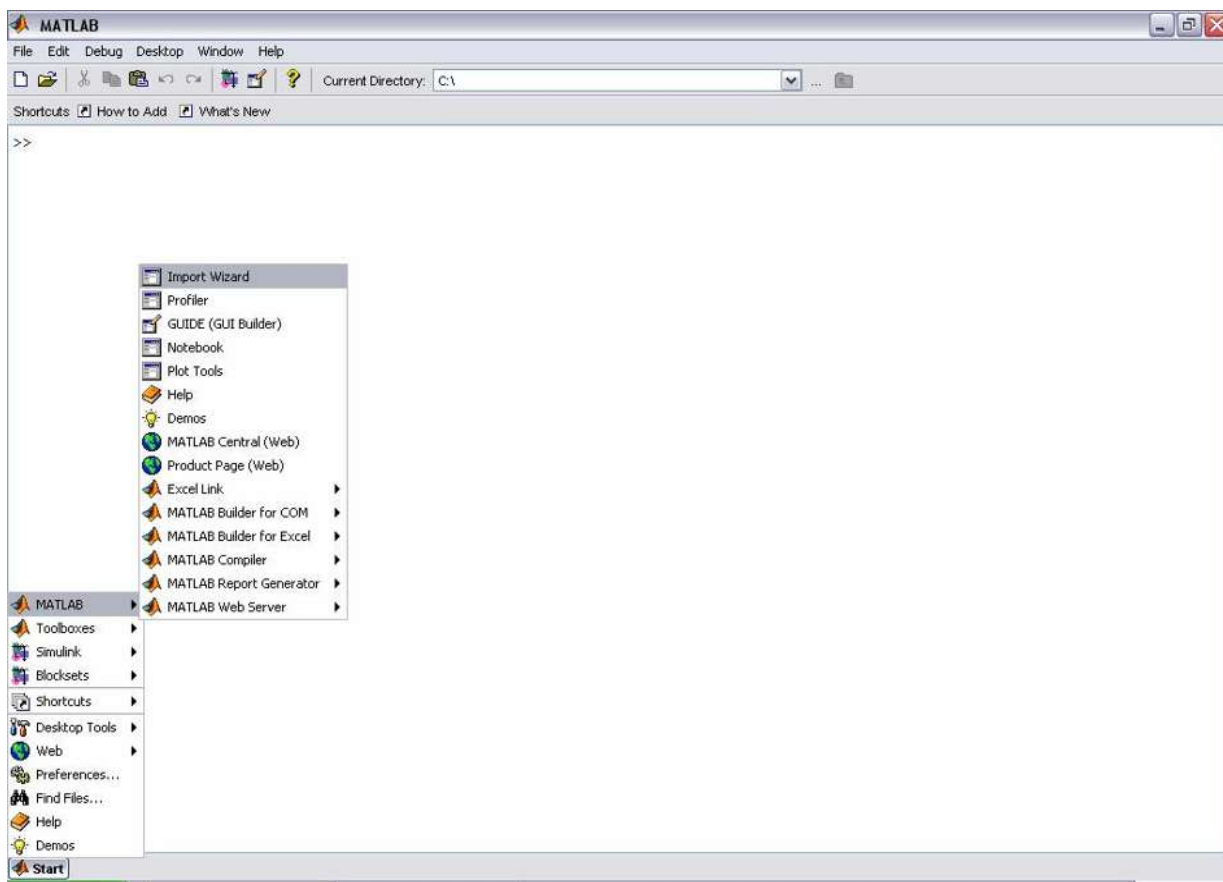


Figura 3.4 Ventana Start → Matlab → Import Wizard en Matlab

Haciendo doble click en Import Wizard nos abrirá la siguiente ventana (Figura 3.5):

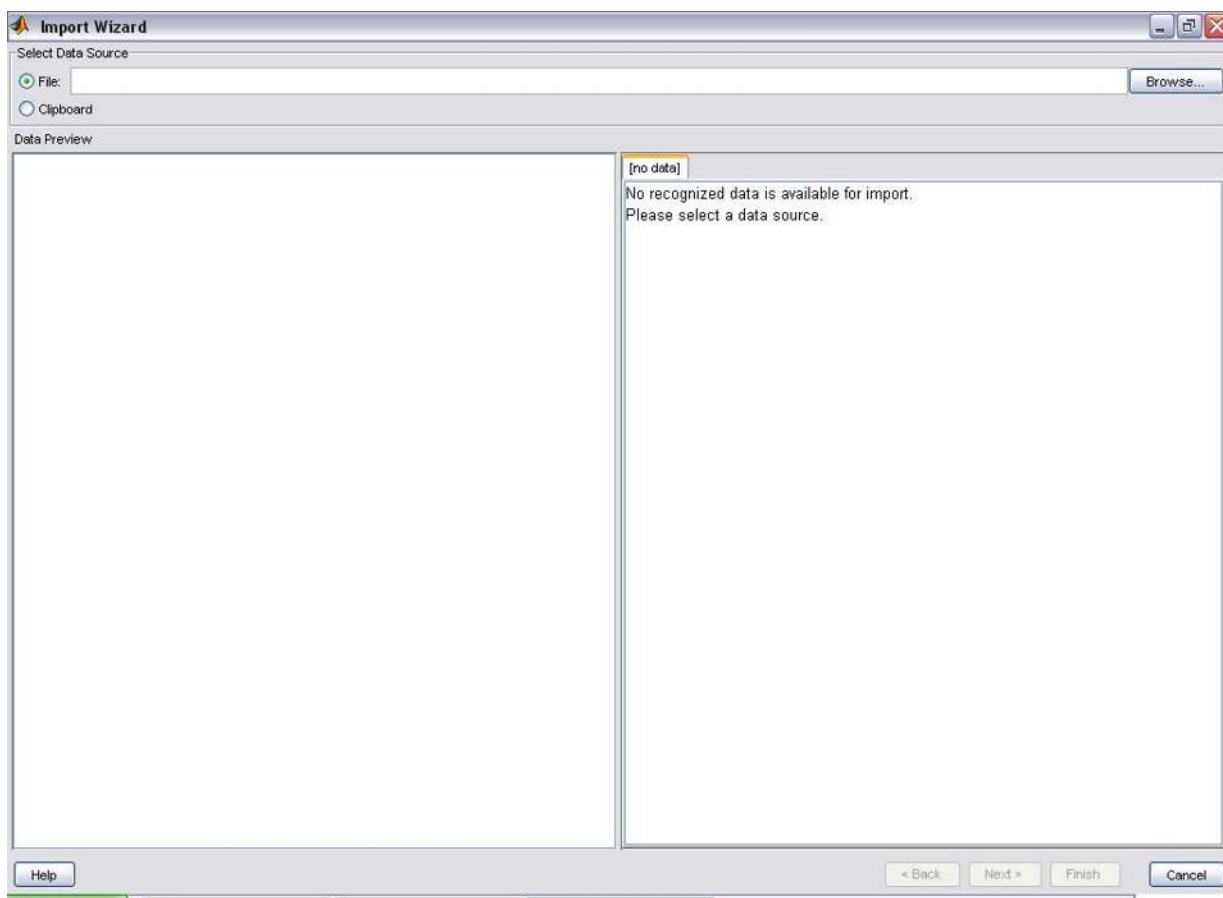


Figura 3.5 Ventana Import Wizard

Daremos un doble click en Browse para con esto nos mostrara una nueva ventana (Figura 3.6) que nos permite abrir el archivo que necesitemos desde una carpeta ya creada anteriormente.

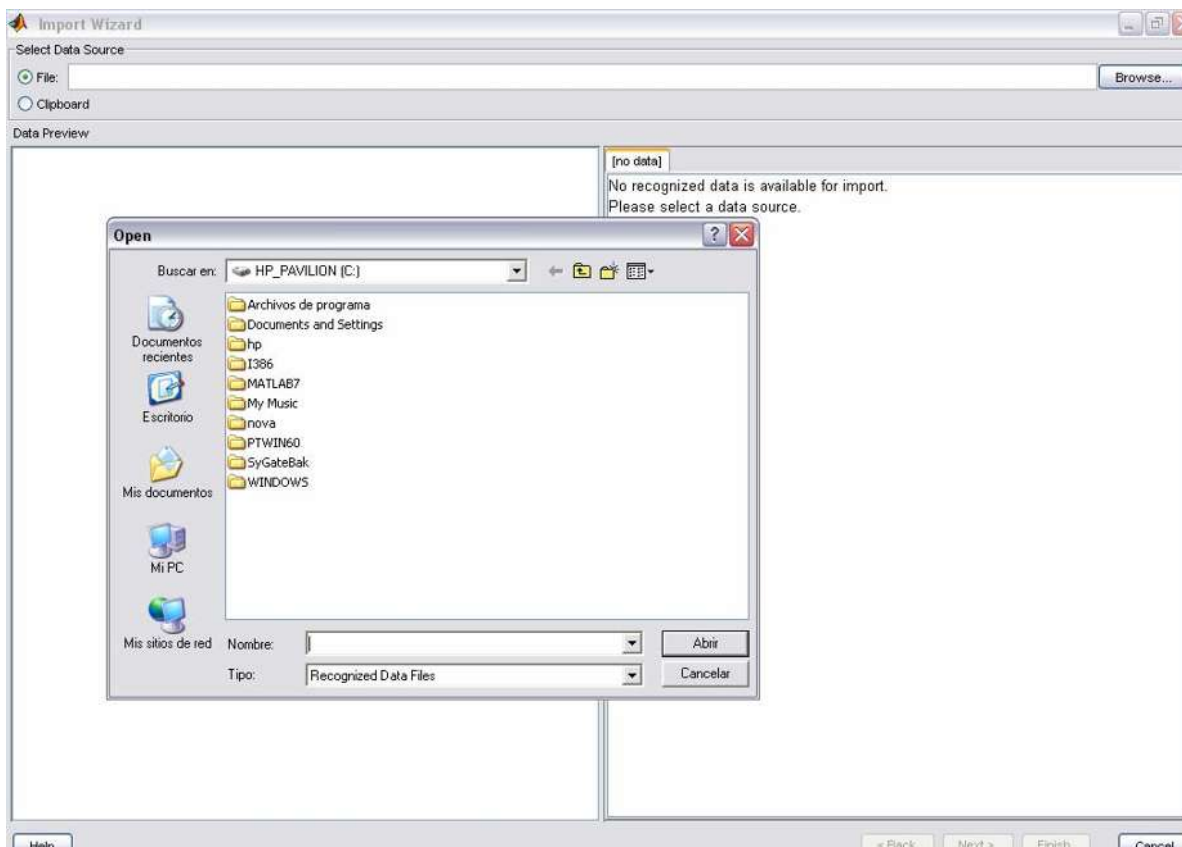


Figura 3.6 Ventana para abrir un archivo en Impor Wizard

Con esto cargaremos el archivo que necesitemos ya creado, buscando en la carpeta especificada y dando click en aceptar, enseguida en next y así obtendremos la tabla de datos para el momento que se necesiten. Esto se muestra en la Figura 3.7.

Así crearemos los archivos LongInitial, Population Inicial y Revolutions, necesarios para poder inicial la simulación y que cambian de acuerdo a las sustancia a utilizar.

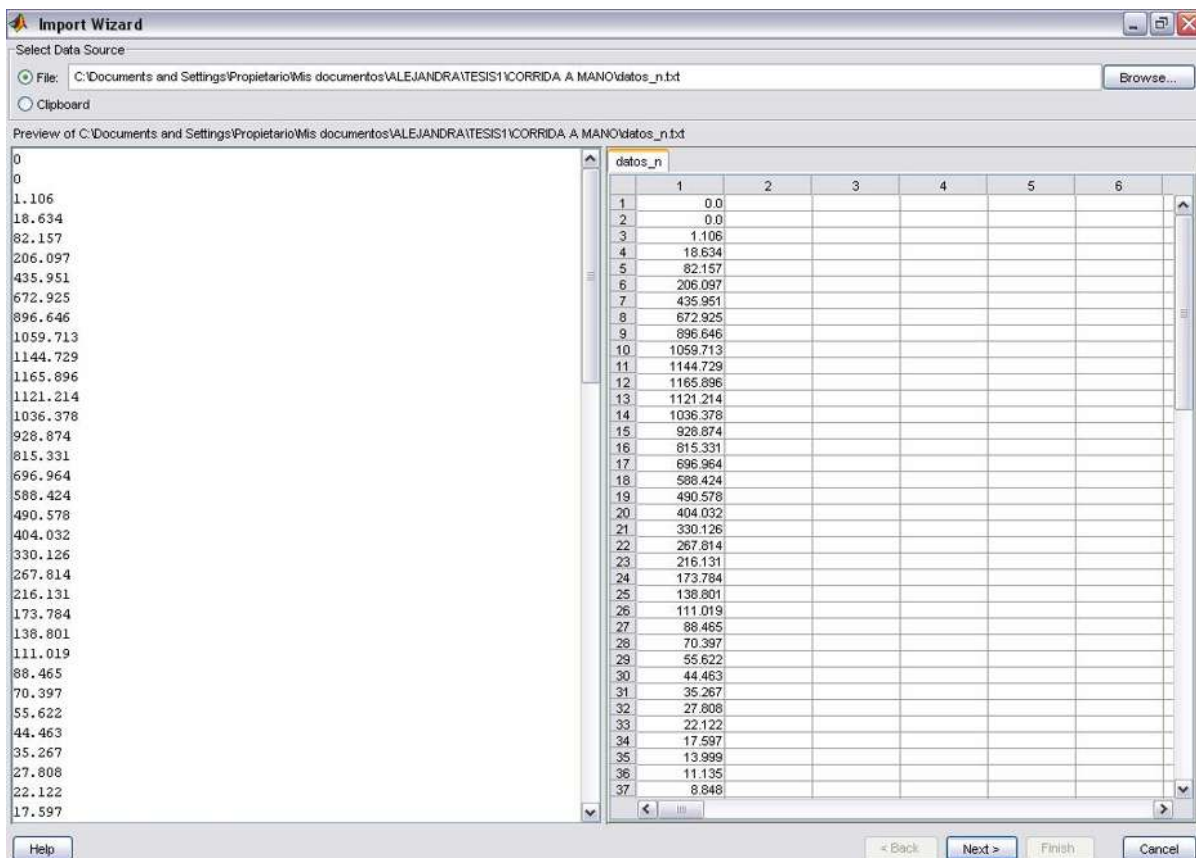


Figura 3.7 Ventana de los datos almacenados en el Workspace

3. Crearemos dos archivos en Simulik el primero llamado PROPIEDADES este nos ayudara a calcular algunas de las propiedades físicas de la sustancia como son la concentración de saturación, la sobresaturación relativa, el γ y la capacidad calorífica de la solución y por ultimo CONSTANTES, que calculara la masa de cristales formados, el factor de forma del Cristal y los coeficientes de transferencia de calor. Estos programas se pueden ver a detalle en el Apéndice B.2.
4. Después se crearan los archivos .m necesarios para calcular los balances de masa, energía en el cristalizador y en la chaqueta, de población, las relaciones consecutivas, etc. Mostrados en el Apéndice B.1.
5. A continuación se realiza la interfase grafica para que tenga un fácil manejo para el usuario y así mismo para englobar todos los subprogramas en un programa principal.

3.5 SIMULADOR DE UN CRISTALIZADOR TIPO BATCH POR ENFRIMIENTO

Esta será la pantalla que vera el usuario del simulador del cristalizador tipo batch por enfriamiento (Figura 3.8) realizada mediante las herramientas de software de MATLAB (archivos m-file, Simulink, y GUIDE).

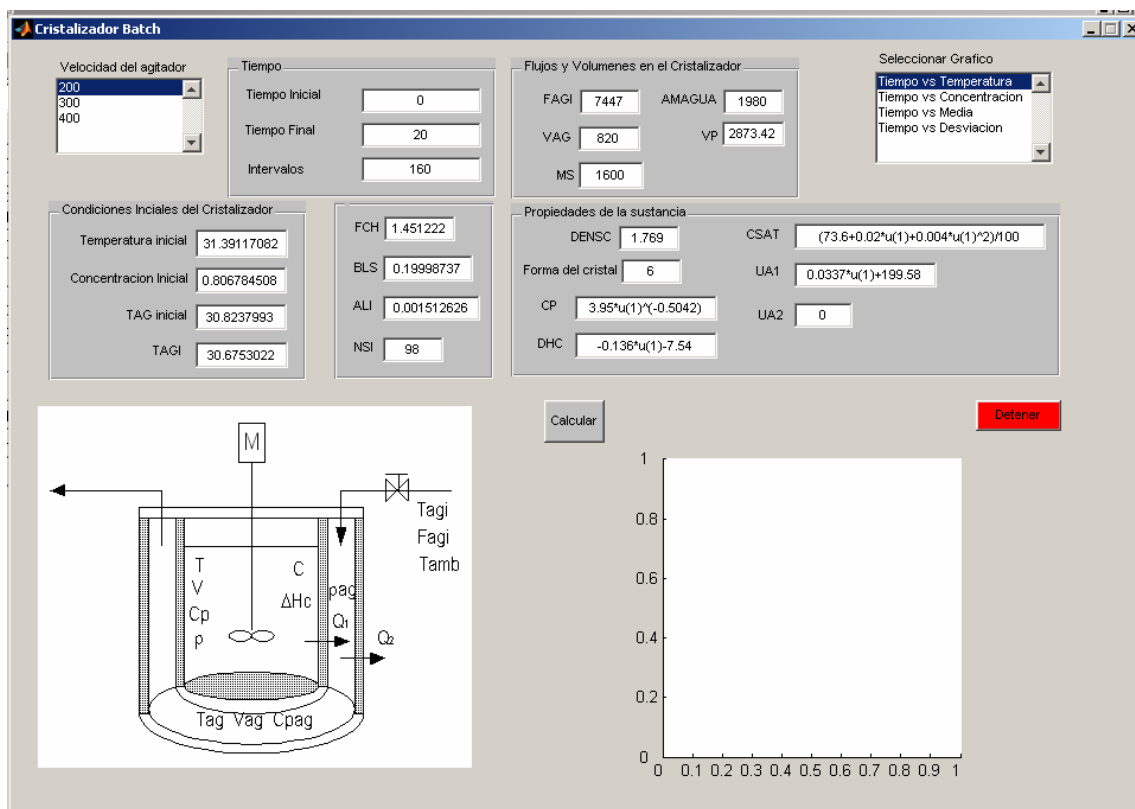


Figura 3.8 Interfaz Grafica del Cristalizador

Para manejar este simulador lo primero que necesitamos es tener las condiciones iniciales como la DTC, la densidad del cristal, así como algunas ecuaciones obtenidas en el laboratorio como son la Capacidad Calorífica de la solución, el porcentaje del sulfato de amonio disuelto. Y otros datos obtenidos de bibliografía tales como la densidad de saturación de la solución (en nuestro caso obtenida de Perry et al, 1992), capacidad calorífica del cristal (obtenida d Perry et al, 1992), la densidad del cristal (Perry et al, 1992) y el calor de cristalización (Mersmann, 1995). Todos estos datos cambian dependiendo de la sustancia a ser

cristalizada, y podrán ser cambiados dentro de la interfaz grafica haciendo doble clic en el string correspondiente o bien en el caso de la DTC y los valores de las constantes cinéticas, abriremos el archivo necesario en el workspace de matlab y editaremos la tabla con los valores iniciales

3.6 COMO MANEJAR EL SIMULADOR

A continuación se dará una guía para poder manejar el Simulador iniciando desde como abrir Matlab.

1. Lo primero que tenemos que hacer es encontrar el icono de acceso a Matlab y darle doble click con el ratón.



Figura 3.9 Icono de acceso a Matlab

2. Con esto accesaremos al espacio de trabajo de Matlab, ya estando dentro de Matlab proseguiremos a abrir el menú File→New→GUI, con esto nos abrirá una nueva ventana que se muestra en la Figura 3.10.

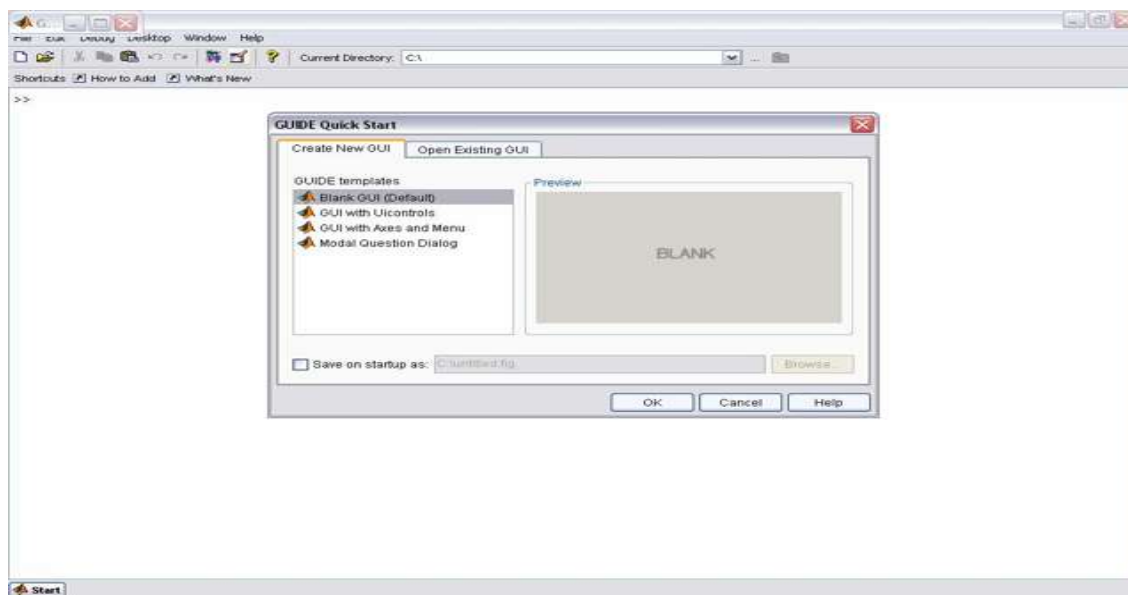


Figura 3.10 Ventana del menú GUIDE Quick Start

- En esta la Figura 3.10 encontraremos dos opciones el crear un nuevo modelo o el abrir un modelo ya existente (Open Existing GUI) daremos click en abrir un modelo ya existente el nombre del archivo será C:\nova\main.fig, lo seleccionaremos y daremos doble click en el botón open, con lo cual nos abrirá la ventana que se vera en la Figura 3.11.

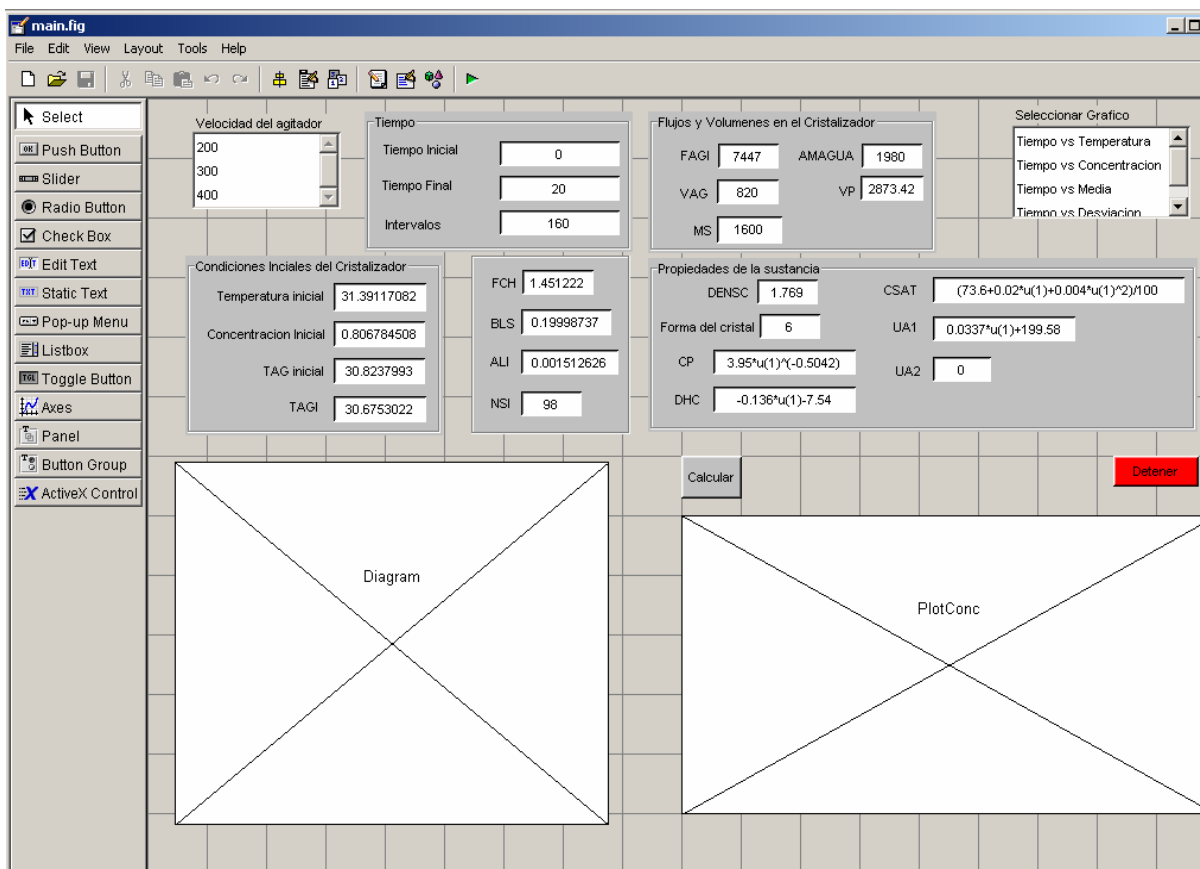


Figura 3.11 Ventana de la interfase grafica de main.fig

- Haciendo click en el botón run (correr programa).



Figura 3.12 Botón run

- Cuando corremos el programa accedamos a la siguiente ventana, mostrada en la Figura 3.13,

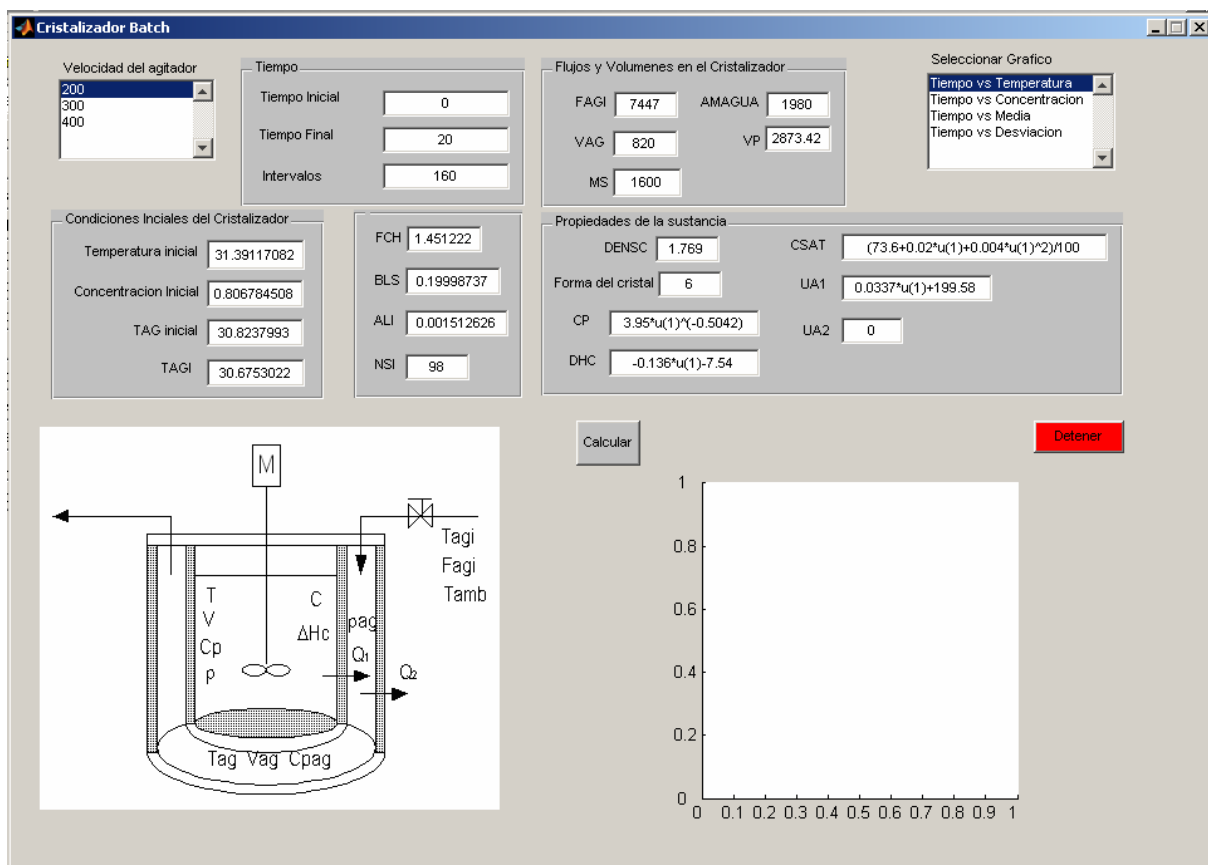


Figura 3.13 Ventana del simulador

6. Aquí se cambiarán los datos de T inicial, Concentración inicial, Temperatura del agua de enfriamiento, Temperatura de entrada del agua de enfriamiento, así como los tiempos inicial y final, las propiedades de la sustancia y los flujos y volúmenes de acuerdo al cristalizador utilizado.
7. En caso de que se haga un cambio de soluto, se tendrán que tener las condiciones iniciales de la DTC (Determinación de Tamaño de Cristal) que se cambiarán desde el workspace de Matlab, abriendo el archivo donde se encuentran guardados los valores iniciales de DTC para el sulfato de amonio de la siguiente manera:

Matlab → Desktop → Workspace → Load Data File → PopulationInitial → Abrir

Nos abrirá un cuadro de dialogo del cual tendremos que seguir paso a paso las indicaciones hasta que el archivo "PopulationInitial" se encuentre en el workspace de nuestra pantalla y entonces cambiar nuestros datos iniciales.

8. De la misma manera se tendrán que cambiar los parámetros cinéticos en caso de que tengamos un cambio de sustancia el archivo que los contiene estos datos fue llamado "Revolutions".
9. Ya que todos los datos con los cuales se quiera hacer la simulación se encuentren bien especificados se da doble click en el botón calcular y con esto se lleva a cabo la simulación. La figura 3.14 nos mostrara el resultado de la simulación.

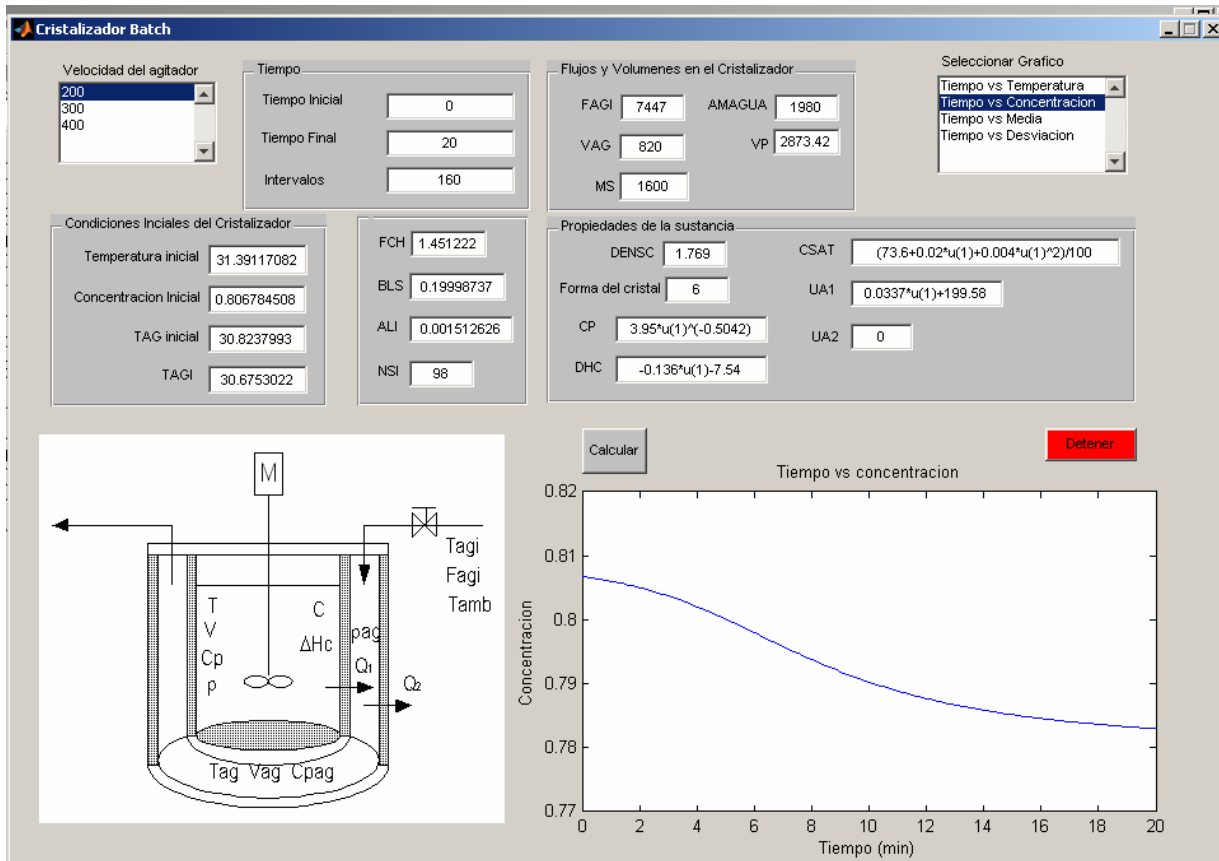


Figura 3.14 Ventana después de la simulación

3.7 ARCHIVOS QUE CONTIENE EL SIMULADOR

El simulador consta de los siguientes archivos:

Tabla 3.1 Archivos del Simulador

Nombre	Tamaño	Fecha de modificación
BO.asv	1KB	20/08/2005
CPAG.asv	1KB	20/08/2005
F_ALFA.asv	1KB	20/08/2005
F_AMT.asv	1KB	14/09/2005
F_BALANCEMASS.asv	1KB	21/08/2005
F_BALNCETAG.asv	1KB	14/09/2005
F_BALANCETSOL.asv	1KB	14/09/2005
F_BO.asv	1KB	20/08/2005
F_CSAT.asv	1KB	01/09/2005
F_UA1.asv	1KB	21/08/2005
FM.asv	1KB	13/09/2005
main.asv	47KB	18/09/2005
MOMENT.asv	1KB	13/09/2005
SR.asv	1KB	20/08/2005
LongInitial	1KB	20/08/2005
PopulationInitial	2KB	05/09/2005
Revolutions	1KB	14/09/2005
partemain	46KB	13/09/2005
resultadosa200	29KB	15/09/2005
diagrama	328KB	30/08/2005
main	12KB	14/10/2005
ComputeFN	1KB	18/09/2005
F_ALFA	1KB	01/09/2005
F_AMT	1KB	14/09/2005
F_BALANCEMASS	1KB	14/09/2005

F_BALANCETAG	1KB	14/09/2005
F_BALNCETSOL	1KB	14/09/2005
F_BO	1KB	13/09/2005
F_CP	1KB	01/09/2005
F_CPAG	1KB	09/09/2005
F_CSAT	1KB	01/09/2005
F_DCH	1KB	01/09/2005
F_DENSAG	1KB	09/09/2005
F_DESV	1KB	14/09/2005
F_G	1KB	13/09/2005
F_MEDIA	1KB	12/09/2005
F_SR	1KB	30/08/2005
F_UA1	1KB	23/08/2005
F_UA2	1KB	21/08/2005
main	48KB	14/10/2005
MOMENT	1KB	13/09/2005
NTotal	1KB	15/09/2005
CONSTANTES	20KB	24/10/2005
PROPIEDADES	20KB	24/10/2005

Y su tamaño es de 587KB

Esto sin incluir su archivo de ayuda que es de 1088KB.

CAPITULO 4

RESULTADOS

En este capítulo se verán los resultados que se obtuvieron en el simulador, realizados con los datos iniciales del sulfato de amonio obtenidos por Salcedo, 2000, y comparándolos con los mismos.

4.1 RESULTADOS OBTENIDOS POR EL SIMULADOR

Este simulador es general y puede ser utilizado para cualquier sustancia, pero en nuestro caso para comprobar su buen funcionamiento utilizaremos los datos de una solución de sulfato de amonio obtenidos por SALCEDO, 2000, que se muestran en el Apéndice C.

Los resultados obtenidos del simulador, para 200, 300 y 400rpm se muestran en las siguientes Figuras 4.1 – 4.12.

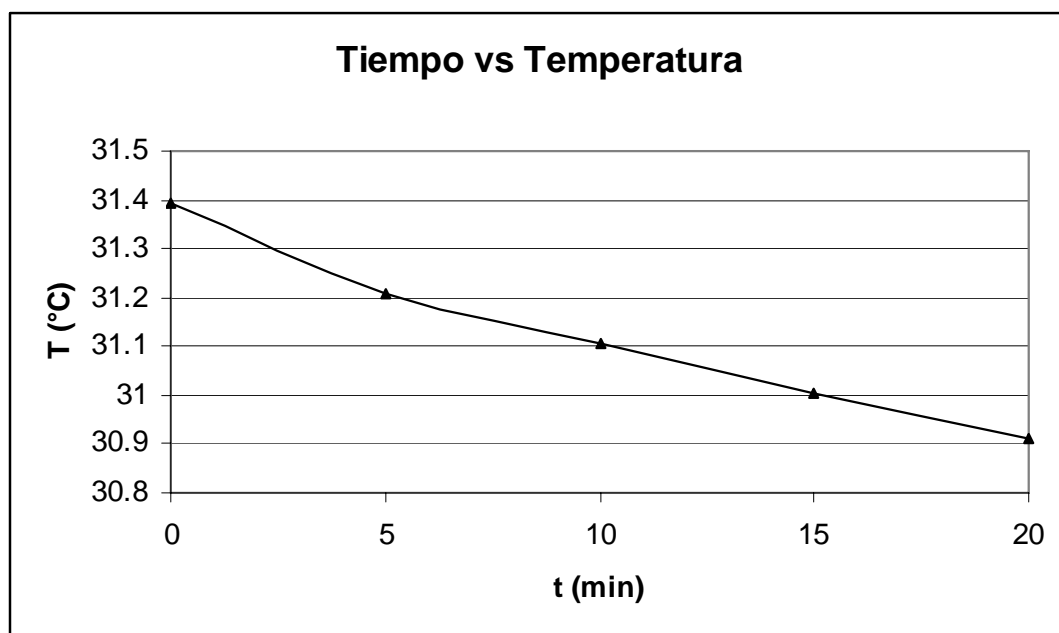


Figura 4.1 Temperatura del cristalizador a 200rpm

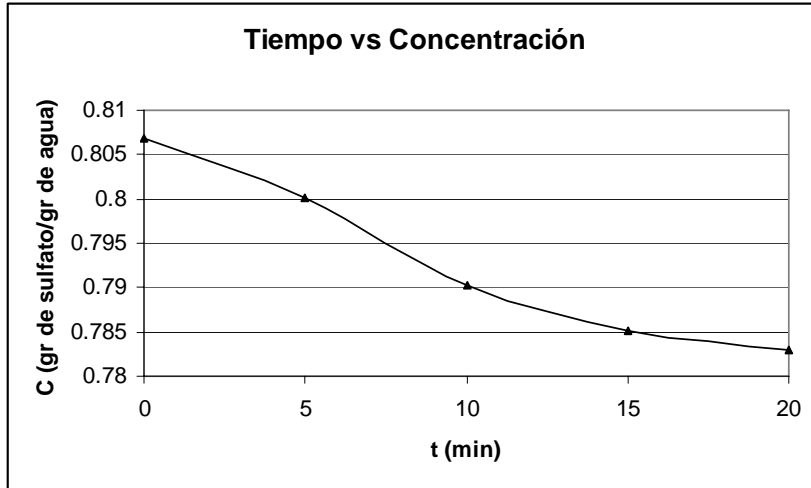


Figura 4.2 Concentración del cristalizador para 200rpm

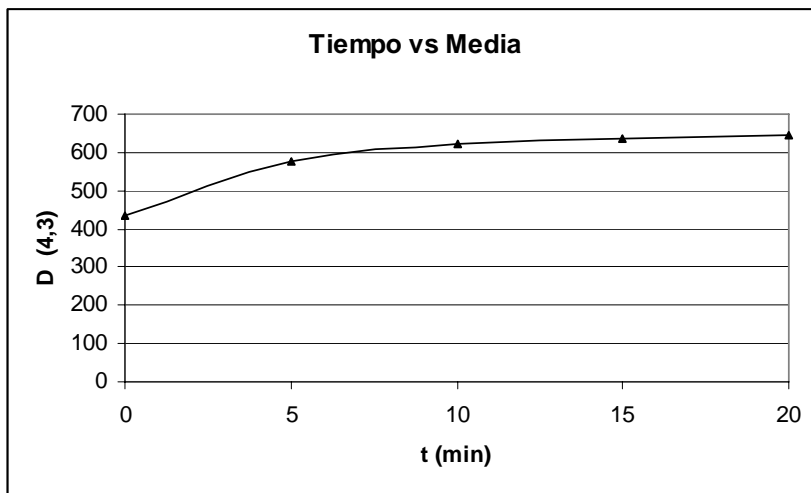


Figura 4.3 Media para cristalización a 200rpm

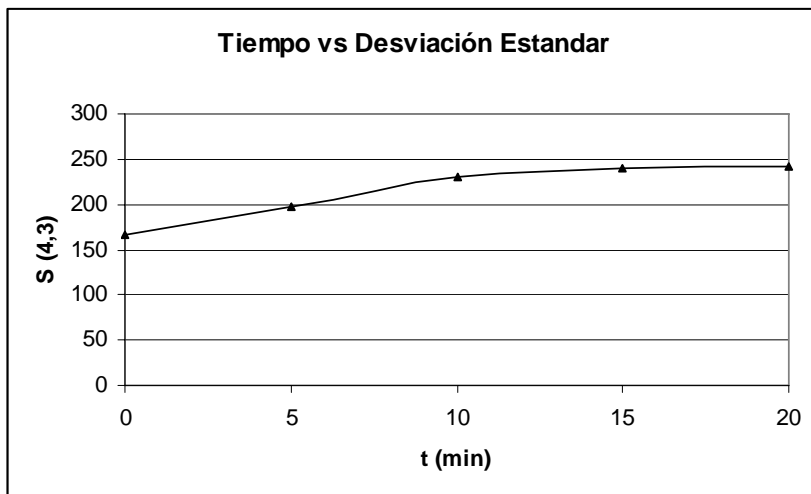


Figura 4.4 Desviación Estándar para cristalización a 200rpm

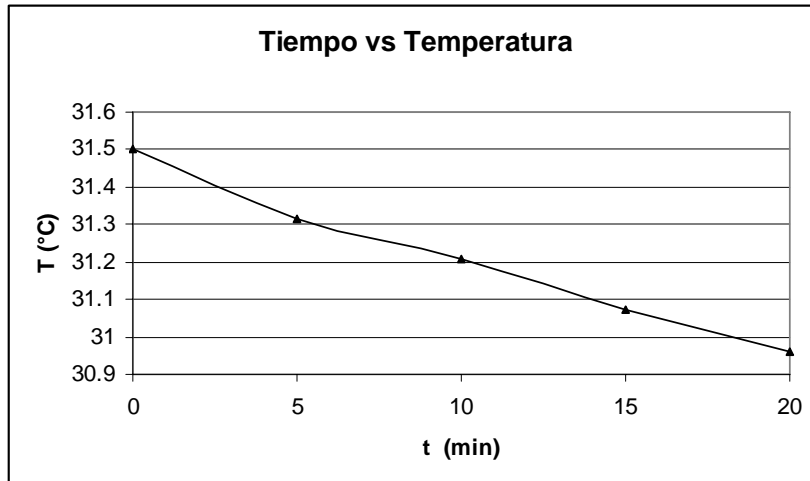


Figura 4.5 Temperatura del Cristalizador a 300rpm

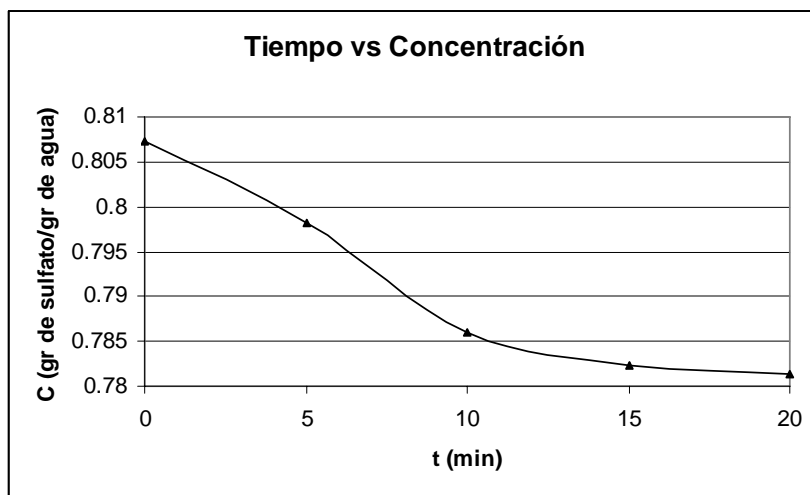


Figura 4.6 Concentración del Cristalizador para 300rpm

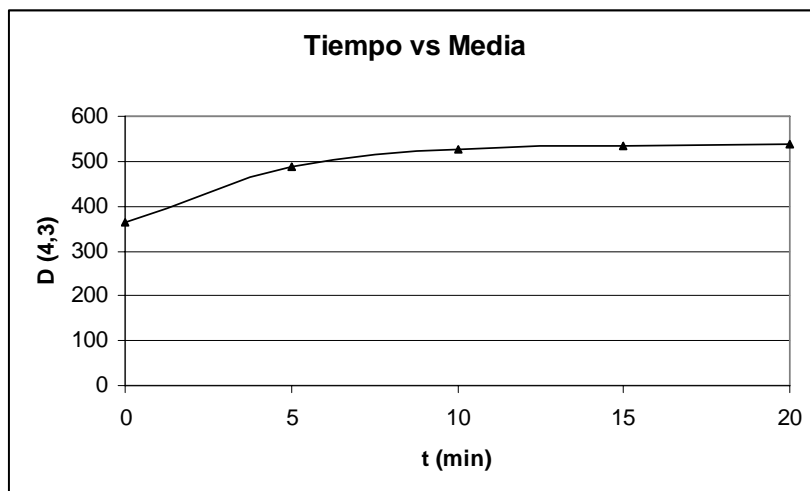


Figura 4.7 Media para cristalización a 300rpm

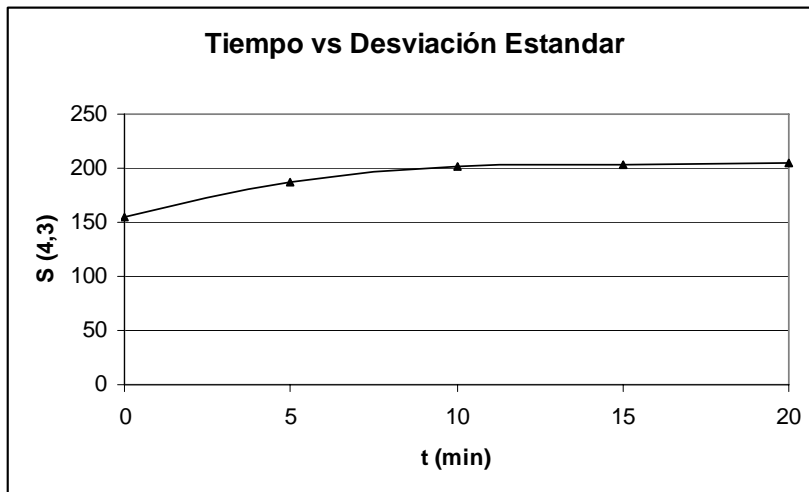


Figura 4.8 Desviación Estándar para cristalización a 300rpm

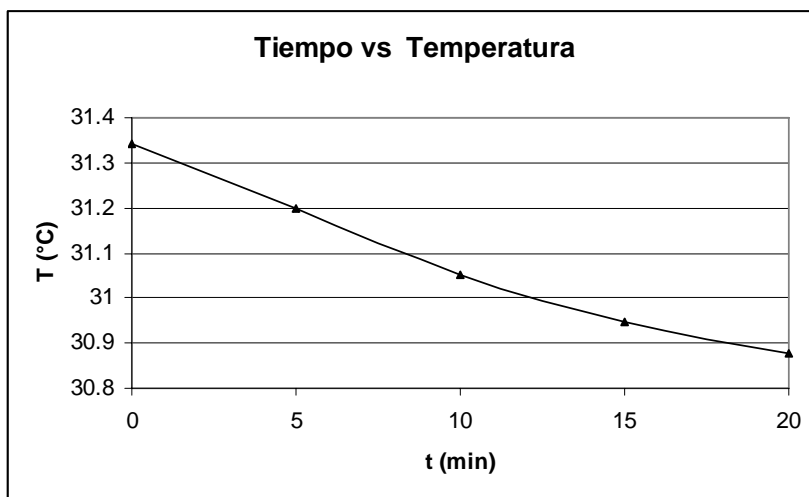


Figura 4.9 Temperatura del cristizador a 400rpm

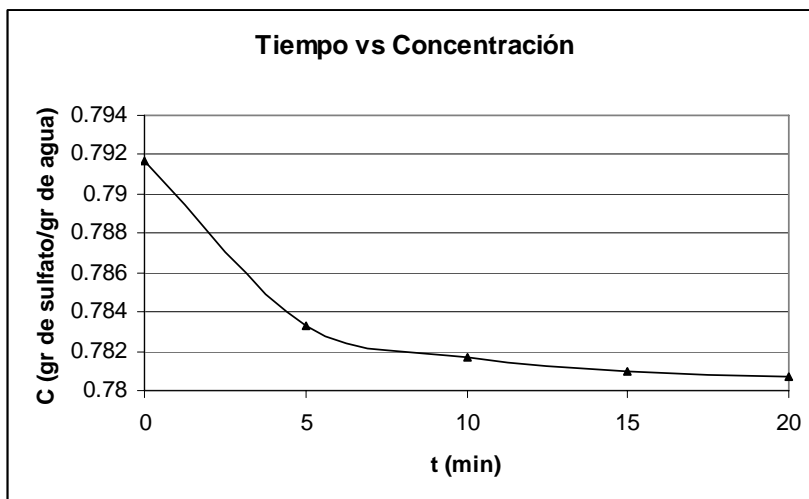


Figura 4.10 Concentración del cristizador a 400rpm

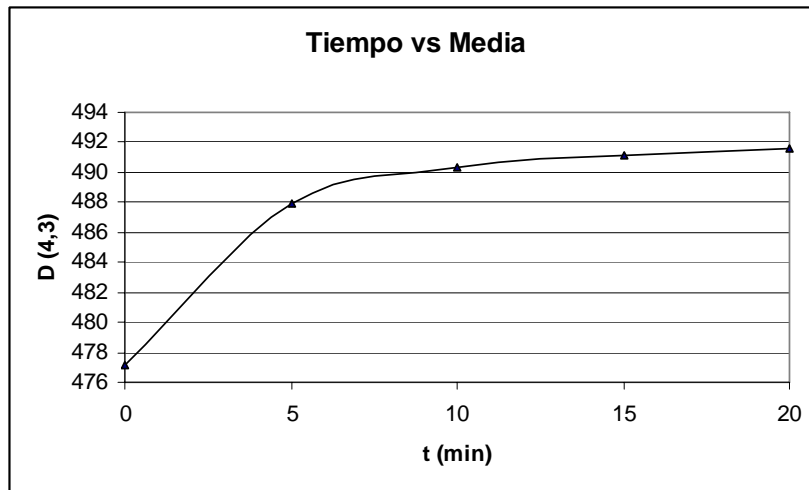


Figura 4.11 Media para cristalización a 400rpm

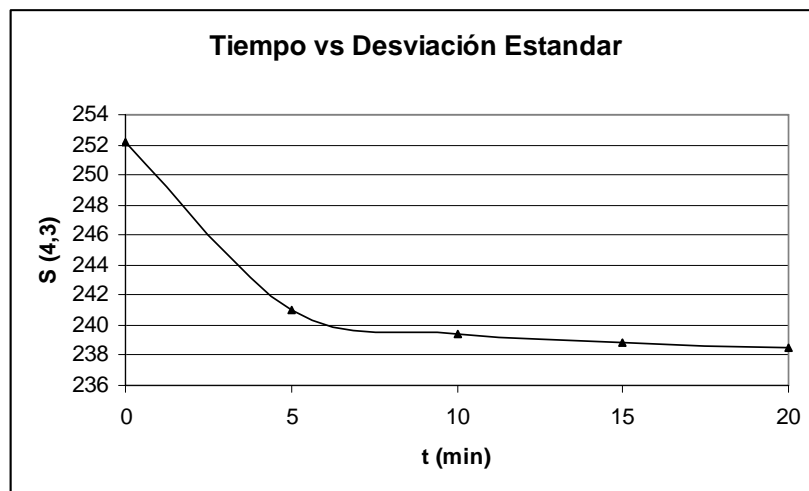


Figura 4.12 Desviación Estándar para cristalización a 400rpm

4.2 COMPARACION DE RESULTADOS

En las Figuras 4.13 – 4.24 se muestran las graficas obtenidas en el simulador que se compararan con las obtenidas por SALCEDO, 2000, para así corroborar que el simulador esta trabajando correctamente. En las figuras, SIM significa que fueron los datos obtenidos en este simulador, LISEE significa los datos experimentales obtenidos por Salcedo, 2000 y LISEA significa los resultados obtenidos del ajuste que realizo Salcedo, 2000.

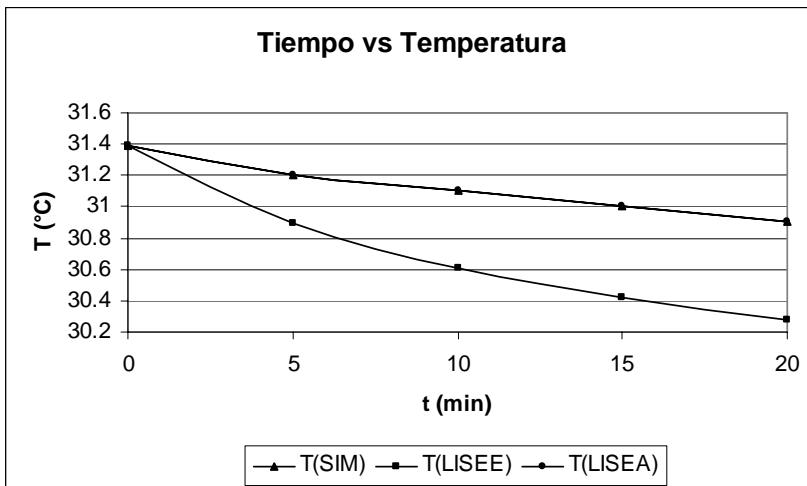


Figura 4.13 Temperatura para 200rpm

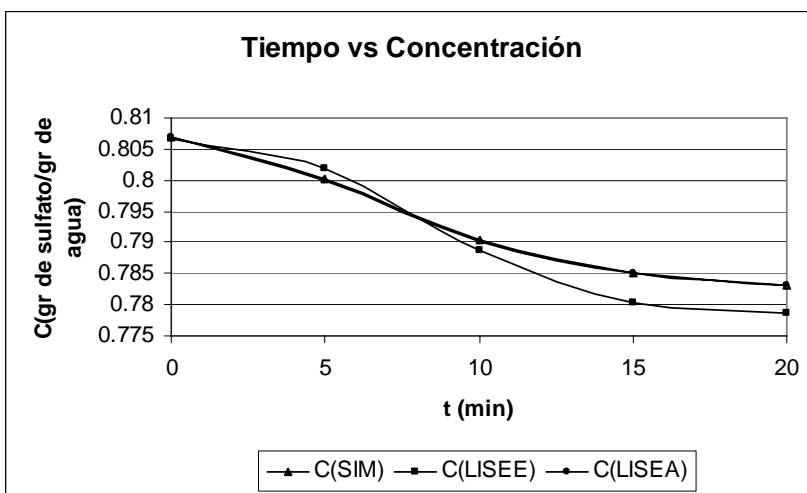


Figura 4.14 Concentración para 200rpm

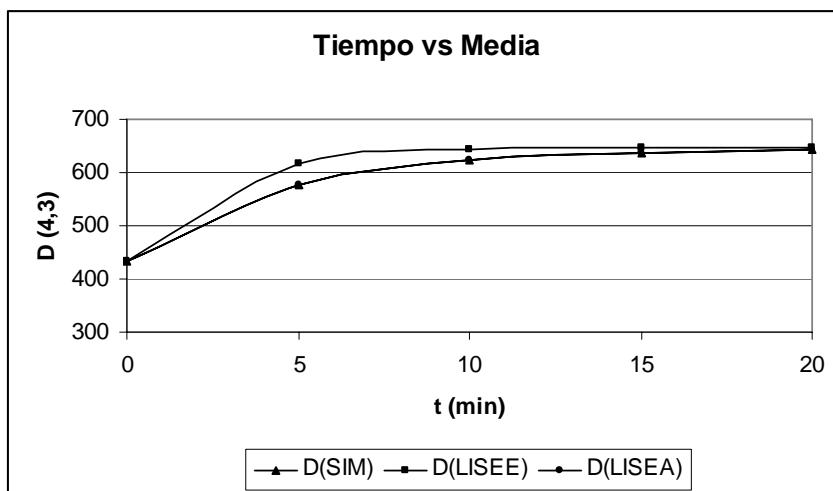


Figura 4.15 Media para 200rpm

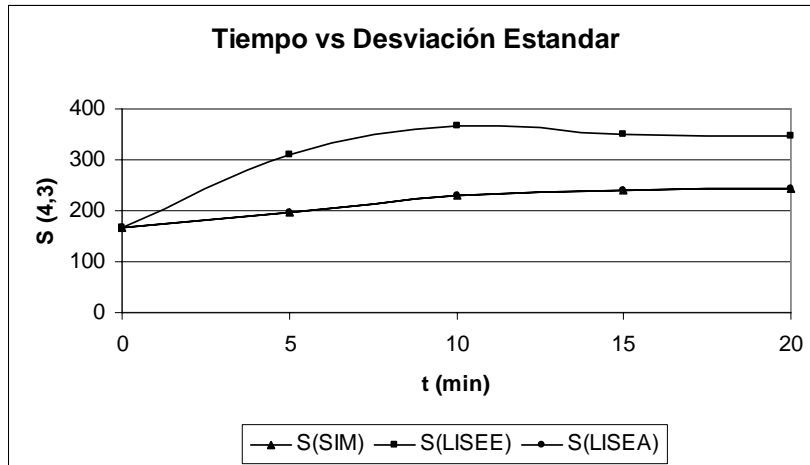


Figura 4.16 Desviación Estándar para 200rpm

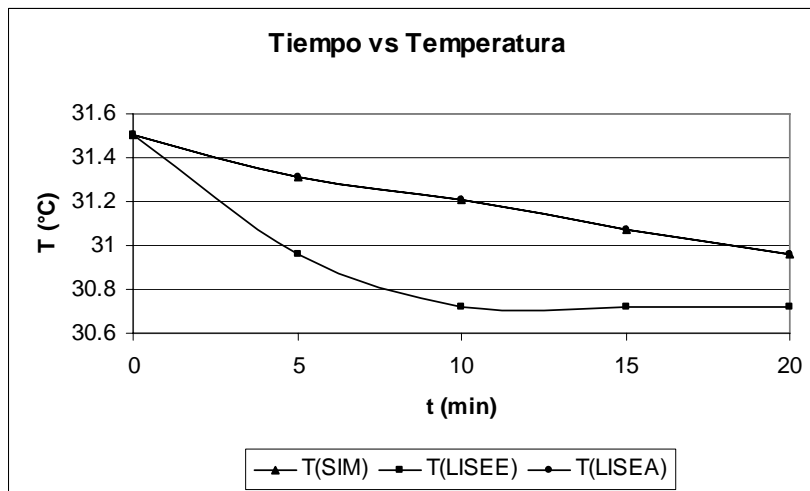


Figura 4.17 Temperatura para 300rpm

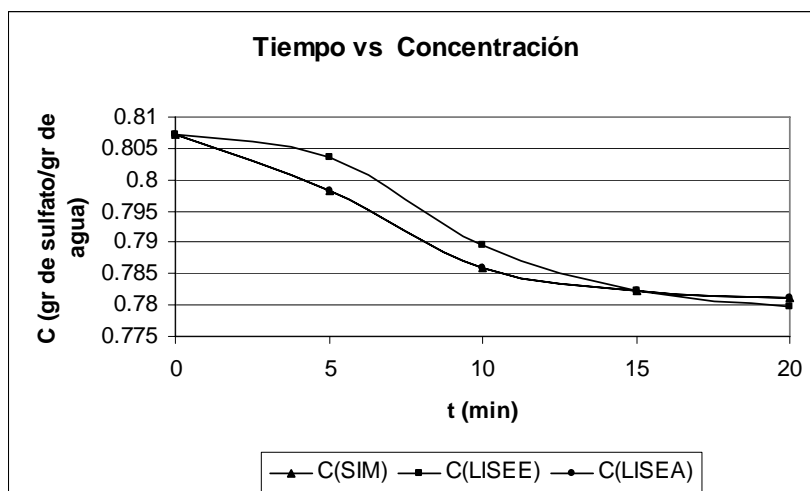


Figura 4.18 Concentración a 300rpm

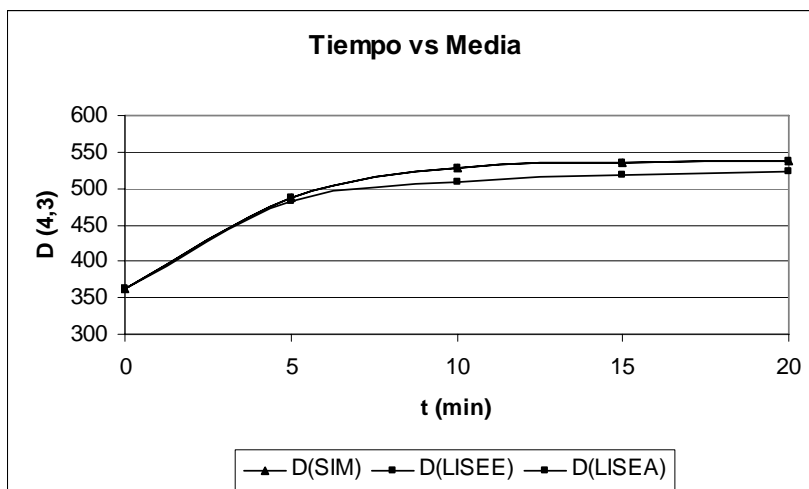


Figura 4.19 Media para 300rpm

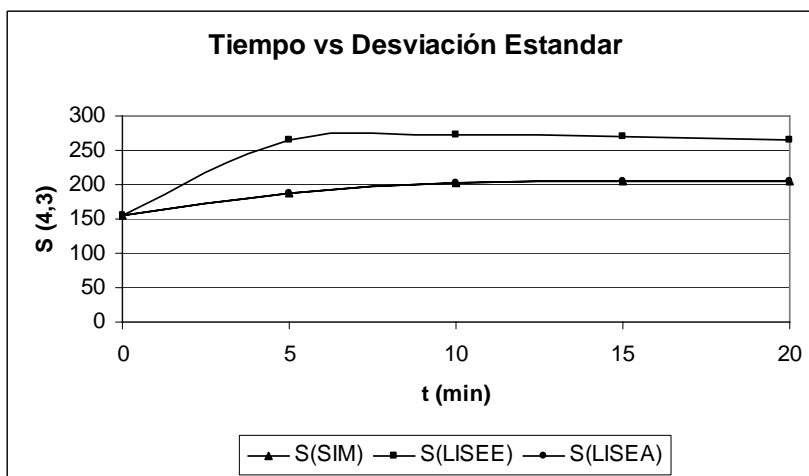


Figura 4.20 Desviación Estándar para 300rpm

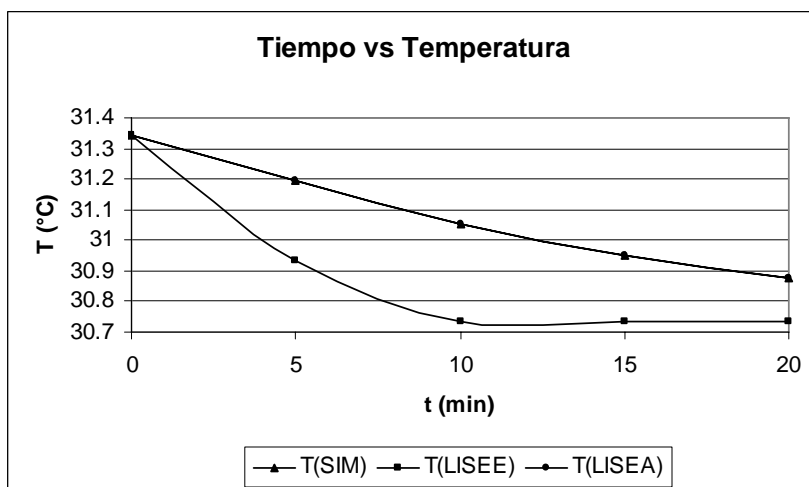


Figura 4.21 Temperatura a 400rpm

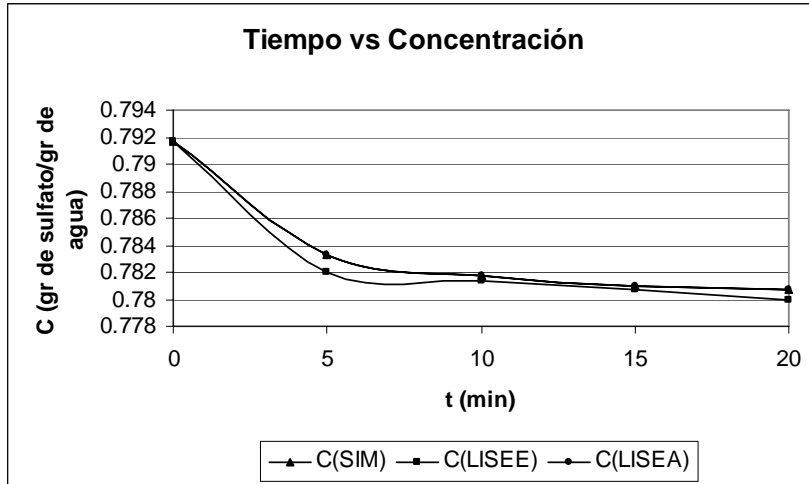


Figura 4.22 Concentración a 400rpm

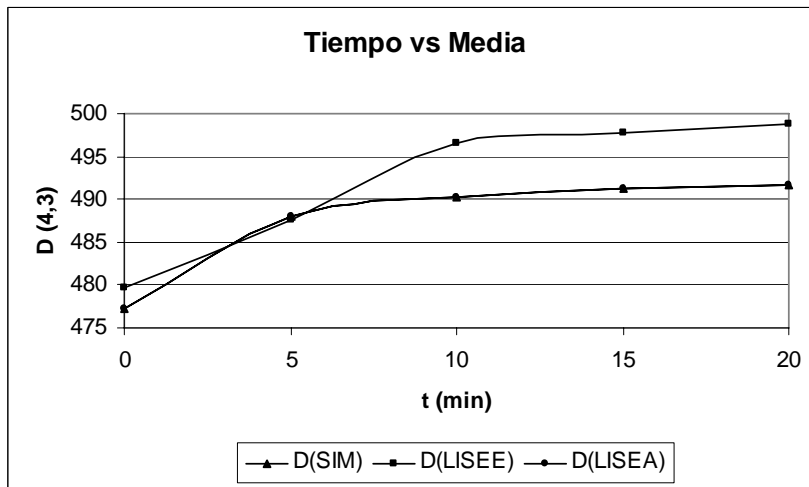


Figura 4.23 Media para 400rpm

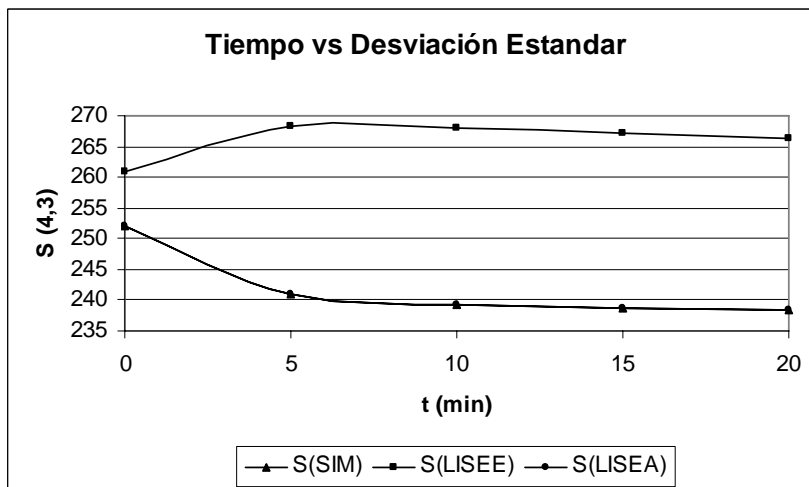


Figura 4.24 Desviación Estándar para 400rpm

En los resultados vemos que el simulador fue lo que esperábamos ya que las graficas coinciden exactamente con los obtenidos por Salcedo, 2000 (LISEA) Ajustados.

El tamaño de nuestro simulador es de 587 KB y el tiempo promedio de corrida es de 13 seg.

CONCLUSIONES

- Se logro desarrollar el simulador para un cristalizador tipo batch en SIMULINK y MATLAB, obteniendo resultados satisfactorios con los datos iniciales para el Sulfato de Amonio sustancia que se utilizo para comprobar el buen funcionamiento del simulador.
- Este simulador puede utilizarse para cualquier otro soluto ya que se encuentra especificado en forma general, solo será necesario tener las condiciones iniciales temperatura del cristalizador, temperatura inicial del agua de enfriamiento a la entrada, temperatura del agua de enfriamiento dentro de la chaqueta, concentración y algunas ecuaciones de las propiedades físicas de la sustancia y con esto nos resolverá las 101 EDO's que constituyen el modelo matemático riguroso.
- Tiene un tipo de simulación considerablemente corto ya que con solo 13seg obtenemos los resultados del comportamiento del proceso, este tiempo fue tomado con un procesador Intel Pentium4, 2GHz en disco duro y 512MB de RAM.

Bibliografía

- [2] **Salcedo Estrada Luís Ignacio, 2001**, “Ingeniería de Procesos I”, Facultad de Ingeniería Química UMSNH.
- [4] SHOICHIRO NAKAMURA, “Análisis Numérico y Visualización Gráfica con MATLAB®”
- [5] **Ríos Insua David – Ríos Insua Sixto – Martín Jacinto**, “Simulación Métodos y Aplicaciones” Alfaomega.
- [13] **Bolaños Reynoso Eusebio, 2000**, “Control y Optimización de las Condiciones de Operación de Cristalizadores Batch por Enfriamiento”, Tesis de Doctorado del Instituto Tecnológico de Celaya.
- [14] **Salcedo Estrada Luís Ignacio, 2000**, “Control de Cristalizadores Tipo Batch”, Tesis de Doctorado del Instituto Tecnológico de Celaya.
- [15] **Kirk A Othmer, 1998**, “Enciclopedia de Tecnología Química”, Limusa.
- [16] **C. J. Geankoplis, 1998**, “Procesos de Transporte y Operaciones Unitarias”, CECSA.
- [17] **Garside J., 1985**, “Industrial Crystallization From Solution”. Chemical Engineering Science, Vol 40 No. 1, págs. 3 -26.
- [18] **Perry R. H., Green D. W. y Maloney J.O., 1992**, Perry Manual del Ing. Químico, Sexta Edición, Mc. Graw – Hill/Interamericana de México S.A. de C.V.
- [19] **Canning T.F. y Randolph A.d., 1967**, “Some Aspects of Crystallization Theory: Systems that Violate McCabe’s Delta L Law”, AIChE Journal, Vol 13 No. 1, págs. 5-9.
- [20] **Randolph A.D. y Larson M.A., 1971**, “Theory of Particulate Processes”, Academia Press New York, New York, USA.
- [21] **Qiu y Rasmuson, 1991**, “Nucleation and Growth of Succinic Acid in a Batch Cooling Crystallizer”, AIChE Journal, September, Vol. 37 No. 9, págs. 1293-1304.
- [22] **Qiu y Rasmuson, 1994**, “Estimation of Crystallization Kinetics from Batch Cooling experiments”, AIChE Journal, May, Vol. 40, No. 5 págs. 799-812.

Páginas de Internet

- [1] <http://www.uclm.es/profesorado/marodrigo/pdf/sopq/unidad1tema3.pdf>
- [3] <http://www.bib.uab.es/pub/papers/02102862n72p165.pdf>
- [6] <http://www.iie.org.mx>
- [7] http://info.pue.ualap.mx/ap.mx/~tesis/leip/camacho_c_i/capitulo7.pdf
- [8] www.SatLab.com
- [9] <http://www.angelfire.com/la/hmolina/matlab7.html>
- [10] http://www.procesosvirtuales.com/virtualPRO/2002/Julio/Herramienta_Chemcad2.htm
- [11] <http://www.modeladoingenieria.edu.ar/utnfrro/integracioniv/practicos/2002/2002tp31.pdf>
- [12] http://tusoftware.com/index.php?_t=p&_p=46

APENDICE A

Propiedades Físicas y Datos del Cristalizador

A.1 Propiedades Físicas

Agua

Densidad

La Ecuación A.1 fue obtenida de datos reportados en el Manual del Ingeniero Químico (Perry et al, 1992), para un rango de temperaturas de 20 a 50°C:

$$\delta_a = -4E - 06 T^2 - 6E - 05 T + 1.001 \quad (\text{A.1})$$

Donde:

δ_a = Densidad del agua en gr/cm^3

T = Temperatura del agua en °C

Capacidad Calorífica

La Ecuación A.2 fue obtenida de los datos reportados en el Manual del Ingeniero Químico (Perry et al, 1992), para el rango de 15 a 100°C:

$$Cp_a = 7E - 05 T + 0.9989 \quad (\text{A.2})$$

Donde:

Cp_a = Capacidad calorífica del agua en $\text{cal/gr}\cdot^\circ\text{C}$

T = Temperatura del agua en °C

Solución Saturada de Sulfato de Amonio

Capacidad Calorífica

La Ecuación A.3 fue calculada experimentalmente en el laboratorio en este trabajo para el intervalo de temperaturas de 30 a 40°C:

$$Cp_{SA} = 3.95 T^{-0.5042} \quad (A.3)$$

Donde:

Cp_{SA} = Capacidad Calorífica de la solución saturada del sulfato de amonio en cal/gr-°C.

T = Temperatura de la solución en °C

Concentración de Saturación

El sulfato de amonio que se utilizó inicialmente no fue a nivel reactivo, sino nivel agrícola de la marca AGROGEN

El sulfato de amonio nivel reactivo contiene de nitrógeno total 21% y de azufre el 24%. Como se puede observar el nivel agrícola es prácticamente el nivel puro. Se hicieron algunas pruebas experimentales para determinar la solubilidad y se comprobó que es ligeramente diferente a la del componente puro, esto se puede deber a los porcentajes de las impurezas.

La Ecuación A.4 fue calculada experimentalmente en el laboratorio en este trabajo para el intervalo de temperaturas de 30 a 40 grados centígrados:

$$Ys = 73 + 0.02 T + 0.004 T^2 \quad (A.4)$$

$$C_{sat} = \frac{Ys}{100} \quad (A.5)$$

Donde:

Ys = Porcentaje de sulfato de amonio disuelto.

C_{sat} = Concentración de saturación en gr de sulfato/gr de agua.

T = Temperatura de la solución saturada en °C.

Como en la parte final de la experimentación tuvieron problemas (Salcedo, 2000) en la DTC con el sulfato de amonio industrial decidieron trabajar en esta etapa con sulfato de amonio grado reactivo de la marca Baker.

La solubilidad del componente puro debería de ser igual a la de la ecuación (2.23), pero al obtenerse experimentalmente se vio que es diferente:

$$Y = 0.004 X^2 + 0.02 X + 73.6$$

Donde:

Y = Solubilidad del sulfato de amonio grado reactivo en gr de sulfato/100 gr de agua.

X = Temperatura en °C.

Densidad

La Ecuación A.6 fue obtenida mediante datos reportados en el Manual del Ingeniero Químico (Perry et al, 1992) para el sulfato de amonio disuelto en agua en su punto de saturación, para el rango de 20 a 80 grados centígrados:

$$\delta_{sat} = 5E - 07 T^2 + 5E - 05 T + 1.2425 \quad (A.6)$$

Donde:

δ_{sat} = Densidad de la solución saturada en gr/cm³

T = Temperatura de la solución en °C

Sulfato de Amonio Sólido

Capacidad Calorífica

El valor para la capacidad calorífica fue encontrado en el Manual del Ingeniero Químico (Perry et al, 1992), será utilizado para el rango de 2 a 55°C:

$$Cp_s = 0.39 \quad (A.7)$$

Donde:

Cp_s = Capacidad calorífica del sulfato sólido en cal/gr-°C.

Densidad

El valor para la densidad del cristal fue encontrado en el Manual del Ingeniero Químico (Perry et al, 1992), será utilizado en el rango de 20 a 40°C:

$$\delta c = 1.769 \quad (\text{A.8})$$

Donde:

$$\delta c = \text{gr/cm}^3$$

Calor de Cristalización

El único valor encontrado fue el reportado en la bibliografía (Mersmann, 1995) y será utilizado junto con la ecuación del calor de disolución para encontrar la ecuación del calor de cristalización en el rango de temperatura de 25 - 40°C. Para el sulfato de amonio este calor es negativo por ser exotérmico. Los datos fueron tomados tal cual de la literatura ya que no hay temperatura de referencia.

$$\Delta H_c = -0.136 T - 7.54 \quad (\text{A.9})$$

Donde:

ΔH_c = Calor de cristalización del sulfato en cal/gr.

T = Temperatura en °C.

A.2 Datos del Cristalizador

Flujo Máximo del Refrigerante

El flujo fue encontrado experimentalmente a la salida de la chaqueta por Salcedo, 2000 y representa el flujo en cualquier parte del equipo ya que fue medido mediante un rotámetro, resulto ser de 8.1L/min antes de colocar el flujometro, después de la colocación de este equipo el flujo al 100% resulto ser de 7.447L/min. Si se coloca otro equipo en el proceso este flujo cambiara.

Volumen de la Chaqueta del Cristalizador

El volumen total contenido en la chaqueta del cristalizador fue medido experimentalmente por Salcedo, 2000 y encontró que es de 915cm³, pero el volumen real al momento de trabajar fue de 820mL. Debido a que existe una fracción hueca por la cual no fluye agua.

Volumen Total del Cristalizador

El volumen máximo según las características físicas del cristalizador que fueron medidas experimentalmente por Salcedo, 2000 se sabe que es de 3148cm^3 . Cabe hacer mención que el volumen del sistema cambiara según el nivel (en nuestro caso será constante ya que estamos en un proceso batch).

Coefficiente Global de Transferencia de Calor

De los datos experimentales que obtuvo Salcedo, 2000 sabemos que las pérdidas hacia los alrededores se consideran despreciables, quedando solamente el coeficiente global entre las etapas solución-cristal-agua. También se tomo el valor de UA para evitar errores al calcular el área de transferencia de calor. Se obtuvo la siguiente ecuación, valida entre 200 y 400rpm a flujo total de la chaqueta:

$$UA = 0.0337 \text{ RPM} + 199.58 \quad (\text{A.10})$$

Donde:

U = Coeficiente global de transferencia de calor en $\text{cal}/^\circ\text{C}\cdot\text{min}\cdot\text{cm}^2$.

A = Área de transferencia de calor en cm^2 .

RPM = Revoluciones por minuto del agitador.

APENDICE B

Programas de Computo

B.1 PROGRAMAS DE CÁLCULO REALIZADOS EN ARCHIVOS .m

Tenemos varios subprogramas creados en archivos .m, tales como los balances de masa, energía, población, las relaciones consecutivas, las condiciones físicas de la sustancia, las, los momentos de distribución, el calculo de la media y desviación estándar, así como el programa principal creado en el GUI's. Estos fueron creados haciendo uso de las bases de datos, creadas ya anteriormente en el Import Wizard de MATLAB, utilizando como datos iniciales los valores experimentales obtenidos (SALCEDO, 2000) para el sulfato de amonio.

B.1.1 PROGRAMAS PARA EL CÁLCULO DE LAS RELACIONES CONSECUTIVAS.

Velocidad de Nacimiento

```
function y = F_BO(Par1, Par2, Par3, Par4, Par5, SR, AMT )
```

```
%Calcula la velocidad de nacimiento
```

```
y = (Par2)*(SR^Par3)*(AMT^Par4)*(Par1^Par5);
```

Velocidad de Producción Reducción

```
function y = F_ALFA( Par1,Par9, Par10, Par11, Par12, SR, AMT )
```

```
%Calcula la velocidad de producción reducción
```

```
y = (Par9)*(SR^Par10)*(AMT^Par11)*(Par1^Par12);
```

Velocidad de Crecimiento

```
function y = F_G( Par1,Par6, Par7, Par8, SR)
```

```
%Calcula la velocidad de crecimiento
```

```
y = (Par6)*(SR^Par7)*(Par1^Par8);
```


B.1.2 PROGRAMAS DE LAS CONDICIONES FÍSICAS DE LA SUSTANCIA.

Densidad del Agua

function y = F_DENSAG(T)

%Calcula la densidad del agua

y = -0.000004*T^2-0.00006*T+ 1.001;

Capacidad Calorífica del Agua

function y = F_CPAG(T)

%Calcula la capacidad calorífica del agua

y = 7E-5*T+0.9989;

Masa Total de Sólidos por Volumen de licor

function y = F_AMT (Densc, Akv, Amom4)

%Masa total de sólidos por volumen de licor

y = Densc*Akv*Amom4;

B.1.3 PROGRAMAS PARA EL CÁLCULO DE LOS BALANCES

nT

function y = NTotal(n)

nT = 0;

for i=2:99

 nT=n(i) +nT;

end

y = nT;

Balance de Población (n)

function F=ComputeFN (n,G,ALFA,B0,nT,DL)

%Calcula el Balance de Población que consta de 98 ecuaciones diferenciales

FN (1) =B0/G;

```

FN(2)=-((G/(12*DL))^(-(4*n(1))-6*n(2)+12*n(3)-2*n(4)))+(ALFA*DL*(n(2)/nT)*1000);
FN(3)=-((G/(12*DL))^(n(1)-8*n(2)+8*n(4)-n(5)))+(ALFA*DL*(n(3)/nT)*1000);
for i=4:97
    FN(i)=-((G/(12*DL))^(n(i-2)-8*n(i-1)+8*n(i+1)-n(i+2)))+(ALFA*DL*(n(i)/nT)*1000);
End
FN(98)=-((G/(12*DL))^(4*n(98)+6*n(97)-
12*n(96)+2*n(95)))+(ALFA*DL*(n(98)/nT)*1000);
FN(99)=-((G/(12*DL))^(22*n(99)-36*n(98)+18*n(97)-
4*n(96)))+(ALFA*DL*(n(99)/nT)*1000);
F = FN;

```

Balance de Energía en el Cristalizador (TSOL)

```

function y = F_BALANCETSOL(DCH,DENSC, AKV, VP, G, AMOM2, BO, ALO, UA1,
TSOL, TAG, CP, AMTP)
%Calcula el balance de energía en el cristalizador
y = (-1.0*(DCH*DENSC*AKV*VP*((3*G*AMOM2)+(BO*ALO^3))) - ....
    - (UA1*(TSOL-TAG))) / (CP*AMTP);

```

Balance de Energía del Agua de Enfriamiento (TAG)

```

function y = F_BALANCETAG(FAGI,VAG,TAGI,TAG1,UA1,TSOL1,DENSAG,CPAG)
%Este programa nos calcula el balance de energía en el agua de enfriamiento
y = ((FAGI/VAG)*(TAGI-TAG1))+((UA1*(TSOL1-TAG1)))/(VAG*DENSAG*CPAG);

```

Balance de Masa (C)

```

function y = F_BALANCEMASS ( DENSC,AKV,FCH,G,AMOM3,BO,ALO)
%Este programa nos calcula el balance de masa
y = -1.0*(DENSC*AKV*FCH*((3*G*AMOM3) + (BO*ALO^3)));

```

B.1.4 PROGRAMAS PARA EL CÁLCULO DE LA SUBROUTINA DE MOMENTO.

Función FM3

```
function FM3=FM (n,L)
%Este programa nos calcula la función FM3
FM3=[];
for j=1:5
    FM3=[FM3 n.*L.^j];
end
```

Subrutina de Momentos

```
function y=MOMENT(FM3, HSIM)
%Este programa calcula la subrutina de momentos
S1=0; S2=0;
for j=1:5;
    for i=2:2:96
        S1 = S1 + FM3 (i ,j);
        S2 = S2 + FM3 (i +1, j);
    end
    A(j)=(HSIM/3)*(FM3(1,j)+FM3(99,j)+4*(S1+FM3(98,j))+2*S2);
    S1=0; S2=0;
end
y=A;
```

B.1.5 PROGRAMA PARA EL CÁLCULO DE LA MEDIA Y DESVIACIÓN ESTANDAR.

Media

```
function y = F_MEDIA( AMOM3,AMOM4 )
%Calcula la media del tamaño de cristal
y = (AMOM4/AMOM3)*1000;
```

Desviación Estándar

function y = F_DESV (AMOM4,AMOM5,AMOM6)

%Este programa nos calcula la desviación estándar

VPROM = ((AMOM6)/(AMOM4))-((AMOM5)/(AMOM4))^2;

y = (VPROM^0.5)*10000;

B.2 PROGRAMAS CREADOS EN SIMULINK

Los siguientes programas fueron creados en simulink, ya que facilita al usuario el cambio de formulas en la interface, cuando cambie la sustancia de trabajo, estos programas calculan la AMTP, ALO, AKV, UA1, UA2, CSAT, SR, DCH y CP.

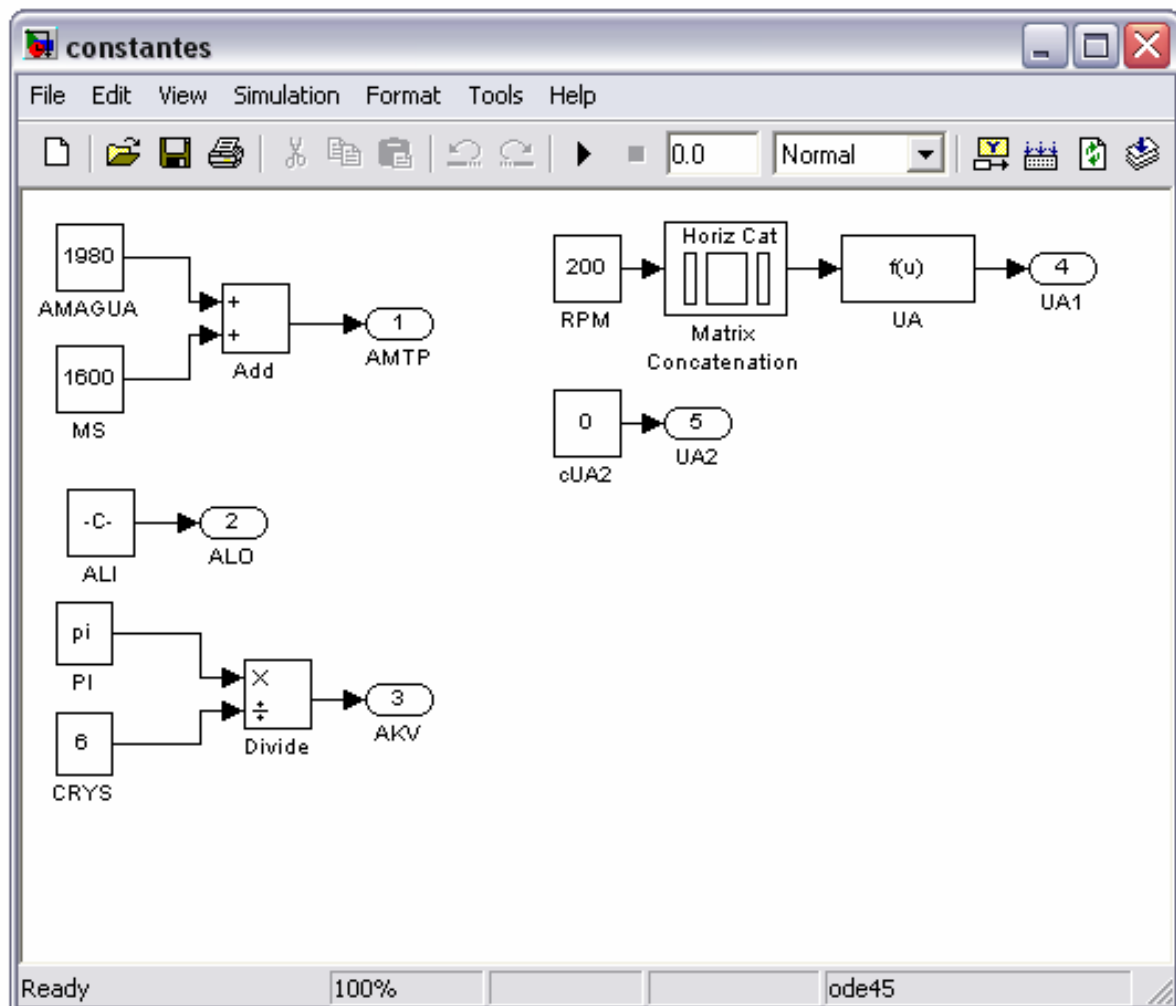


Figura B.1 Programa CONSTANTES.mdl

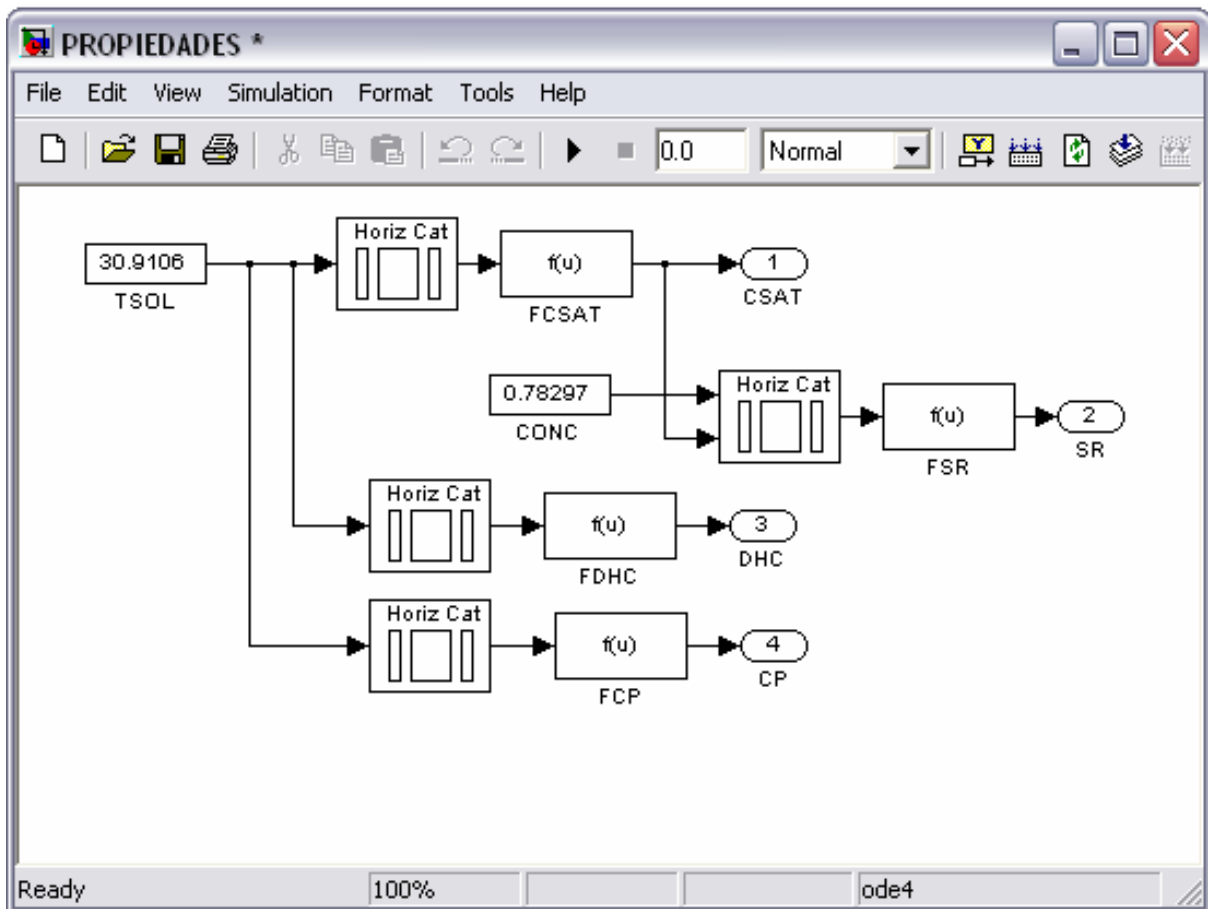


Figura B.2 Programa PROPIEDADES.mdl

B.3 PROGRAMA PRINCIPAL

% Selecciona y cambia los valores de las revoluciones por minuto

```
load('Revolutions');
sr1 = num2str(Revolution(1,1));
sr2 = num2str(Revolution(1,2));
sr3 = num2str(Revolution(1,3));
ResultsStr = [sr1; sr2; sr3];
set(handles.rpm1,'String',ResultsStr);
%ResultsStr = get(handles.ResultsList,'String');
```

%Trae la figura que se muestra en la pantalla del simulador

```
handles.rgb = imread('diagrama.bmp');  
axes(handles.Diagram);  
imshow(handles.rgb);
```

%Abre el modelo y los handles que se encuentran en la pantalla

```
function model_open(handles,rpm)  
StringUA = get(handles.UETxt,'string');  
StringAMAGUA=get(handles.AMAGUATxt,'String');  
StringMS=get(handles.MSTxt,'String');  
StringALI=get(handles.ALITxt,'String');  
StringCRYS=get(handles.CRYSTxt,'String');  
StringUA2=get(handles.UA2Txt,'String');
```

% Abre los programas que se encuentran en Simulink y los ejecuta

```
    open_system('CONSTANTES');  
    open_system('PROPIEDADES');  
    set_param('CONSTANTES/UA','Expr',StringUA);  
        set_param('CONSTANTES/AMAGUA','Value',StringAMAGUA);  
    set_param('CONSTANTES/MS','Value',StringMS);  
    set_param('CONSTANTES/ALI','Value',StringALI);  
    set_param('CONSTANTES/CRYS','Value',StringCRYS);  
    set_param('CONSTANTES/RPM','Value',rpm);  
    set_param('CONSTANTES/cUA2','Value',StringUA2);  
    set_param('CONSTANTES','StartTime','0.0','StopTime','0.0');  
    close_system('CONSTANTES',1);
```

%Lee la tabla que se encuentra en el Import Wizard

```
load('Revolutions');
```

%Lee y selecciona la columna dependiendo de las rpm elegidas

```
index_selected = get(handles.rpm1,'Value');
```

```
ParameterRPM(1) = Revolution(1,index_selected); %Velocidad de agitación
ParameterRPM(2) = Revolution(2,index_selected);%kb
ParameterRPM(3) = Revolution(3,index_selected);%b
ParameterRPM(4) = Revolution(4,index_selected);%o
ParameterRPM(5) = Revolution(5,index_selected);%p
ParameterRPM(6) = Revolution(6,index_selected);%kg
ParameterRPM(7) = Revolution(7,index_selected);%g
ParameterRPM(8) = Revolution(8,index_selected);%h
ParameterRPM(9) = Revolution(9,index_selected);%ka
ParameterRPM(10)= Revolution(10,index_selected);%c
ParameterRPM(11)= Revolution(11,index_selected);%k
ParameterRPM(12)= Revolution(12,index_selected);%d
```

%Lleva los valores introducidos en los handles a los programas en que se

%necesiten

```
ConcInitial = str2double(get(handles.ConcTxt,'String'));
TempInitial = str2double(get(handles.TempTxt,'String'));
TAGINITIAL = str2double(get(handles.TAGTxt,'String'));
TAGI        = str2double(get(handles.TAGITxt,'String'));
TimeInitial = str2double(get(handles.TimeInitialTxt,'String'));
TimeFinal   = str2double(get(handles.TimeFinalTxt,'String'));
NumIntervals = str2double(get(handles.NumIntervalsTxt,'String'));
DENS        = str2double(get(handles.DENSCTxt,'String'));
FAGI        = str2double(get(handles.FAGITxt,'String'));
VAG         = str2double(get(handles.VAGTxt,'String'));
FCH         = str2double(get(handles.FCHTxt,'String'));
NSI         = str2double(get(handles.NSITxt,'String'));
ALI         = str2double(get(handles.ALITxt,'String'));
BLS         = str2double(get(handles.BLSTxt,'String'));
MS          = str2double(get(handles.MSTxt,'String'));
VP          = str2double(get(handles.VPTxt,'String'));
```

```
AMAGUA = str2double(get(handles.AMAGUATxt,'String'));  
CRYS = str2double(get(handles.CRYSTxt,'String'));
```

```
%Cambia de valor numérico a cadena de caracteres  
rpm = num2str(ParameterRPM(1));  
model_open(handles,rpm);
```

```
%Simula el programa constantes  
[T,X,y]=sim('CONSTANTES');
```

```
%Nombra las variables de salida del programa constantes  
AMTP= y(1);  
ALO = y(2);  
AKV = y(3);  
UA1 = y(4);  
UA2 = y(5);
```

```
%Calcula el tamaño de paso y el incremento  
H = (TimeFinal-TimeInitial)/NumIntervals;  
DL = (BLS-ALI)/NSI;  
HSIM = DL;
```

```
StringCSAT = get(handles.CSATTxt,'string');  
set_param('PROPIEDADES/FCSAT','Expr',StringCSAT);
```

```
StringDHC = get(handles.DHCTxt,'string');  
set_param('PROPIEDADES/FDHC','Expr',StringDHC);
```

```
StringCP = get(handles.CPTxt,'string');  
set_param('PROPIEDADES/FCP','Expr',StringCP);
```



```
load('PopulationInitial');
load('LongInitial');

%Selecciona entre los tres valores de rpm distintos
if (index_selected == 1)
    Populationselect = PopulationInitial200;
end

if (index_selected == 2)
    Populationselect = PopulationInitial300;
end

if (index_selected == 3)
    Populationselect = PopulationInitial400;
end

Time(1) = TimeInitial;
TSOL(1) = TempInitial;
CONC(1) = ConclInitial;
TAG(1) = TAGINITIAL;

for Particle=1:99
    Population(Particle)=Populationselect(Particle);
end

AMOM = MOMENT(Population',LongInitial,HSIM);
DESVIACION(1) = F_DESV(AMOM(4),AMOM(5), AMOM(6));
MEDIA(1) = F_MEDIA(AMOM(4), AMOM(5));

nT = NTotal(Population);
nT = nT + Population(1);
```

```
AMT = F_AMT(DENSC,AKV,AMOM(4));
```

```
AMCF = AMT*2873.42;
```

```
TSOLstring = num2str(TemplInitial);
```

```
CONCstring = num2str(ConcnInitial);
```

```
set_param('PROPIEDADES/TSOL','Value',TSOLstring);
```

```
set_param('PROPIEDADES/CONC','Value',CONCstring);
```

```
set_param('PROPIEDADES','StartTime','0.0','StopTime','0.0');
```

```
[T2,X2,y2]=sim('PROPIEDADES');
```

```
CSAT = y2(1);
```

```
SR = y2(2);
```

```
BO
```

```
=
```

```
F_BO(ParameterRPM(1),ParameterRPM(2),ParameterRPM(3),ParameterRPM(4),ParameterRPM(5),SR,AMT);
```

```
ALFA
```

```
=
```

```
F_ALFA(ParameterRPM(1),ParameterRPM(9),ParameterRPM(10),ParameterRPM(11),ParameterRPM(12),SR,AMT);
```

```
G
```

```
=
```

```
F_G(ParameterRPM(1),ParameterRPM(6),ParameterRPM(7),ParameterRPM(8),SR);
```

```
for INTERVAL=2:NumIntervals+1
```

%Metodo de Runge-Kutta

```
k1N = ComputeFN(Population,G,ALFA,BO,nT,DL);
```

```
TSOLstring = num2str(TSOL(INTERVAL-1));
```

```
TSOL1= TSOL(INTERVAL-1);
```

```
CONCstring = num2str(CONC(INTERVAL-1));
```

```
CONC1= CONC(INTERVAL-1);
```

```

TAGstring = num2str(TAG(INTERVAL-1));
TAG1= TAG(INTERVAL-1);
set_param('PROPIEDADES/TSOL','Value',TSOLstring);
set_param('PROPIEDADES/CONC','Value',CONCstring);
set_param('PROPIEDADES','StartTime','0.0','StopTime','0.0');
[T2,X2,y2]=sim('PROPIEDADES');

```

```

DENSAG = F_DENSAG(TSOL1);
CPAG = F_CPAG(TSOL1);
DCH = y2(3);
CP = y2(4);

```

```

k1CONC = F_BALANCEMASS( DENSAG,AKV,FCH,G,AMOM(3),BO,ALO);
k1TSOL = F_BALANCETSOL(DCH,DENSAG, AKV, VP, G, AMOM(3), BO, ALO,
UA1, TSOL1, TAG1, CP, AMTP);
k1TAG = F_BALANCETAG(FAGI,VAG,TAGI,TAG1,UA1,TSOL1,DENSAG,CPAG);

```

%Segunda K

```

for i=2:99
    nk2(i)=(Population(i)+(H*k1N(i)/2));
end
nk2(1)=Population(1);
CONC2= CONC1 + (H*k1CONC/2);
TSOL2= TSOL1 + (H*k1TSOL/2);
TAG2= TAG1 + (H*k1TAG/2);
YTSOLstring = num2str(TSOL2);
YCONCstring = num2str(CONC2);

nT = NTotal(nk2);
nT= nT+ nk2(1);

```

```
k2N = ComputeFN(nk2',G,ALFA,BO,nT,DL);
```

```
set_param('PROPIEDADES/TSOL','Value',YTSOLstring);
```

```
set_param('PROPIEDADES/CONC','Value',YCONCstring);
```

```
set_param('PROPIEDADES','StartTime','0.0','StopTime','0.0');
```

```
[T2,X2,y2]=sim('PROPIEDADES');
```

```
DENSAG = F_DENSAG(TSOL2);
```

```
CPAG = F_CPAG(TSOL2);
```

```
DCH = y2(3);
```

```
CP = y2(4);
```

```
k2CONC = F_BALANCEMASS( DENSAG,AKV,FCH,G,AMOM(3),BO,ALO);
```

```
k2TSOL = F_BALANCETSOL(DCH,DENSAG, AKV, VP, G, AMOM(3), BO, ALO,  
UA1, TSOL2, TAG2, CP, AMTP);
```

```
k2TAG = F_BALANCETAG(FAGI,VAG,TAGI,TAG2,UA1,TSOL2,DENSAG,CPAG);
```

%Tercera K

```
for i=2:99
```

```
    nk3(i)=Population(i)+(H*k2N(i)/2);
```

```
end
```

```
nk3(1)=Population(1);
```

```
CONC3= CONC1+ (H*k2CONC/2);
```

```
TSOL3= TSOL1+ (H*k2TSOL/2);
```

```
TAG3= TAG1+ (H*k2TAG/2);
```

```
YTSOLstring = num2str(TSOL3);
```

```
YCONCstring = num2str(CONC3);
```

```
nT = NTotal(nk3);
```

```
nT= nT+ nk3(1);
```

```

k3N = ComputeFN(nk3,G,ALFA,BO,nT,DL);

set_param('PROPIEDADES/TSOL','Value',YTSOLstring);
set_param('PROPIEDADES/CONC','Value',YCONCstring);
set_param('PROPIEDADES','StartTime','0.0','StopTime','0.0');
[T2,X2,y2]=sim('PROPIEDADES');

DENSAG = F_DENSAG(TSOL3);
CPAG = F_CPAG(TSOL3);
DCH = y2(3);
CP = y2(4);

k3CONC = F_BALANCEMASS( DENSAG,AKV,FCH,G,AMOM(3),BO,ALO);
k3TSOL = F_BALANCETSOL(DCH,DENSAG, AKV, VP, G, AMOM(3), BO, ALO,
UA1, TSOL3, TAG3, CP, AMTP);
k3TAG = F_BALANCETAG(FAGI,VAG,TAGI,TAG3,UA1,TSOL3,DENSAG,CPAG);

% Cuarta K
for i=2:99
    nk4(i)=Population(i)+(H*k3N(i));
end
nk4(1)=Population(1);
CONC4= CONC1+ (H*k3CONC);
TSOL4= TSOL1+ (H*k3TSOL);
TAG4= TAG1+ (H*k3TAG);
YTSOLstring = num2str(TSOL4);
YCONCstring = num2str(CONC4);

nT = NTotal(nk4);
nT= nT+ nk4(1);

```

```

k4N = ComputeFN(nk4,G,ALFA,BO,nT,DL);

set_param('PROPIEDADES/TSOL','Value',YTSOLstring);
set_param('PROPIEDADES/CONC','Value',YCONCstring);
set_param('PROPIEDADES','StartTime','0.0','StopTime','0.0');
[T2,X2,y2]=sim('PROPIEDADES');

DENSAG = F_DENSAG(TSOL4);
CPAG = F_CPAG(TSOL4);
DCH = y2(3);
CP = y2(4);

k4CONC = F_BALANCEMASS( DENSAG,AKV,FCH,G,AMOM(3),BO,ALO);
k4TSOL = F_BALANCETSOL(DCH,DENSAG, AKV, VP, G, AMOM(3), BO, ALO,
UA1, TSOL4, TAG4, CP, AMTP);
k4TAG = F_BALANCETAG(FAGI,VAG,TAGI,TAG4,UA1,TSOL4,DENSAG,CPAG);

for i=2:99
    Population(i)=Population(i)+(H/6)*(k1N(i)+ 2*k2N(i)+2*k3N(i)+k4N(i));
End

Population(1)= BO/G;
CONC(INTERVAL) = CONC(INTERVAL-1)+(H/6)*(k1CONC + 2*k2CONC +
2*k3CONC + k4CONC);
TSOL(INTERVAL) = TSOL(INTERVAL-1)+(H/6)*(k1TSOL + 2*k2TSOL +
2*k3TSOL + k4TSOL);
TAG(INTERVAL) = TAG(INTERVAL-1)+(H/6)*(k1TAG + 2*k2TAG + 2*k3TAG +
k4TAG);
Time(INTERVAL) = Time(INTERVAL-1)+H;

```

```
% Momentos de Distribución al Tiempo X = X + H
```

```
AMOM = MOMENT(Population',LongInitial,HSIM);
DESVIACION(INTERVAL) = F_DESV(AMOM(4),AMOM(5), AMOM(6));
MEDIA(INTERVAL) = F_MEDIA(AMOM(4), AMOM(5));
AMT = F_AMT(DENSC,AKV,AMOM(4));
AMCF = AMT*2873.42;
```

```
TSOLstring = num2str(TSOL(INTERVAL));
CONCstring = num2str(CONC(INTERVAL));
set_param('PROPIEDADES/TSOL','Value',TSOLstring);
set_param('PROPIEDADES/CONC','Value',CONCstring);
set_param('PROPIEDADES','StartTime','0.0','StopTime','0.0');
[T2,X2,y2]=sim('PROPIEDADES');
```

```
CSAT = y2(1);
```

```
SR = y2(2);
```

```
BO
```

```
=
```

```
F_BO(ParameterRPM(1),ParameterRPM(2),ParameterRPM(3),ParameterRPM(4),Pa
rameterRPM(5),SR,AMT);
```

```
ALFA
```

```
=
```

```
F_ALFA(ParameterRPM(1),ParameterRPM(9),ParameterRPM(10),ParameterRPM(1
1),ParameterRPM(12),SR,AMT);
```

```
G
```

```
=
```

```
F_G(ParameterRPM(1),ParameterRPM(6),ParameterRPM(7),ParameterRPM(8),SR);
```

```
end
```

```
close_system('PROPIEDADES',1);
```

```
Time';  
CONC';  
TSOL';  
TAG';  
MEDIA';  
DESVIACION';
```

```
axes(handles.PlotConc)
```

```
index_plot = get(handles.Listplot,'Value');
```

```
if (index_plot == 1)  
    plot(Time,TSOL)  
    xlabel('Tiempo (min)')  
    ylabel('Temperatura (°C)')  
    title('Tiempo vs Temperatura')  
    axis([0 20 28 34])
```

```
end
```

```
if (index_plot == 2)  
    plot(Time,CONC)  
    xlabel('Tiempo (min)')  
    ylabel('Concentracion')  
    title('Tiempo vs concentracion')  
    axis([0 20 0.77 0.82])
```

```
end
```



```
if (index_plot == 3)
    plot(Time,MEDIA)
    xlabel('Tiempo (min)')
    ylabel('D(4,3)')
    title('Tiempo vs media')
    axis([0 20 300 700])
end
```

```
if (index_plot == 4)
    plot(Time,DESVIACION)
    xlabel('Tiempo (min)')
    ylabel('S(4,3)')
    title('Tiempo vs desviacion estandar')
    axis([0 20 0 500])
end
```

APENDICE C

Datos Iniciales para el uso del Simulador

En este apéndice se muestran los datos iniciales necesarios para que pueda hacerse uso del simulador, fueron tomados de la investigación realizada por Salcedo, 2000. Aclarando que todos los datos que aquí se muestran solamente se pueden utilizar para el Sulfato de Amonio, en caso de utilizarlo para otra solución necesitaran ser sustituidos.

Será necesario el valor inicial de la Distribución de Tamaño de Cristal (DTC), obtenida experimentalmente, que se muestra a continuación en la Tabla C.1.

Tabla C.1 Distribución de tamaño de cristal

	200rpm	300rpm	400rpm
n ₀	0	0	0
n ₁	0	4.143	789.991
n ₂	1.106	59.488	4137.28
n ₃	18.634	307.437	10585.56
n ₄	82.157	706.982	16319.028
n ₅	206.097	1206.05	21137.422
n ₆	435.951	1602.664	23521.915
n ₇	672.925	1812.183	23784.902
n ₈	896.646	1844.253	22654.245
n ₉	1059.713	1741.245	20675.859
n ₁₀	1144.729	1553.229	18276.859
n ₁₁	1165.896	1339.231	15896.088
n ₁₂	1121.214	1116.026	13554.426
n ₁₃	1036.378	911.189	11438.628
n ₁₄	928.874	731.63	9577.148
n ₁₅	815.331	581.038	7991.837
n ₁₆	696.964	456.567	6619.324
n ₁₇	588.424	356.543	5477.396
n ₁₈	490.578	276.984	4527.727
n ₁₉	404.032	214.507	3735.862
n ₂₀	330.126	165.514	3082.9
n ₂₁	267.814	127.476	2543.946
n ₂₂	216.131	98.357	2100.438
n ₂₃	173.784	75.959	1736.901
n ₂₄	138.801	58.299	1435.941
n ₂₅	111.019	45.077	1190.358
n ₂₆	88.465	34.808	987.605

n ₂₇	70.397	26.954	820.944
n ₂₈	55.622	20.723	681.588
n ₂₉	44.463	16.197	570.028
n ₃₀	35.267	12.564	475.8
n ₃₁	27.808	9.71	396.719
n ₃₂	22.122	7.602	332.849
n ₃₃	17.597	5.954	279.736
n ₃₄	13.999	4.666	235.469
n ₃₅	11.135	3.66	198.457
n ₃₆	8.848	2.874	167.358
n ₃₇	7.007	2.254	141.025
n ₃₈	5.589	1.782	119.457
n ₃₉	4.46	1.411	101.393
n ₄₀	3.562	1.118	86.221
n ₄₁	2.832	0.882	73.222
n ₄₂	2.26	0.7	62.31
n ₄₃	1.813	0.559	53.173
n ₄₄	1.457	0.448	45.479
n ₄₅	1.173	0.36	38.99
n ₄₆	0.947	0.29	33.508
n ₄₇	0.767	0.234	28.869
n ₄₈	0.621	0.189	24.877
n ₄₉	0.491	0.149	21.113
n ₅₀	0.405	0.123	18.304
n ₅₁	0.335	0.102	15.91
n ₅₂	0.277	0.084	13.864
n ₅₃	0.216	0.066	11.784
n ₅₄	0.175	0.053	10.257
n ₅₅	0.142	0.044	9.007
n ₅₆	0.111	0.034	7.813
n ₅₇	0.082	0.025	6.701
n ₅₈	0.067	0.021	5.938
n ₅₉	0.052	0.016	5.194
n ₆₀	0.045	0.014	4.45
n ₆₁	0.041	0.013	3.977
n ₆₂	0.036	0.011	3.448
n ₆₃	0.031	0.01	3.001
n ₆₄	0.028	0.009	2.705
n ₆₅	0.023	0.007	2.282
n ₆₆	0.02	0.006	2.061
n ₆₇	0.016	0.005	1.802
n ₆₈	0.013	0.004	1.578
n ₆₉	0.011	0.004	1.426
n ₇₀	0.008	0.003	1.213
n ₇₁	0.007	0.002	1.12
n ₇₂	0.005	0.002	0.944
n ₇₃	0.004	0.001	0.873
n ₇₄	0.003	0.001	0.747
n ₇₅	0.003	0.001	0.684

n ₇₆	0.002	0.001	0.593
n ₇₇	0.002	0.001	0.542
n ₇₈	0.001	0	0.473
n ₇₉	0.001	0	0.433
n ₈₀	0.001	0	0.379
n ₈₁	0.001	0	0.349
n ₈₂	0.001	0	0.302
n ₈₃	0.001	0	0.282
n ₈₄	0.001	0	0.238
n ₈₅	0.001	0	0.227
n ₈₆	0	0	0.185
n ₈₇	0	0	0.177
n ₈₈	0	0	0.147
n ₈₉	0	0	0.134
n ₉₀	0	0	0.117
n ₉₁	0	0	0.1
n ₉₂	0	0	0.093
n ₉₃	0	0	0.075
n ₉₄	0	0	0.072
n ₉₅	0	0	0.066
n ₉₆	0	0	0.062
n ₉₇	0	0	0.058
n ₉₈	0	0	0.053

A continuación en la Tabla C.2 se muestran los parámetros de ajuste para las cinéticas de nucleación, crecimiento y producción-reducción.

Tabla C.2 Parámetros de ajuste para las cinéticas

Cinética	Parámetro	Valor de ajuste		
		200 rpm	300 rpm	400 rpm
B ⁰	k _b	180	184.98	209.94
B ⁰	b	0.56032	0.38942	0.29972
B ⁰	o	0.001	0.0010019	0.0030019
B ⁰	p	0.05	0.049981	0.039971
G	k _g	0.00092365	0.00079103	0.00089961
G	g	1.5	1.272	1.3996
G	h	1.3334	1.1479	1.1996
a	k _a	1	1	1
a	c	0.1	0.01	0.060039
a	k	1.09	1.0895	0.0030563
a	d	0.001180	0.009	0.001999

Enseguida se darán las condiciones iniciales de temperatura en el cristalizador (T), temperatura en el agua de enfriamiento (TAG), temperatura del agua que entra a

la chaqueta (TAGI) y concentración de la solución (C).

Tabla C.3 Condiciones iniciales del cristalizador

	200rpm	300rpm	400rpm
T	31.3911708	31.5025193	31.3438172
TAG	30.8237993	30.832343	30.832343
TAGI	30.6753022	30.7217276	30.7339107
C	0.80678451	0.8072485	0.79167861

Tabla C.4 Tamaño de Cristales (L)

	L(cm)				
L ₀	0.00151263	L ₃₃	0.06834588	L ₆₇	0.13720438
L ₁	0.00353788	L ₃₄	0.07037113	L ₆₈	0.13922963
L ₂	0.00556313	L ₃₅	0.07239638	L ₆₉	0.14125488
L ₃	0.00758838	L ₃₆	0.07442163	L ₇₀	0.14328013
L ₄	0.00961363	L ₃₇	0.07644688	L ₇₁	0.14530538
L ₅	0.01163888	L ₃₈	0.07847213	L ₇₂	0.14733063
L ₆	0.01366413	L ₃₉	0.08049738	L ₇₃	0.14935588
L ₇	0.01568938	L ₄₀	0.08252263	L ₇₄	0.15138113
L ₈	0.01771463	L ₄₁	0.08454788	L ₇₅	0.15340638
L ₉	0.01973988	L ₄₂	0.08657313	L ₇₆	0.15543163
L ₁₀	0.02176513	L ₄₃	0.08859838	L ₇₇	0.15745688
L ₁₁	0.02379038	L ₄₄	0.09062363	L ₇₈	0.15948213
L ₁₂	0.02581563	L ₄₅	0.09264888	L ₇₉	0.16150738
L ₁₃	0.02784088	L ₄₆	0.09467413	L ₈₀	0.16353263
L ₁₄	0.02986613	L ₄₇	0.09669938	L ₈₁	0.16555788
L ₁₅	0.03189138	L ₄₈	0.09872463	L ₈₂	0.16758313
L ₁₆	0.03391663	L ₄₉	0.10074988	L ₈₃	0.16960838
L ₁₇	0.03594188	L ₅₀	0.10277513	L ₈₄	0.17163363
L ₁₈	0.03796713	L ₅₁	0.10480038	L ₈₅	0.17365888
L ₁₉	0.03999238	L ₅₂	0.10682563	L ₈₆	0.17568413
L ₂₀	0.04201763	L ₅₃	0.10885088	L ₈₇	0.17770938
L ₂₁	0.04404288	L ₅₄	0.11087613	L ₈₈	0.17973463
L ₂₂	0.04606813	L ₅₅	0.11290138	L ₈₉	0.18175988
L ₂₃	0.04809338	L ₅₆	0.11492663	L ₉₀	0.18378513
L ₂₄	0.05011863	L ₅₇	0.11695188	L ₉₁	0.18581038
L ₂₅	0.05214388	L ₅₈	0.11897713	L ₉₂	0.18783563
L ₂₆	0.05416913	L ₅₉	0.12100238	L ₉₃	0.18986088
L ₂₇	0.05619438	L ₆₀	0.12302763	L ₉₄	0.19188613
L ₂₈	0.05821963	L ₆₁	0.12505288	L ₉₅	0.19391138
L ₂₉	0.06024488	L ₆₂	0.12707813	L ₉₆	0.19593663
L ₃₀	0.06227013	L ₆₃	0.12910338	L ₉₇	0.19796188
L ₃₁	0.06429538	L ₆₄	0.13112863	L ₉₈	0.19998713
L ₃₂	0.06632063	L ₆₅	0.13315388		
		L ₆₆	0.13517913		