

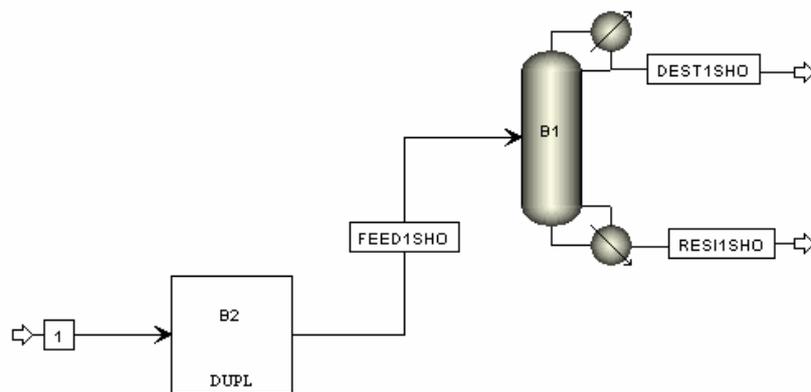
Caso 6

OBJETIVO

El objetivo de es la recuperación de etanol y n-hexano con una pureza superior al 95%, de una corriente alimento constituida por una fracción molar de etanol de 0.65 y una de n-hexano de 0.35. Para ello disponemos de dos columna de destilación que pueden trabajar con una relación de reflujo máxima de 10 y una presión entre 1 y 10 atm.

PROCEDIMIENTO:

En primer lugar realizaremos la simulación de la primera corriente con una ShortCut (DSTWU), con lo que podemos obtener datos para resolver la columna RadFrac. Para facilitar el trabajo, consideramos la utilización de un duplicador (Manipulators → Dupl) para poder utilizar una corriente, de las mismas características, como entrada a la columna DSTWU y Rad Frac.

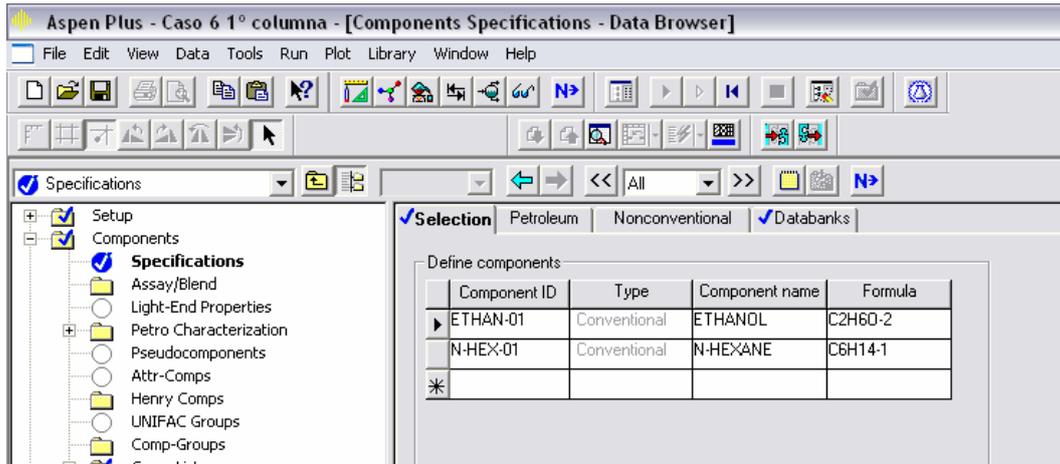


Posteriormente se indican los componentes que participan en la simulación:

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

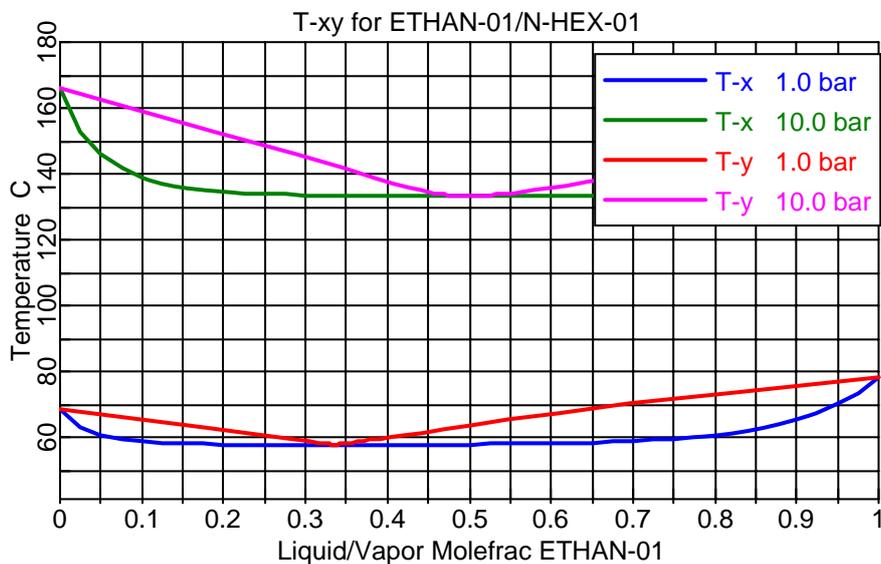
**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**

Cartagena99



Después indicamos el modelo termodinámico a utilizar. En este caso se ha considerado adecuado un modelo de coeficiente de actividad Unifac, ya que tenemos un componente polar, el etanol, y el modelo Peng Robinson no simula bien este tipo de compuestos.

Para verificar que en esta mezcla existe un azeótropo, se representa los datos de equilibrio. (Tools → Análisis → Property → Binary). Se indica el tipo de gráfico T-xy y la presión a la que se quieren obtener los datos (se ha indicado una presión de 1 y 10 bar).



Como se observa en la representación el sistema etanol,n-hexano forma un

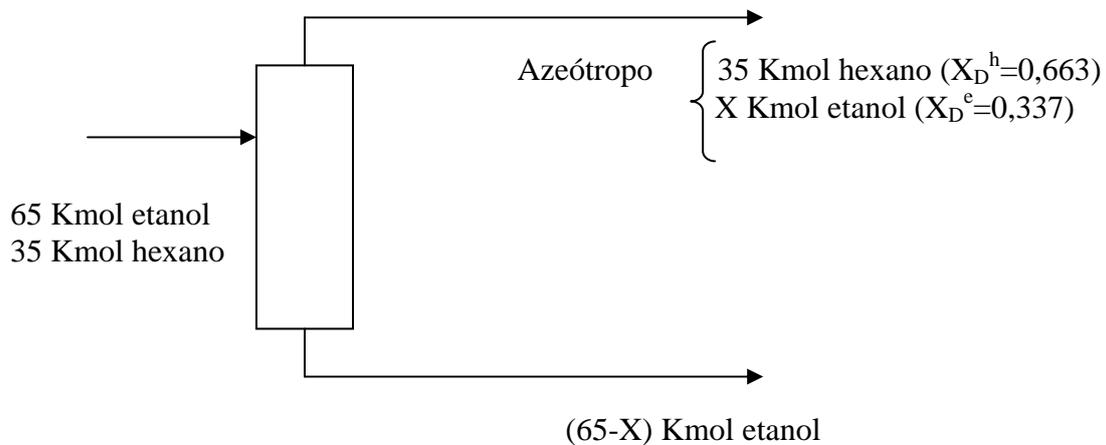
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

Para la primera columna, a baja presión, en la simulación de la Shortcut indicamos una relación de reflujo inicial de 6 (inferior a la máxima fijada como 10). Después indicamos la recuperación del componente clave ligero (hexano) en un valor muy alto (el mayor número posible que permite el programa es 0,9999999) y el componente clave pesado es el etanol. Para fijar la recuperación debemos de realizar el siguiente cálculo:

- Datos iniciales supuestos:
- Alimentación 100 Kmol.
 - n-hexano en el residuo: 0 Kmol.



- o Cálculo del caudal de destilado

Aplicando la siguiente regla de tres:

$$\left. \begin{array}{l} 35 \text{ Kmol hexano} \text{ ————— } 0,663 \\ \zeta \text{ (destilado total)} \text{ ————— } 1 \end{array} \right\}$$

Destilado total: 52,79 Kmol

- o Cálculo del caudal de etanol en el destilado

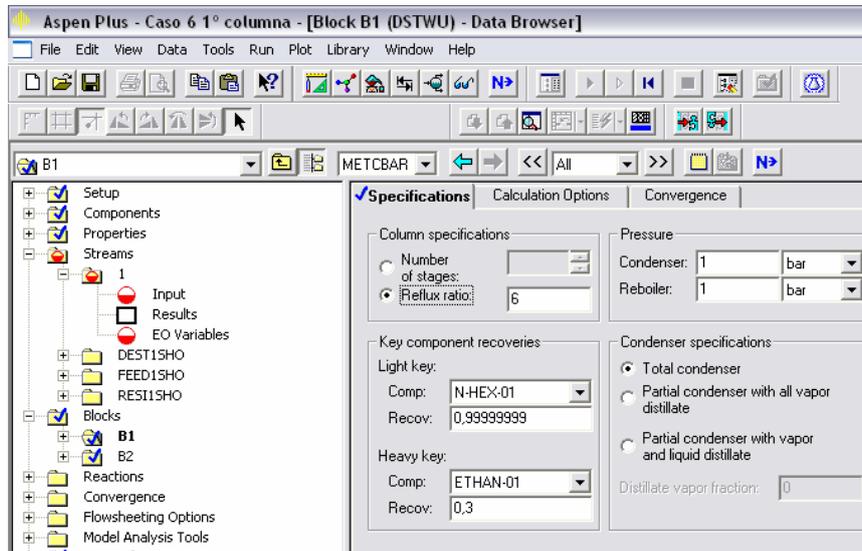
$$\text{Etanol en el destilado} = \text{Destilado} \cdot X_D^e = 52,79 \cdot 0,337 = 17,79 \text{ Kmol}$$

Cartagena99

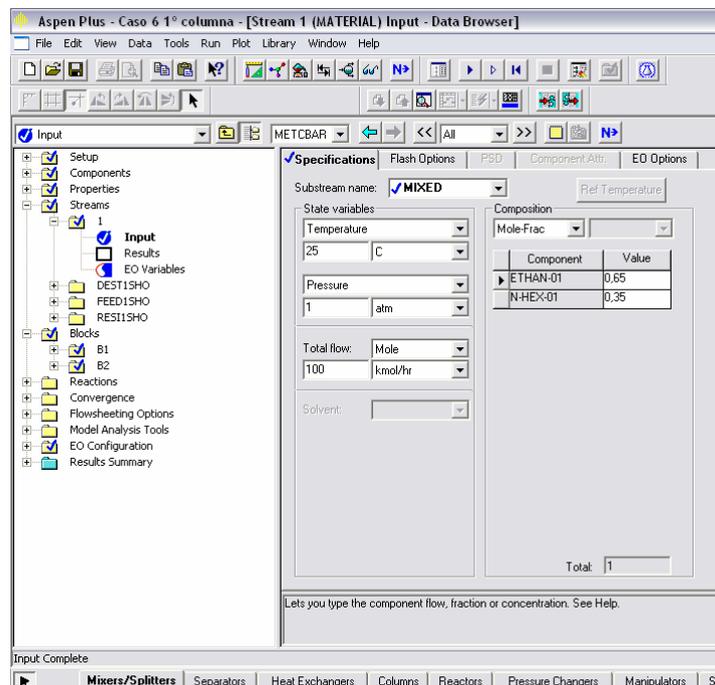
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Para la simulación en Aspen, pondremos un valor superior a éste teórico (por ejemplo 0,3).



Posteriormente indicamos las condiciones de la corriente de entrada (25°C, 1 atm, fracción molar de etanol 0,65 y fracción molar de n-hexano 0,35).

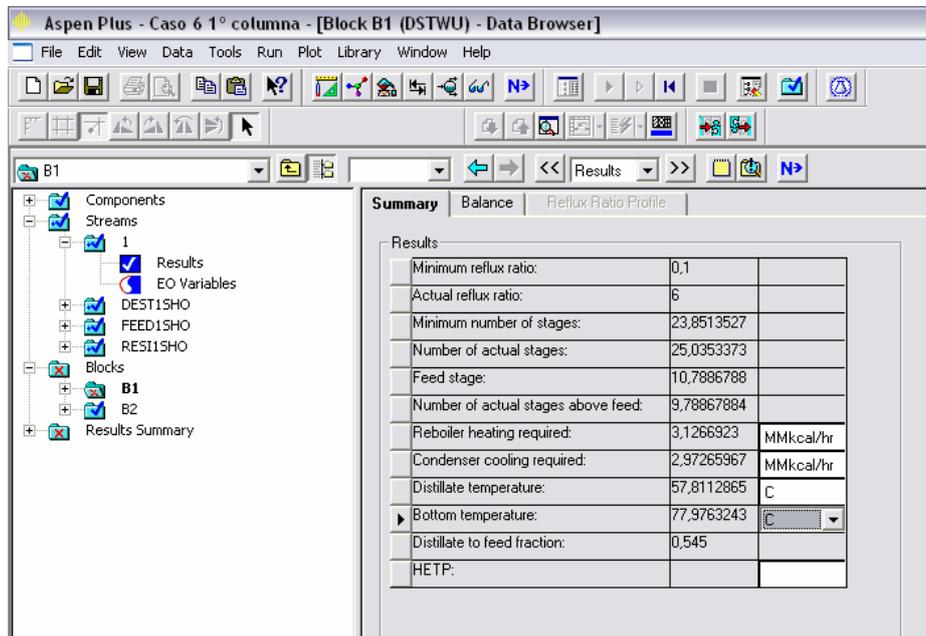


Cartagena99

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

| Caso 6 1º Columna | | | | | | |
|-------------------|-----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| Stream ID | | 1 | DEST1SHO | FEED1SHO | FEED2RAD | RESI1SHO |
| Temperature | C | 25,0 | 57,8 | 25,0 | 25,0 | 78,0 |
| Pressure | bar | 1,013 | 1,000 | 1,013 | 1,013 | 1,000 |
| Vapor Frac | | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Mole Flow | kmol/hr | 100,000 | 54,500 | 100,000 | 100,000 | 45,500 |
| Mass Flow | kg/hr | 6010,688 | 3914,547 | 6010,688 | 6010,688 | 2096,141 |
| Volume Flow | cum/hr | 8,354 | 5,934 | 8,354 | 8,354 | 2,963 |
| Enthalpy | MMkcal/hr | -5,957 | -2,865 | -5,957 | -5,957 | -2,938 |
| Mole Flow | kmol/hr | | | | | |
| ETHAN-01 | | 65,000 | 19,500 | 65,000 | 65,000 | 45,500 |
| N-HEX-01 | | 35,000 | 35,000 | 35,000 | 35,000 | trace |
| Mole Frac | | | | | | |
| ETHAN-01 | | 0,650 | 0,358 | 0,650 | 0,650 | 1,000 |
| N-HEX-01 | | 0,350 | 0,642 | 0,350 | 0,350 | 8 PPB |



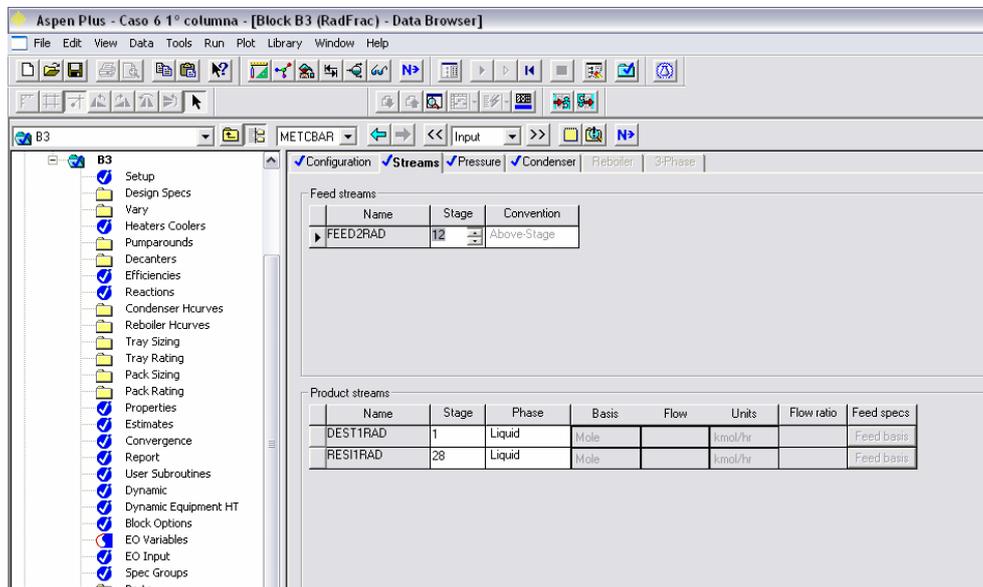
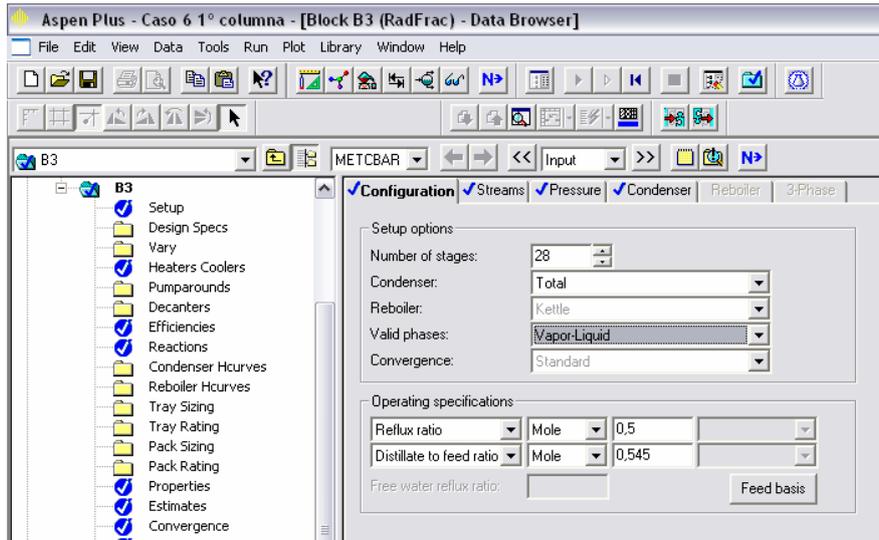
| Aspen Plus - Caso 6 1º columna - [Block B1 (DSTWU) - Data Browser] | | |
|--|------------|-----------|
| Summary | | |
| Results | | |
| Minimum reflux ratio: | 0,1 | |
| Actual reflux ratio: | 6 | |
| Minimum number of stages: | 23,8513527 | |
| Number of actual stages: | 25,0353373 | |
| Feed stage: | 10,7886788 | |
| Number of actual stages above feed: | 9,78867884 | |
| Reboiler heating required: | 3,1266923 | MMkcal/hr |
| Condenser cooling required: | 2,97265967 | MMkcal/hr |
| Distillate temperature: | 57,8112865 | C |
| Bottom temperature: | 77,9763243 | C |
| Distillate to feed fraction: | 0,545 | |
| HETP: | | |

Conocido el número de pisos, la relación destilado carga y el piso de

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

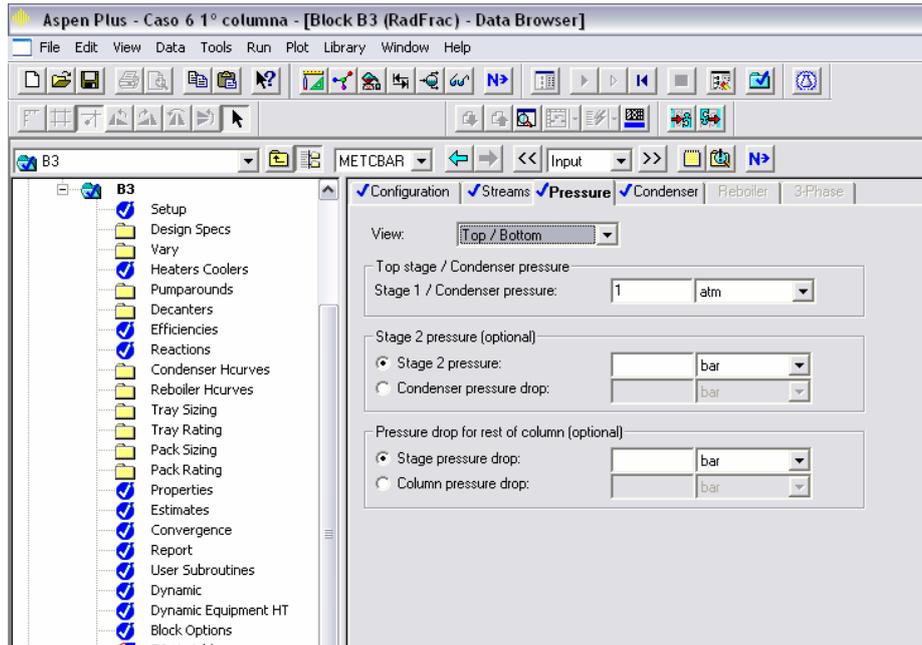
ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99



**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**



| Caso 6 1º Columna | | | | | | | | |
|-------------------|-----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| Stream ID | | 1 | DEST1RAD | DEST1SHO | FEED1SHO | FEED2RAD | RESI1RAD | RESI1SHO |
| Temperature | C | 25,0 | 58,2 | 57,8 | 25,0 | 25,0 | 78,3 | 78,0 |
| Pressure | bar | 1,013 | 1,013 | 1,000 | 1,013 | 1,013 | 1,013 | 1,000 |
| Vapor Frac | | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Mole Fbw | kmol/hr | 100,000 | 54,500 | 54,500 | 100,000 | 100,000 | 45,500 | 45,500 |
| Mass Flow | kg/hr | 6010,688 | 3914,547 | 3914,547 | 6010,688 | 6010,688 | 2096,141 | 2096,141 |
| Volume Flow | cum/hr | 8,354 | 5,938 | 5,934 | 8,354 | 8,354 | 2,965 | 2,963 |
| Enthalpy | MMkcal/hr | -5,957 | -2,864 | -2,865 | -5,957 | -5,957 | -2,938 | -2,938 |
| Mole Fbw | kmol/hr | | | | | | | |
| ETHAN-01 | | 65,000 | 19,500 | 19,500 | 65,000 | 65,000 | 45,500 | 45,500 |
| N-HEX-01 | | 35,000 | 35,000 | 35,000 | 35,000 | 35,000 | trace | trace |
| Mole Frac | | | | | | | | |
| ETHAN-01 | | 0,650 | 0,358 | 0,358 | 0,650 | 0,650 | 1,000 | 1,000 |
| N-HEX-01 | | 0,350 | 0,642 | 0,642 | 0,350 | 0,350 | trace | 8 PPB |

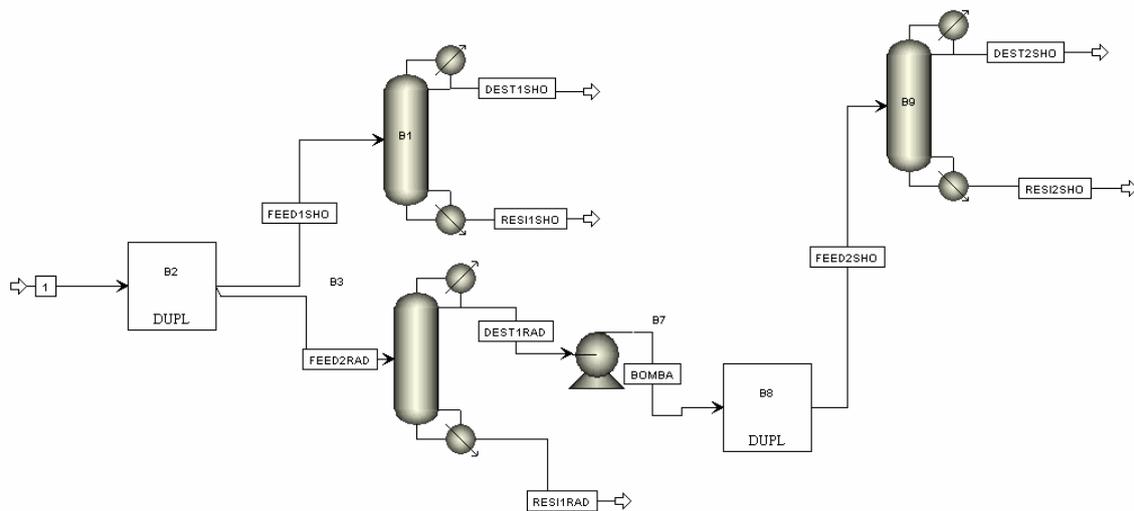
Los resultados obtenidos muestran como el etanol se obtiene prácticamente puro en el residuo y por cabeza se obtienen el azeotropo correspondiente a una presión de 1 atm.

Una vez conseguido el etanol prácticamente puro utilizaremos una columna a alta presión para separar el n-hexano. En primer lugar colocamos una bomba para aumentar la presión hasta un valor de 10 atmósferas. Posteriormente colocamos un duplicador para facilitar la simulación con la Shortcut y posteriormente con la RadFrac.

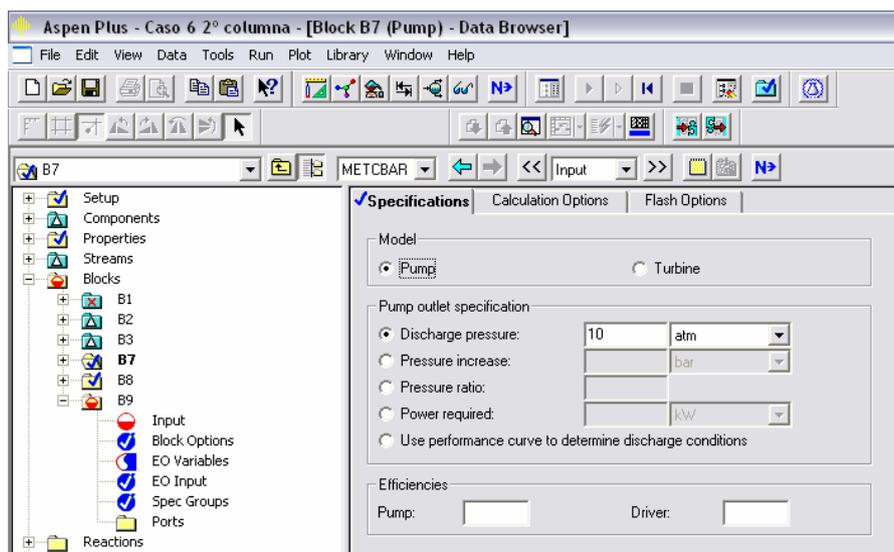
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99



Para simular la bomba simplemente es necesario indicar del equipo que se trata y la presión de descarga.



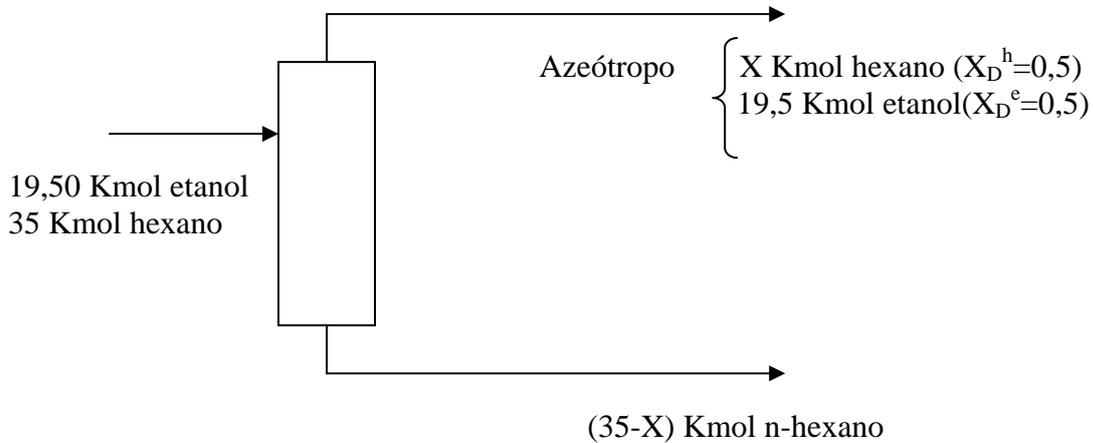
Para la simulación de la Shortcut indicamos una relación de reflujo inicial de 6 (inferior a la máxima fijada como 10). Después indicamos la recuperación del componente clave ligero (etanol) en un valor muy alto (el mayor número posible que permite el programa es 0,99999999) y el componente clave pesado es el n-hexano. Para fijar la recuperación debemos de realizar el siguiente cálculo:

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99

Datos iniciales:- Composición y caudal de la corriente de destilado de la 1^o columna
 - etanol en el residuo: 0 Kmol.



- Cálculo del caudal de destilado

Aplicando la siguiente regla de tres:

$$\left. \begin{array}{l} 19,5 \text{ Kmol etanol} \text{ ————— } 0,5 \\ i \text{ (destilado total)} \text{ ————— } 1 \end{array} \right\}$$

Destilado total: 39 Kmol

- Cálculo del caudal de n-hexano en el destilado

$$\text{n-hexano en el destilado} = \text{Destilado} \cdot X_D^e = 39 \cdot 0,5 = 19,5 \text{ Kmol}$$

- Cálculo de la pérdida de n-hexano por cabeza

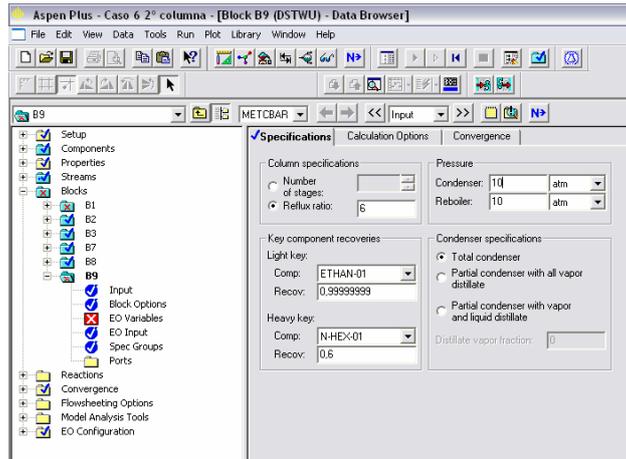
$$\text{pérdida de etanol por cabeza} = \frac{\text{n - hexano en el destilado}}{\text{n - hexano alimentado}} = \frac{19,5}{35} = 0,557$$

Para la simulación en Aspen, pondremos un valor superior a éste teórico (por ejemplo 0,6).

CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99



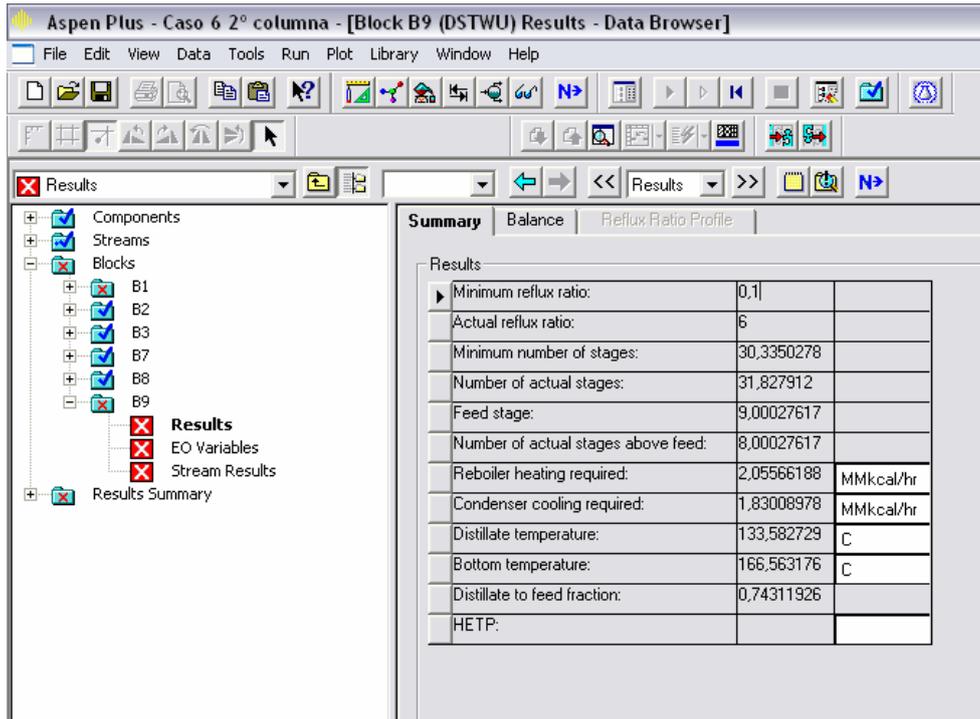
Al resolver aparece un error, que indica que la relación de reflujo mínima calculada es negativa. Esto quiere decir que la separación es tan fácil, que sin reflujo sería capaz de conseguirse. Aún así, Aspen indica un valor de relación de reflujo mínima de 0,1. Los resultados obtenidos son:

| Caso 6 1ª Columna | | | | | | | | | | | | |
|-------------------|------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| Stream ID | | 1 | BOMBA | DEST1RAD | DEST1SHG | DEST2SHO | FEED1SHC | FEED2RAD | FEED2SHO | RESI1RAD | RESI1SHO | RESI2SHO |
| Temperature | C | 25,0 | 59,4 | 58,2 | 57,8 | 133,6 | 25,0 | 25,0 | 59,4 | 78,3 | 78,0 | 166,6 |
| Pressure | bar | 1,013 | 10,133 | 1,013 | 1,000 | 10,133 | 1,013 | 1,013 | 10,133 | 1,013 | 1,000 | 10,133 |
| Vapor Frac | | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Mole Flow | kmol/hr | 100,000 | 54,500 | 54,500 | 54,500 | 40,500 | 100,000 | 100,000 | 54,500 | 45,500 | 45,500 | 14,000 |
| Mass Flow | kg/hr | 6010,688 | 3914,547 | 3914,547 | 3914,547 | 2708,067 | 6010,688 | 6010,688 | 3914,547 | 2096,141 | 2096,141 | 1206,480 |
| Volume Flow | cum/hr | 8,354 | 5,950 | 5,938 | 5,934 | 4,713 | 8,354 | 8,354 | 5,950 | 2,965 | 2,963 | 2,399 |
| Enthalpy | MM kcal/hr | -5,957 | -2,860 | -2,864 | -2,865 | -2,082 | -5,957 | -5,957 | -2,860 | -2,938 | -2,938 | -0,553 |
| Mole Flow | kmol/hr | | | | | | | | | | | |
| ETHAN-01 | | 65,000 | 19,500 | 19,500 | 19,500 | 19,500 | 65,000 | 65,000 | 19,500 | 45,500 | 45,500 | trace |
| N-HEX-01 | | 35,000 | 35,000 | 35,000 | 35,000 | 21,000 | 35,000 | 35,000 | 35,000 | trace | trace | 14,000 |
| Mole Frac | | | | | | | | | | | | |
| ETHAN-01 | | 0,650 | 0,358 | 0,358 | 0,358 | 0,481 | 0,650 | 0,650 | 0,358 | 1,000 | 1,000 | 14 PPB |
| N-HEX-01 | | 0,350 | 0,642 | 0,642 | 0,642 | 0,519 | 0,350 | 0,350 | 0,642 | trace | 8 PPB | 1,000 |

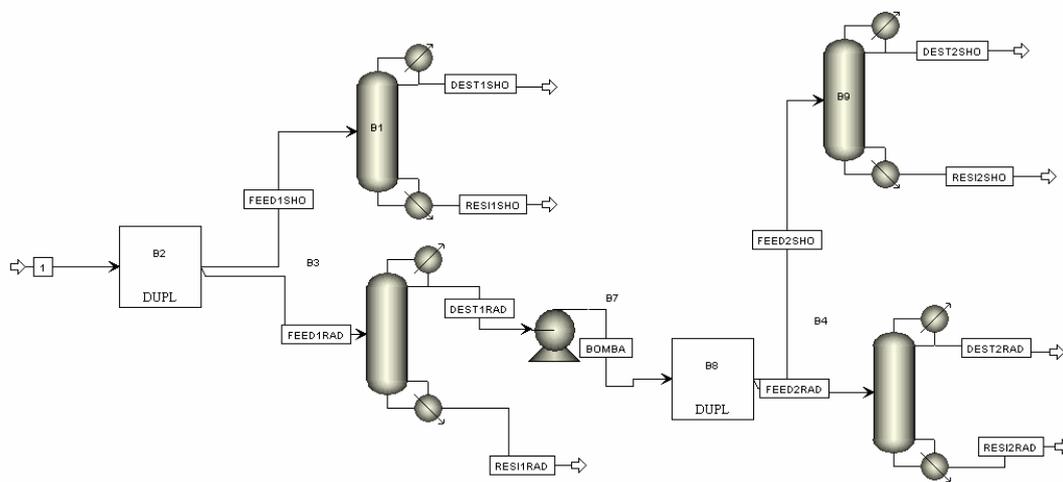
CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99



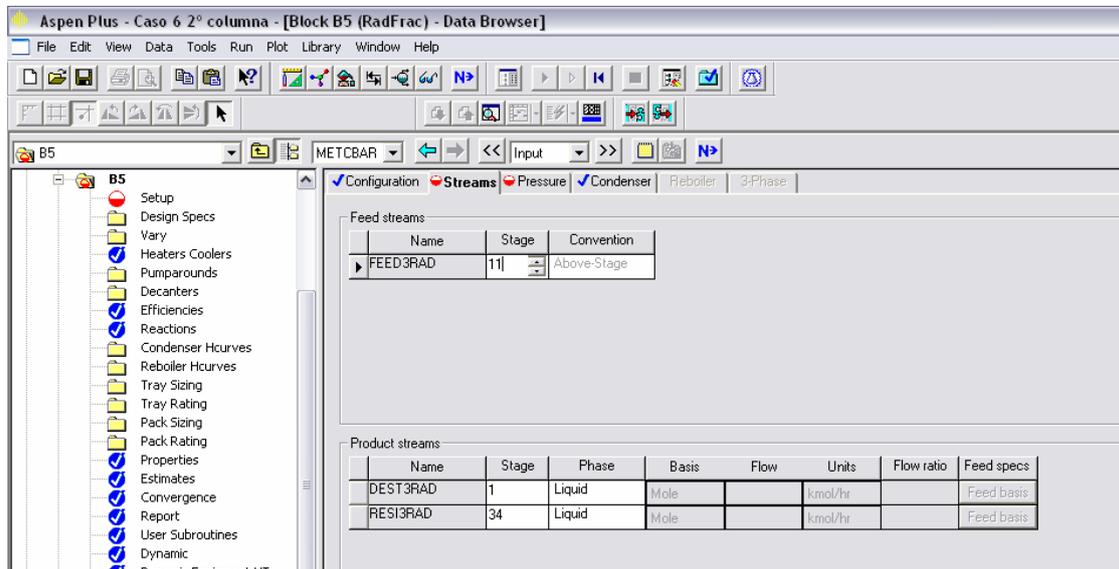
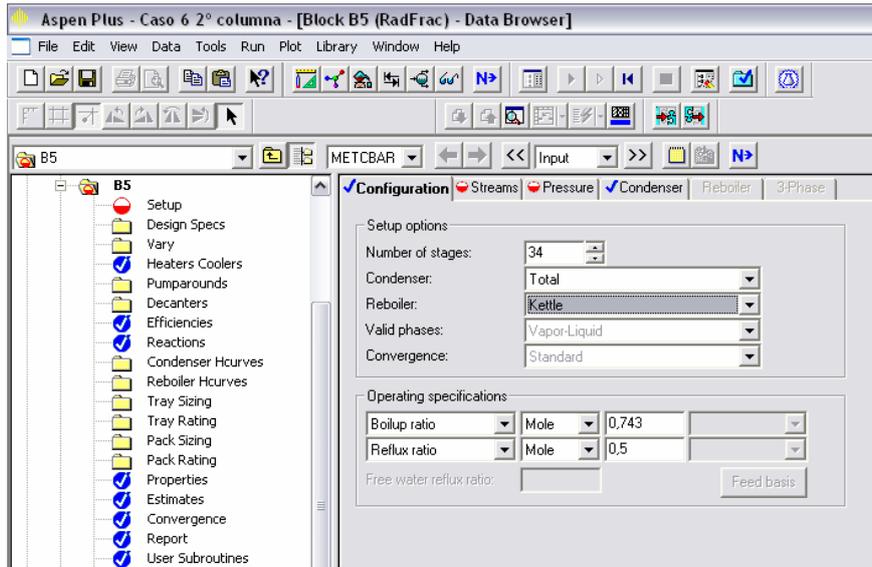
Conocido el número de pisos, la relación destilado carga y el piso de alimentación podemos simular la separación utilizando la columna Radfrac.



CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70

ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70

Cartagena99



| Caso 6 1ª Columna | | | | | | | | | | | | | | | |
|-------------------|---------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|
| Stream ID | | 1 | BOMBA | DEST1RAD | DEST1SHO | DEST2RAD | DEST2SHO | FEED1RAD | FEED1SHO | FEED2RAD | FEED2SHO | RESI1RAD | RESI1SHO | RESI2RAD | RESI2SHO |
| Temperature | C | 25,0 | 59,4 | 58,2 | 57,8 | 133,6 | 133,1 | 25,0 | 25,0 | 59,4 | 59,4 | 78,3 | 78,0 | 166,6 | 165,8 |
| Pressure | bar | 1,013 | 10,133 | 1,013 | 1,000 | 10,133 | 10,000 | 1,013 | 1,013 | 10,133 | 10,133 | 1,013 | 1,000 | 10,133 | 10,000 |
| Vapor Frac | | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 | 0,000 |
| Mole Flow | kmol/hr | 100,000 | 54,500 | 54,500 | 54,500 | 40,493 | 40,500 | 100,000 | 100,000 | 54,500 | 54,500 | 45,500 | 45,500 | 14,007 | 14,000 |
| Mass Flow | kg/hr | 6010,688 | 3914,547 | 3914,547 | 3914,547 | 2707,506 | 2708,067 | 6010,688 | 6010,688 | 3914,547 | 3914,547 | 2096,141 | 2096,141 | 1207,040 | 1206,480 |
| Volume Flow | cum/hr | 8,354 | 5,950 | 5,938 | 5,934 | 4,712 | 4,707 | 8,354 | 8,354 | 5,950 | 5,950 | 2,965 | 2,963 | 2,401 | 2,394 |

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
 LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
 CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**



Los resultados obtenidos muestran como el n-hexano se obtiene prácticamente puro en el residuo y por cabeza se obtienen el azeotropo correspondiente a una presión de 10 atm.

CONCLUSIONES:

En el siguiente cuadro se resumen las condiciones de trabajo de las dos columnas utilizadas para obtener el etanol y el n-hexano prácticamente puros y la recuperación de cada uno de los productos. La recuperación se calcula como la cantidad del producto obtenido dividido entre la cantidad de este producto alimentado.

| 1º Columna | | | 2º Columna | | Recuperación (%) | | |
|------------------|---------|----------|------------------|---------|------------------|--------|----------|
| Relación reflujo | Presión | Nº Pisos | Relación reflujo | Presión | Nº Pisos | Etanol | n-hexano |
| 0,5 | 1 | 28 | 0,5 | 10 | 34 | 0,7 | 40,02 |

**CLASES PARTICULARES, TUTORÍAS TÉCNICAS ONLINE
LLAMA O ENVÍA WHATSAPP: 689 45 44 70**

**ONLINE PRIVATE LESSONS FOR SCIENCE STUDENTS
CALL OR WHATSAPP:689 45 44 70**

Cartagena99