

**INTRODUCCIÓN A LA INGENIERÍA DE LOS PROCESOS QUÍMICOS.** Tema desarrollado por los profesores Dr. D. Antonio Aznar, Dr. D. Juan Carlos Cabanelas y Dra. D<sup>a</sup>. Berna Serrano del Dpto. de Ciencia e Ingeniería de Materiales e Ingeniería Química de la Universidad Carlos III de Madrid.



## CONCEPTO DE INGENIERÍA QUÍMICA (IQ).

Concebir, calcular, proyectar, hacer construir y hacer funcionar las instalaciones donde poder llevar a cabo a escala industrial una reacción química cualquiera o una operación de separación inmediata. (J.Cathalá 1951)

### 1.1.- INTRODUCCIÓN A LA INGENIERÍA DE LOS PROCESOS QUÍMICOS:

#### 1.1.1.- Concepto y fundamentos de la Ingeniería Química.

“La Ingeniería química trata de concebir, calcular, proyectar, hacer construir y hacer funcionar las instalaciones donde poder llevar a cabo a escala industrial una reacción química cualquiera o una operación de separación inmediata” (J.Cathala, 1951, Institut du Génie Chimique de Toulouse). De esta definición se desprende que la ingeniería química se ocupa tanto de la transformación de reactivos en productos (reacción química) como de los procesos de cambio de fase (fusión, evaporación, etc.)y de solubilización; así como de las instalaciones donde estas transformaciones han de realizarse, de la adecuación de las materias primas a utilizar y de los productos y subproductos formados y de los factores económicos implicados.



## PARÁMETROS DE UN PROCESO QUÍMICO

### LABORATORIO

Reacción:

- ✓ Cinética
- ✓ Termodinámica
- ✓ Mecanismo de reacción

### INDUSTRIA

Preparación de materias primas.

Reacción:

- ✓ Cinética.
- ✓ Termodinámica.

Acondicionamiento de productos.

Factores económicos.



## PARAMETROS DE UN PROCESO QUÍMICO

Para el estudio de cualquier proceso químico tanto a escala de laboratorio como industrial, es necesario conocer los parámetros cinéticos ( $k$ , orden de reacción, ...), termodinámicos ( $\Delta H$ ,  $\Delta G$ ,  $K_{eq}$ , ...) y mecanísticos del mismo. Sin embargo los procesos industriales involucran otros estudios complementarios como la preparación de las materias primas y acondicionamiento de los productos obtenidos (pureza, tamaño de partícula, estado de agregación, ...), además del estudio de viabilidad económica de todo el proceso.

Una reacción química a escala industrial tiene unos condicionantes económicos importantes que la diferencian de la que se puede realizar a escala laboratorio. De tal manera que si en toda reacción química podemos decir en general que los reactivos se transforman en productos, en un proceso industrial tiene que darse que

### LOS REACTIVOS SE TRANSFORMAN EN PRODUCTOS Y BENEFICIO ECONÓMICO

en caso de que no exista beneficio económico el proceso INDUSTRIAL no se realiza.



Universidad  
Carlos III de Madrid  
www.uc3m.es

# Introducción a la Ingeniería de los Procesos Químicos

## BASES DE LA INGENIERÍA QUÍMICA

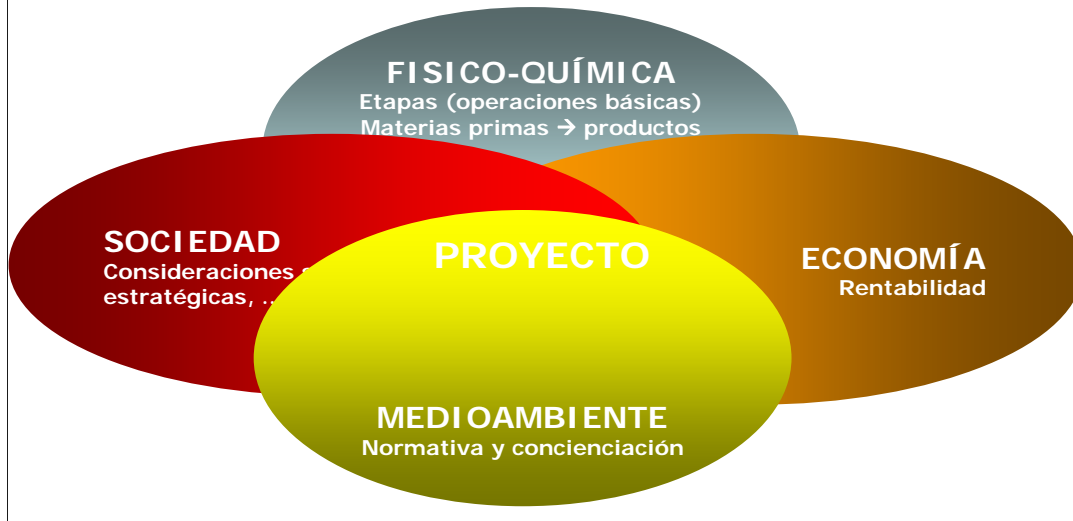
A. Aznar, J.C. Cabanelas y B. Serrano



Podemos decir que la Ingeniería Química se basa tanto en el estudio de las transformaciones de la materia como de las instalaciones donde se llevan a cabo estas transformaciones y de los factores económicos que las condicionan.



## FACTORES QUE INFLUYEN EN UN PROYECTO



### FACTORES QUE INFLUYEN EN UN PROYECTO

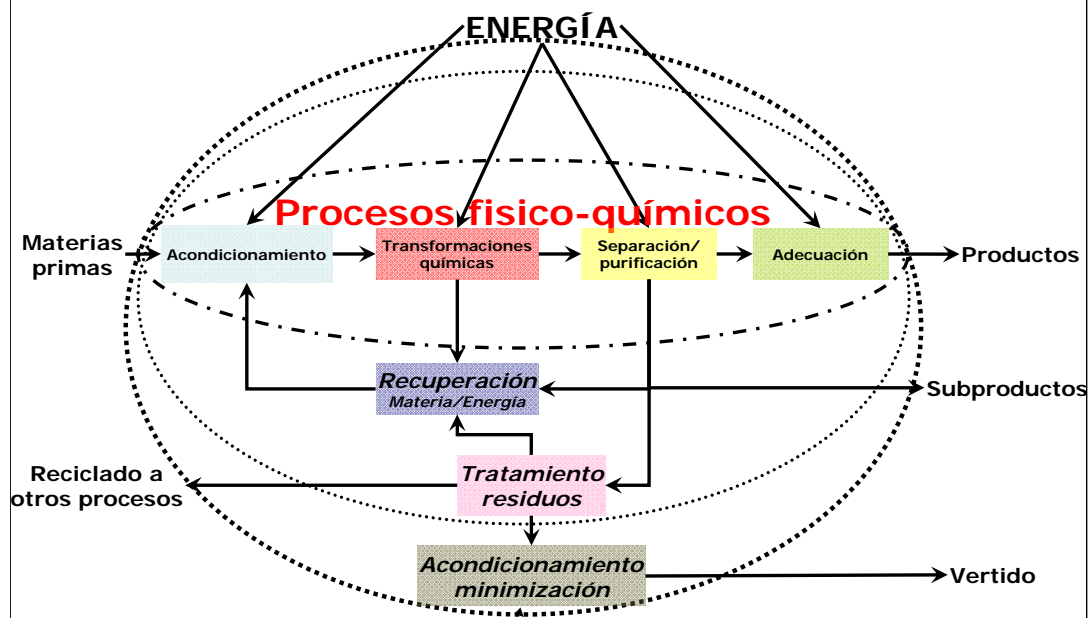
En todo desarrollo de Ingeniería Química habrá que tener en cuenta los factores físico-químicos, económicos, medioambientales y sociales del mismo.

Los factores físico-químicos se concretan en la aplicación de las ciencias básicas al diseño de las etapas físicas y químicas necesarias en el proceso productivo. Desde las materias primas hasta la obtención del producto, existen una serie de etapas, que son englobadas y estudiadas bajo la denominación de **operaciones básicas o unitarias**. En aquellas etapas donde se realizan reacciones químicas será necesario el estudio cinético de las mismas. Este estudio está encuadrado en la disciplina denominada Ingeniería de la reacción química.

El principio fundamental en un sistema de economía de mercado es el factor de rentabilidad económica, de forma que la rentabilidad de un proyecto nos indicará la viabilidad del mismo. En el caso de la economía dirigida, por contra, serán factores como el desarrollo regional o la necesidad de ocupar mano de obra, por encima de la obtención de un mínimo coste o de plusvalías, los que motivarán el desarrollo de un proyecto.

El factor medioambiental interviene en cuanto al cumplimiento de las normativas existentes, así como en el aumento de la conciencia de respeto medioambiental del consumidor. Estos dos aspectos cada vez influirán más en la selección del propio proceso productivo y afectarán al coste del mismo.

Finalmente existen una serie de factores sociales también importantes a la hora de diseñar una estrategia de producción como son: el empleo de mano de obra de una serie de grupos sociales concretos, por criterios de edad, étnicos o religiosos, origen regional de las materias primas, desarrollo de nuevas modas de consumo, creación de empleo indirecto, sectores productivos a desarrollar, etc.



El objetivo de la industria química es transformar las materias primas mediante una serie de procesos en productos útiles. Estos procesos incluyen etapas donde existe reestructuración de los enlaces de las sustancias que intervienen (procesos químicos) o simplemente separación, modificación de tamaño y/o cambio de fase (procesos físicos).

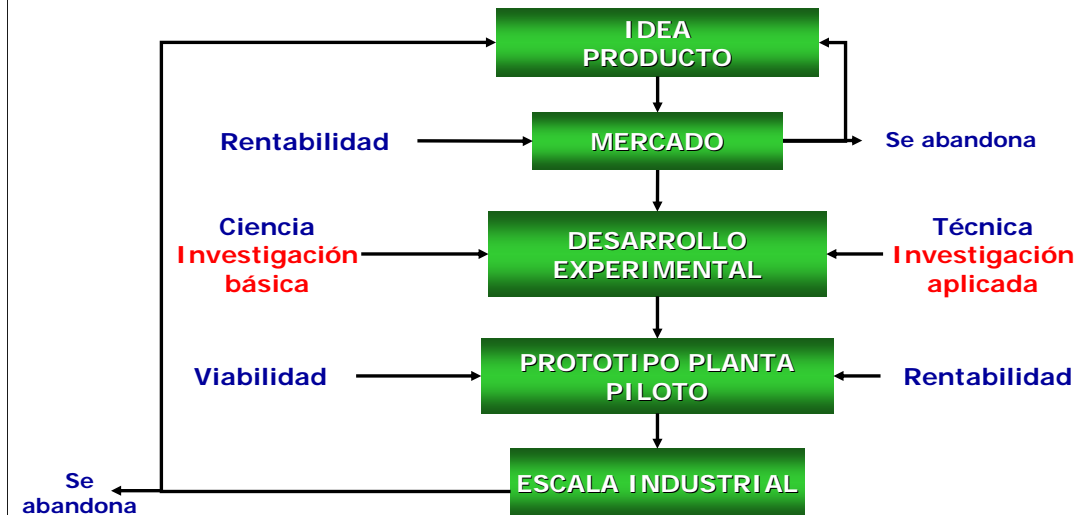
Este nivel básico ha sido el que ha caracterizado las actuaciones de la industria química en sus primeros tiempos (s. XIX). En la segunda mitad del s. XX, y sobre todo a partir de la crisis energética y de materias primas de los años 70, comenzando a imponerse una fuerte tendencia a tener en cuenta la producción de subproductos y el consumo energético de los procesos. En esta segunda etapa de desarrollo de la industria química, se aprecia un fuerte tendencia a optimizar los rendimientos de los procesos (empleo generalizado de catalizadores) y a la recuperación y tratamiento de los subproductos productos, bien para su reutilización y reciclado.

En la actualidad la tendencia de la industria química es a minimizar la producción de sustancias no utilizables, minimizando el consumo de materias primas y energía y con ello el vertido de residuos y su impacto ambiental. Una creciente conciencia medioambiental de la sociedad, junto a una legislación más exigente, esta favoreciendo la aparición una "QUIMICA VERDE".



**Proceso químico industrial:** satisfacer una demanda existente de un producto, un servicio o una tecnología.

### ETAPAS DEL DESARROLLO DE UN DISEÑO A ESCALA INDUSTRIAL



### ETAPAS DEL DESARROLLO DE UN DISEÑO A ESCALA INDUSTRIAL

Todo proceso químico industrial surge por la necesidad de satisfacer una demanda existente, bien de un producto, de un servicio o de una tecnología. El interés social y/o la rentabilidad económica de satisfacer dicha demanda lleva al ingeniero a ejecutar los siguientes pasos:

- i) Búsqueda de una idea o un producto en base a una necesidad existente o mejora de alguno ya existente en el mercado, acondicionándolo a las nuevas exigencias del mismo.
- ii) Contraste de dicha idea con el mercado. Ver la rentabilidad de la idea en función de las condiciones de demanda y oferta.
  - ✓ Si la idea tiene aceptación: iniciar el proceso.
  - ✓ Si la idea no es válida, se modifica o descarta la misma.
- iii) Desarrollo del proceso, realizando la investigación necesaria:
  - ✓ Básica si es un proceso nuevo (conocimiento científico).
  - ✓ Aplicada para obtener un conocimiento científico-técnico.
- iv) Aplicación del conocimiento científico-técnico alcanzado para idear aplicaciones, procesos y sistemas de producción ajustados a la obtención del producto o ingenio deseado.
  - ✓ Realización del prototipo o planta piloto.
  - ✓ Redimensionado a escala industrial, y contraste con el mercado mediante el estudio de la viabilidad y rentabilidad del proceso referido al mercado. Si el proceso es rentable se pasa al diseño del proceso a escala industrial. Si no, se abandona o se rediseña.





Resumiendo, el desarrollo de cualquier proceso químico implica:

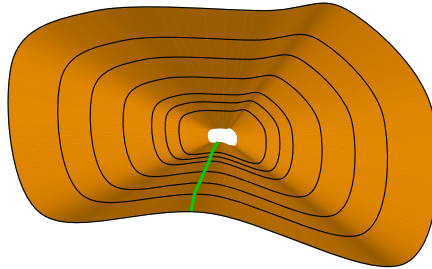
- En todo proceso químico las ciencias básicas (química, física, biología, matemáticas, etc.) nos permiten conocer los parámetros termodinámicos, cinéticos y de movimiento que gobiernan el mismo, de manera que se puedan parametrizar y generar expresiones algebraicas para su cálculo.
- Este conocimiento nos permite evaluar los fenómenos de transferencia de materia, calor y cantidad de movimiento que van a gobernar el proceso.
- Necesitamos utilizar otras disciplinas como la economía, diseño y control de procesos para que el proceso propuesto sea no solo técnicamente viable, sino también económicamente. Además hay que tener permanentemente presente los temas de seguridad de operarios, usuarios y población en general, tanto durante la construcción de la instalación como durante la explotación de la misma, transporte y almacenamiento de materias primas y productos elaborados o semielaborados y por supuesto durante el uso final de los mismos y en caso de accidente o catástrofe.
- Hay que tener presente el medio ambiente durante todas las etapas del proceso, de manera que la huella medioambiental del proceso productivo sea la menor posible. Este planteamiento incidirá tanto en la sostenibilidad medio ambiental, como en la económica y social del proceso.





## FENÓMENOS DE TRANSPORTE

Gradiente de la magnitud ( $f(t)$  ó  $f(x)$ ) → TRANSPORTE → equilibrio



$$\frac{\delta [\text{conc}]}{\delta (x \text{ ó } t)} \neq 0$$

Transporte de materia

$$\frac{\delta T}{\delta (x \text{ ó } t)} \neq 0$$

Transporte de energía

$$\frac{\delta v}{\delta (x \text{ ó } t)} \neq 0$$

Transporte de cantidad  
de movimiento

### 1.1.2.- FENOMENOS DE TRANSPORTE.

Cualquier proceso físico o químico tiene por objeto modificar las condiciones de una determinada cantidad de materia, para adecuarla a nuestros fines. Esta modificación se provoca alterando los valores de las variables que definen al sistema, dando lugar al transporte de alguna de las tres propiedades intensivas que se conservan en las colisiones moleculares: la materia, la energía o la cantidad de movimiento. La variación de una de estas propiedades es provocada por la existencia de un gradiente de la misma, es decir, de una variación a lo largo de una o más dimensiones (ejes de coordenadas espaciales y tiempo):

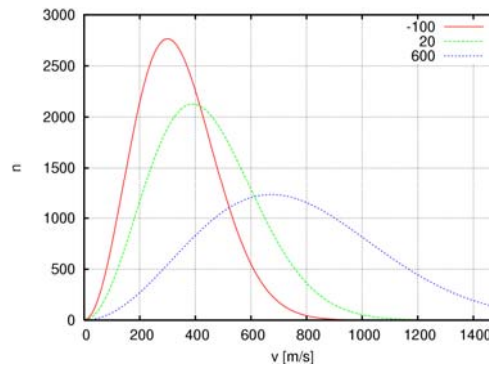
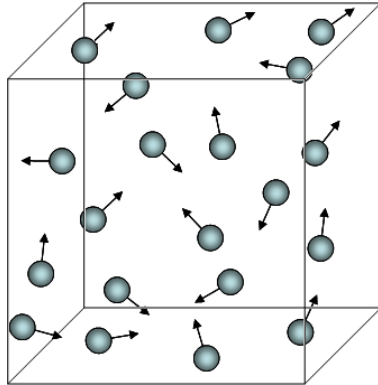
- ✓ Si en una mezcla fluida multicomponente existe un gradiente en la composición de alguno de ellos, existirá un transporte de materia.
- ✓ Si existe en un medio un gradiente de temperatura, se producirá un transporte de energía.
- ✓ Si existe un gradiente de velocidades entre diferentes partes de un fluido, se generará un transporte de cantidad de movimiento.

En definitiva, para que exista un proceso debe existir un gradiente de la magnitud independiente. Este gradiente es la fuerza impulsora y el fenómeno de transporte se realiza en el sentido de alcanzar el estado de mínima energía (equilibrio) en el que las magnitudes independientes son constantes en todas las direcciones, es decir el sistema sufre un cambio en el sentido contrario al gradiente. El objetivo del estudio de los fenómenos de transporte es pues, determinar la velocidad con que se alcanza el equilibrio (de composición, de energía y de cantidad de movimiento) en el sistema.

Los fenómenos de transporte pueden estudiarse a nivel macroscópico, microscópico o molecular.



## TRANSPORTE MOLÉCULAR



### TRANSPORTE A NIVEL MOLECULAR

La descripción molecular se caracteriza porque trata un sistema macro o microscópico como si estuviese compuesto de entidades individuales infinitamente pequeñas, cada una de las cuales sigue ciertas leyes. En consecuencia, las propiedades y las variables de estado del sistema se obtienen como suma de las de todas las entidades que constituyen el sistema. La mecánica cuántica y la mecánica estadística son métodos típicos de análisis molecular de las propiedades de los sistemas, sin embargo, la complejidad de cálculo no hace viable esta aproximación como método de cálculo de los fenómenos de transporte en la mayor parte de los problemas, permitiendo al ingeniero utilizar estos conceptos en el análisis y diseño.



## TRANSPORTE MICROSCÓPICO

Ley de conservación de cantidad de movimiento → Ley de Newton de la viscosidad

Ley de conservación de energía → Ley de Fourier

Ley de conservación de materia → Ley de Fick

$$\Delta F_z = -\delta \, d\pi/dz$$

$\Delta F_z$  = flujo de la propiedad transportada  $\pi$

$-\delta$  = resistencia al desplazamiento de la propiedad transportada  $\pi$

$d\pi/dz$  = cantidad de la propiedad  $\pi$  transferida por unidad de tiempo o de espacio

	Ley	$\Delta F_z$	$\delta$	$\pi$
Cantidad de movimiento	Newton	$\tau_{zx}$	$\nu, \eta$	$v_x, \rho \cdot v_x$
Energía	Fourier	$Q_z$	$K, \alpha$	$T, \rho \cdot c_p \cdot T$
Materia	Fick	$J_{iz}$	$D_i \cdot \rho$	$X_i$

### TRANSPORTE A NIVEL MICROSCÓPICO

El transporte a nivel microscópico corresponde a un tratamiento fenomenológico del problema y admite que el sistema puede considerarse como continuo, obviándose las interacciones moleculares detalladas y planteando ecuaciones de balance diferencial para materia, cantidad de movimiento y energía. Respondiendo a la expresión general

$$\Delta F_z = -\delta \, d\pi/dz$$

donde  $d\pi/dz$  es la variación en la dirección  $z$  de la variable que gobierna el transporte de la propiedad,  $\delta$  es una variable característica de la resistencia que pone el sistema al transporte de la propiedad en estudio, y  $\Delta F_z$  es el flujo de la propiedad transportada.

- Ley de Newton de la viscosidad: En el caso de transporte de cantidad de movimiento  $\tau_{zx}$  es la fuerza que hay que ejercer para que se desplace una porción de fluido con respecto al de sus inmediaciones, suponiendo régimen laminar,  $\eta$  y  $\nu$  son respectivamente la viscosidad y la viscosidad cinemática y  $v_x$  la velocidad cinemática.

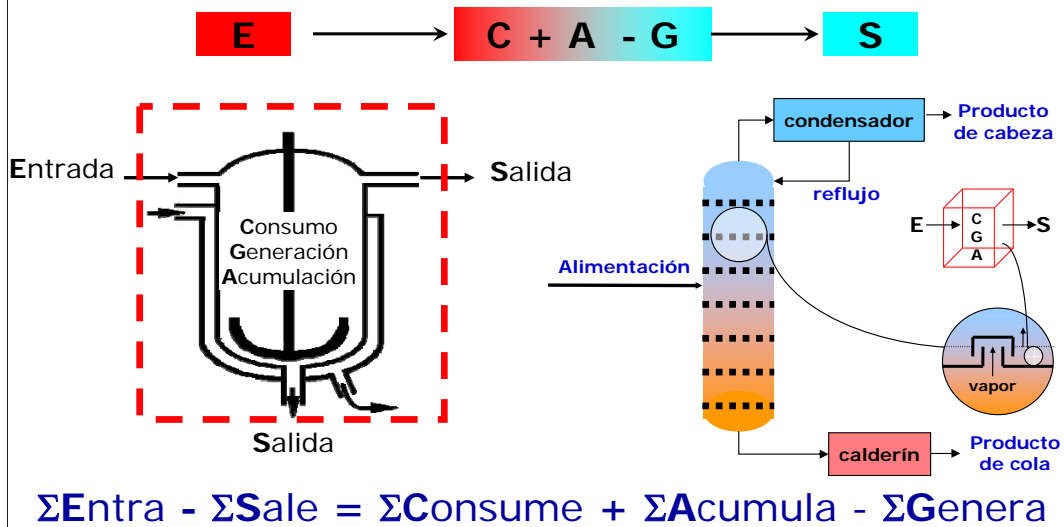
- Ley de Fourier: El transporte de energía térmica se rige por la ley de Fourier donde  $Q_z$  es el flujo de calor  $K$  y  $\alpha$  son la conductividad y difusibilidad térmica respectivamente y  $c_p$  es la capacidad calorífica a presión constante.

- Ley de Fick: No habiendo agitación la transferencia de masa viene gobernada por la ley de Fick donde  $J_{iz}$  es la densidad de flujo del componente "i" en la dirección  $z$ , siendo  $D_i$  el coeficiente de difusión de dicho componente y  $X_i$  su fracción molar.

Para procesos sin movimiento o con flujo laminar, el tratamiento a nivel microscópico encuentra numerosas aplicaciones prácticas, aunque con frecuencia, resulta excesivamente complicado. Para flujo turbulento y elevado grado de mezcla no presenta mucha aplicación práctica y es necesario recurrir a otros métodos de descripción.



## TRANSPORTE MACROSCÓPICO



### TRANSPORTE MACROSCÓPICO

El transporte macroscópico de una propiedad en un sistema es el cálculo de la entrada (**E**), salida (**S**), acumulación (**A**), generación (**G**) y consumo (**C**) de dicha propiedad en el sistema, el cual viene definido por unos límites físicos reales (paredes exteriores del sistema) o conceptuales (límites imaginarios impuestos para el cálculo).

En cada sistema podemos aplicar al conjunto el principio de conservación por el cual:

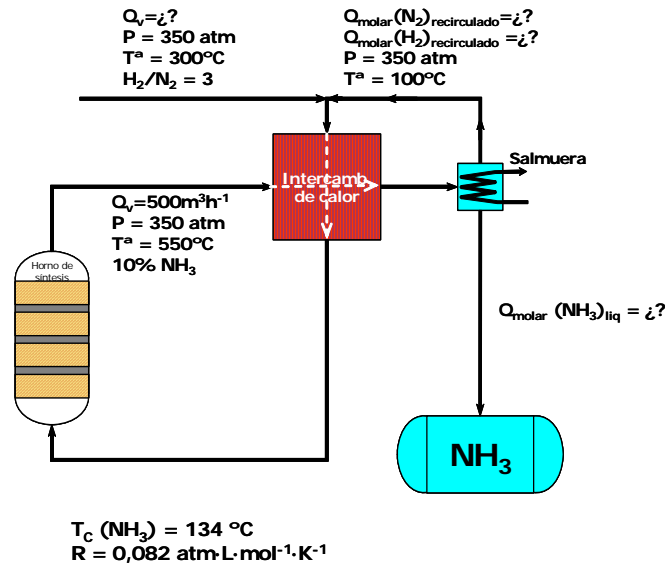
#### LA SUMA DE ENERGÍA Y MATERIA SE CONSERVA

de manera que como puede haber entradas de reactivos, salida de productos y subproductos, entrada y salida de inertes, refrigerantes, calefactores, etc. El principio de conservación dice que:

$$\Sigma \text{ Entradas} - \Sigma \text{ Salidas} = \Sigma \text{ Consume} + \Sigma \text{ Acumula} - \Sigma \text{ Generación}$$



## DIAGRAMAS DE FLUJO



## DIAGRAMAS DE FLUJO

El diagrama de flujo es una representación gráfica de la secuencia de pasos que se realizan para obtener un cierto producto. En el deben estar indicadas todas las entradas y salidas del sistema y de cada una de las subunidades en que se pueda dividir este, de manera que recoja la información sobre las propiedades de las distintas entradas y salidas.

Sirven para proporcionar información clara, ordenada y concisa sobre el proceso global y sus diversas partes.



## CALCULO DE BALANCES DE MATERIA

$$\Sigma \text{Entra} - \Sigma \text{Sale} = \Sigma \text{Consume} + \Sigma \text{Acumula} - \Sigma \text{Genera}$$

1. **Determinar los límites del sistema.**
2. **¿De que se puede hacer un balance?**
  - de toda la materia (globales)
  - de un compuesto (ej.  $\text{H}_2\text{SO}_4$ )
  - de un grupo de átomos (ej.  $\text{SO}_4^{2-}$ )
  - de un solo átomo (ej. S, O)
  - de otras sustancias de composición no identificada pero que no cambian en el sistema (ej. Gas inerte, sólidos ...)
3. **¿Cuántos balances pueden hacerse?** Para N componentes, un total de N+1 balances de los que solo N son independientes. Se deben escoger como ecuaciones independientes aquellas que conlleven menor error experimental.
4. **¿Cuántos se necesitan?** Tantos como  $n^\circ$  de variables independientes -1, pues tomamos una de ellas como base de cálculo.

### 1.1.3.- BALANCES DE MATERIA

Un balance de materia es un inventario entre la masa que entra en el sistema y la que sale. En estado estacionario (no hay variación con el tiempo) se plantea un sistema de ecuaciones algebraicas lineales, mientras que en estado no estacionario se planteará un sistema de ecuaciones diferenciales de 1<sup>er</sup> orden con el tiempo.

Lo primero que hay que determinar son los límites del sistema sobre el que se va a efectuar el balance, sean estos reales o conceptuales.

El balance se efectuará sobre toda la materia que entre y salga del sistema (balance global) o sobre aquellos compuestos, grupos atómicos o átomos (balances parciales) que participen en el sistema. Aquellas sustancias que permanezcan invariantes durante el proceso (gases inertes, sólidos no reactivos, etc.), servirán para relacionar las entradas y salidas del sistema.

El número de ecuaciones a plantear debe ser igual al de componentes a determinar (variables independientes), en caso de que se puedan plantear más ecuaciones estas serán combinación lineal de otras.



**BASE DE CÁLCULO:** Magnitud establecida arbitrariamente a la que referimos todos los cálculos de un balance.

- No afecta a los resultados de las variables intensivas (composiciones, temperaturas, etc.).
- Afecta a los resultados de las variables extensivas (caudales, etc.).
- Puede afectar a la laboriosidad de los cálculos implicados.

### ¿QUÉ BASE DE CÁLCULO DEBEMOS ESCOGER?

- Magnitud de las entradas o salidas del proceso de la que mas datos conozcamos.
- En sistemas discontinuos utilizar la masa o volumen (si no son gases) que entra o sale del sistema en cada ciclo de alguno de los componentes o corrientes.
- En estado estacionario usar como base de cálculo la unidad temporal a la que se refieran las corrientes de entrada o salida.
- Cien unidades de alguna de las materias de entrada o salida, preferentemente de aquella que no sufra reacción química.

## BASE DE CÁLCULO

Es la magnitud a la que referimos todos los cálculos de un balance de manera arbitraria.

La base de cálculo elegida no influye en el valor de las variables intensivas (no dependen de la masa) y si en el de las extensivas (dependen de la masa de referencia), aunque sobre lo que afecta de una manera radical es en la complejidad de los cálculos a realizar.

Para la selección de una base de cálculo no hay unas reglas exactas, aunque hay ciertas recomendaciones empíricas que ayudan en su selección:

- ✓ Se seleccionará aquella magnitud de la corriente de entrada o de salida de la que más datos conozcamos.
- ✓ En sistemas discontinuos utilizar la masa o volumen (si no son gases) de alguno de los componentes o corrientes que entra o sale del sistema en cada ciclo.
- ✓ En estado estacionario usar como base de cálculo la unidad temporal a la que se refieran las corrientes de entrada o salida.
- ✓ Cien unidades de alguna de las materias de entrada o salida, preferentemente de aquella que no sufra reacción química.





## RESOLUCIÓN DE BALANCES DE MATERIA: Simplificaciones



### 1. Estado estacionario $A = 0$

$$E - S = C - G$$

- Sin reacción química:  $A, G, C = 0$

$$E = S$$

- Con reacción química.

✓ Balance másico global:  $G$  y  $C = 0$

$$E = S$$

✓ Reactivos:  $G = 0$ ;

$$E = S + C$$

✓ Productos:  $C = 0$ ;

$$E = S - G$$

### 2. Estado no estacionario

- Sin reacción química:  $G, C = 0$

$$E - S = A$$

- Con reacción química.

$$E - S = C - G \pm A$$

$A > 0$  productos;  $A < 0$  reactivos

## RESOLUCIÓN DE BALANCES DE MATERIA.

En los sistemas estacionarios (no varían con el tiempo) no existe término de acumulación, de manera que si el proceso es no reactivo el balance de masas se simplifica igualando las entradas a las salidas. En el caso de que exista reacción química la masa global del sistema se mantiene luego las entradas son igual a las salidas; por el contrario los balances parciales deben tener en cuenta los consumos (reactivos) y las generaciones).

En estado no estacionario siempre hay que tener en cuenta el término de acumulación, que puede ser positivo ( $E > S$ ) o negativo ( $E < S$ ) cuando no hay reacción. En el caso de sistemas reactivos el término Acumulación suele ser positivo cuando se refiere a los productos y negativo cuando lo hace a los reactivos.



## RESOLUCIÓN DE BALANCES DE MATERIA: Simplificaciones

- En caso de que varias sustancias se encuentran en proporciones fijas en las diversas corrientes que intervienen, solo se podrá escribir una ecuación independiente entre ellas.
- Si una sustancia se encuentra en las corrientes de salida y entrada invariante, sirve para calcular la relación existente entre dichas corrientes.
- Para el cálculo de las corrientes de recirculación y purga, es conveniente elegir uno de los nodos del circuito, de forma que dichas corrientes de recirculación entren y/o salgan del sistema a calcular.
- El rendimiento de una operación que obtiene un único producto a partir de un único material de partida, es el peso o moles del producto final dividido entre el peso o moles del inicial. En caso de que existan más de un producto final o material de partida, es imprescindible indicar el material de partida sobre el cual se base el cálculo del rendimiento.

### RESOLUCIÓN DE BALANCES DE MATERIA.

En caso de que una o más sustancias se encuentran en proporciones fijas en las diversas corrientes que intervienen, solo se podrá escribir una ecuación independiente entre ellas. Esta situación es habitual en los sistemas con reacción donde la composición de las corrientes de entrada y salida están relacionadas por las proporciones estequiométricas en que intervengan del diferentes reactivos y productos.

Si una sustancia se encuentra en las corrientes de salida y entrada invariante (gas inerte, corriente líquida, etc.), sirve para calcular la relación existente entre dichas corrientes.

Para el cálculo de las corrientes de recirculación y purga, es conveniente elegir uno de los nodos del circuito, de forma que dichas corrientes de recirculación entren y/o salgan por las fronteras elegidas del sistema a calcular.

El rendimiento de una operación que obtiene un único producto a partir de un único material de partida, es el peso o moles del producto final dividido entre el peso o moles del inicial. En caso de que existan más de un producto final o material de partida, es imprescindible indicar el material de partida sobre el cual se base el cálculo del rendimiento.