

**Guía para prácticas de Aspen Plus 7.2 en Operaciones de Separación
G-L y L-L**

Curso 2012-2013

Autor: Carlos José Álvarez Gallego

Licencia: Creative Commons

SESIÓN 1 y 2

Objetivos

- 1) Identificar las herramientas auxiliares de Aspen plus para obtener información útil de tipo termodinámica y de equilibrio de fases para resolver problemas de separación.
- 2) Resolver problemas sencillos tipo Flash y aprender a hacer análisis de sensibilidad y de especificación de condiciones.

Contenido

IMPORTANTE: Entrar por la interfaz de usuario y guardar cada caso en una carpeta individual

Comentar los distintos modelos que emplea ASPEN PLUS para operaciones de separación

En la librería de unidades encontraremos unidades de separación en dos pestañas: *separators* y *columns*. Los bloques con el mismo nombre son la misma unidad , sólo cambia el icono.

- La pestaña *separators* incluye cinco posibilidades:

Sep 1 y Sep 2.

Sep 1 es un separador simple (que puede obedecer a cualquier operación de separación) que simplemente permite especificar la fracción de cada componente de una corriente que se separa. No hay aspectos de diseño, ni relacionados con la naturaleza de la operación y tampoco aspectos energéticos. Simplemente "fracciona" los componentes como una caja negra. Admite varias entradas y salidas pero hay que especificar el fraccionamiento en cada unidad de todos los componentes. Es útil si el balance de energía es desconocido o no importa.

Sep 2 es similar aunque admite algunos parámetros de rendimiento adicionales. En ambos casos se obvian los detalles de la separación.

Flash 2 y flash 3

Flash 2 es un modelo riguroso que simula un separador de una sola etapa con una o más entradas y dos salidas: una de vapor y otra líquida. Opcionalmente se puede especificar una salida adicional de decantación de agua. Permite especificar un comportamiento V-L o V-L-L en su interior para condiciones de mezclas inmiscibles

Como es riguroso necesita de que se especifique el estado energético del sistema indicando dos de los siguientes parámetros: P, T, intercambio de calor o fracción de vapor generada.

Flash 3 es similar aunque se obtienen tres corrientes de salida (V-L-L) lo que implica separación de fases inmiscibles líquidas. Puede especificarse con una corriente de vapor nula lo que lo convierte en un decantador L-L en el que se generan vapores.

Tanto uno como otro permiten especificar un porcentaje de arrastre de la fase líquida en la corriente de salida del vapor.

Los bloques flash además de resolver este tipo de unidades sencillas permiten obtener todo tipo de información termodinámica y de equilibrio de las mezclas de componentes que contienen. Si se especifica una fracción de vapor de 0 se obtienen las condiciones del punto de burbuja y si se especifica una fracción de vapor de 1 se obtienen las condiciones del punto de rocío. Por otra parte si se especifica la condición "*Heat duty = 0*" se convierte en un flash adiabático. Especificando un valor de temperatura es isotérmico.

Decanter:

Obedece a la operación unitaria de separación L-L en una etapa con suficiente tiempo de residencia para estabilizar las fases y sin generación de volátiles (en tal caso hay que usar Flash 3 con $V=0$).

Se debe especificar la condición termodinámica con dos de los tres parámetros :P, T o intercambio de calor. Puede generar información termodinámica y de equilibrio de fases L-L.

- La pestaña columns incluye cuatro modelos genéricos (DSTWU, DISTL, RADFRAC y EXTRACT y cuatro modelos específicos: MULTIFRAC, SCFRAC, PETROFRAC y BATCHSEP).

Modelos simplificados: DSTWU, DISTL y SCFRAC

Los modelos DSTWU y DISTL son los más sencillos y generan columnas únicas. Permiten incorporar una separación de agua en el condensador de cabeza y realizar cálculos *free-water*. El modelo SCFRAC también es del mismo tipo pero tiene aplicaciones específicas de refinería.

El modelo **DSTWU** opera bajo el método de cálculo de fracción ligera y fracción pesada de Winn-Underwood-Gilliland. Sólo admite una alimentación y dos corrientes de salida (cabeza y cola) aunque el condensador de cabeza puede ser total o parcial. Es la mejor opción para mezclas binarias o asimilables a binarias (clave ligera-clave pesada) donde sólo se pretenda optimizar el rendimiento de destilación en base al número de plato y la relación de reflujo. Permite optimizar la colocación del plato de alimentación y calcular los requerimientos de calor en el condensador y el calderín. Su campo de aplicación es el refinado y optimización de la solución de métodos aproximados (McCabe-Thiele y Sorel-Lewis).

Puede generar diagramas y tablas L/D vs NPT.

Por su parte el modelo **DISTL** es similar al DSTWU pero admite una alimentación multicomponente. Se deben especificar la relación de reflujo, el número de platos teóricos y la ratio de productividad (D/F). Luego mediante simulación permite optimizar el resultado.

El modelo **SCFRAC** es más completo aunque sigue siendo un modelo simplificado, pues admite tantas corrientes de salida como se deseen y varias secciones en la columna o incluso alguna corriente de *stripping* por vapor. Su campo de trabajo es el de las unidades típicas de refinería desde un punto de vista no riguroso.

Modelos rigurosos: RADFRAC, PETROFRAC, MULTIFRAC, BATCHSEP Y EXTRACT

EXTRAC es un modelo exclusivo de extracción L-L riguroso pero que no permite especificar aspectos de diseño de la columna. Pueden incorporarse varias alimentaciones y salidas laterales. Es el único modelo de esta operación unitaria del que dispone ASPEN PLUS.

RADFRAC es el modelo riguroso de amplio espectro de ASPEN PLUS. Es lo suficientemente versátil como para cubrir la mayoría de casos y no sólo modeliza la operación de rectificación, y también es apto para *stripping* G-L y Absorción G-L.

Adicionalmente es capaz de modelizar:

- Sistemas con tres fases (V-L-L).
- Sistemas con reacción
- Destilaciones extractivas y azeotrópicas.
- Sistemas con grandes desviaciones de la idealidad en fase líquida.
- Separar secciones de columnas como columnas individuales.

RADFRAC puede manejar sólidos (incluyendo precipitación de sales) y agua y decantarla en el condensador.

RADFRAC tiene dos niveles de complejidad:

- *Rating mode*: Puede calcular temperaturas, caudales y perfiles de fraccionamiento en la columna. Acepta eficiencias de vaporización y de Murphree.
- *Design mode*: El máximo nivel de complejidad. Se pueden especificar aspectos de diseño como el tipo de platos o empaquetamiento.

Los otros modelos de operación en continuo **MULTIFRAC** y **PETROFRAC** son versiones que admiten más de una columna acoplada y diseñadas específicamente para aplicaciones conocidas (ver guía de ayuda sección *Aspen plus reference, unit operation models reference*).

Por su parte **BATCHSEP** como su nombre indica es un modelo riguroso desarrollado para una unidad que funciona en modo discontinuo por cargas.

Extracción de datos de equilibrio de sistemas binarios

DIAGRAMA BINARIO

1º) Aspen necesita de que algún bloque esté definido para poder trabajar con los componentes. Lo más sencillo es un destilador tipo **Flash2**. Se coloca el bloque con las corrientes y nombres (L₀, L y V).

2º) Definir las características:

- Poner título y definir unidades personalizadas en *specifications* (US-1)

- Definir las unidades en *unit sets* (new).
- Activar en *Report options* en la pestaña *stream* la opción *mole* para *fraction basis*
- En componentes incluir los dos componentes (Agua y etanol).
- En *properties* seleccionar COMMON y IDEAL como método base de cálculo.
- En *stream* y en la ficha L₀ rellenar 1 atm, 85°C y 100 mol/hr con una composición 0,35 **ETOH** y 0,65 de **Agua** en mol-frac.
- En *blocks* y en la ficha flash escribir 85°C y 1 atm (flash isoterma)

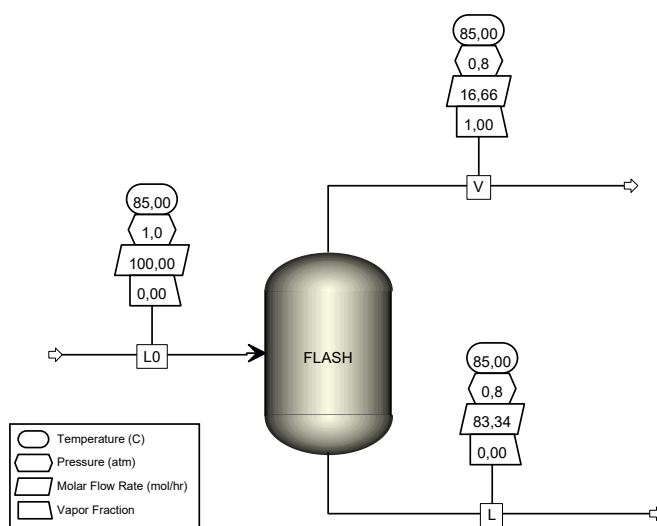
3º) Correr una primera simulación para comprobar que todo está bien.

En estas condiciones no habrá evaporación (V=0) por lo que hay que bajar la presión o subir la temperatura. Probar con P= 0,8 atm. La descompresión producirá la evaporación.

4º) Si se quiere que los datos aparezcan en la hoja ir a resultados y pulsar *Stream table*.

5º) Para imprimir (todo: en el botón de la barra de herramientas; una parte: en *view, page break preview* y manipular) o guardar...

6º) Analizar la sensibilidad del sistema ante las variables: P y T del flash, T y P de la entrada (TFLASH, PFLASH y valores objetivo ETOH y H2O en V). Ver que no depende de la entrada (si dependerá de los valores en el bloque) y sí dependerá el balance de calor pero no el de masas.



Flash binario etanol agua			
Stream ID	L	L0	V
From	FLASH	FLASH	FLASH
To		FLASH	FLASH
Phase	LIQUID	LIQUID	VAPOR
Substream: MIXED			
Mole Flow	mol/hr		
AGUA	56.88849	65.00000	8.111512
ETANOL	26.44757	35.00000	8.552431
Mole Frac			
AGUA	.6826395	.6500000	.4867703
ETANOL	.3173605	.3500000	.5132297
Total Flow	mol/hr	100.00000	16.66394
Total Flow	kg/hr	2.243276	.5401334
Total Flow	cum/sec	7.69228E-7	1.70044E-4
Temperature	C	85.00000	85.00000
Pressure	atm	.8000000	.8000000
Vapor Frac		0.0	1.000000
Liquid Frac		1.000000	0.0
Solid Frac		0.0	0.0
Enthalpy	J/kmol	-2.7744E+8	-2.7704E+8
Enthalpy	J/kg	-1.0307E+7	-9.9534E+6
Enthalpy	Watt	-6422.428	-7695.682
Entropy	J/kmol-K	-1.9885E+5	-2.0428E+5
Entropy	J/kg-K	-7386.998	-7339.307
Density	kmol/cum	30.09369	28.84132
Density	kg/cum	810.0749	802.7722
Average MW		26.91843	27.83410
Liq Vol 60F	cum/sec	7.12601E-7	8.91471E-7

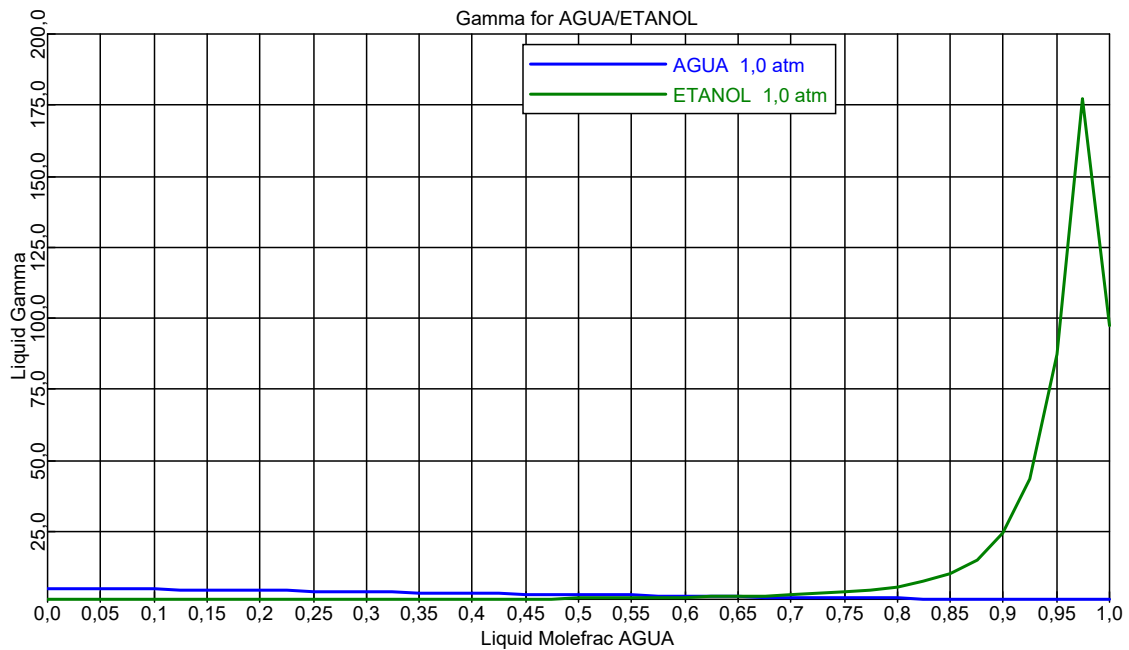
7º) Cambiar de modelo termodinámico y comentar que es la parte más importante (mostrar la ayuda a la selección del modelo). Usar el modelo WILSON (gases ideales y ley de Henry y líquidos NO ideales) y comprobar cómo se vaporiza todo. También pasa lo mismo con el modelo de NRTL. Volver al modelo ideal y correr la simulación.

8º) Ahora vamos a sacar los diagramas termodinámicos y de equilibrio de esta mezcla. Ir a *Tools, Analysis y binary* y elegir el tipo de análisis (Txy, Pxy y Gibbs) y las condiciones y darle a *GO*.

Genera el gráfico y una pestaña con la tabla de datos que podemos exportar al excel simplemente seleccionando las columnas y con copiar y pegar.

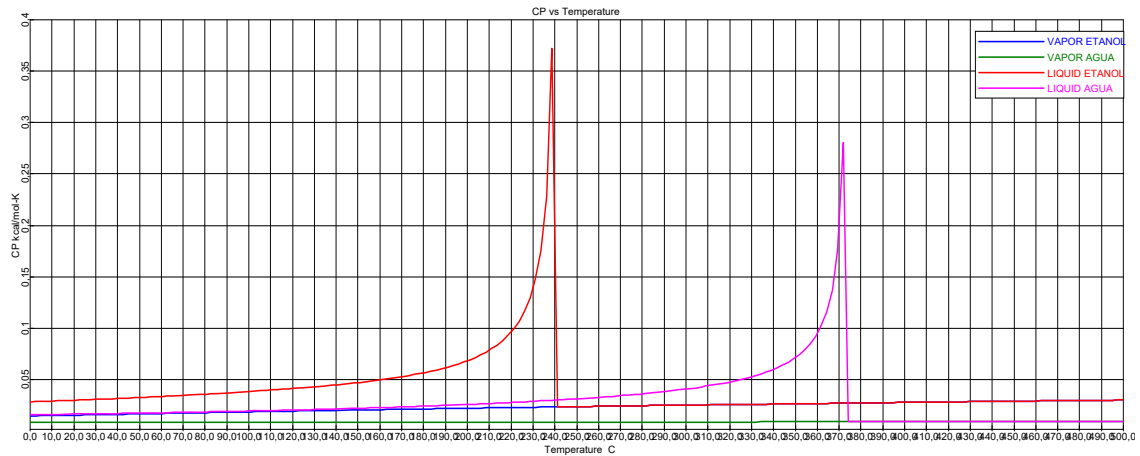
Si le damos a *plot wizard* en la pestaña de datos podemos elegir más tipos de gráficos con estos datos. Generar Txy, YX, zoom YX, gamma (actividad), KVL (reparto), mover leyendas, Txy por rango de presiones. Pasar a modelizar Pxy, Pxy en función de T y Gibbs y Gibbs en función de T.

Podemos añadir más de un componente a la misma gráfica con *add to plot*. Si cambiamos el método IDEAL a SOAVE-REDLICH-KWONG (SOAVE-RK) y simulamos de nuevo veremos cómo cambia el comportamiento del coeficiente de actividad.



Consejo: pegar las gráficas como imagen para no tener problemas en excel. Hacer las modificaciones en Aspen (zoom , rangos, leyendas, etc...) con *properties*.

9º) Volvemos a poner el modelo IDEAL y simulamos. También podemos sacar propiedades concretas de los componentes puros en *Tools, Analysis y pure*. Seleccionamos el análisis termodinámico, C_p , ambos componentes en fase vapor y líquido, entre 0 y 500°C. Se pueden exportar los datos numéricos o la representación. ¿Qué ocurre a 239 y 372°C para cada uno? Se alcanza el punto crítico y no hay líquido posible.



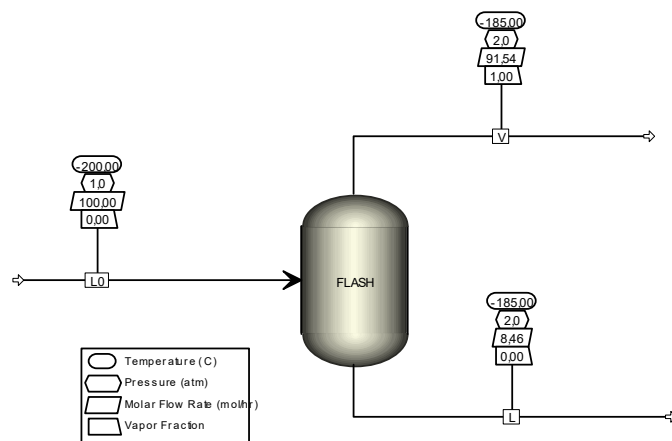
Extracción de datos de equilibrio de sistemas ternarios

DIAGRAMA TERNARIO

1º) Hacemos un nuevo archivo del mismo tipo (incluso se puede aprovechar este si se cambia el nombre y se cambian los datos de condiciones y componentes).

2º) Los nuevos componentes serán los del sistema ternario Aire: **O₂, N₂ y Ar**. Vamos a obtener el diagrama ternario de la curva de residuo. composición molar del 0,205, 0,79 y 0,05 respectivamente y 100 mol/h de entrada a -200°C y 1 atm. En el flash imponemos 2 atm y -185°C bajo cero. El modelo termodinámico será IDEAL.

3º) Se pueden hacer los mismos análisis de sensibilidad que antes para T y P del flash.



Flash binario Aire (O ₂ , N ₂ y Ar)			
Stream ID	L	L0	V
From	FLASH	FLASH	FLASH
To		FLASH	
Phase	LIQUID	LIQUID	VAPOR
Substream: MIXED			
Mole Flow	mol/hr		
O ₂	3.837830	20.50000	16.66217
N ₂	4.549056	79.00000	74.45094
AR	0.721934	5.000000	4.278065
Mole Frac			
O ₂	4536936	2050000	1820188
N ₂	5377720	7900000	8133078
AR	653444E-30	00000E-30	67339E-3
Total Flow	mol/hr	8.459079	100.0000
Total Flow	kg/hr	2531248	2.889014
Total Flow	cum/sect	66292E-8	97937E-7
Temperature	C	-185.0000	-200.0000
Pressure	atm	2.000000	1.000000
Vapor Frac		0.0	1.000000
Liquid Frac		1.000000	1.000000
Solid Frac		0.0	0.0
Enthalpy	JKmol	-1.2022E+7	2584E+7
Enthalpy	JKg	-4.0176E+5	3.559E+5
Enthalpy	Wat	-28.24893	349.5598
Entropy	JKmol-K	1.0059E+5	1.164E+5
Entropy	JKg-K	-3361.651	3864.130
Density	kmol/cum	30.66382	30.93512
Density	kg/cum	917.5674	893.7200
Average MW		29.92345	28.89014
Liq Vol60F	cum/sect	25847E-7	48772E-6

4º) Para obtener los diagramas ternarios se va a *tools, analysis property residues* y se obtiene la curva de residuos que equivale a las mezclas que se pueden obtener en una destilación cerrada de la mezcla ternaria.

Luego vamos a *tools, conceptual design, ternary maps (clicar residue curve o distillation curve)* y en el arbol de carpetas dar UNA SOLA VEZ a *ternary plot*. Se genera un plot y en él se pueden pintar las curvas que uno quiera. Con el cursor se tiene acceso a la información de cada punto en la esquina superior derecha.

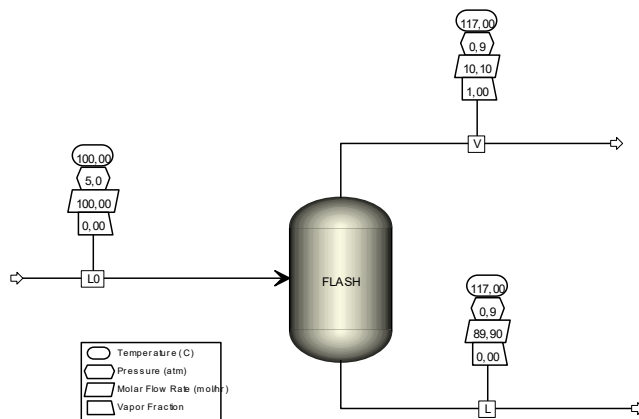
Hacer: Zoom, poner puntos, líneas, cambiar tipos de letras, colores. Se puede exportar o imprimir.

5º) En *conceptual design, ternary maps* también se puede comprobar si hay azeótropos (*report*).

Mezcla multicomponentes y azeótropos

INFORMACIÓN EN MEZCLAS MULTICOMPONENTE

1º) Ahora tenemos una mezcla ternaria no ideal en el líquido de **2-etoxietanol, n-octano y etilbenceno**. Usaremos el modelo de UNIQUAC (ideal sólo en el gas). Introducimos los componentes en una proporción de 0,2; 0,55 y 0,25 a 100ºC y 5 atm. En la unidad flash consignaremos 117ºC y 0,9 atm.



Flash TERNARIO NO IDEAL				
Stream ID	L	L0	V	
From		FLASH		FLASH
To			FLASH	
Phase		LIQUID	LIQUID	VAPOR
Substream: MIXED				
Mole Flow	mol/hr			
OCTANO	49.66615	55.00000	5.33385	
ETBENCEN	23.18636	25.00000	1.81363	
2-ETETOH	17.05138	20.00000	2.94861	
Mole Frac				
OCTANO	5524360	5500000	528307	
ETBENCEN	2579017	2500000	179637	
2-ETETOH	1896623	2000000	292054	
Total Flow	mol/hr	89.90389	100.00000	10.0961
Total Flow	kg/hr	9.671753	10.73933	1.06757
Total Flow	cm ³ /sec	3.94341E-6	4.26937E-6	9.97588E-7
Temperature	C	117.00000	100.00000	117.0000
Pressure	atm	9.000000	5.000000	9.000000
Vapor Frac		0.0	0.0	1.000000
Liquid Frac		1.000000	1.000000	0.0
Solid Frac		0.0	0.0	0.0
Enthalpy	J/kmol	-2.0265E+8	-2.1128E+8	-2.0535E+8
Enthalpy	J/kg	-1.8837E+6	-1.9673E+6	-1.9420E+6
Enthalpy	Wat	-5060.749	-5868.891	-575.901
Entropy	J/kmol-K	-6.2923E+5	-6.4211E+5	-5.4318E+5
Entropy	J/kg-K	-5849.054	-5979.043	-5136.86
Density	kmol/cum	6.332918	6.506293	.028112
Density	kg/cum	681.2878	698.7323	2.97265
Average MW		107.5788	107.3933	105.741
Liq. Vol@0F	cm ³ /sec	3.48256E-6	3.86384E-6	8.81275E-7

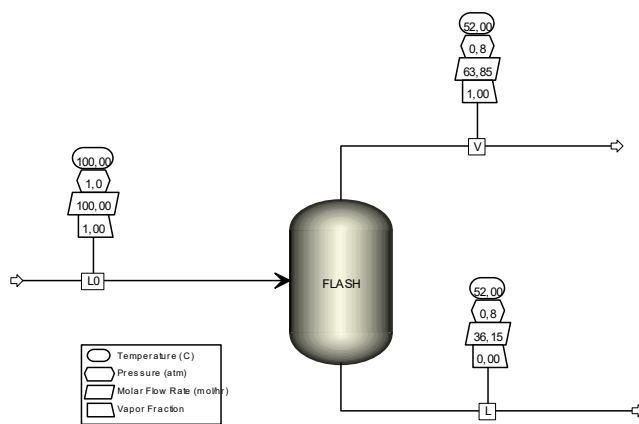
2º) En estas condiciones conseguimos una separación bastante mala de los componentes. Habría que seguir probando hasta mejorarla. Se puede hacer el análisis de sensibilidad de la temperatura y la presión de la unidad flash para localizar los mejores valores. Pero antes es mejor hacer un análisis de azeótropos.

3º) En el menú *tools, conceptual desing, azeotropos search*, se seleccionan los tres componentes y se le dá a *report*. Aparecen dos azeótropos. Uno inestable y otro de silla.

4º) Ahora cambiaremos al sistema **cloroformo, acetona y metanol** vamos a ver un azeótropo ternario. Usaremos de nuevo el modelo UNIQUAC. Introducimos los componentes en una proporción de 0,4; 0,3 y 0,3 molar a 100ºC y 1 atm. En la unidad flash consignaremos 52ºC y 0,8 atm.

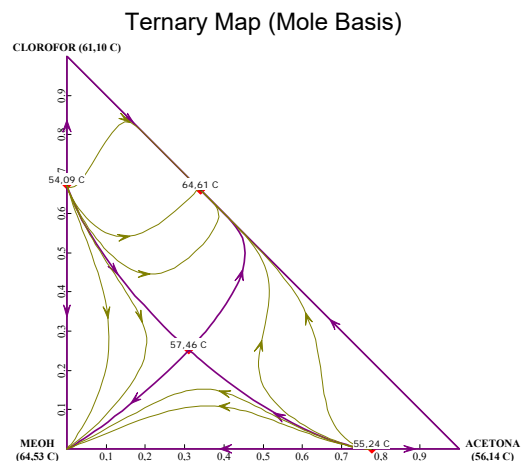
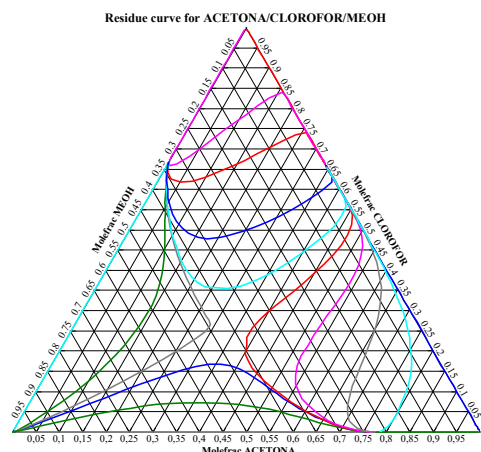
5º) Se puede también repetir el análisis de sensibilidad, y se verá que es complicado y con un margen muy estrecho de presión y temperatura en el flash, pero lo interesante ahora es ver los azeótropos de la mezcla. Primero iremos a ver las curvas de residuo de la mezcla ternaria. Hacernos clic en *tools, analysis, property* y *residues* y sin cambiar nada clicamos *Go*. Ya se observa que hay tres regiones diferenciadas y una zona central que debe albergar "algo". Si cambiamos el análisis a 2 y 5 atm, veremos como esa zona "migra" hacia la zona de mayor pureza del metanol.

6º) Haremos ahora el análisis de azeótropos: *tools, conceptual desing, azeotropos search*, y salen 4 azeótropos: tres binarios y uno de los ternario muy cerca de la zona en la que empezamos a trabajar. Conviene por lo tanto hacer un análisis previo antes de probar condiciones.



Flash TERNARIO ACETONA CLOROFORMO AGUA				
Stream ID		L	V	
From		FLASH		FLASH
To			FLASH	
Phase		LIQUID	VAPOR	VAPOR
Substream: MIXED				
Mole Flow	mol/hr			
ACETONA		1196321	3000000	1803679
CLOROFORMO		1537601	4000000	2462399
MEOH		8811377	3000000	2138662
Mole Frac				
ACETONA		.3309271	.3000000	.2824895
CLOROFORMO		.4253320	.4000000	.3856574
MEOH		.2437408	.3000000	.3318531
Total Flow	mol/hr	3615060	1000000	6384940
Total Flow	kg/hr	2812702	7478748	4666046
Total Flow	cum/sec	7.07271E-7	6.50534E-4	5.91508E-4
Temperature	C	52.00000	100.0000	52.00000
Pressure	atm	8000000	1.000000	8000000
Vapor Frac		0.0	1.000000	1.000000
Liquid Frac		1.000000	0.0	0.0
Solid Frac		0.0	0.0	0.0
Enthalpy	J/kmol	-1.9439E+8	-1.6121E+8	-1.6561E+8
Enthalpy	kJ/kg	-2.4984E+6	-2.1555E+6	-2.2662E+6
Enthalpy	Wat	-1.952017	-4.477.985	-2.937.321
Entropy	J/kmol-K	-2.3175E+5	-1.2385E+5	-1.3010E+5
Entropy	kJ/kg-K	-2978.548	-1656.049	-1780.217
Density	kg/molcum	14.19799	.0326592	.0298844
Density	kg/cum	1104677	2.442501	2.191229
Average MW		77.80512	74.78748	73.07893
Liq Vol@OP	cum/sec	8.84466E-7	1.84725E-6	1.15879E-6

Temp (C)	Classification	Type	No. Comp.	ACETONA	CLOROFORMO	MEOH
64,61	Stable node	Homogeneous	2	0,3409	0,6591	0,0000
57,46	Saddle	Homogeneous	3	0,3110	0,2517	0,4372
55,24	Unstable Node	Homogeneous	2	0,7774	0,0000	0,2226
54,09	Unstable Node	Homogeneous	2	0,0000	0,6726	0,3274



A TENER EN CUENTA:

OJO: Elegir bien el modelo: tutorial en *tools property method selection assistant*. En la ayuda: buscar en el índice *property methods, available property methods* y clicar el enlace *Aspen User Guide Chapter 7*. Ahí tenemos toda la información relevante.

7º) ADEMÁS TENEMOS LA BASE DE DATOS DE NIST-TDE PARA COMPONENTES. Extracción de datos de componentes puros. Probar con la acetona.

8º) Otra información útil que se puede extraer es la referente a las mezcla de las corrientes del sistema. Con *tools, analysis, stream* y elegir una curva como T-V.

9º) Podemos ampliar la información de la tabla de corrientes con cualquier propiedad que queramos definiéndola en *Prop set* dentro de *Properties*. Creamos REO-L (para hacer referencia a características reológicas de la corriente L) y adjuntamos la densidad (ρ_{mx}) y la viscosidad (μ_{mx}) de la mezcla. En la pestaña de *Qualifiers*, seleccionamos la fase líquida.

Luego vamos a *set up, report options, stream* y añadimos *Prop Set REO-L*. Y le damos a simular y nos aparecerán estos datos en la tabla de corrientes.

Obtención del punto de rocío y de burbuja de una mezcla multicomponente

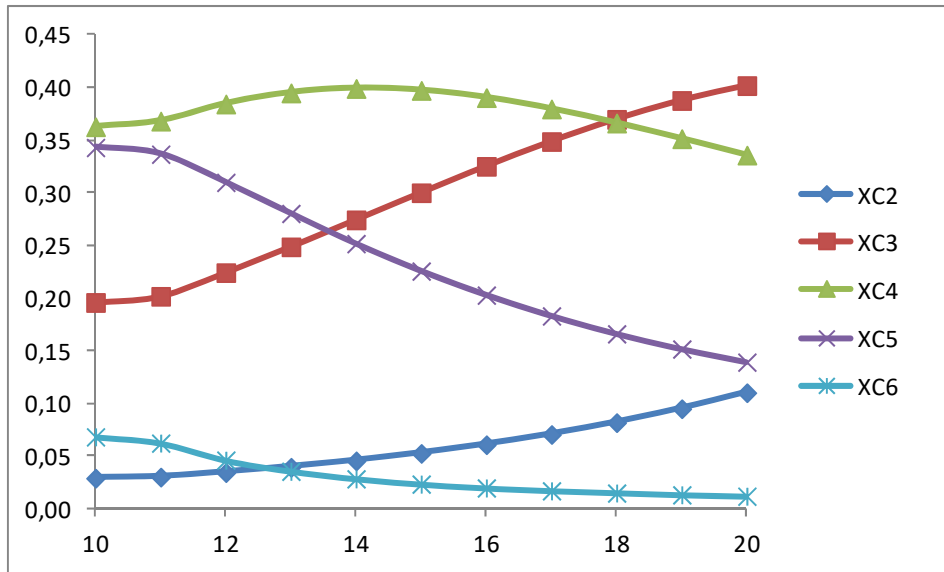
1º) Ahora partiremos de la mezcla **etano, propano, n-butano, n-pentano y n-hexano** para determinar sus puntos de rocío y burbuja. Configuraremos el sistema con una entrada de 1,72 MPa y un flujo total de 51 mol/h que se reparte en 1,5, 10, 18,5, 17,5 y 3,5 mol/h respectivamente. Es conveniente personalizar las unidades (dejamos P en atm).

El modelo termodinámico será el IDEAL y las condiciones del FLASH será de 1,72 MPa. Si no cambiamos ninguna variable respecto a la entrada (T y P) no habrá cambios en la mezcla. Vamos a poner tanto en la alimentación (L_0) como en el equipo flash una fracción de vapor de 0. Esto nos dará el punto de burbuja.

Simulamos y obtenemos 89,24°C además en la pestaña *phase equilibrium* encontramos el reparto entre fases de los componentes y las constantes de volatilidad (K_i). Si cambiamos la fracción de vapor a 1 (todo vapor) podremos calcular el punto de rocío del mismo modo y resulta de 133,14°C.

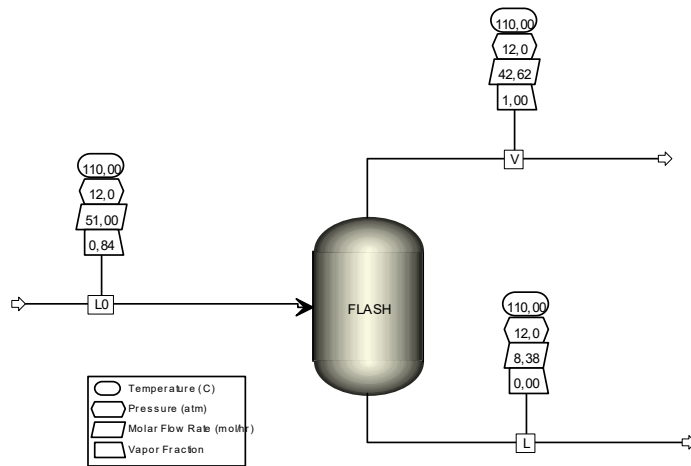
2º) Podemos llevar el sistema a un punto intermedio entre ambas temperaturas (110°C) y variar la presión. Hacemos un análisis de sensibilidad en el que definamos XC2, XC3, XC4, XC5 y XC6 como la fracción molar de cada componente en la corriente V. Tabulamos sus valores y variamos la presión en el Flash entre 10 y 20 y simulamos.

Buscamos con ello, por ejemplo, cual es la mayor concentración de butano que podemos tener en el vapor (la obtenemos sobre 14 atm como se ve en la siguiente gráfica) o la presión a la que c3 pasa a ser mayoritario (18 atm).



Ahora bajamos la presión a 12 atm y ponemos la temperatura tanto en la corriente de L₀ como en el flash a 110°C.

En principio está en forma de vapor un 83,57% de la entrada como vapor en V (resultados en el flash). Vamos a ir variando la presión (aumentándola) para localizar el intervalo útil de presiones (1-25 atm a un intervalo de 0,5 atm). Hasta 10,5 no hay variación pues está todo en forma de vapor. A partir de 24 atm está todo en forma de líquido.



Sistema C 2-nC6			
Stream ID	L	L0	V
From	FLASH		FLASH
To		FLASH	FLASH
Phase	LIQ LIQ	MIXED	VAPOR
Substream MIXED			
Mole Flow	mol/hr		
C2	0.208293	1.500000	1.479172
C3	4.348172	10.000000	9.565189
NC4	2.117385	18.500000	16.38262
NC5	4.287591	17.500000	13.21240
NC6	1.516261	3.500000	1.983734
Mole Frac			
C2	0.08653E-3	0.294117	0.347035
C3	0.519068	0.1960784	0.2244132
NC4	2.527652	0.3627451	0.3843600
NC5	5.118360	0.3431373	0.3099821
NC6	0.1810054	0.0882274	0.0465412
Total Flow	mol/hr	51.00000	42.62312
Total Flow	kg/hr	58.28878	2.542714
Total Flow	cum/sec	1.6597E-7	1.10199E-5
Temperature	C	110.0000	110.0000
Pressure	atm	12.00000	12.00000
Vapor Frac		0.0	0.8357474
Liquid Frac		1.000000	0.1642526
Solid Frac		0.0	0.0
Enthalpy	J/kmol	1.5036E+8	1.2379E+8
Enthalpy	J/kg	2.1609E+6	2.0198E+6
Enthalpy	Wat	-349.8782	-1753.620
Entropy	J/kmol-K	4.6956E+5	3.7670E+5
Entropy	J/kg-K	-6748.186	-6146.586
Density	kmol/cum	7.349765	4.520815
Density	kg/cum	511.4180	27.70641
Average MW		69.58290	61.28632
Liq Vol60F	cum/sec	6.1047E-7	4.7373E-6

3º) El trabajo de ir probando valores o de analizar la sensibilidad es útil al principio, pero cuando los sistemas son complejos es mejor optar por fijar una condición y dejar que la simulación encuentre cómo obtenerla.

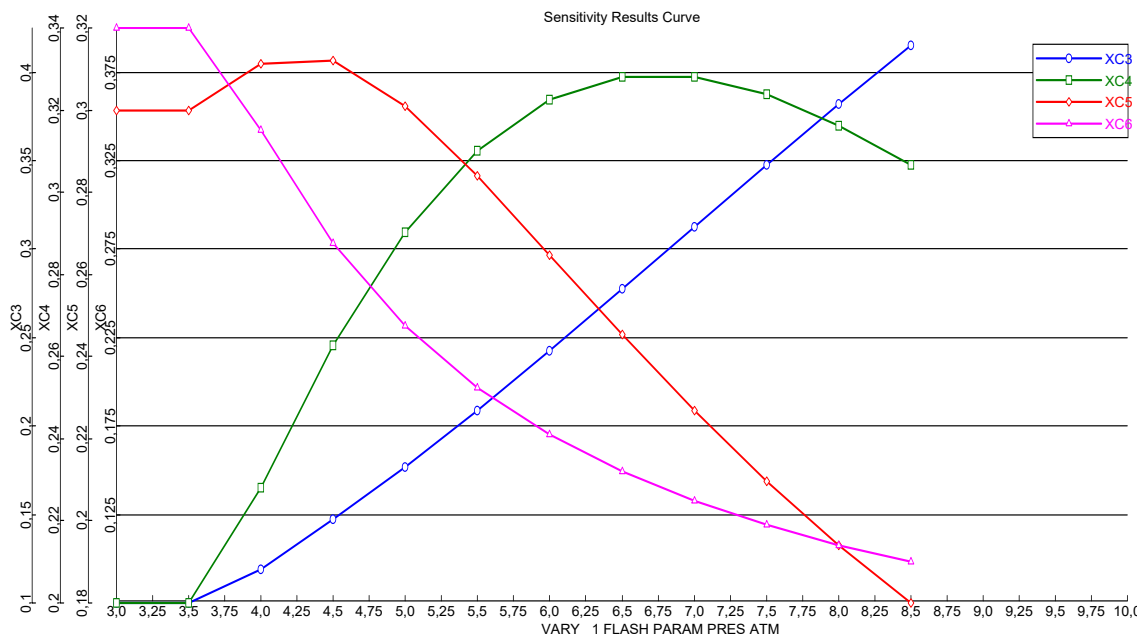
Desactivamos el análisis de sensibilidad y si vamos a *Flowsheet options* dentro de *Design specification* podemos crear una especificación (XC5, que será que queremos que la fracción molar de c5 sea 0,25 con una tolerancia de 0,05) y variaremos para ello la presión en el flash (entre 11 y 24) y simulamos.

Si se va resultados *summary convergence* se obtiene $XC5=0,2501$ a una presión (ver resultados en el bloque flash) de 14,065 atm. incluso en *convergence solver historic* podemos ver la iteraciones y observar que no hay nada raro.

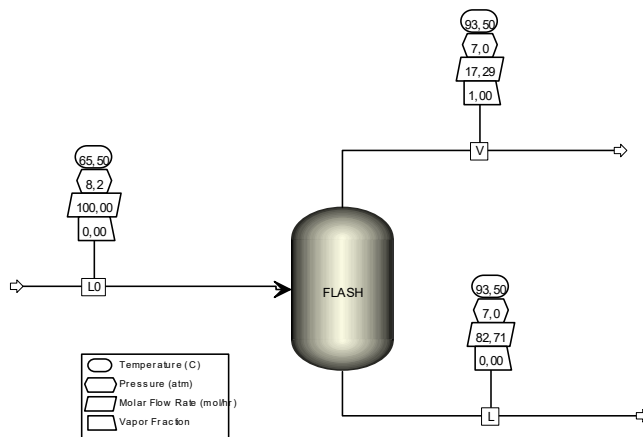
DESTILACIÓN TIPO FLASH ADIABÁTICA E ISOTERMA

1º) Construir un destilador flash con la mezcla de 100 mol/h de **propano, n-butano, n-pentano y n-hexano** en proporciones 10%, 20%, 30% y 40% respectivamente que entra a una presión de 8,25 atm y 65,5°C en una unidad flash que trabaja a 93,5°C y 7 atm. Aunque puede que no sea el más adecuado, vamos a imponer e modelo IDEAL. Simulamos y vemos los resultados. La partición de c4 y c5 (expresada como K_i) no es muy buen en estas condiciones.

Creamos un análisis de sensibilidad PFLASH con las fracciones molares XC3 a XC6 y lo hacemos variar respecto a la presión del Flash (3-10 atm a intervalos de 0,5 atm). El análisis de sensibilidad indica que a partir de 8,5 atm ya no hay vapor y además el gráfico de los resultados permite definir las mejores zonas para enriquecer el vapor en c5 (4-4,5 atm) o c4 (6,5-7 atm).



Si entramos en resultados de la unidad flash indica el intercambio calorífico necesario para mantener la isothermicidad es de 250,78 W.

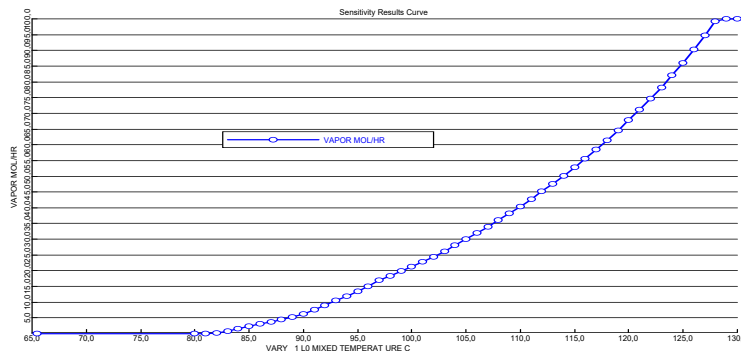


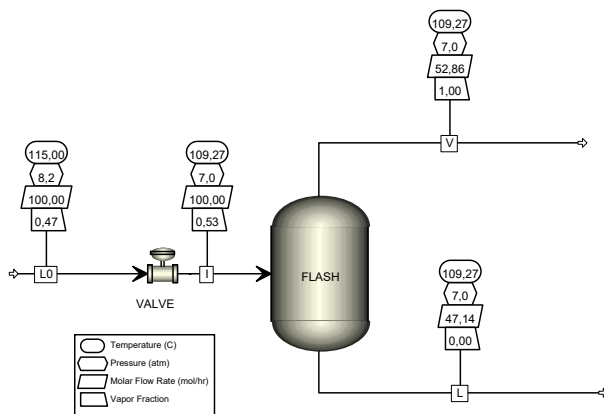
Flash Isotermico C3-nC6				
Stream ID	L	L0	V	
From	FLASH		FLASH	FLASH
To		FLASH		
Phase	LIQUID	LIQUID	VAPOR	
Substream MIXED				
Mole Flow	mol/hr			
C3	4.597364	10.00000	5.402636	
NC4	14.32702	20.00000	5.672977	
NC5	26.07951	30.00000	3.920486	
NC6	37.70744	40.00000	2.292557	
Mole Frac				
C3	0.556832	1.000000	0.3124960	
NC4	0.1732171	2.000000	0.3281329	
NC5	0.3153076	3.000000	0.2267664	
NC6	0.4558920	4.000000	0.1326047	
Total Flow	mol/hr	82.71134	100.00000	17.28866
Total Flow	kg/hr	6.166628	7.215028	1.048400
Total Flow	cum/sec	0.09972E-6	0.47142E-6	0.06406E-5
Temperature	C	93.50000	85.50000	93.50000
Pressure	atm	7.000000	8.250000	7.000000
Vapor Frac		0.0	0.0	1.000000
Liquid Frac		1.000000	1.000000	0.0
Solid Frac		0.0	0.0	0.0
Enthalpy	J/kmol	1.6287E+8	1.6481E+8	1.2184E+8
Enthalpy	J/kg	2.1846E+6	2.2842E+6	2.0091E+6
Enthalpy	Wat	-3742.103	-4577.987	-585.1014
Entropy	J/kmol-K	5.1441E+5	5.1327E+5	3.8565E+5
Entropy	J/kg-K	-6899.605	-7113.921	-6029.826
Density	kmol/kum	7.412071	8.001844	2.326675
Density	kg/kum	552.6144	577.3353	14.10918
Average MW		74.55601	72.15028	60.84094
In. Volume	cum/sec	7.70193E-6	1.10759E-6	1.05664E-7

2º) Si queremos que este sistema funcione de modo adiabático sólo hay que cambiar un par de cosas. Primero colocar una válvula adiabática antes del flash para bajar la presión hasta las 7 atmósferas. Sino no será justificable el cambio de presión entre la corriente de entrada y el flash. Segundo seleccionar la condición de $heat\ duty = 0$ en el flash para que sea adiabático y mantener 7 atm de presión. Simulamos y vemos los resultados de las corrientes en el resumen (*summary, stream*) y vemos que no hay vapor ($V=0$).

Si vamos al bloque de resultados del flash veremos que la temperatura es mucho más baja: 65,5°C pues al no haber intercambio de calor mantiene la de la entrada y la bajada de presión por sí no es suficiente para que se evapore la mezcla, luego hay que subir la temperatura de la alimentación o bajar la presión. ¿cuánto?

Modificaremos la temperatura con un análisis de sensibilidad TALIMEN entre 65 y 150°C a intervalos de 5°C y veremos su efecto sobre el caudal de vapor (*stream, V, mole flow*). En los resultados de la simulación veremos como el vapor no aparece hasta más de 80°C y es máximo a menos de 130°C. Afinamos realizando de nuevo el análisis de sensibilidad entre 80 y 130°C pero a intervalos de 1°C. A esa presión (7 atm) el intervalo podría estar entre 81-128°C. Trabajar con un adiabático nos impone fijar una temperatura de entrada en un dispositivo externo (válvula).





Flash Isotérmico C3-nc6				
Stream ID		L	V	
From		FLASH	FLASH	
To			VALVE	
Phase		LIQUID	MIXED	VAPOR
Substream:		MIXED		
Mole Flow	mol/hr			
C3		1.085332	10.00000	8.914668
NC4		5.149754	20.00000	14.85025
NC5		13.97763	30.00000	16.02237
NC6		26.92306	40.00000	13.07694
Mole Frac				
C3		0.230256	1.000000	1.686333
NC4		1.092536	2.000000	2.89129
NC5		2.965397	3.000000	3.030854
NC6		5.711810	4.000000	2.473684
Total Flow	mol/hr	47.13577	100.0000	52.86423
Total Flow	kg/hr	3.675823	7.215028	3.539205
Total Flow	cum/sec	1.87375E-6	5.27807E-5	6.68275E-5
Temperature	C	109.2651	115.0000	109.2651
Pressure	atm	7.000000	8.250000	7.000000
Vapor Frac		0.0	.4724184	1.000000
Liquid Frac		1.000000	.5275816	0.0
Solid Frac		0.0	0.0	0.0
Enthalpy	J/kmol	-1.6519E+8	-1.4569E+8	-1.2830E+8
Enthalpy	J/kg	-2.1183E+6	-2.0192E+6	-1.9163E+6
Enthalpy	Watt	-2162.906	-4046.917	-1883.986
Entropy	J/kmol-K	-5.3080E+5	-4.6293E+5	-4.0093E+5
Entropy	J/kg-K	-6806.497	-6416.203	-5988.534
Density	kmol/cum	6.987722	5.262870	2.230757
Density	kg/cum	544.9296	37.97175	14.93469
Average MW		77.98372	72.15028	66.94896
Liq Mol Frac	cum/sec	1.58739E-6	3.19759E-6	1.61020E-6

HOMEWORK:

- 1º) Averiguar usando destiladores tipo flash isotérmicos qué rango de condiciones de presión y temperatura permite separar el 85% del benceno en el vapor de una mezcla benceno-tolueno en proporción molar 1:5. Dibujar "plots" de sensibilidad.
- 2º) Obtener el diagrama ternario de la mezcla nc5-nc6-nc7 a 15 atm usando el método PENG-ROBINSON.
- 3º) Obtener los puntos de rocío y de burbuja a 7,2 atm de una mezcla equimolecular de NH₃ y agua usando el modelo WILSON.
- 4º) Obtener el diagrama ternario con azeótropos de la mezcla equimolar MeOH-Acetona-hexano.

SESIÓN 3 y 4

Objetivo

Utilizar los modelos simplificados de rectificación del ASPEN PLUS.

Resolver problemas tipo:

- Estimación del NPT mínimo a partir del BM resuelto de una columna en una mezcla binaria o asimilable a tal por el modelo WUG (clave ligera-clave pesada) que es modificación del FUG.
- Optimización del número de etapas y de la posición del plato de alimentación. Representación de la relación NPT vs L/D y datos de T, P y fracción de vapor en cada corriente y en el calderín y condensador.
- Calcular la altura equivalente de plato teórico en caso de utilizar una columna empacada.

MODELO DSTWU

El modelo DSTWU es un modelo simplificado de caja negra que se utiliza en columna única.

El modelo **DSTWU** opera bajo el método de cálculo de fracción ligera y fracción pesada de Winn-Underwood-Gilliland (Winn es una mejora de la ecuación de Fenske's) por lo que es válido no sólo para mezclas binarias, sino para mezclas que se asemejan en su comportamiento a una mezcla binaria como es el caso de considerar grupos de componentes de clave ligera y pesada.

El modelo resuelve la columna bajo la premisa de relación de reflujo total para obtener el número de platos teóricos mínimos. Después calcula el valor de reflujo mínimo y posteriormente el número de platos óptimo y el reflujo que le corresponde.

Adicionalmente a tener resuelto el balance macroscópico de materia de la columna (F , D , W y X_F , X_D y X_W) el modelo necesita un par de datos más: presión en condensador y calderín y, por otra parte, un dato para comenzar la optimización (NPT o relación de reflujo).

Es la mejor opción para mezclas binarias o asimilables a binarias (clave ligera-clave pesada) donde sólo se pretenda optimizar el rendimiento de destilación en base al número de plato y la relación de reflujo. Permite optimizar la colocación del plato de alimentación y calcular los requerimientos de calor en el condensador y el calderín. Su campo de aplicación es el refinado y optimización de la solución de métodos aproximados (McCabe-Thiele y Sorel-Lewis).

Puede generar diagramas y tablas L/V vs NPT.

Permiten incorporar una separación de agua en el condensador de cabeza y realizar cálculos *free-water*.

- Limitaciones:

Sólo admite una alimentación y dos corrientes de salida (cabeza y cola) aunque el condensador de cabeza puede ser total o parcial.

Sólo admite dos componentes o grupos de componentes asimilables a componentes individuales.

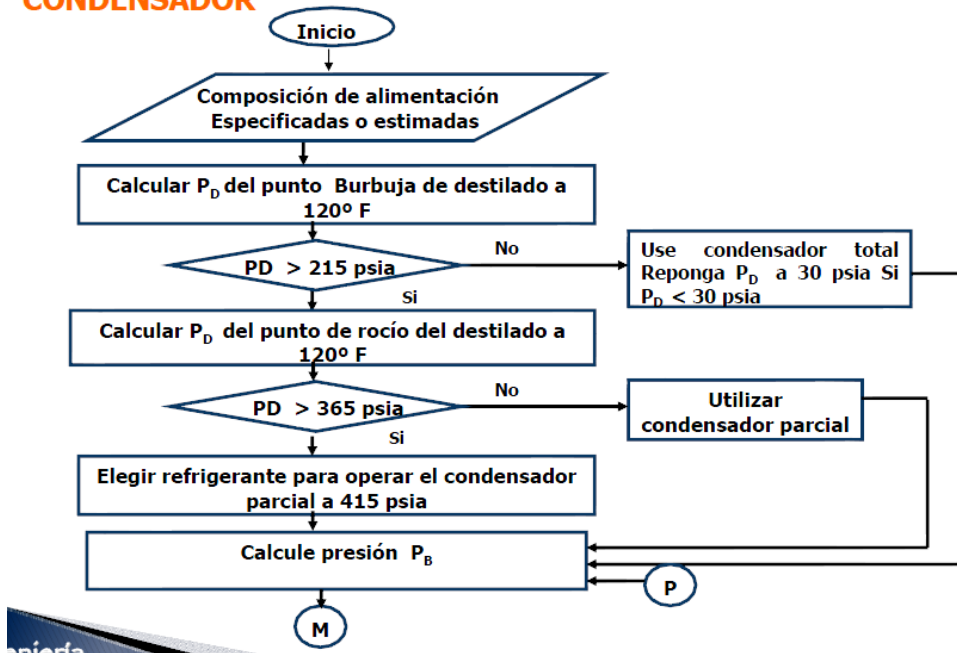
1º) Vamos a realizar una separación binaria clásica **ETOH-agua** por debajo del azeótropo (para evitar tener que usar un modelo más complejo). Partiremos de una mezcla de 100 mol/h con un 20% en moles de EtOH a 83,16°C y en forma líquida (*Vapor fraction =0*). Usaremos el método de propiedades de WILSON para obtener un destilado con un 80% en moles de EtOH y un producto de cola con un 0,5 % en moles de EtOH.

2º) Definiremos una columna tipo DSTWU en la que impondremos una relación de reflujo externa (L/D) de 2 veces el mínimo (en Aspen la proporcionalidad se expresa como un signo menos y el valor de la misma: -2). Con el balance de materia resuelto podemos especificar una recuperación del EtOH en el condensador del $0,9812=(0,8*24.53/0.2*100)$ respecto a la alimentación y una recuperación de agua de $0,061325=(0.2*24.53/0.8*100)$ en el mismo sitio respecto a la alimentación.

En el método FUG (y su modificación WUG del ASPEN plus) hay que determinar la presión del condensador y del calderín. A efectos prácticos en esta primera ocasión vamos a suponerlos.

A partir del cálculo del punto de burbuja y de rocío de las corrientes se determina la presión y se elige el condensador total o parcial.

DETERMINACIÓN DE PRESIÓN DE OPERACIÓN TIPO DE CONDENSADOR



3º) Como ya hemos dicho supondremos 0,9 atm en el condensador y 1,1 en el calderín (aunque podrían ser más pequeñas y de hecho la diferencia es muy elevada 0,2 atm=2,94 psi y lo normal es una caída de unos 0,1 psi por plato, por lo que una columna de 20 platos tendría una caída de unos 2 psi) y simulamos de todos modos. En el bloque de resultados de la columna tendremos:

Summary		Balance	Reflux Ratio Profile
Results			
▶ Minimum reflux ratio:	1.09165133		
Actual reflux ratio:	2.18330265		
Minimum number of stages:	16.8666876		
Number of actual stages:	24.9209417		
Feed stage:	21.7581307		
Number of actual stages above feed:	20.7581307		
Reboiler heating required:	891.040099	Watt	
Condenser cooling required:	863.339297	Watt	
Distillate temperature:	75.4340504	C	
Bottom temperature:	101.098746	C	
Distillate to feed fraction:	0.2453		
HETP:			

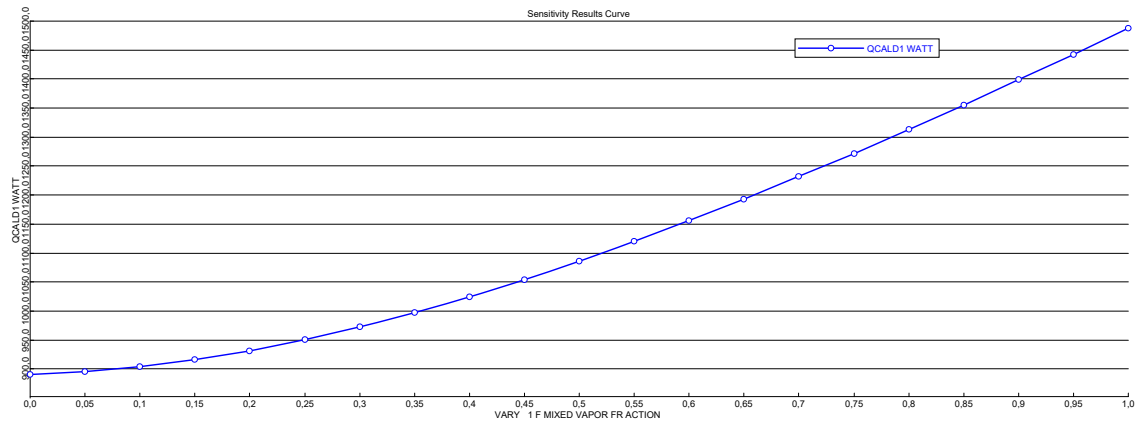
de donde se obtiene el valor del reflujo mínimo (de la ecuación de Winn), el número de platos mínimo que es de 17 (16,87) y la ubicación del plato de alimentación (plato 22) de la columna actual (de 25 platos). Como se observa en los datos de corrientes, se ha respetado el fraccionamiento impuesto casi exactamente (cuestión de decimales en el cálculo).

RECTIFICACIÓN ETANOL-AGUA				
Stream ID		D	F	W
From		DSTWU		DSTWU
To			DSTWU	
Phase		LIQUID	LIQUID	LIQUID
Substream: MIXED				
Mole Flow	mol/hr			
ETOH		1962400	20.00000	.3760000
AGUA		4.906000	80.00000	75.09400
Mole Frac				
ETOH		.8000000	.2000000	4.98211E-3
AGUA		.2000000	.8000000	.9950179

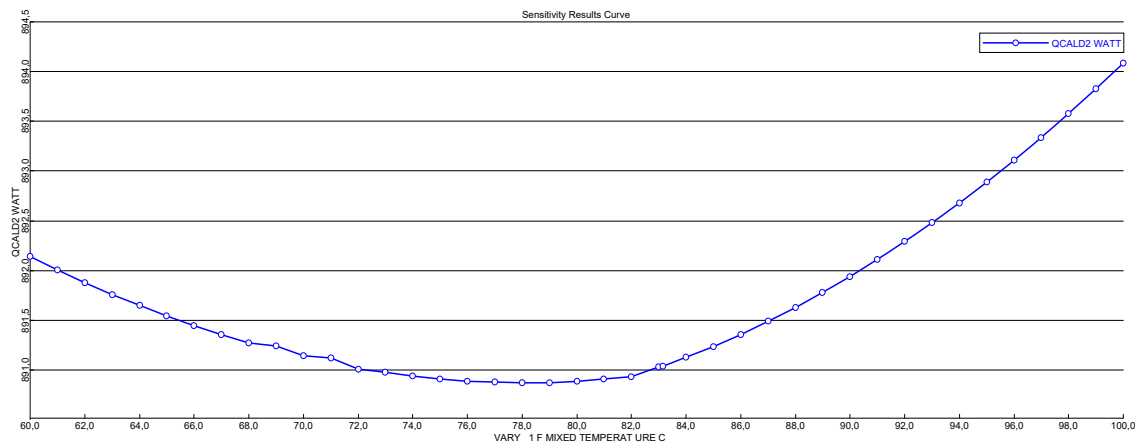
A partir de aquí podemos ir cambiando cada condición del sistema para converger hacia donde queramos.

Respecto a los valores de las corrientes, podemos observar cómo se han respetado y fijado las proporciones de recuperación de los componentes clave. Estos datos son inamovibles en la simulación de este modelo y no se pueden hacer especificaciones o análisis de sensibilidad sobre ellos (en RADFRAC sí).

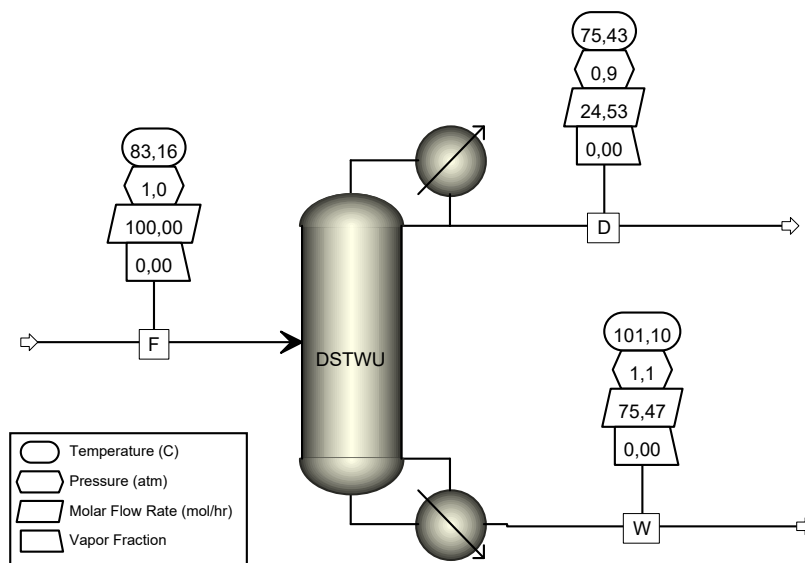
4º) Haremos un análisis de sensibilidad cómo las condiciones de la alimentación influyen en el calor suministrado al calderín (QCALD). Definimos los análisis de sensibilidad FVAPFR y FTEMP y dentro de ellos definimos la variable dependiente QCALD (*Block var, DSTWU, REB-DUTY*) y la tabulamos. Variamos en un caso VFRAC (*stream-var, F, VFRAC*) entre 0 y 1 con intervalo de 0,05 y en el otro caso TEMP (*stream-var, F, TEMP*) entre 60 y 100°C con intervalo de 1°C. Y simulamos.



En el caso de la dependencia con la fracción de vapor, cuanto mayor es la fracción de vapor, mayor cantidad de calor es necesaria en el calderín para obtener la misma separación con los mismos platos.



Sin embargo, para la temperatura de la entrada hay un mínimo de calor a una temperatura cercana a 79°C.

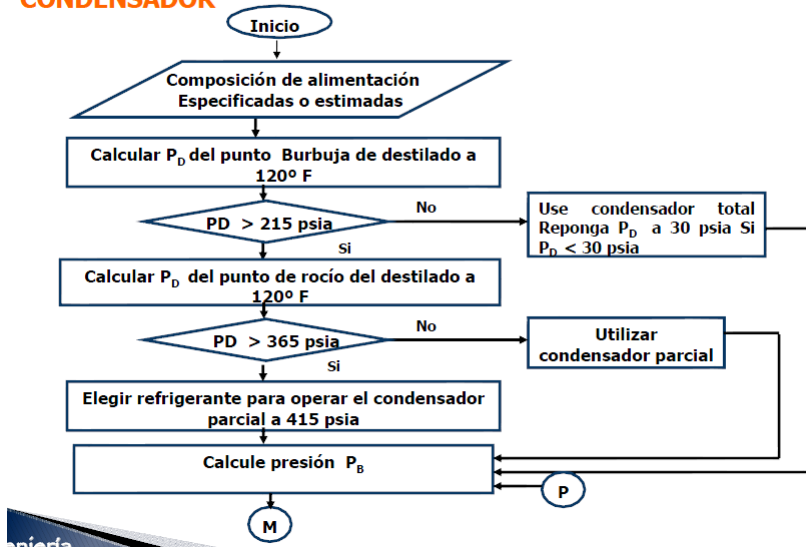


5º) Una vez establecido el sistema podemos plantearnos si deseamos cambiar una especificación de diseño, por ejemplo el % EtOH en el destilado a 0,90. Vamos a *Flowsheet option* y *design specification* y definimos XETOH. Establecemos una tolerancia de 0,01 e indicamos que queremos variar el reflujo mínimo entre 1,092 (mínimo actual) y 5 en pasos de 0,1 y simulamos y ERROR. No podemos establecer una especificación de diseño sobre este valor pues en este modelo el balance de masa está resulto en base a estos datos de partida. En el historial de convergencia se puede comprobar cómo variar la ratio de reflujo mínima no afecta al cálculo de errores y por eso no puede converger.

6º) Vamos ahora a hacer **una separación de clave-ligera clave pesada**. Los componentes de la alimentación son **C2, C3, nC4, nC5 y nC6** con flujos molares de 30, 200, 370, 350 y 50 mol/h respectivamente de 110°C y 20 atm. Se empleará una relación de reflujo externa(L/D) de 1,5 veces la mínima para obtener un objetivo de recuperación de c3 (clave ligera) de 0,95 y de c4 (clave pesada) de 0,05 en el destilado. En estas condiciones de alta presión es recomendable un método no ideal a altas presiones PENG-ROBINSON(PENG-ROB).

7º) Colocamos un bloque tipo DSTWU y sus corrientes y componentes pero lo desactivaremos de momento (con la derecha sobre el bloque en el *Data browser*) para calcular algunos datos que nos hacen falta. Buscamos la presión en el calderín y el condensador y el tipo de condensador (parcial o total).

DETERMINACIÓN DE PRESIÓN DE OPERACIÓN TIPO DE CONDENSADOR



Podemos usar un flash isotérmico de esta mezcla para calcular los puntos de rocío y burbuja a 120°F (método FUG). Para ello configuraremos una nueva sección en la hoja de flujo.

En *flowsheet, section* creamos una nueva sección con ID FLASH, modeloFLASH2 y le incorporamos las corrientes. Definimos las condiciones del flash para punto de burbuja (120°F y fracción de vapor nula) y de la corriente de entrada con las mismas que la corriente de nuestra columna y simulamos. Dentro de los resultados del bloque flash encontraremos una P del punto de burbuja de 6,823 atm que equivale a 100,3 psi, como la presión es menor de 215 psi se usa el condensador total a esta presión.

Si hubiera sido necesario calcular el punto de rocío se cambia el valor de fracción de vapor a 1 y se vuelve a simular. En el bloque de resultados del flash ahora indicará 2,479 atm que equivale a 36,4 psi. Nos tenemos que asegurar que la temperatura está por debajo de la de descomposición de los componentes sino habría que disminuir la presión en el condensador para que se necesitara menos temperatura en el calderín y , en consecuencia, en toda la columna.

Ahora aplicaremos Flash adiabático ($heat\ duty=0$) a la alimentación a 110°C ó 20 atm- uno de los dos- para averiguar su condición física) y simulamos. Y en los resultados del bloque flash veremos un 0,0576 de fracción vaporizada (luego es una mezcla VL con casi un 6% de vapor).

Por otra parte vamos a aproximar la caída de presión en columna (5 psi en el condensador y 0,1 psi por plato en columnas atmosféricas o superiores y 0,05 psi en columnas a vacío). Suponemos 20 platos (10 en cada sección de columna) lo que sería una caída de 6 psi en la sección superior (incluido condensador) y de 1 psi en la inferior (incluido calderín). Si entra a 20 atm, las presiones serían $(20\text{atm}-6\text{psi})=20-0.41=19.59$ atm en el condensador y $(20\text{ atm}+1\text{psi})=20+0,07\text{ atm}=20.07$ en el calderín. Esta decisión se puede luego cambiar tras ver el NPT que resulte de la simulación e iterar.

8º) Por último, hay que especificar la relación de reflujo (que será una fija o una proporción respecto al mínimo que se expresaría con un signo (-) delante, es decir para 1,5 veces el reflujo mínimo sería -1,5.

9º) Realizamos la primera simulación en estas condiciones y en la hoja de resultados buscamos los del bloque DSTWU. En esta hoja se especifica entre otras cosas NPTmin y L/Dmin aparte de los valores actuales de la simulación que podemos pasar a modificar ahora.

Summary		
Balance		
Reflux Ratio Profile		
Results		
Minimum reflux ratio:	2.78415732	
Actual reflux ratio:	4.17623598	
Minimum number of stages:	9.54006847	
Number of actual stages:	15.9244994	
Feed stage:	8.57024498	
Number of actual stages above feed:	7.57024498	
Reboiler heating required:	4751.71817	Watt
Condenser cooling required:	4292.6325	Watt
Distillate temperature:	48.1424938	C
Bottom temperature:	137.491055	C
Distillate to feed fraction:	0.23861344	
HETP:		

La simulación pronostica 16 platos teóricos (siguiente entero a 15,92), y el plato de alimentación en el plato 9 (8,57).El mínimo NPT es de 10 (9,59) y una relación de reflujo mínimo de 2,784 entendiendo que en este caso el reflujo se expresa como externo (L/D).

Como vemos hay menos platos de los considerados por lo que podemos volver a cambiar las presiones: 9 platos=0,9 psi+5=5,9 psi de pérdida de carga arriba y 7 platos=0,7 psi de pérdida

de carga abajo. Las presiones serán por lo tanto: arriba=20-5,9 psi=20-0.40=19,60 atm y abajo=20+0,7 psi=20+0.05=20.05. Lo sustituimos y volvemos a simular.

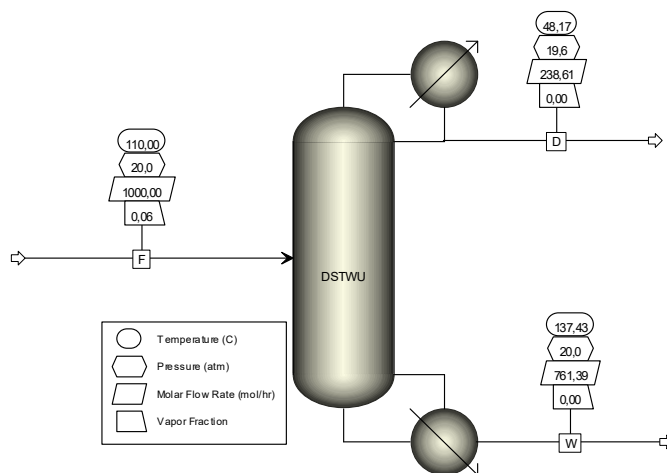
Summary		Balance	Reflux Ratio Profile
Results			
Minimum reflux ratio:	2,78388209		
Actual reflux ratio:	4,17582313		
Minimum number of stages:	9,53537818		
Number of actual stages:	15,9170841		
Feed stage:	8,56841022		
Number of actual stages above feed:	7,56841022		
Reboiler heating required:	4747,65745	Watt	
Condenser cooling required:	4291,33943	Watt	
Distillate temperature:	48,1680603	C	
Bottom temperature:	137,429836	C	
Distillate to feed fraction:	0,23861385		
HETP:			

La simulación pronostica de nuevo 16 platos teóricos (siguiente entero a 15,91), y el plato de alimentación en el plato 9 (8,57). El mínimo NPT es de 10 (9,54) y una relación de reflujo mínimo de 2,784 por lo que ahora todo cuadra.

También podemos obtener de las necesidades caloríficas del calderín y el condensador y de las temperaturas en ambos.

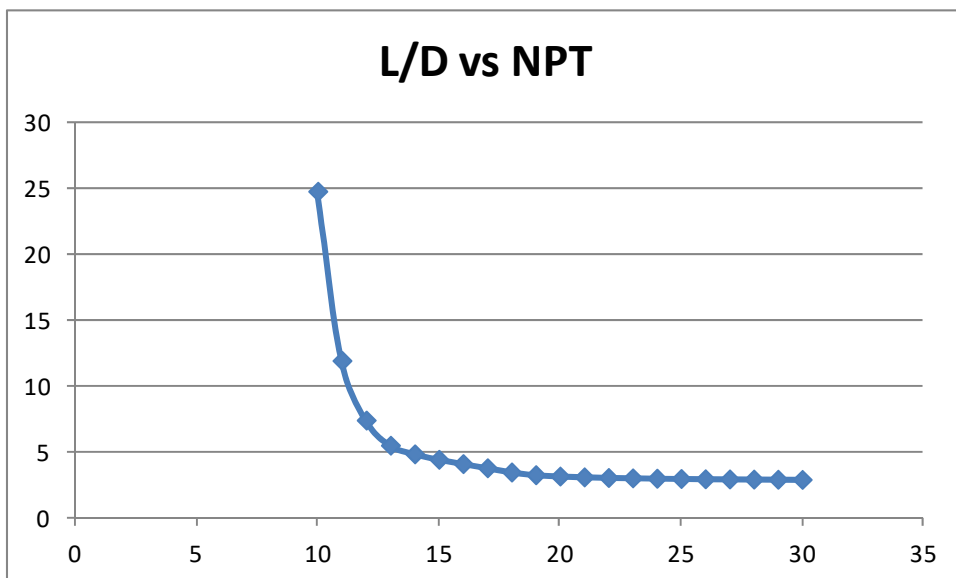
10º) A partir de aquí podemos ir cambiando cada condición del sistema para converger hacia donde queramos.

Respecto a los valores de las corrientes, podemos observar en el resumen de corrientes (*stream*) cómo se han respetado y fijado las proporciones de recuperación de los componentes clave y como los no claves (*c2*, *c5* y *c6*) están casi totalmente separados. Estos datos son inamovibles en la simulación de este modelo (aunque podemos cambiarlos manualmente antes de simular) y no se pueden hacer especificaciones o análisis de sensibilidad sobre ellos (en RADFRAC sí).



DSTWU C2-C6				
Stream ID		D	F	W
From		DSTWU		DSTWU
To			DSTWU	
Phase		LIQUID	MIXED	LIQUID
Substream: MIXED				
Mole Flow	mol/hr			
C2		29.99496	30.00000	5.03857E-3
C3		190.0000	200.0000	10.00000
NC4		18.50000	370.0000	351.5000
NC5		.1188118	350.0000	349.8812
NC6		8.00154E-5	50.00000	49.99992
Mole Frac				
C2		.1257050	.0300000	6.61763E-6
C3		.7962656	.2000000	.0131339
NC4		.0775311	.3700000	.4616580
NC5		4.97925E-4	.3500000	.4595319
NC6		3.35334E-7	.0500000	.0656696

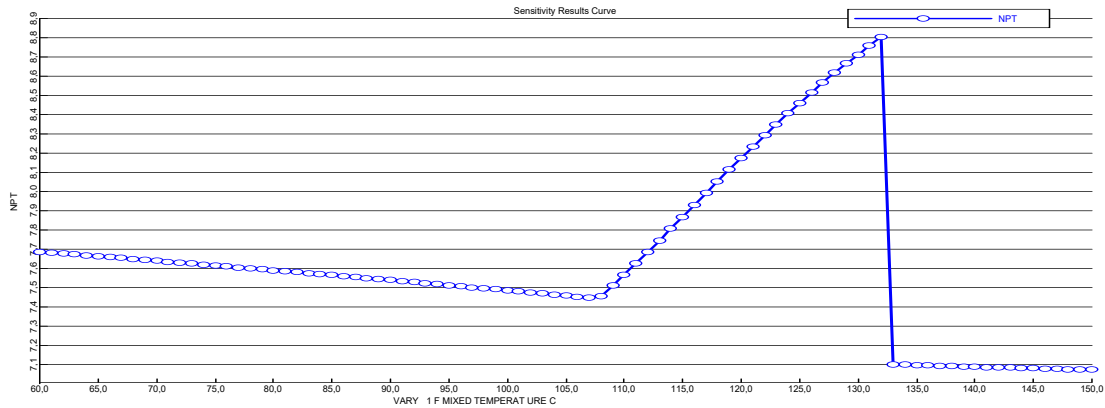
11º) En la ficha de entrada de datos del bloque DSTWU en la pestaña *calculations options* podemos forzar a que se calcule la relación entre la relación de reflujo y el número de platos teóricos. Ponemos que queremos una simulación de platos 10 a 30 y un incremento de 1 y corremos la simulación. Ahora en los resultados del bloque se genera una pestaña de *reflux ratio profile* que nos informa de la dependencia de ambos parámetros entre sí.



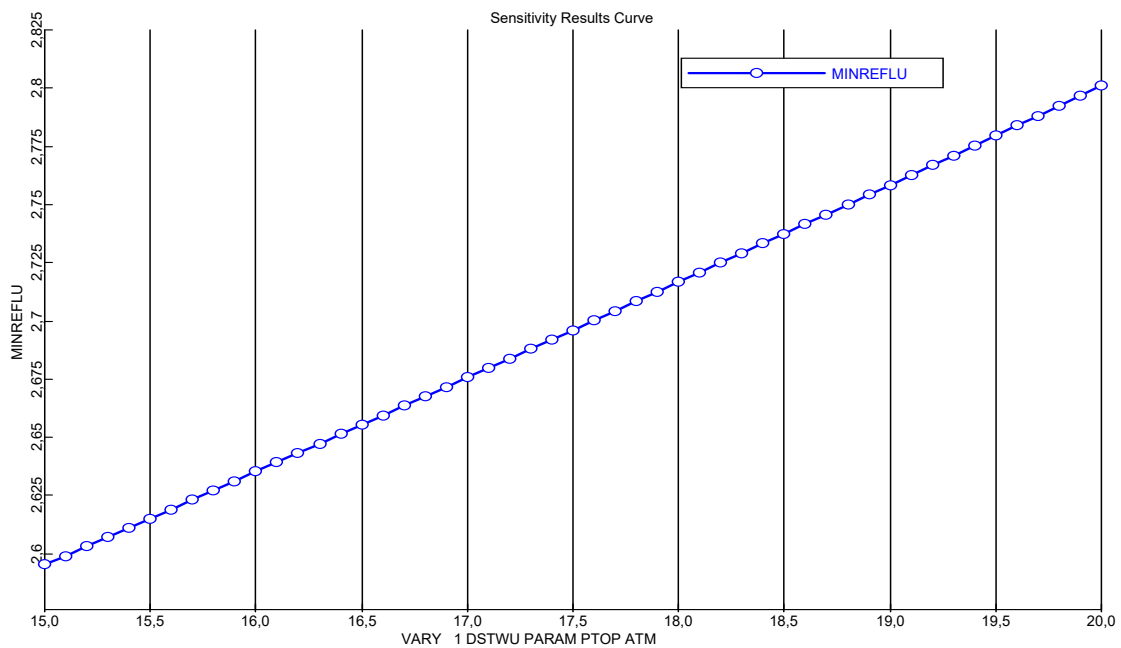
Como se observa, al bajar L/D disminuyen los costes de operación, pero aumenta el número de platos (y aumenta el coste del equipamiento). podemos disminuir hasta un valor de L/D de hasta 3,5 y después ya sólo aumentan los costes y no compensa...

12º) Podemos hacer un análisis de sensibilidad para ver como varía el número de platos teóricos en la sección de rectificación con el valor de la temperatura de entrada. Para ello en *model analysis tools* y *sensitivity* definimos el análisis de sensibilidad NPT (*block var, DSTWU, RECT-STAGES*) y que varíe la temperatura de F (*stream var, F, TEMP*) entre 60 y 150°C en

intervalos de 1°C en la corriente F. Simulamos y obtenemos que va bajando hasta 107°C y cambia de tendencia a partir de aquí (probablemente la mezcla comienza a evaporarse en este punto y antes es una mezcla líquida). Pero sólo afecta al cambio de NPT en la sección de rectificación a partir del valor de 117°C.



Otro análisis de sensibilidad interesante es el de cómo varía el reflujo mínimo con la presión en el condensador. Definimos MINREFLU (*block var, DSTWU, MIN-REFLUX*) y lo hacemos variar con *PTOP* y representar entre 15 y 20 atm a un intervalo de 0,1 atm. A menos presión, menor reflujo mínimo casi linealmente.



También podemos hacer estudio de la dependencia del NPT con la temperatura de entrada, y con la caída de presión en columna *PTOP-PBOT* (AMBAS SEPARADAS). Aunque necesitaríamos un software especial para representarlo.

Por último, si se desea que la columna sea de tipo empacada (columna de relleno) tan sólo hay que activar el ítem *Calculate HETP* en la hoja *Calculation options* de la columna y volver a correr la simulación. Se pueden probar diferentes alturas de columnas y ver la altura equivalente de plato teórico que se obtiene (un poco al revés de lo que sería habitual): para 6 metros de columna, tendríamos una altura equivalente de plato teórico de 0,377 m).

HOMEWORK: Problemas de clase para DSTWU:

1) Una solución acuosa con 35% en peso de amoníaco se desea separar, a 10 atm, en un producto de cabeza con un 97,5% de amoníaco y un producto de colas con un 2,5% de amoníaco. Si la alimentación entra a 15 °C y la relación de reflujo es $L/V = 2/3$, calcular:

- las corrientes de entrada y salida de la columna, el condensador y el calderín.
- la cantidad de calor que hay que retirar del condensador y suministrar al calderín, por kilogramo de producto de cabeza.
- el número de platos teóricos necesarios y en cual se introduce la alimentación.
- los flujos de vapor y líquido en cada plato de la columna.
- el número mínimo de platos.
- la relación de reflujo mínima

SOLUCIÓN BALANCE DE MASA

Corriente	Caudal (kg/h)	Fracción másica
F	100	0,35
D	34,21	0,975
W	65,79	0,025
L0	68,42	0,975
V1	102,63	0,975

En el condensador: Fracción recuperada de NH_3 : $(0,975 \cdot 34,21 / 0,35 \cdot 100) = 0,95299$

Fracción recuperada de H_2O : $(0,025 \cdot 34,21 / 0,65 \cdot 100) = 0,01316$

QJO: Reflujo externo: $(L/D) = 68,42 / 34,21 = 2$

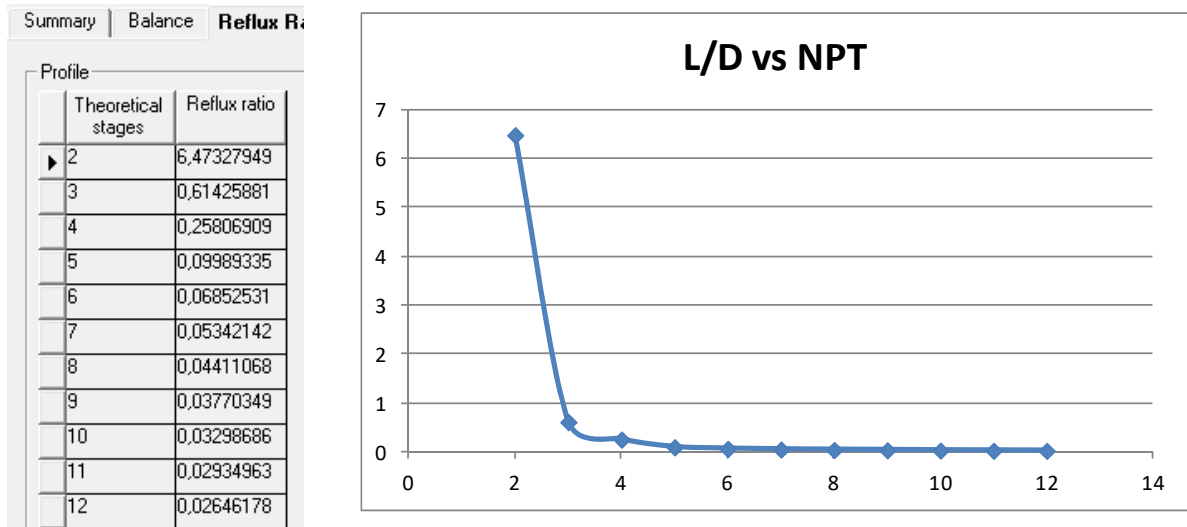
USAR PENG ROBINSON with WONG-SADLER mixing rules (PRWS)

Como aproximación, consideramos que no hay pérdida de presión en la columna: 10 atm en cabeza y cola.

Summary		
Balance	Reflux Ratio Profile	
Results		
Minimum reflux ratio:	0,00238834	
Actual reflux ratio:	2	
Minimum number of stages:	1,8829032	
Number of actual stages:	2,37544405	
Feed stage:	2,2779487	
Number of actual stages above feed:	1,2779487	
Reboiler heating required:	52554,4668	Watt
Condenser cooling required:	41132,9097	Watt
Distillate temperature:	26,19842	C
Bottom temperature:	153,371087	C
Distillate to feed fraction:	0,35421801	
HETP:		

Da lugar a algo con poco sentido (3 platos con un mínimo de 2 y la alimentación en el segundo plato...). Al resolverlo por Pochon-Savarit salieron 4 platos (3 más el calderín). Parece que en estas condiciones de presión y temperatura, la separación es muy sencilla (volatilidades muy diferentes entre compuestos) y no tiene sentido montar una columna de rectificación.

En cualquier caso vamos a considerar de 2 a 12 platos y vamos a generar los resultados, a partir de 5-6 platos el descenso en la ratio de reflujo no justifica seguir.



MODELO DISTL

Por su parte el modelo **DISTL** es similar al DSTWU pero admite una alimentación multicomponente. Se deben especificar la relación de reflujo, el número de platos teóricos y la ratio de productividad (D/F). Luego mediante simulación permite optimizar el resultado. Este modelo utiliza la aproximación de Edmister. Este modelo no se basa en el NPT y L/D mínimos sino en los teóricos (no estima los valores mínimos).

1º) Vamos a considerar una mezcla de 1000 mol/h de hidrocarburos **c4-c5-c6-c7-c8 equimoleculares** (todos 0,2) sin componentes clave. La temperatura de entrada es 150°C y la presión 10 atm. Usaremos el modelo CHAO-SEA, que está recomendado para aplicaciones de refinería de baja y media presión.

En este caso se debe definir inequívocamente el número de platos teóricos, el plato de la alimentación la relación de reflujo externa (L/D) y la ratio D/F. Luego podremos modificarlo sobre la base de establecer simulaciones con análisis de sensibilidad y de especificación de diseño.

Vamos a optar en una primera pasada por 20 etapas con el plato de alimentación en la 10, una ratio de reflujo externo de 2, y una ratio D/F de 0,7. Para no complicarnos en esta primera etapa podemos poner 10 atm de presión en condensador y calderín. Simulamos y obtenemos una separación mejorable con casi todo el C4 a c6 en el destilado y en el calderín una mezcla de c7-c8. Podíamos incluso haber afrontado esta separación usando DSTWU. Lo peor es que tenemos c7 muy fraccionado (casi al 50%).

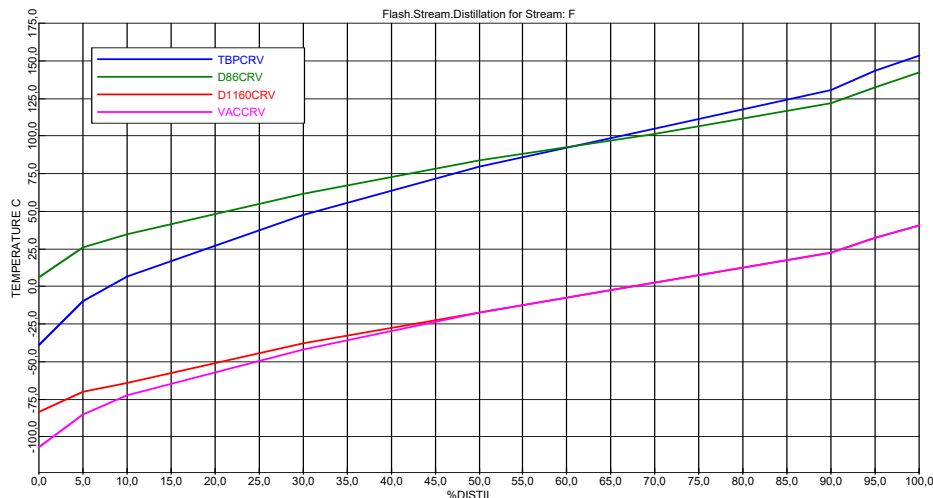
DISTL C4-C8							
Stream ID		D	F	FN	LOU T	VOU T	W
From		DISTL			FLASH	FLASH	DISTL
To			DISTL	FLASH			
Phase		LQ UID	MIXED	MIXED	LQ UID	VAPOR	LQ UID
Substream: MIXED							
Mole Flow	mol/hr						
NC4		200.0000	200.0000	200.0000	138.6016	61.398398	3.7777E-6
NC5		199.9957	200.0000	200.0000	161.6109	38.389094	3.0716E-3
NC6		199.1242	200.0000	200.0000	176.8131	23.18687	8.758481
NC7		99.72042	200.0000	200.0000	186.2024	13.79765	100.2796
NC8		1.160223	200.0000	200.0000	191.9013	8.098746	198.8398

Ahora habría que imponer un objetivo: Separar casi completamente el C8 por abajo (>98%) y el c7 por arriba lo mejor posible. ¿cómo?...

2º) Empezamos por ajustar bien las presiones calculando el punto de burbuja en el flash isotérmico a 120ºF y fracción de vapor 0 y resulta 1,316 atm que son 19,4 psi muy inferior a 215 psi por lo que el condensador es total. Si ponemos el flash adiabático (*heat duty=0*) y 150ºC obtenemos una fracción de vapor de 0,1449 (que sería la condición de alimentación en ASPEN PLUS), por lo que estamos en una mezcla líquido-vapor de casi un 14,5% vapor y el resto de líquido. Si observamos los resultados de la ficha del DISTL, esta información está en ellos como *feed quality* (no está en DSTWU):

Summary		
Balance		
Results:		
Condenser duty:	14216,2762	Watt
Reboiler duty:	14040,1227	Watt
Feed stage temperature:	209,508296	C
Top stage temperature:	130,97039	C
Bottom stage temperature:	231,527589	C
Feed quality:	0,14487649	

Si seleccionamos la corriente F y hacemos un análisis *Tools, stream, dist-curve*:



donde:

Curve	Description
TBPCRV	True boiling point distillation curve on liquid volume basis
D86CRV	ASTM D86 distillation curve
D1160CRV	ASTM D1160 distillation curve at 10 mmHg
VACCRV	Vacuum distillation curve on a liquid volume basis at 10 mmHg

NOTA: SOBRE LA CONDICIÓN DE ALIMENTACIÓN EN ASPEN PLUS.

Si hacemos un análisis de corriente del punto:

Stream:

Stream properties

		TOTAL	VAPOR	LIQUID
TEMP	C	150		
PRES	atm	10		
VFRAC		0,1448739		
MOLEFLMX	mol/hr	1000	144,8739	855,1261
MWVMX		86,17716	73,47484	88,32916
HMX	Watt	-46736,25	-5343,528	-41392,72
HMX	J/kmol	-168250000	-132780000	-174260000
SMX	J/kmol-K	-555470	-432400	-576320
CPMX	J/kmol-K	244719	180012	255682
RHDMX	kmol/cum	1,764653	0,3428375	5,933815

donde HMX es la entalpía. Repitiendo el análisis al imponer una fracción de vapor de 0 y 1 (en lugar de la temperatura a 10 atm) obtenemos -47937,11 en VF=0 y -39585,89 en VF=1. Y podemos calcular la condición de alimentación:

$$\phi = \frac{H_v^0 - H_F^0}{H_v^0 - H_L^0} = \frac{-39585,89 - (-46736,25)}{-39585,89 - (-47937,11)} = \mathbf{0,856}$$

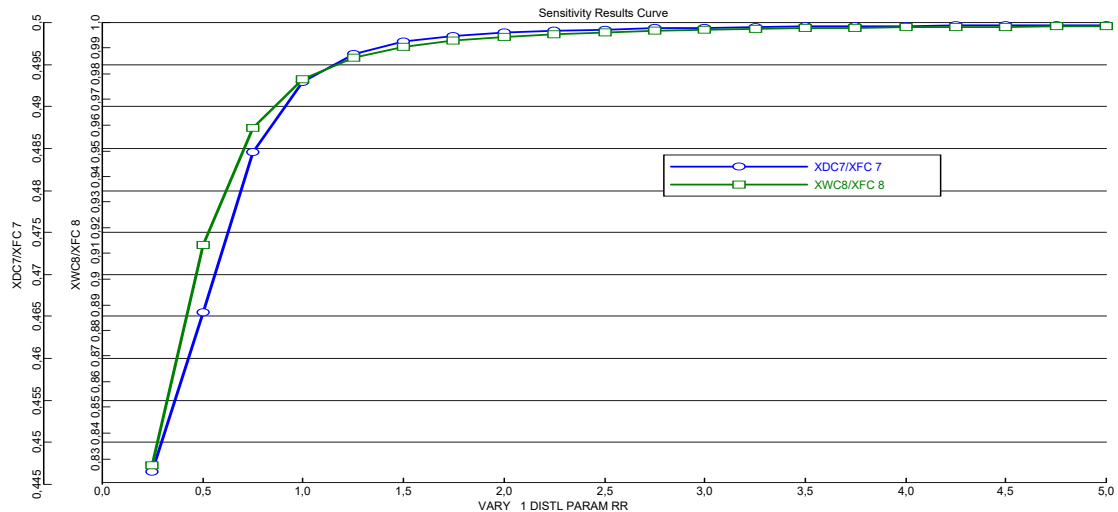
CUIDADO: La condición de alimentación en ASPEN PLUS es $1-\phi=0,144$. en lugar de tomar como referencia el VAPOR se toma el LÍQUIDO:

$$\phi = \frac{H_F^0 - H_L^0}{H_v^0 - H_L^0} = \frac{-46736,25 - (-47937,11)}{-39585,89 - (-47937,11)} = \mathbf{0,144}$$

3º) Considerando los 20 platos anteriores con la alimentación en el plato 10, la pérdida de presión sería en la zona de enriquecimiento sería de $5+1=6$ psi=0,41 atm y la presión en el condensador= $10-0,41=9,59$. Para la zona de agotamiento la pérdida sería de 1 psi= 0,07. Y la presión en el calderín sería de $10+0,07=10,07$. Lo incluimos en el DISTL y volvemos a iterar y la cosa cambia más bien poco.

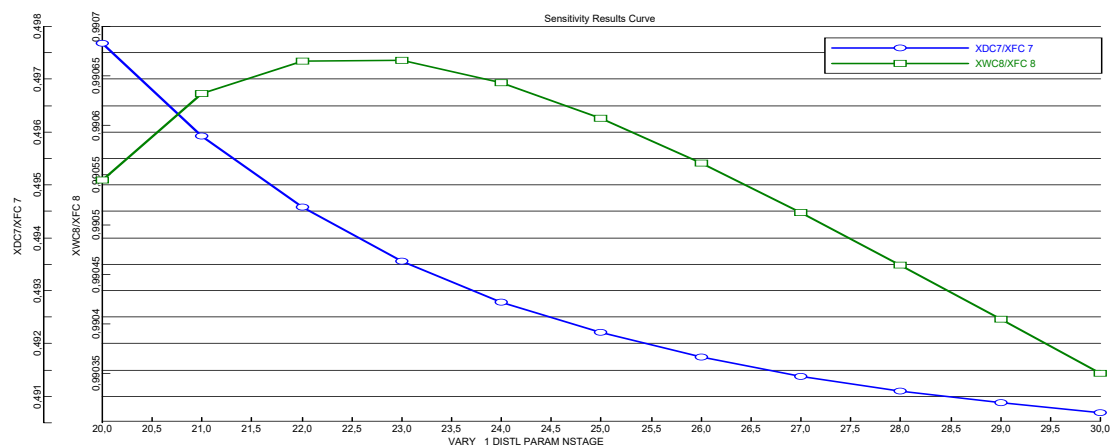
4º) Vamos al análisis de sensibilidad para ver cómo influyen los parámetros clave del DISTL en la separación y analizaremos la cantidad de C8 en W respecto a F ($XWC8/XFC8$) en mole flow y la cantidad de c7 en el destilado respecto a F ($XDC7/XFC7$) en mole flow en función de la relación de reflujo (RR), del NPT (NSTAGE) y de la posición del plato de alimentación (FED-LOC).

En primer lugar, al variar la relación de reflujo (creamos el análisis de sensibilidad REFLUX) variando RR entre 0,25 y 5 vemos que por encima de 2, casi no mejora ninguno de los dos. Es más, podemos bajar hasta 1,5 y seguiríamos con un 99% de nC8 recuperado en el calderín.



Vamos a bajar la relación de reflujo a 1,5 (antes estaba en 2) en DISTL para ahorrar costes de operación y simulamos.

Vamos analizar lo que pasa en función del número de platos. Ahora creamos análisis de sensibilidad llamado NPT (desactivamos REFLUX para evitar problemas) en función del número de platos (NSTAGE) y lo variamos entre 20 y 30 (obviamente en incrementos de 1).

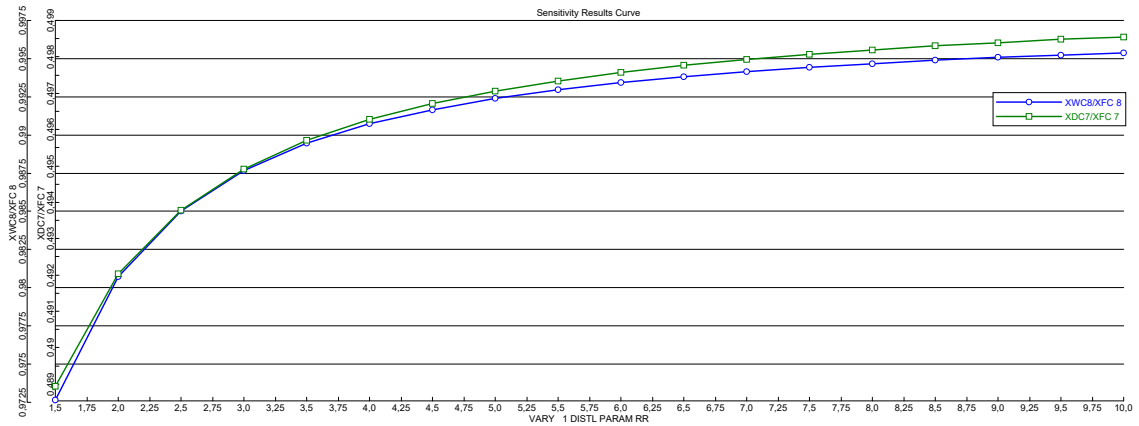


La separación de c7 mejora al bajar el número de platos para el c7 y para el c8 apenas empeora al bajar por debajo de 22 platos (por encima algo más).

Hemos de reconsiderar nuestra columna y bajar el número de platos. Vamos a cambiar en el módulo DISTL la columna a 10 platos con la alimentación en el 5 y desactivaremos el análisis de sensibilidad NPT para que no dé problemas y simulamos. Vemos los resultados en *stream*.

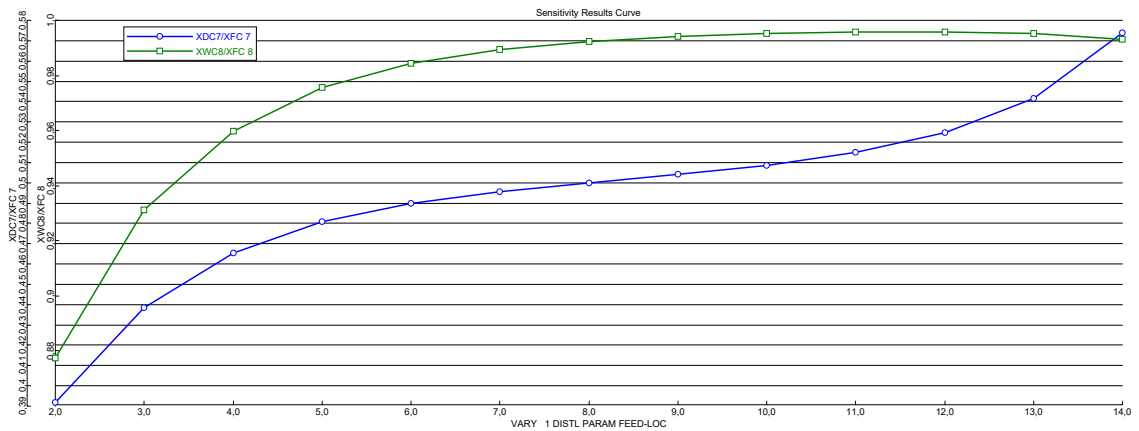
Nos hemos pasado. Con tan pocos platos, empeora mucho la separación (incluso empiezan a aparecer c6 y c5 en el calderín. Ponemos 15 platos y la alimentación en el 7 y simulamos.

Ahora intentamos mejorar la separación aumentando la relación de reflujo. Activamos el análisis de sensibilidad REFLUX y variamos entre 1,5 y 10 en intervalos de 0,5 y simulamos.

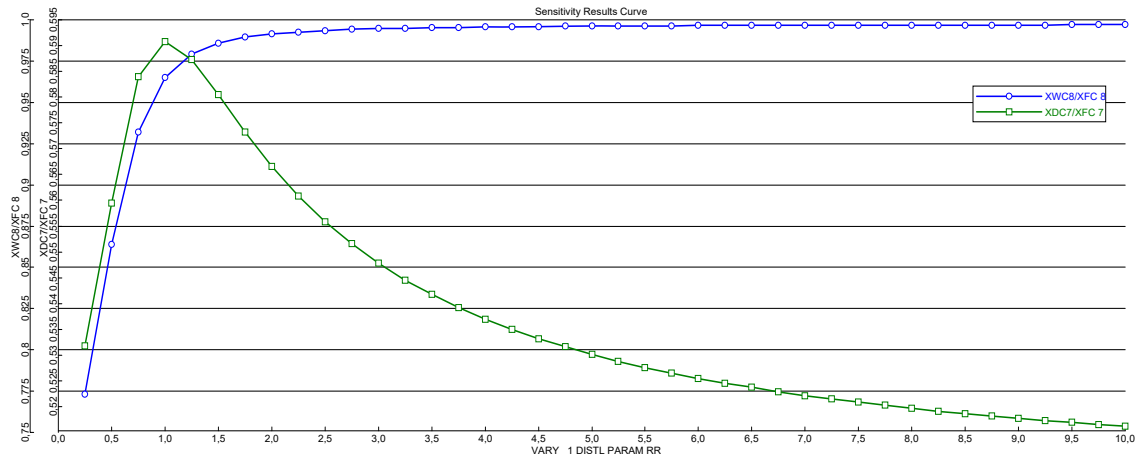


Basta subir hasta 3,5 de L/D para tener de nuevo una buena recuperación del c8 (>99%). Así que con unas 15 etapas ahorramos bastante respecto a la columna de 20 y sólo hay que subir el reflujo de 1,5 a 3,5. Lo hacemos (cambiamos a 3,5 en DISTL) y simulamos.

Por último vamos a localizar mejor el plato para mejorar aún más. Desactivamos los otros dos análisis de sensibilidad y creamos el análisis de sensibilidad FEEDTRAY definiendo la variable FEED-LOC entre 2 y 14 (a incrementos de 1). El c8 casi no tiene mejora a partir de la posición 10. Para el c7 mejora cuanto más baja el plato de alimentación.



Desactivamos el análisis de sensibilidad FEEDTRAY y vamos a cambiar en el módulo DISTL el plato de alimentación a la posición 13 de 15. Activamos el REFLUX entre 0,5 y 10 y EUREKA. Encontramos un máximo local a 1, pero para cumplir con el 98% de c8 hay que ir a 1,5. De todos modos a 1,5 de reflujo, 15 platos con el plato 13 de alimentación hemos mejorado la recuperación de c7. hasta el 58%. NO HAY PARA MÁS. Cambiamos en DISTL a 1,5 y simulamos.



Sólo quedaría ajustar las presiones del calderín y condensador.

Con 15 platos (13 de ellos en la sección de enriquecimiento los cambios de presión quedarían: -6,3 psi y +0,2 psi (**9,57 y 10,01**). Simulamos con las nuevas presiones y no cambia casi nada.

DISTL C4-C8							
Stream ID		D	F	FIN	LOUT	VOUT	W
From		DISTL			FLASH	FLASH	DISTL
To			DISTL	FLASH			
Phase		LIQUID	MIXED	MIXED	LIQUID	VAPOR	LIQUID
Substream: MIXED							
Mole Flow	mol/hr						
NC4		199.4414	200.0000	200.0000	138.6016	61.39839	.5585874
NC5		196.7742	200.0000	200.0000	161.6109	38.38909	3.225820
NC6		184.9679	200.0000	200.0000	176.8131	23.18687	15.03213
NC7		116.0346	200.0000	200.0000	186.2024	13.79765	83.96544
NC8		2.782274	200.0000	200.0000	191.9013	8.098746	197.2177
Mole Frac							
NC4		.2849163	.2000000	.2000000	.1620826	.4238150	1.86196E-3
NC5		.2811060	.2000000	.2000000	.1889900	.2649886	.0107527
NC6		.2642398	.2000000	.2000000	.2067677	.1600521	.0501070
NC7		.1657637	.2000000	.2000000	.2177476	.0952410	.2798848
NC8		3.97468E-3	.2000000	.2000000	.2244120	.0559032	.6573924

NOTA:

Como se observa este modelo sirve básicamente como etapa previa del riguroso (RADFRAC) y no aporta gran información salvo permitir establecer unas primeras simulaciones en mezclas multicomponentes sin clave ligera y pesada (que es el campo al que no llega DSTWU) de cuál es el rango de platos y relaciones de reflujo útiles.

SESIÓN 4 y 5

Objetivo

Utilizar el modelo riguroso y más versátil para separaciones G-L del ASPEN PLUS.

Resolver problemas tipo:

- Aplicación del modelo RADFRAC a mezclas binarias y multicomponentes.
- Aspectos de diseño: cálculo de dimensiones e influencia del tipo de plato (*tray sizing*) y del relleno (*pack sizing*).
- Adaptación del modelo a la operación de absorción (módulos *tray rating* y *pack rating*).

MODELO RADFRAC

El modelo RADFRAC es un modelo riguroso de amplio espectro de ASPEN PLUS. Es lo suficientemente versátil como para cubrir la mayoría de casos y no sólo modeliza la operación de rectificación, y también es apto para *stripping* G-L y absorción G-L.

Tiene numerosas configuraciones de columna y unidades colaterales posibles incluyendo posibilidades que no contemplan DSTWU y DISTL como:

- Sistemas con tres fases (V-L-L).
- Sistemas con reacción
- Destilaciones extractivas y azeotrópicas.
- Sistemas con grandes desviaciones de la idealidad en fase líquida.
- Separar secciones de columnas como columnas individuales.
- Puede manejar sólidos (incluyendo precipitación de sales) y agua y decantarla en el condensador.

RADFRAC tiene dos niveles de complejidad:

- *Rating mode*: Puede calcular temperaturas, caudales y perfiles de fraccionamiento en la columna. Acepta el cálculo de eficiencias de vaporización y de Murphree.
- *Design mode*: El máximo nivel de complejidad. Se pueden especificar aspectos de diseño como el tipo de platos o empaquetamiento.

RADFRAC está pensado como modelo de diseño aunque su complejidad recomienda que se hagan simulaciones previas en modelos simplificados para acotar el rango de posibilidades. Todo esto es posible porque el modelo resuelve los balances de materia y energía simultáneamente en cada plato de columna. Si la transferencia de materia gobierna el proceso se usan los módulos "rating" y si gobiernan los equilibrios se usan los módulos "sizing".

1º) Conviene como siempre antes de nada fijar un conjunto de unidades adecuado a las unidades del problema (*new units set*). Vamos a partir de una mezcla binaria de **propano-isobutano**. Partiremos de una mezcla de 100 kmol/h con un 40% en moles de propano a 322 K forma líquida y 14,2 atm. Usaremos el método de propiedades de CHAO-SEA para obtener un destilado de 40 kmol/h con un 98% en moles de c3.

Tanto el balance de masa como los datos de presión del condensador (14 atm) y caída de presión por plato (0,1 psi) han sido estimados previamente por un método simplificado.

2º) Definiremos una columna tipo RADFRAC en la que impondremos una relación de reflujo externa (L/D) de 2 y 32 platos con entrada del plato de alimentación en el número 16 *above stage*. El condensador será total y el calderín tipo kettle (más corriente). No haremos ninguna especificación más aunque se pueden aportar más y corremos la simulación. Elegiremos un modelo de comportamiento de equilibrio en el que las condiciones de flujo de la columna permite que se alcancen equilibrios. En caso contrario, si hay limitaciones de transferencia de materia utilizaríamos el modelo *rate-based*.

Verificamos el balance de masa para comprobar que la simulación no ha afectado a nuestras especificaciones en D y W. Vemos que aunque la simulación ha convergido no lo ha hecho donde queríamos y la fracción molar de c3 en el destilado no es 0,98 sino 0,88.

Esto es debido a que las condiciones en las que se obtuvieron los datos (NPT ó L/D) eran aproximadas y en un análisis riguroso no se "soportan". Hay que intentar cumplir en cualquier caso modificado por ejemplo la ratio de reflujo externa. La cambiamos a 5 y volvemos a simular. Ahora incluso conseguimos más separación de la deseada. Podríamos seguir probando valores o establecer una **especificación de diseño**.

3º) En *Data browser* en la pestaña *flowsheet options* creamos una nueva especificación de diseño (C3DEST:mole frac, D, c3) para 0,98 con una tolerancia de 0,001 (algo más del 1%) variando la relación de reflujo (Mole-RR) en la unidad RADFRAC entre 2 y 5 y simulamos. Ahora sí tenemos una composición de 0,9808 en el destilado y 0,0128 en la cola. Esto se consigue con una relación de 3,078 (ver resultados dentro de *flowsheet options, Desing spec, XDC3*).

Pero esta forma de especificar afecta a todas las unidades de una misma hoja por eso hay que especificar una tolerancia. Dentro del bloque RADFRAC tenemos las mismas posibilidades. Así que desactivamos la anterior especificación y creamos una nueva: llamándola 1, con *mole purity*, el valor de 0,98 y seleccionando c3 como componente en la corriente D. En la pestaña *vary* creamos una nueva variable y seleccionamos *reflux ratio* y fijamos el intervalo entre 2 y 5 no es necesario especificar el máximo tamaño de paso para la simulación.

Al simular obtenemos, los resultados en *vary*: L/D=3,056. ¿A qué se debe esta diferencia? Al iterar sólo con los datos de la columna, la convergencia debe ser ligeramente distinta pues se fuerza el valor de fracción molar en la corriente sin tolerancia ninguna (esto se puede ver en la tabla de resultados de las corrientes).

4º) Además de la información de la relación de reflujo optimizada y ajustada a especificación, podemos obtener más información. Dentro de la pestaña de resultados de RADFRAC, tenemos información de temperaturas e intercambios de calor en el condensador y calderín.

Summary		Balance	Split Fraction	Reboiler	Utilities	Stage Utilities	Summary		Balance	Split Fraction	Reboiler	Utilities	Stage Utilities					
View:	Condenser / Top stage	Basis:		Mole									View:	Reboiler / Bottom stage	Basis:		Mole	
Condenser / Top stage performance							Reboiler / Bottom stage performance											
Temperature:	317,065212	K									Temperature:	357,186456	K					
Subcooled Temperature:											Heat duty:	691886,526	Watt					
Heat duty:	-604659,68	Watt									Bottoms rate:	60	kmol/hr					
Subcooled duty:											Boilup rate:	173,69993	kmol/hr					
Distillate rate:	40	kmol/hr									Boilup ratio:	2,89499883						
Reflux rate:	122,252493	kmol/hr																
Reflux ratio:	3,05631231																	
Free water distillate rate:																		
Free water reflux ratio:																		

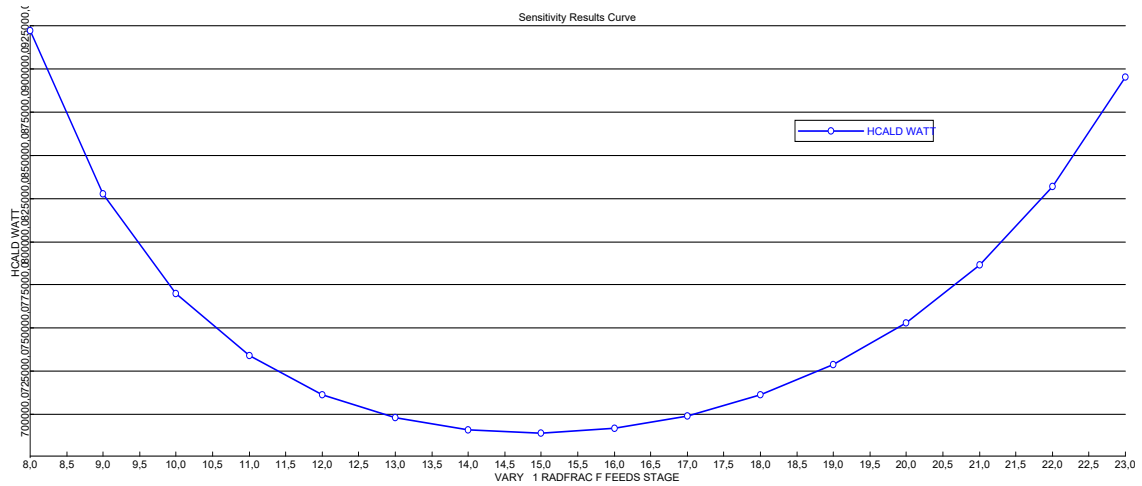
Ahora podemos variar otras condiciones de la columna sin afectar a la especificación de fracción molar del c3 en el destilado (al estar fijada por la especificación). Podemos empezar por variar la posición de la alimentación:

Si la situamos en el plato 12, veremos cómo cambian los intercambios caloríficos en condensador y calderín y también cambia la ratio de reflujo aunque sin afectar a la especificación que impusimos antes de fracción molar de c3 en el destilado.

Summary		Balance	Split Fraction	Reboiler	Utilities	Stage Utilities	Summary		Balance	Split Fraction	Reboiler	Utilities	Stage Utilities					
View:	Condenser / Top stage	Basis:		Mole									View:	Reboiler / Bottom stage	Basis:		Mole	
Condenser / Top stage performance							Reboiler / Bottom stage performance											
Temperature:	317,065168	K									Temperature:	357,186509	K					
Subcooled Temperature:											Heat duty:	711283,044	Watt					
Heat duty:	-624056,11	Watt									Bottoms rate:	60	kmol/hr					
Subcooled duty:											Boilup rate:	178,569992	kmol/hr					
Distillate rate:	40	kmol/hr									Boilup ratio:	2,97616653						
Reflux rate:	127,457321	kmol/hr																
Reflux ratio:	3,18643302																	
Free water distillate rate:																		
Free water reflux ratio:																		

Nos interesa encontrar un mínimo de intercambio de calor en el calderín. Podemos ir variando individualmente el valor de la ubicación del plato o hacerlo desde un análisis de sensibilidad.

Definimos el análisis FEEDPOS (posición del plato de alimentación). El parámetro dependiente será el calor recibido por el calderín (lo hemos llamado HCALD) que encontramos dentro de las variables del bloque RADFRAC (REB-DUTY) y lo vinculamos a FEED-STAGE dentro de las variables de esa misma unidad y lo variamos entre 2 y 31. Al simular obtenemos errores que podemos comprobar que se producen en los valores de posición de la alimentación inferiores a 8 y superiores a 23 (pues no se cumpliría la especificación que impusimos). Refinamos la variación con estos límites (8 y 23) y volvemos a simular.



Se obtiene un mínimo al ubicar el plato de la alimentación en la posición 15. Hemos mejorado el dato que teníamos de partida de ubicar la alimentación en el plato 16, esto implica que los costes de operación son menores. Volvemos a los datos de la columna y cambiamos la ubicación por 15. Ahora el reflujo es de 3,037.

Summary | Balance | Split Fraction | Reboiler | Utilities | Stage Utilities

View: Condenser / Top stage Basis: Mole

Condenser / Top stage performance

Temperature:	317,065233	K
Subcooled Temperature:		
Heat duty:	-601830,7	Watt
Subcooled duty:		
Distillate rate:	40	kmol/hr
Reflux rate:	121,493358	kmol/hr
Reflux ratio:	3,03733395	
Free water distillate rate:		
Free water reflux ratio:		

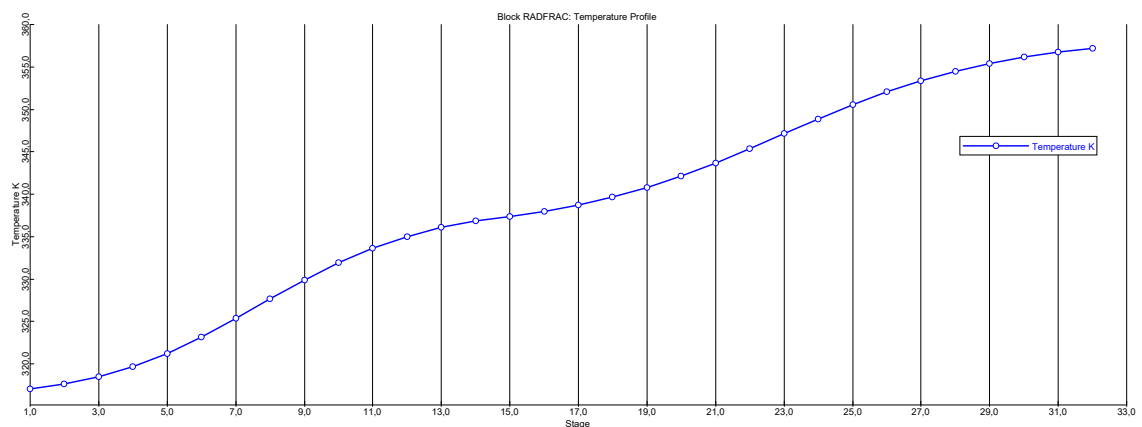
Summary | Balance | Split Fraction | Reboiler | Utilities | Stage Utilities

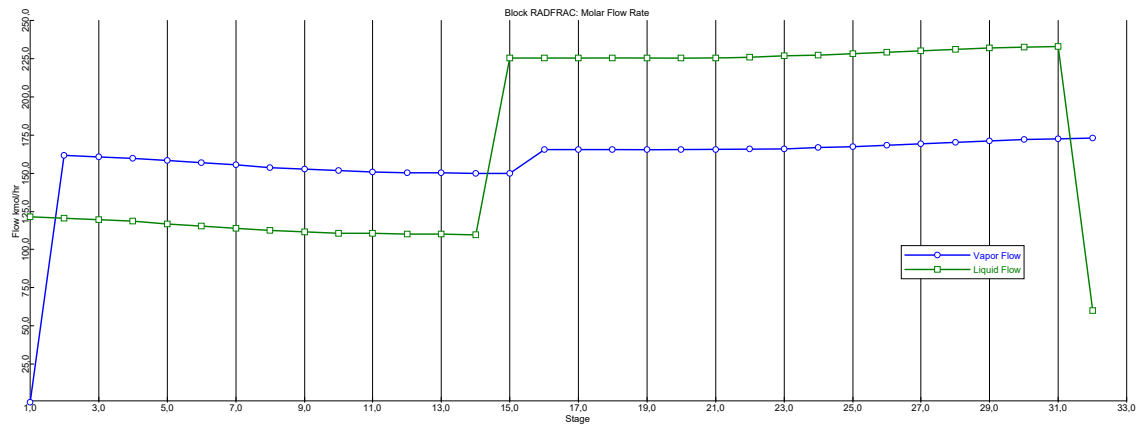
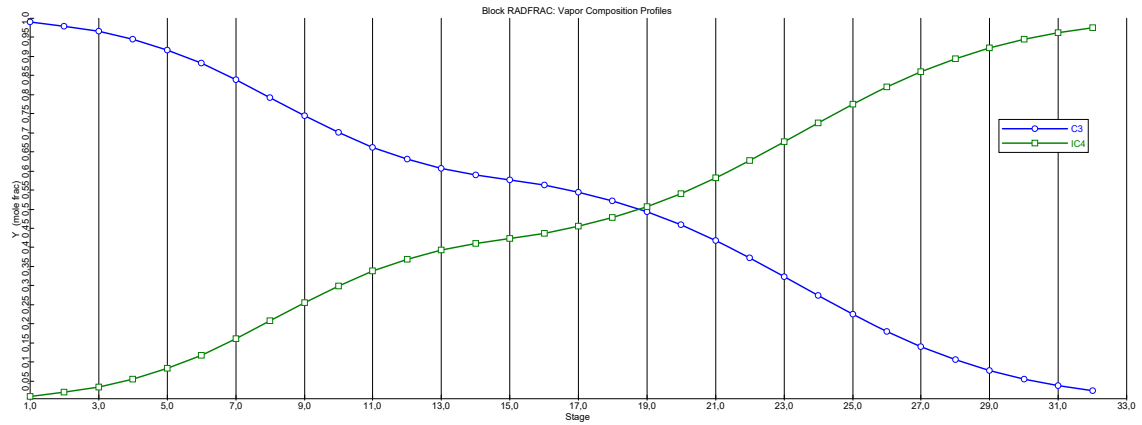
View: Reboiler / Bottom stage Basis: Mole

Reboiler / Bottom stage performance

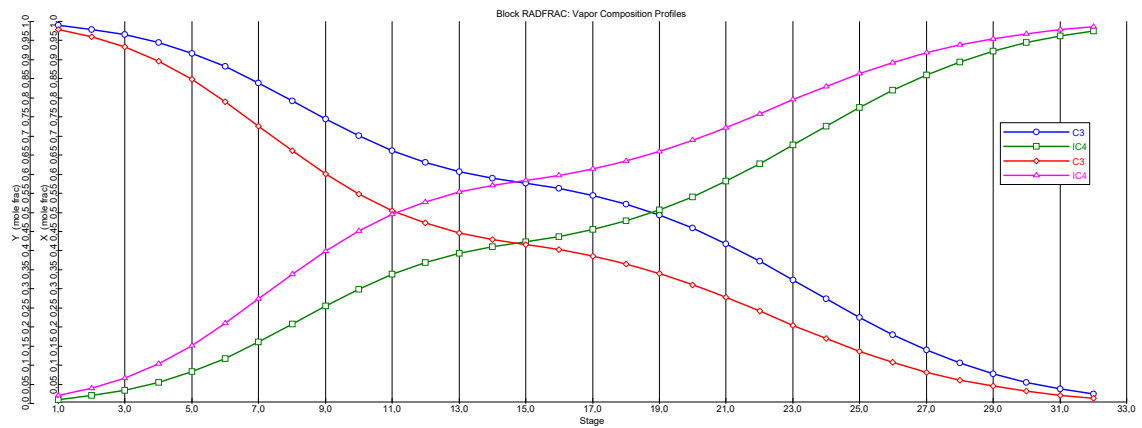
Temperature:	357,18643	K
Heat duty:	689057,51	Watt
Bottoms rate:	60	kmol/hr
Boilup rate:	172,989605	kmol/hr
Boilup ratio:	2,88316009	

Podemos ver más información en los resultados de la columna: perfiles de la columna (temperaturas, presión, caudales de vapor y líquido que salen de cada plato...) y podemos representarlos en un gráfico:

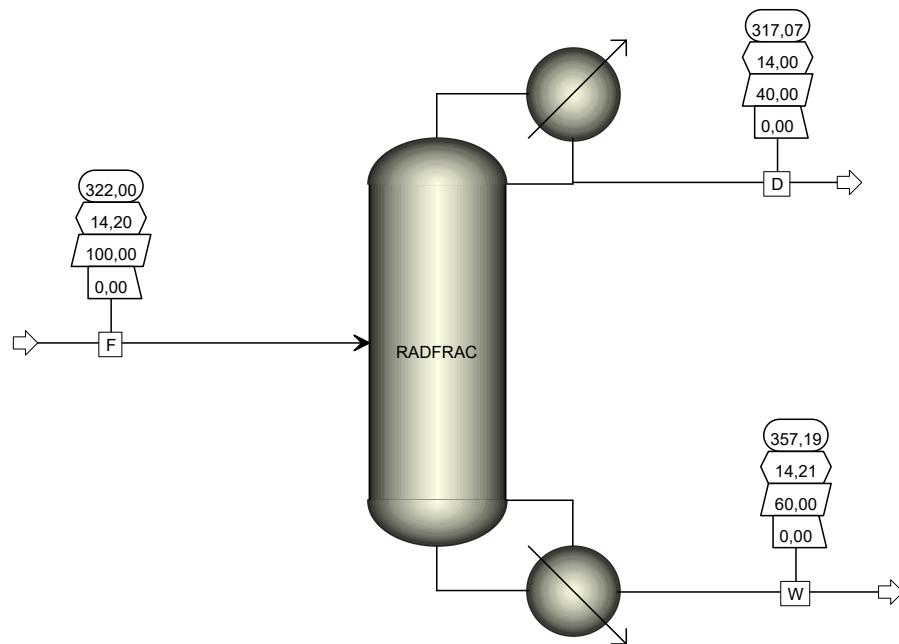
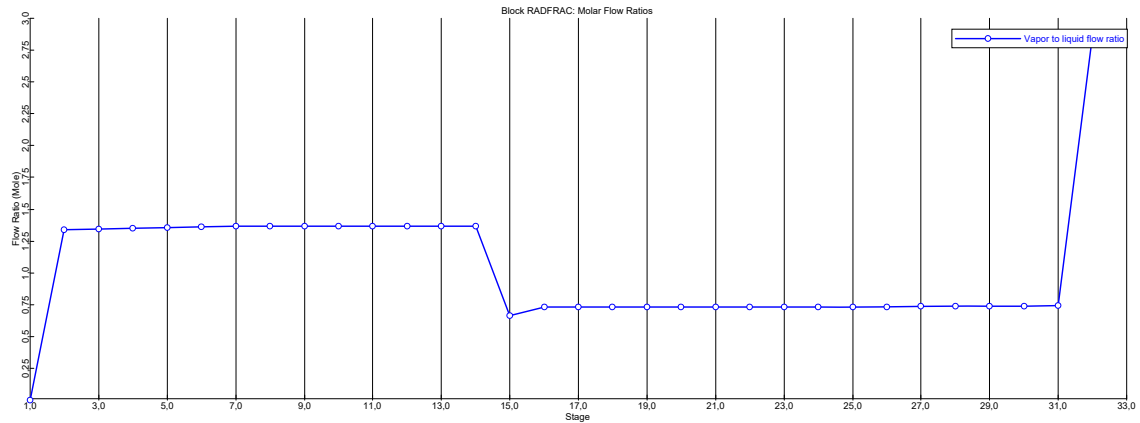




Una vez representado un perfil podemos añadir otros en la misma grafica (añadimos los de la fase líquida):



Si representamos la ratio de flujo (V/L) veremos que no cambia mucho de un plato a otro por lo que los métodos aproximados darán una buena aproximación del comportamiento de este sistema. Siempre podemos tomar los datos numéricos y representar a nuestro gusto en excel.



5º) Si deseamos establecer las dimensiones de la columna podemos considerar los valores calculados por el método analítico visto en clase: 0,61 m de espacio entre platos con un 20% más de altura de la calculada y dos etapas menos (NPT-2) al descontar el calderín y el tanque de reflujo): $L = 1,2(0,61)(32-2) = 21,96$ m.

Para calcular el diámetro de columna usaremos una correlación que viene programada en ASPEN dentro de *Tray sizing* en el bloque de RADFRAC. Definimos una nueva estimación (1) entre los platos 2 y 31 para un plato perforado (*sieve*) que tiene un espaciado de plato típico de 0,61 m y una área de agujeros respecto a área activa de 0,12 (todo esto es modificable). Podemos modificar el porcentaje de velocidad de flujo de vapor respecto al de la velocidad de inundación por ejemplo o el mínimo de área de vertedero. Especificaremos el método de Fair para el cálculo de la velocidad de inundación y simularemos.

Correlación de Fair

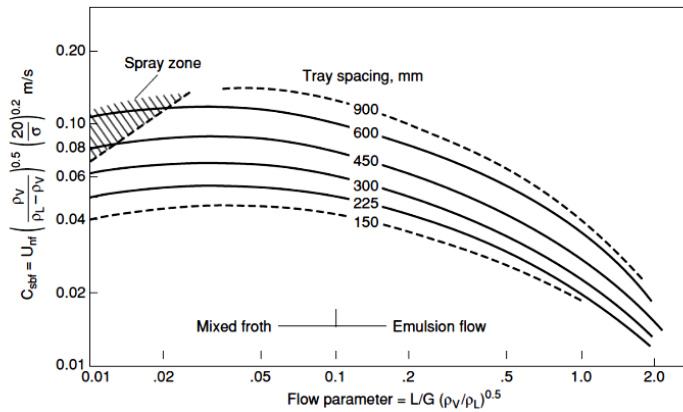
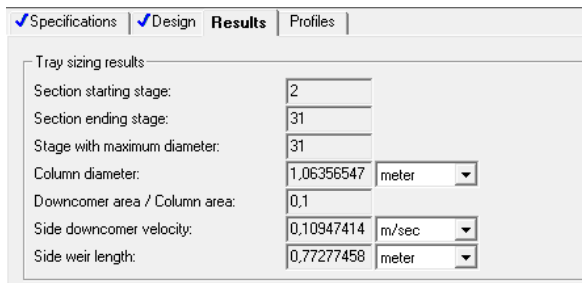


FIG. 14-31 Fair's entrainment flooding correlation for columns with crossflow trays (sieve, valve, bubble-cap). [Fair, *Pet/Chem Eng* 33(10), 45 (September 1961).]

Los resultados aparecerán en el apartado de *Tray sizing*. Obtenemos un diámetro de columna de 1,06 m y el resto de dimensiones de los platos (longitud del vertedero).



Para el tanque de reflujo con geometría cilíndrica usaremos una relación $H/D=4$:

- Reflux Drum

$$V_V = \frac{2LM_L t}{\rho_L}$$

$$D_T = \left(\frac{V_V}{\pi}\right)^{1/3}$$

$$H = 4D_T$$



Para un tiempo de retención de 5 minutos, donde L es el flujo molar líquido del plato 1 (lo podemos comprobar en el perfil de datos (*profile*): 161,48 kmol/h, M_L es la masa molar promedio del destilado (en la tabla de resultados de corriente aparece como 44,38 kg/kmol) y ρ_L es la densidad de dicho destilado (en el mismo sitio: 462 kg/m³).

Si sustituimos todo obtendremos: $V_V = 2,59 \text{ m}^3$ y el diámetro y la altura serán: 0,937 m y 3,75 m.

6º) Vamos a partir de una mezcla multicomponente. Retomaremos el caso **c2-c6** que ya vimos en el modelo DSTWU.

Vamos ahora a hacer una separación ya abordada en DSTWU como clave-ligera clave pesada. Los componentes de la alimentación son **C2, C3, nC4, nC5 y nC6** con flujos molares de 0,03, 0,2, 0,37, 0,35 y 0,05 mol/h (sobre un total de 1000 mol/h) respectivamente de 110°C y 20 atm. En estas condiciones de alta presión es recomendable un método no ideal a altas presiones PENG-ROBINSON(PENG-ROB). Utilizaremos datos ya OBTENIDOS puestos en valor en el simulación DSTWU:

- Presión en el condensador de 19,6 atm y en el calderín de 20,05 atm, con lo que la pérdida en la columna es de 0,45 atm.
- Relación de reflujo externa 4,176 con 16 etapas y la etapa de alimentación en el plato 9 (*above stage*).
- Tasa de destilado de 238,61 kmol/h.
- Modelo de equilibrio (lo habitual en destilación).

7º) Al simular y ver los resultados en *Stream* en la unidad RADFRADC podemos apreciar cómo la hipótesis que hicimos en su momento de aplicar clave ligera y clave pesada al sistema en los componentes c3 y c4 para usar el modelo DSTWU fue afortunada pues los componentes c2, nc5 y nc6 están prácticamente diferenciados entre D y W (*split fraction*). Si quisiéramos separar c5 y c6 tendríamos que acoplar otra columna a la cola de ésta.

	D	F	W
Substream: MIXED			
Mole Flow mol/hr			
C2	29,95300	30,00000	,0469987
C3	180,0032	200,0000	19,99675
NC4	28,36282	370,0000	341,6372
NC5	,2908550	350,0000	349,7091
NC6	7,71488E-5	50,00000	49,99992
Mole Frac			
C2	,1255312	,0300000	6,17276E-5
C3	,7543827	,2000000	,0262634
NC4	,1188669	,3700000	,4487020
NC5	1,21896E-3	,3500000	,4593036
NC6	3,23326E-7	,0500000	,0656692
Mass Flow kg/hr			
C2	,9006760	,9020892	1,41324E-3

	D	F	FIN
Substream: MIXED			
Mole Flow mol/hr			
C2	29,99496	30,00000	30,00000
C3	190,0000	200,0000	200,0000
NC4	18,50000	370,0000	370,0000
NC5	,1188118	350,0000	350,0000
NC6	8,00154E-5	50,00000	50,00000
Mole Frac			
C2	,1257050	,0300000	,0300000
C3	,7962656	,2000000	,2000000
NC4	,0775311	,3700000	,3700000
NC5	4,97925E-4	,3500000	,3500000
NC6	3,35334E-7	,0500000	,0500000
Mass Flow			
C2	,9019377	,9020892	,9020892

Pero en el análisis detallado veremos que la distribución de c3 y nc4 en ambos modelos es muy dispar. De hecho, se recuperan 180 moles con RADFRAC y 190 moles con DSTWU de c3 en el destilado. Y de hecho no se cumplen los requisitos del problema en DSTWU (rec 0,95 de c3 en D y de c4 de 0,05 en D) como muestra el *split fraction* de los resultados del bloque. De hecho

de c3 se recupera sólo el 0,90 y de c4 hay más de la cuenta: 0,077. HAY QUE MEJORAR LA SEPARACIÓN.

Es probable, por tanto es posible que podamos optimizar aún más la columna con estos nuevos datos que cómo lo hicimos con DSTWU.

En la ficha de balance se puede comprobar cómo el ajuste del balance es muy bueno.

Mass and energy balance				
Total		In	Out	Rel. diff
Mole-flow:	mol/hr	1000	1000	0
Mass-flow:	kg/hr	60,7885072	60,7885072	-1,772E-10
Enthalpy:	Watt	-38081,312	-37677,771	-0,0105968

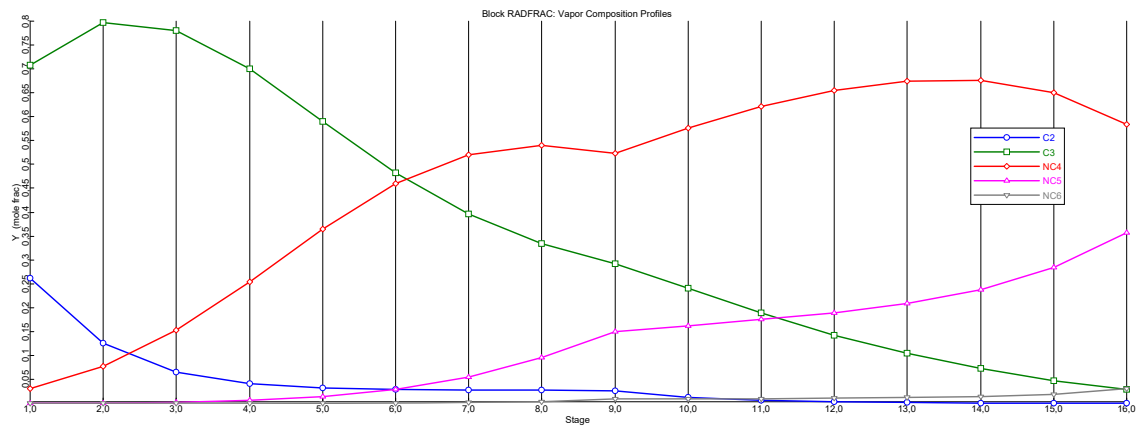
Vamos a forzar como especificación la recuperación del 0,95 de c3 en el destilado: elegimos *design spec* en el bloque y la llamamos 1, elegimos *mole recovery* con un objetivo de 0,95 del componente c3 en D con la base de F. Y en el bloque *vary* especificamos *reflux ratio* entre 2 y 10 y simulamos.

El resultado (en *vary*) indica que la relación de reflujo externa que cumple la especificación es 6,178. ¿Se cumplirá también la otra especificación? (nc4 0,05 en D). Vamos a *split fraction* de los resultados del bloque: se cumple. Ahora sí estamos trabajando bajo los mismos resultados que DSTWU aunque como vemos la relación de reflujo es diferente (un 48% mayor). El modelado riguroso ha destapado que la simulación aproximada era algo optimista en cuanto a la relación de reflujo requerida.

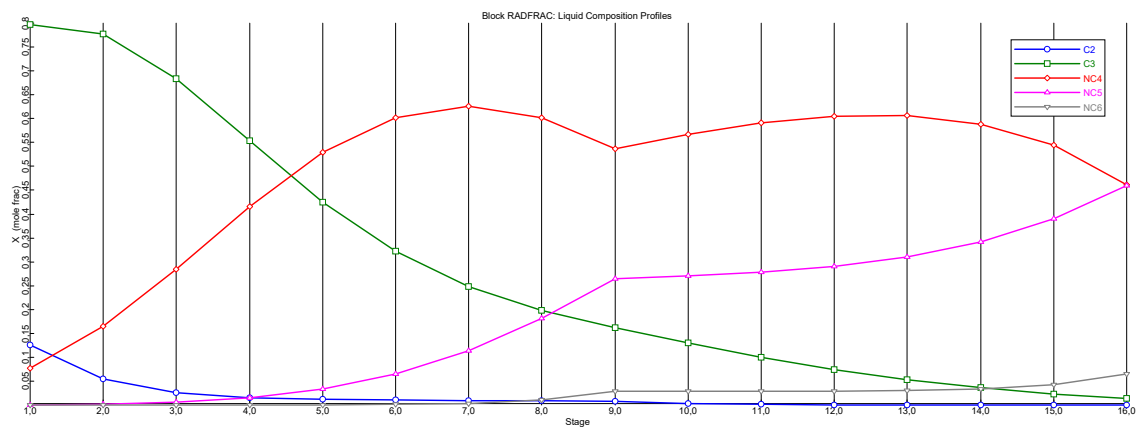
Además se obtienen los calores intercambiados en el calderín y el condensador en la pestaña de resumen (summary) y sus temperaturas.

Condenser / Top stage performance		Reboiler / Bottom stage performance	
Temperature:	48,1742265 C	Temperature:	137,425404 C
Subcooled Temperature:		Heat duty:	6617,01862 W
Heat duty:	-6160,9097 W	Bottoms rate:	761,39 mol/hr
Subcooled duty:		Boilup rate:	1578,07532 mol/hr
Distillate rate:	238,61 mol/hr	Boilup ratio:	2,07262417
Reflux rate:	1474,12384 mol/hr		
Reflux ratio:	6,17796339		
Free water distillate rate:			
Free water reflux ratio:			

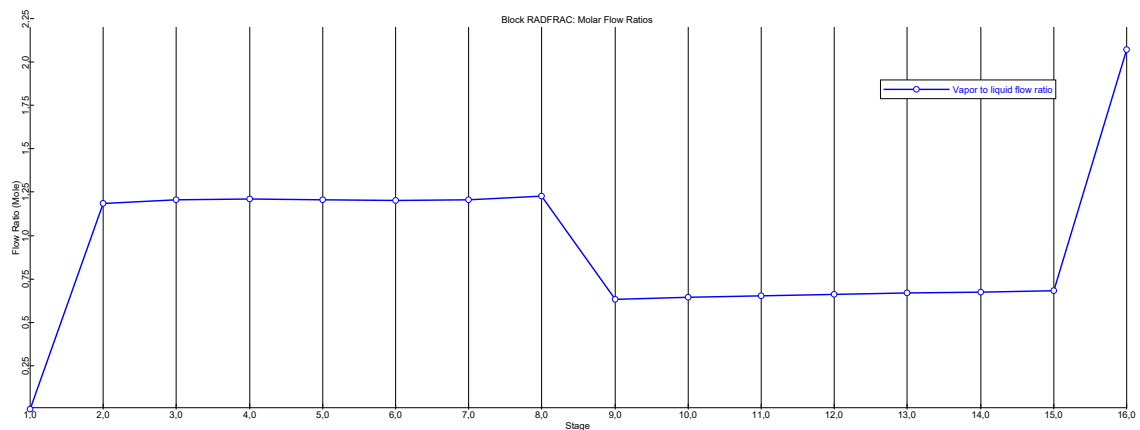
Y en cuanto a los perfiles, a modo de ejemplo podemos graficar la composición en la fase vapor a lo largo de la columna usando los resultados en *profile*.



De igual modo en la fase líquida:



Y si representamos la ratio V/L a lo largo de la columna veremos cómo es muy estable a lo largo de cada sección (lo que justificaba el empleo de métodos simplificados de cálculo).



8º) En esta mezcla podría ser interesante recuperar el pentano más separado de cómo lo obtenemos ahora por cola del proceso. Podríamos simplemente montar una columna para separar la cola del proceso o podemos montar una columna auxiliar con picaje lateral en la zona de agotamiento. Echando un vistazo al perfil de fracciones molares, la mayor diferencia se da en el plato 13. Vamos a incluir el picaje lateral ahí.

El **picaje lateral** será de 150 mol/h (pues hay que restarlo de los 600 que salen por cola pues la el caudal de destilado está fijado) y no conviene que sea muy alto para no perjudicar mucho el resto de la separación. Creamos para ello una corriente de salida opcional (PICAJE) y la unimos por su inicio a la columna.

Si entramos en *data browser* veremos cómo hay que definir el plato de entrada: 13 y con 150 mol/h y simulamos.

Vamos a los resultados de la corriente nueva y vemos cómo esta corriente es mayoritaria en nc4 y posee una proporción c5-c6 muy favorable (10,92) aunque inferior a la de antes del picaje en este plato (hay que tener en cuenta que retirar L o V de la columna es empeorar su capacidad de separación).

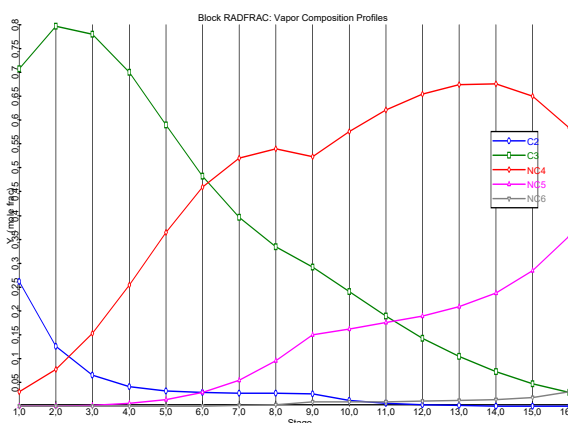
Si vamos a los resultados del bloque se comprueba que para mantener la especificación (0,95 de c3 en D) se ha tenido que modificar la ratio de reflujo externa a 7,330. si vamos a split ratio se observa cómo el efecto ha sido disminuir sustancialmente la recuperación de nc4 por W y concentrarla en el picaje.

Summary Balance Split Fraction Reboiler Utilities Si					Summary Balance Split Fraction Reboiler U				
Component split fractions in product streams					Component split fractions in product streams				
	Component	D	W	PICAJE		Component	D	W	
▶	C2	0,99867718	0,00022981	0,00109300	▶	C2	0,9994453	0,00055470	
	C3	0,94999995	0,02225003	0,02775002		C3	0,94999999	0,05000001	
	NC4	0,05009029	0,69967062	0,25023908		NC4	0,04999155	0,95000844	
	NC5	0,00033217	0,86400664	0,13566119		NC5	0,00037068	0,99962932	
	NC6	4,969E-07	0,91305291	0,08694659		NC6	5,6644E-07	1	

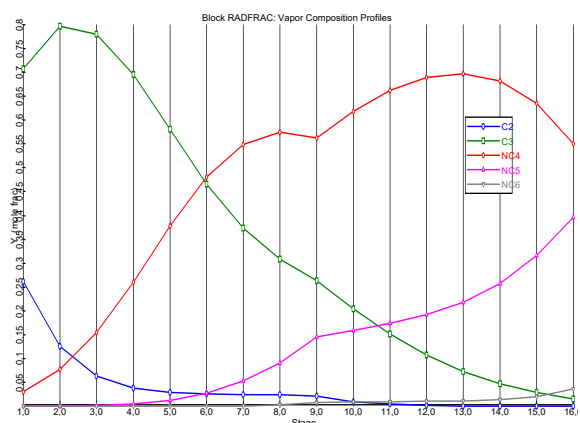
CON PICAJE

SIN PICAJE

De hecho si pintamos el perfil de composiciones en el vapor y el líquido:

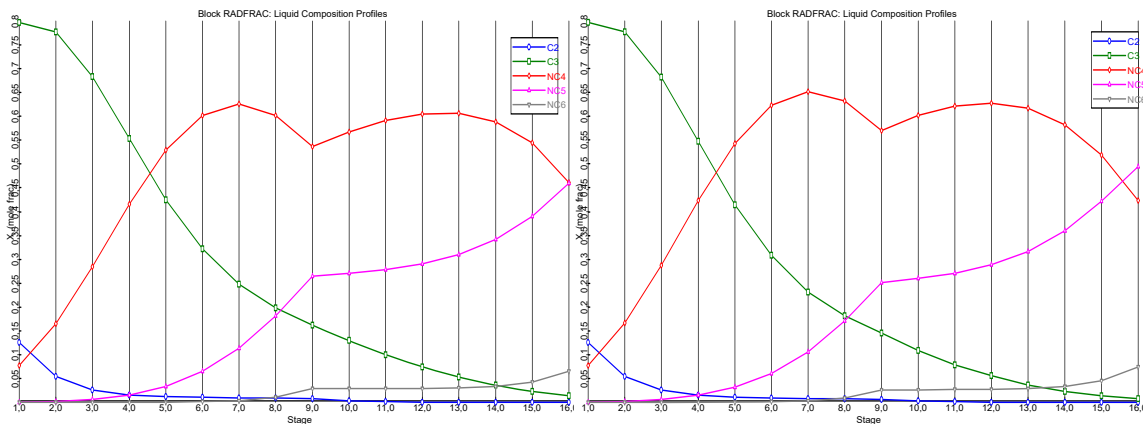


VAPOR ANTES



VAPOR DESPUÉS

No hay grandes diferencias en el vapor



LÍQUIDO ANTES

LÍQUIDO DESPUÉS

Las mayores diferencias se dan en el líquido. Ahora podríamos utilizar la corriente del picaje en el plato 6 para montar otra columna que nos separese el c4 del c5 y c6. Dando por bueno el picaje (si es lo que realmente se perseguía) vamos a pasar a diseñar la columna.

9º) Ahora vamos a implementar el diseño de platos en esta columna. Por el método analítico visto en clase: 0,61 m de espacio entre platos con un 20% más de altura de la calculada y dos etapas menos (NPT-2) al descontar el calderín y el tanque de reflujo: $L = 1,2(0,61)(16-2) = 10,29$ m.

10º) Si hacemos uso de la herramienta *Tray sizing* para calcular el diámetro de columna: Definimos una nueva estimación (1) entre los platos 2 y 15 para un plato perforado (*sieve*) que tiene un espaciado de plato típico de 0,61 m y una área de agujeros respecto a área activa de 0,12 (todo esto es modificable). dejamos el porcentaje de velocidad de flujo de vapor respecto al de la velocidad de inundación (0,8; que es un valor más real) por ejemplo o el mínimo de área de vertedero. Especificaremos el método de Fair y asumiremos un 1,2 de factor de sobreescalamiento y simularemos.

Los resultados aparecerán en el apartado de *Tray sizing*. Obtenemos un diámetro de columna de 11,3 cm que es muy pequeño (no es práctico para labores de mantenimiento salvo que sea el diseño de una columna de laboratorio). No tiene sentido si perseguimos un equipo a escala real. Todo esto está ocasionado porque tenemos una entrada de sólo 1000 mol/h en una columna de que queremos que sea de 1 m de ancho y >10 m de altura. No tiene sentido. OJO: Hay que ser crítico con los resultados. Vamos a modificar la cantidad de alimentación aumentado en un factor de 100 (100.000 mol/h en F y 15.000 en PICAJE y 23861 mol/h en D *distillate rate*) y volvemos a simular.

Si vamos a los resultados de *Tray sizing* veremos que tenemos una columna de 1,13 m (asumible) que cumple con todo lo que le hemos especificado (caudales y composiciones).

Specifications | Design | **Results** | Profiles

Tray sizing results:

Section starting stage:
 Section ending stage:
 Stage with maximum diameter:
 Column diameter: meter
 Downcomer area / Column area:
 Side downcomer velocity: m/sec
 Side weir length: meter

Y en los perfiles vemos cómo se calculan para cada plato los aspectos de diseño.

Specifications | Design | Results | **Profiles**

Tray sizing profiles:

Stage	Diameter	Total area	Active area per panel	Side downcomer area
	meter	sqm	sqm	sqm
2	0,90763836	0,64701681	0,51761344	0,06470168
3	0,90660224	0,64554044	0,51643235	0,06455404
4	0,91179634	0,65295849	0,52236679	0,06529584
5	0,92006556	0,66485575	0,53188459	0,06648557
6	0,93069282	0,68030336	0,54424268	0,06803033
7	0,93911768	0,69267563	0,55414051	0,06926756
8	0,94458509	0,70076444	0,56061155	0,07007644
9	1,04819736	0,86293087	0,69034469	0,08629308
10	1,07643035	0,91004265	0,72803412	0,09100426
11	1,09904397	0,9486806	0,75894447	0,09486805
12	1,11676667	0,9795233	0,78361864	0,09795233
13	1,13015015	1,00314145	0,80251316	0,10031414
14	1,12590272	0,99561542	0,79649233	0,09956154
15	1,13338152	1,0088861	0,80710888	0,10088861

Con estos resultados podemos afinar modificando los parámetros que habíamos fijado (tipo de plato, altura de vertedero, etc...) para ver cómo influyen. A modo de ejemplo cambiamos a un plato tipo Glitsch Ballast y simulamos. La columna cambia a 0,85 m de diámetro por lo que habría que aumentar los caudales si queremos llegar al menos a 1 m de diámetro de columna.

Specifications | Design | **Results** | Profiles

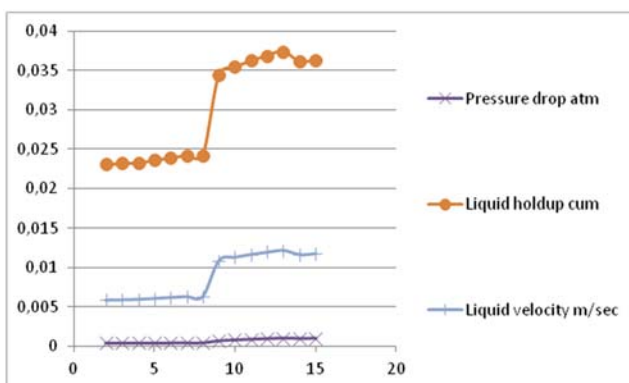
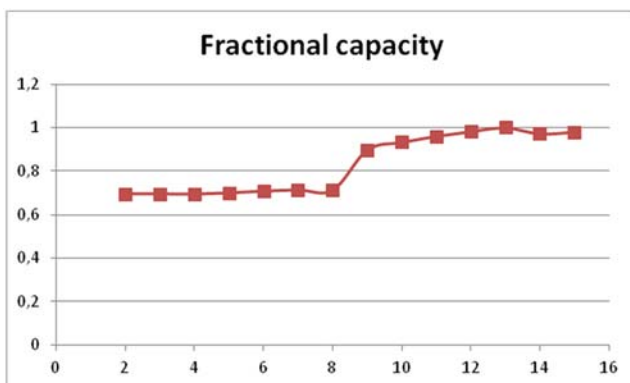
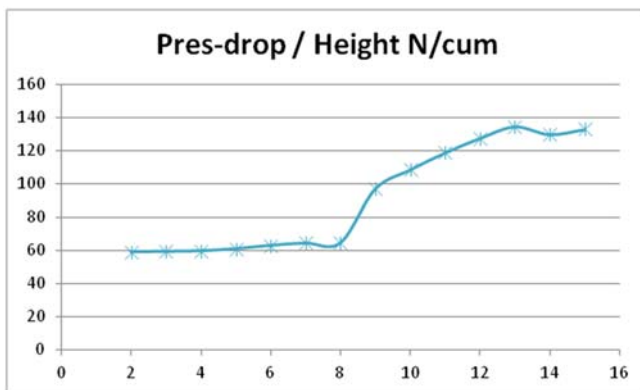
Tray sizing results:

Section starting stage:
 Section ending stage:
 Stage with maximum diameter:
 Column diameter: meter
 Downcomer area / Column area:
 Side downcomer velocity: m/sec
 Side weir length: meter

11º) Ahora veremos qué ocurre si convertimos la columna en una columna empacada. Ponemos en marcha la simulación en el módulo de *Pack sizing*. Definimos el empacado entre las etapas 2 y 15 (1 y 16 son el calderín y el condensador), con un empacado cerámico tipo raschig de la casa raschig de 35 mm de longitud y una columna de 10,29 m de altura (similar a la anterior).

Si no especificamos nada más y simulamos y vamos a la ficha de resultados de *pack sizing* veremos cómo se pronostica un diámetro de 1,028 m e incluso la ratio área/volumen del empacado (140).

En el perfil de diseño tenemos:



12º) Para el tanque de reflujo con geometría cilíndrica ($H/D=4$), usaremos:

- Reflux Drum

$$V_V = \frac{2LM_L t}{\rho_L}$$

$$D_T = \left(\frac{V_V}{\pi}\right)^{1/3}$$

$$H = 4D_T$$



Para un tiempo de retención de 5 minutos, donde L es el flujo molar del plato 1 (lo podemos comprobar en el perfil de datos (*profile*): 2318,85 mol/min, M_L es la masa molar promedio del destilado (en la tabla de resultados de corriente aparece como 43,44 g/mol) y ρ_L es la densidad de dicho destilado (en el mismo sitio: 448,37 kg/m³).

Si sustituimos obtendremos: $V_V = 2,25 \text{ m}^3$ y el diámetro y la altura serán: 0,894 m 3,58 m.

ABSORCIÓN

12º) Ahora cambiamos de torna y creamos un nuevo caso para ver cómo se adapta **RadFrac para el caso de la Absorción G-L**. Las corrientes serán: WATER, AMMAIR como entradas y AMMWATER y CLEANAIR como salidas.

Usaremos 200 kg/h de agua pura para absorber amoníaco de una mezcla de 1200 L/h de aire-amoníaco con una proporción molar de amoníaco de 0,1. El componente aire puede postularse tal cual o indicando cada componente (más tedioso). La corriente de aire con amoníaco entra a 25°C y 3 atm de presión y la corriente de agua a 25°C y 1 atm. El objetivo es retirar el 95% del amoníaco con el agua.

El método termodinámico apropiado para estos casos es ELECNRTL y definiremos el método de cálculo como *rate-based* (admitiendo por tanto que las limitaciones de transferencia de materia gobiernan el proceso). También hay que indicar que no hay calderín o condensador.

La corriente WATER entra en el plato 1 *above-stage* y la corriente AMMAIR entra en el plato 12 *on-stage*. Por su parte la corriente AMMWATER sale del plato 12 como líquido y la corriente CLEANAIR sale del plato 1 como vapor.

Definimos la presión de operación como 1 atm con una caída de 0,1 psi por plato. No tocamos los parámetros por defecto de *Rate-base distillation set-up* (modificables).

Ahora definimos el empaquetado en *Tray rating*: entre las etapas 1 y 12 con platos perforados de 1,5 m y un espaciado de plato de 0,5 metros con 50 mm de altura de vertedero y un factor de sobredimensionamiento de 10% (1,1) y con correlación tipo Fair y activamos la casilla *rate-base calculations* y simulamos. Obtenemos una separación pobre (<40%) a una relación de

Component	CLEANAIR	AMMWATEF
AMONIACO	0,60042102	0,39957898
AGUA	0,1420579	0,8579421
AIR	0,99886244	0,00113756

reflujo baja (0,328).

13º) Para mejorar el proceso haremos un análisis de sensibilidad: ¿cómo varía la recuperación de amoniaco respecto al caudal de agua?:

Definimos CAUDWAT. Con las variables dependientes AMMRES (amoniaco residual en la salida de aire: *stream, mole flow, CLEANAIR, Amoniaco*) y AMMFEED (amoniaco residual en la salida de agua: *stream, mole flow, AMMAIR, Amoniaco*) y tabulamos AMMRES/AMMFEED. Variamos el caudal de agua (*stream-var, water, mass-flow*) entre 200 y 2000 en incrementos de 100.

Si queremos retirar el 95% del amoniaco hay que trabajar por encima de 1800 kg/h de agua. Vamos a repetir el análisis entre 1800 y 1900 a incrementos de 10 l/h y se optimiza a partir de 1840 kg/h.

14º) Hemos conseguido la separación deseada aunque el sistema de platos no es el más eficaz cuando es la transferencia de materia la que gobierna el proceso.

Vamos a transformar la columna en una torre de relleno definiendo *pack rating*. Por su parte en *pack rating*: entre las etapas 1 y 12 en una columna de 1,5 m y un empaquetado cerámico de *raschig* de la propia marca de 35 mm de longitud.

La altura de la columna sería de 6,6 m (se corresponde al caso anterior de 50 m de espaciado y 12 platos y un 10% de sobredimensionamiento).

Results		
Profiles		
Packed column rating results		
Section starting stage:	1	
Section ending stage:	12	
Column diameter:	1,5	meter
Maximum fractional capacity:	0,07983917	
Maximum capacity factor:	0,00505195	m/sec
Section pressure drop:	0,00641226	psi
Average pressure drop / Height:	6,69863596	N/cum
Maximum stage liquid holdup:	0,00236027	cum
Max liquid superficial velocity:	3,3665E-05	m/sec
Surface area:	140	sqm/cum
Void fraction:	0,76	
1st Stichmair constant:	48	
2nd Stichmair constant:	8	
3rd Stichmair constant:	2	

Si tenemos dudas sobre la significación de alguno de estos parámetros podemos ir a *help, what it is?* y marcar la casilla y nos remite a una explicación.

Pero la separación sigue siendo mala. Desactivamos el análisis de sensibilidad e imponemos 1850 kg/h de agua en WATER y simulamos.

Summary			
Balance			
Split Fraction			
Reboiler			
Component split fractions in product streams			
	Component	CLEANAIR	AMMWATER
▶	AMONIACO	0,04937680	0,9506232
	AGUA	0,01205012	0,98794987
	AIR	0,9896813	0,01031870

SESIÓN 6

Objetivo

Utilizar el modelo DECANTER para resolver sistemas L-L de una sola etapa y el modelo EXTRACT para torre de relleno L-L continua.

Resolver problemas tipo:

- Aplicación del modelo DECANTER a obtener diagramas de fases y líneas de reparto en sistemas ternarios.
- Resolución de sistemas L-L en una sola etapa.
- Aplicación a torres de relleno L-L con el modelo EXTRAC.

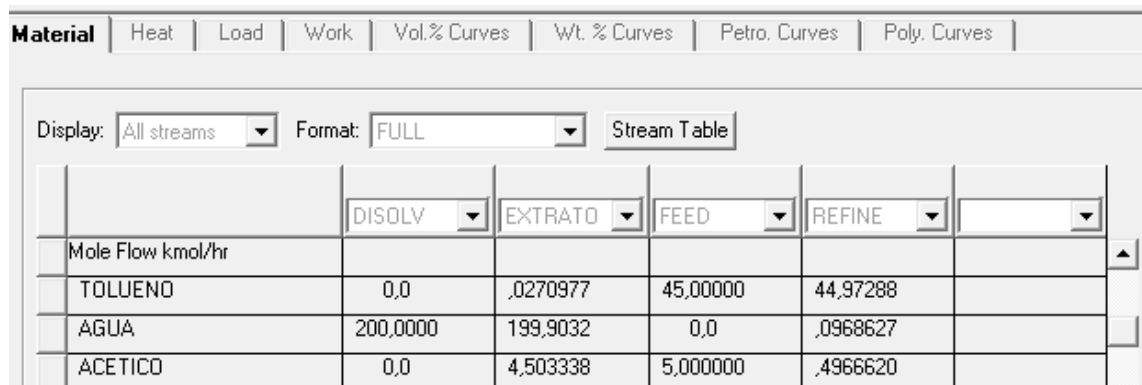
MODELO DECANTER

Obedece a la operación unitaria de separación L-L en una etapa con suficiente tiempo de residencia para estabilizar las fases y sin generación de volátiles (en tal caso hay que usar Flash 3 con $V=0$).

Se debe especificar la condición termodinámica con dos de los tres parámetros :P, T o intercambio de calor. Puede generar información termodinámica y de equilibrio de fases L-L.

1º) Vamos a empezar por definir un diagrama de flujo con una unidad de **DECANTER**, dos corrientes de entrada (FEED y DISOLV) y dos salidas (EXTRACT y REFINE). Como datos de partida la alimentación será una mezcla Tolueno-Ácido Acético al 90% molar en el primero y como disolvente agua pura. Tanto las corrientes como el equipo funcionará a 25°C y 1 atm de presión.

2º) Una vez introducidos los datos del sistema y las corrientes imponemos un modelo termodinámico UNIFAC y podemos imponer el mismo modelo dentro del equipo y corremos la simulación (ésta es una de las unidades que permite especificar modelo propio). Si observamos la tabla de resultados de corrientes veremos como el acético pasa de la alimentación al extracto en un 90%. También como algo de tolueno se disuelve en agua y viceversa.



	DISOLV	EXTRATO	FEED	REFINE	
Mole Flow kmol/hr					
TOLUENO	0,0	,0270977	45,00000	44,97288	
AGUA	200,0000	199,9032	0,0	,0968627	
ACETICO	0,0	4,503338	5,000000	,4966620	

Respecto a la información en el bloque DECANTER, los resultados son:

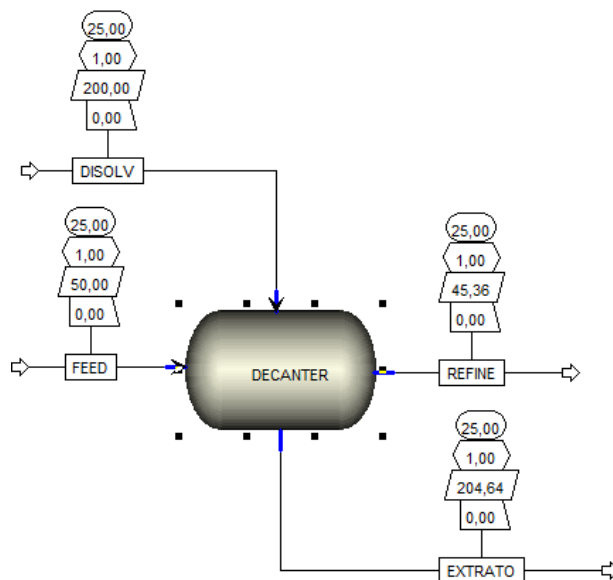
Summary	Balance	Phase Equilibrium	Utility Usage	Summary	Balance	Phase Equilibrium	Utility Usage	
Decanter results:				Liquid-liquid equilibrium results:				
Outlet temperature:	25	C		Component	F	X1	X2	K
Outlet pressure:	1	atm		TOLUENO	0,18	0,98697451	0,00013255	0,00013429
Heat duty:	1034,12037	Watt		AGUA	0,8	0,00212574	0,97783908	459,9973
Net duty:	1034,12037	Watt		ACETICO	0,02	0,01089973	0,02202836	2,02099956
1st liquid / Total liquid:	0,18226564							

Donde se aprecia la separación en fases (18,2% en la fase ligera) y la separación en cada una de cada componente (K). Como se comprueba por los valores de X1 y X2 el tolueno y agua están prácticamente separados en las dos fases y el acético se concentra en la fase acuosa en una proporción molar 2,02 ($K=X2/X1$).

X1 es la fracción molar de equilibrio en la fase líquida 1 (más ligera: tolueno).

X2 es la fracción molar de equilibrio en la fase líquida 2 (más pesada: agua).

En realidad en el modelo DECANTER es indiferente cual es la fase más ligera o más pesada.

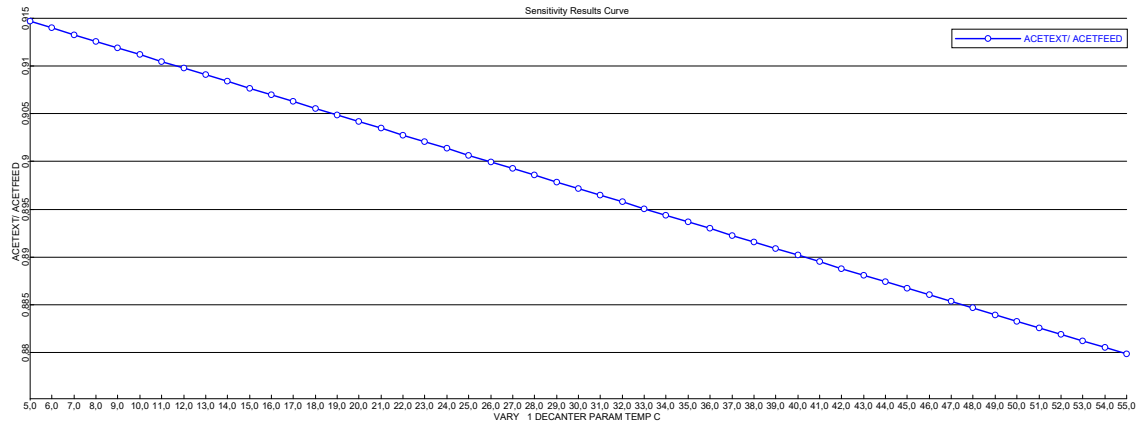


EXTRACCIÓN ACÉTICO UNA ETAPA					
Stream ID		DISOLV	EXTRATO	FEED	REFINE
From			DECANTER		DECANTER
To		DECANTER		DECANTER	
Phase		LIQUID	LIQUID	LIQUID	LIQUID
Substream:	MIXED				
Mole Flow	kmol/hr				
TOLUENO		0.0	.0340400	45.00000	44.96593
AGUA		200.0000	199.8641	0.0	.1359029
ACETICO		0.0	4.744424	5.000000	.2555765
Mole Frac					
TOLUENO		0.0	1.66339E-4	.9000000	.9913690
AGUA		1.0000000	.9766497	0.0	2.99627E-3
ACETICO		0.0	.0231839	.1000000	5.63472E-3
Total Flow	kmol/hr	200.0000	204.6426	50.00000	45.35741

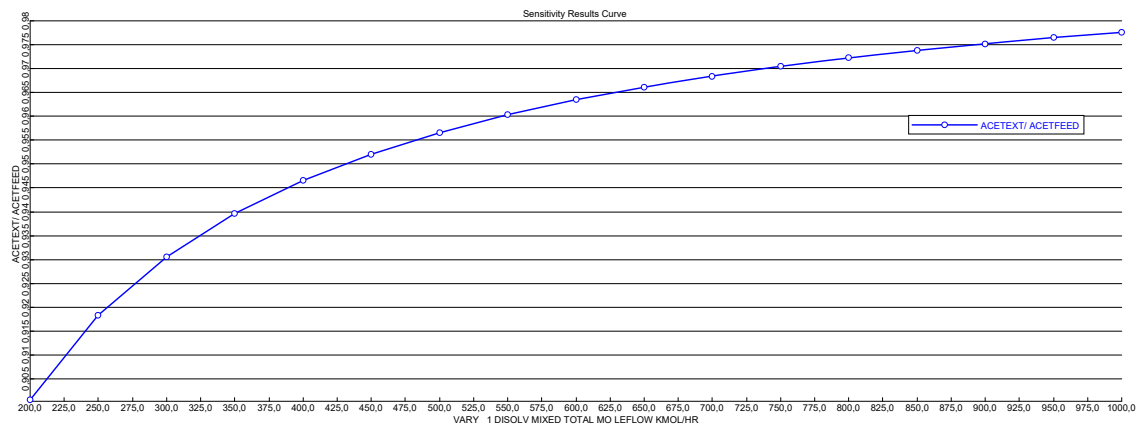
La recuperación de acético es de poco más del 90%.

2º) Podemos hacer un análisis de sensibilidad para saber cuál es la temperatura a la que conseguiríamos una separación superior al 95%.

Vamos a *Model analysis tools* y definimos ACETEXT como el flujo molar de acético en EXTRACT y ACETFEED como el flujo molar de acético en FEED. Lo hacemos variar con la temperatura del DECANTER ENTRE 5y 55°C a intervalos de 1°C y tabulamos ACETEXT/ACETFEED. Como se ve, sólo se consigue llegar al 91,5% aunque enfriemos hasta 5°C. No es una variable que nos ayude.

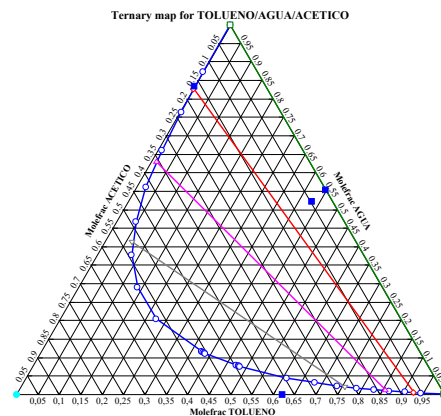


En este análisis de sensibilidad cambiamos la variable (en vary) igual pero con la única diferencia de que variaremos el caudal de disolvente (agua pura), con las mismas variables dependientes (ACETEXT y ACETFEED) vamos a variar *Mole flow* de la corriente DISOLV y componente agua de 200 a 1000 Kmol/h en un intervalo de 50 Kmol/h.



A 25°C se supera el 95% a partir de 450 kmol/h.

Por último, se pueden sacar informaciones termodinámicas relevantes como hicimos en el modelo Flash. de ejemplo podemos sacar el diagrama ternario para calcular el reparto a 25°C y 1 atm (en modo L-L).



MODELO EXTRACT

EXTRACT es un modelo exclusivo de extracción L-L riguroso pero que no permite especificar aspectos de diseño de la columna. Pueden incorporarse varias alimentaciones y salidas laterales. Es el único modelo de esta operación unitaria del que dispone ASPEN PLUS.

1º) Repetimos el mismo caso anterior (Tolueno, acético y agua) con las mismas condiciones cambiando sólo el bloque DECANTER por el bloque EXTRACT. **Es importante que cada corriente se ubique correctamente en el bloque** (sino luego el programa nos las cruza). Por arriba introducimos el disolvente (AGUA) y el refinado y por abajo la alimentación y el extracto que será la fase más pesada.

2º) En el bloque EXTRACT introducir el número de etapas (hay que comenzar con alguna aunque luego simulando lo cambiemos partiremos de 5. Consideraremos el sistema adiabático (pues no hay cambios de temperatura ni reacciones, sólo los calores de disolución y mezcla que son despreciables). Como componente clave del líquido 1 (más pesado) el agua y del líquido 2 (más ligero) el tolueno. **ESTO ES AL REVÉS QUE RADFRAC: se empieza a contar por abajo.**

3º) Especificamos que la alimentación entra en el plato 5 y el disolvente en el 1 y que el refinado sale por el 1 y el extracto por el 5. No es necesario especificar el perfil de presiones. Vamos a considerar que las velocidades de flujo son bajas y la pérdida de carga pequeña.

4º) Simulamos y obtenemos una separación casi perfecta lo que indica que el sistema está sobredimensionado.

Summary Balance Split Fraction					Summary Balance Split Fraction			
Mass and energy balance					Component split fractions			
	Total	In	Out	Rel. diff	Component	REFINE	EXTRATO	
► Mole-flow:	kmol/hr	250	250	0	► TOLUENO	0.99935632	0.00064367	
Mass-flow:	kg/hr	8049.6422	8049.6422	0	AGUA	0.00037241	0.99962759	
Enthalpy:	Watt	-16347007	-16346984	-1.383E-06	ACETICO	1.7793E-05	0.99998221	

Podemos incluso obtener los perfiles de composición y caudales de cada líquido por plato aunque no podemos representarlos y hay que llevárselos a representarlos a Excel.

Stage	Temperature [C]	Pressure [atm]	Heat duty [Watt]	1st liquid flow [kmol/hr]	2nd liquid flow [kmol/hr]
1	25,0537676	1	0	200,017601	45,0456063
2	25,1837717	1	0	200,02478	45,0632068
3	25,4342227	1	0	200,084535	45,0703866
4	25,8717527	1	0	200,597462	45,1301412
5	26,2992179	1	0	204,954394	45,6430678

Stage	TOLUENO	AGUA	ACETICO
1	8,3182E-05	0,99991299	3,8319E-06
2	8,3378E-05	0,99987982	3,6802E-05
3	8,4159E-05	0,99959571	0,00032012
4	8,9229E-05	0,99715376	0,00275701
5	0,00014132	0,97546344	0,02439523

Como se observa, en el plato 5 ya está la gran mayoría de acético: sobredimensionado.

5º) Vamos a disminuir el caudal de agua usada para economizar el proceso fijando como especificación de diseño que se recupere el 96% del acético con el extracto. En *Flowsheet options* creamos una nueva especificación: creamos ACETEXT y ACETFEED igual que antes y colocamos como especificación ACETEXT/ACETFEED y un valor objetivo de 0,96 (1% de variación: 0,0096) y variamos la *mole flow* de DISOLV en agua de 20 a 200 kmol/hr y vemos cómo con tan sólo 30,45 kmol/h de agua es suficiente.

Variable	Initial value	Final value	Units
MANIPULATED	200	30,457245	KMOL/HR
ACETEXT	4,99991104	4,76586684	KMOL/HR
ACETFEED	5	5	KMOL/HR

6º) Fijamos el caudal de agua a 35 Kmol/h y desactivamos la especificación y analizamos la dependencia de esta variable ACETEXT/ACETFEED con el número de etapas de equilibrio en un análisis de sensibilidad entre 2 y 20 etapas (NSTAGE) a intervalos de 1 etapa pero no se puede hacer pues la ubicación de las corrientes cambian con el número de etapas, por lo que hay que probar una a una. Se obtiene:

Nº etapas	5	6	7	8	9	10
ACETEXT	4,845	4,9035	4,9385	4,9601	4,9738	4,9827
%recup	96,90	98,07	98,77	99,20	99,48	99,65

Como se ve con sólo una etapa más (6) obtenemos un 2% más de recuperación sin aumentar el caudal de agua (que luego supone gastos en una columna posterior de destilación para recuperar el acético con el consiguiente ahorro de costes de operación. Incluso aumentando al doble la altura de la columna (10) llegamos a una recuperación casi perfecta pero no compensará. Ya será cuestión de ver si el aumento de inmovilizado se compensa con la disminución de costes de operación (no sólo de esta unidad sino de las posteriores columnas de destilación para separar el acético del agua).

TABLA DE CASOS

NOMBRE	COMPONENTES (PROPORCIÓN)	PROPERTY METHOD	EST. ENERG. ENTRADA	EQUIPO	NOTAS
ETOH-H2O	ETOH (0,35 mol) Agua (0,65 mol) 100 mol/h	IDEAL	1 atm 85°C	FLASH2 85°C, 0,8 atm	Isotermo
Aire	O2 (0.205 mol) N2 (0.79 mol) Ar (0.05 mol) 100 mol/h	IDEAL	-200°C 1 atm	FLASH2 -185°C 2 atm	Isotermo
Ternaria no ideal	2-etoxietanol n-octano etilbenceno (0,2; 0,55; 0,25 mol)) 100 mol/h	UNIQUAC	100°C 5 atm	FLASH2 117°C 0,9 atm	Isotermo
Azeótropo ternario	Cloroformo Acetona Metanol (0,4; 0,3; 0,3 mol) 100 mol/h	UNIQUAC	100°C 1 atm	FLASH2 52°C 0,8 atm	Isotermo
C2-C6	Etano 1,5 mol/h Propano 10 mol/h n-butano 18,5 mol/h n-pentano 17,5 mol/h n-hexano 3,5 mol/h total: 51 mol/h	IDEAL	1,72 MPa Fracción de vapor =0	FLASH2 1,72 MPa	PUNTO DE BURBUJA Y DE ROCÍO
C3-C6	Propano 10% mol n-butano 20% mol n-pentano 30% mol n-hexano 40% mol 100 mol/h	IDEAL	65,5°C 8,25 atm	FLASH2 93,5°C 7 atm	Isotérmico y adiabático

HOMEWORK:

1º) Averiguar usando destiladores tipo flash isotérmicos qué rango de condiciones de presión y temperatura permite separar el 85% de todo el benceno de una mezcla benceno-tolueno en proporción molar 1:5. Dibujar "plots" de sensibilidad respecto a la P y T del equipo. (Usar el método de WILSON).

2º) Obtener el diagrama ternario de la mezcla nc5-nc6-nc7 a 15 atm usando el método PENG-ROBINSON.

3º) Obtener los puntos de rocío y de burbuja a 7,2 atm de una mezcla equimolecular de NH3 y AGUA usando el modelo WILSON.

4º) Obtener el diagrama ternario con azeótropos a 10 atm y 25°C de la mezcla equimolar MeOH-Acetona-Hexano. Usar el método PENG-ROBINSON.

TABLA DE CASOS (II)

NOMBRE	COMPONENTES (PROPORCIÓN)	PROPERTY METHOD	EST. ENERG. ENTRADA	EQUIPO	NOTAS
ETOH-H2O	ETOH (0,2 mol) Agua (0,8 mol) 100 mol/h	WILSON	83,16°C Líquida (VF=0)	DSTWU L/D= 2xL/Dmin 0,9 atm (condensador) 1,1 atm (calderín)	Xd= 0,8 Xw=0,005 Rec ETOH= 0,9812 Rec H2O= 0,061325
C2-C6	Etano 30 mol/h Propano 200 mol/h n-butano 370 mol/h n-pentano 350 mol/h n-hexano 50 mol/h total: 1000 mol/h	PENG-ROBINSON	20 atm 110°C	DSTWU L/D= 1,5xL/Dmin Caidas: 5 psi (condensador) 0,1 psi (plato) Suponemos 20 platos RESULTA: 19,59 atm y 20,07 atm	Clave ligera:c3 Clave pesada: c4 Rec CL= 0,95 Rec CP= 0,05
	ÍDEM	PENG-ROBINSON	120°F VF=0 (BP) VF=1 (DP) HD=0	FLASH2	Para calcular el punto de burbuja y rocío y ver la condición de alimentación
C4-C8	n-butano n-pentano n-hexano n-heptano n-octano equimoleculares total: 1000 mol/h	CHAO-SEA	150°C 10 atm	DISTL L/D= 2 Suponemos 20 platos Feed Stage: 10 P. supuesta 10 atm en ambas	D/F=0,7
	ÍDEM	CHAO-SEA	120°F VF=0 (BP) VF=1 (DP) HD=0	FLASH2	Para calcular el punto de burbuja y rocío y ver la condición de alimentación

TABLA DE CASOS (III)

NOMBRE	COMPONENTES (PROPORCIÓN)	PROPERTY METHOD	EST. ENERG. ENTRADA	EQUIPO	NOTAS
Propano-isobutano	Propano: 0,4 Isobutano:0,6 100 Kmol/h	CHAO-SEA	322 K 14,2 atm	RADFRAC L/D=2 32 platos FEED TRAY= 16 above stage P condensador: 14 atm $\Delta P= 0,1$ psi por plato	D= 40 Kmol/h $X_d(c3)= 0,98$ Cond. total Cald. keetle Equilibrio
C2-C6	Etano 30 mol/h Propano 200 mol/h n-butano 370 mol/h n-pentano 350 mol/h n-hexano 50 mol/h total: 1000 mol/h	PENG-ROBINSON	20 atm 110°C	RADFRAC L/D= 4,176 P cond: 19,6 atm P. cald: 20,05 atm (pérdida: 0,45 atm) 16 platos Feed tary= 9	Tasa de destilado: D/F=238,61 kmol/h Cond. total Cald. keetle Equilibrio
Absorción	AMMAIR: 1200 L/h NH3:0,1 Aire: 0,9 WATER: 200 kg/h pura.	ELECNRTL	AMMAIR: 25°C, 3 atm WATER: 25°C, 1atm	RADFRAC 12 platos AMMAIR y AMMWATER en plato 12 CLEANAIR y WATER en plato 1 P. supuesta 1 atm $\Delta P= 0,1$ psi por plato	Sin condensador ni calderín Rate-based

TABLA DE CASOS (IV)

NOMBRE	COMPONENTES (PROPORCIÓN)	PROPERT Y METHOD	EST. ENERG. ENTRADA	EQUIPO	NOTAS
TOLUENO-AGUA	FEED: Tolueno-acético al 90% molar de tolueno y 50 kmol/h DISOLV. agua pura (200 kmol/h) EXTRACT REFINE	UNIFAC	1 atm y 25°C en ambas corrientes (FEED Y DISOLV)	DECANTER 1 ATM, 25°C Componente clave en la segunda fase líquida (más pesada) el agua	Se pueden fijar eficiencias de recuperación, método termodinámico propio (VANLAAR), en el módulo DECANTER
TOLUENO-AGUA RIGUROSO	FEED: Tolueno-acético al 90% molar de tolueno y 50 kmol/h DISOLV. agua pura (200 kmol/h) EXTRACT REFINE	UNIFAC	1 atm y 25°C en ambas corrientes (FEED Y DISOLV)	EXTRACT 5 ETAPAS Adiabático Clave 1 agua y clave 2 tolueno FEED en plato 5 DISOLV en plato 1 REFINE en plato 1 EXTRACT en plato 5 P 1 atm	Se pueden fijar eficiencias de recuperación, método termodinámico propio (VANLAAR), en el módulo DECANTER