

Caso 1 A

OBJETIVO:

El objetivo de este caso es estudiar los modelos termodinámicos que mejor se ajustan al sistema isobutano-n-butano.

PROCEDIMIENTO:

Para poder ver la bondad de los distintos modelos termodinámicos, se disponen de los datos bibliográficos de sistema.

Sistema isobutano – n-butano Datos de equilibrio

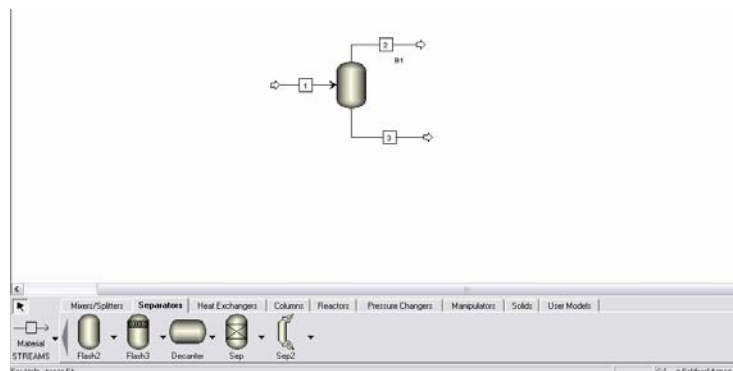
x (i-C4)	P (bar)	y (i-C4)	P (bar)
0,00	15,54	0,00	15,54
0,10	15,99	0,10	15,93
0,20	16,45	0,20	16,33
0,30	16,91	0,30	16,75
0,40	17,37	0,40	17,19
0,50	17,84	0,50	17,65
0,60	18,30	0,60	18,12
0,70	18,77	0,70	18,61
0,80	19,24	0,80	19,12
0,90	19,72	0,90	19,65
1,00	20,20	1,00	20,20


En primer lugar vamos a utilizar como base de cálculo la *ecuación de estado Peng-Robinson*.

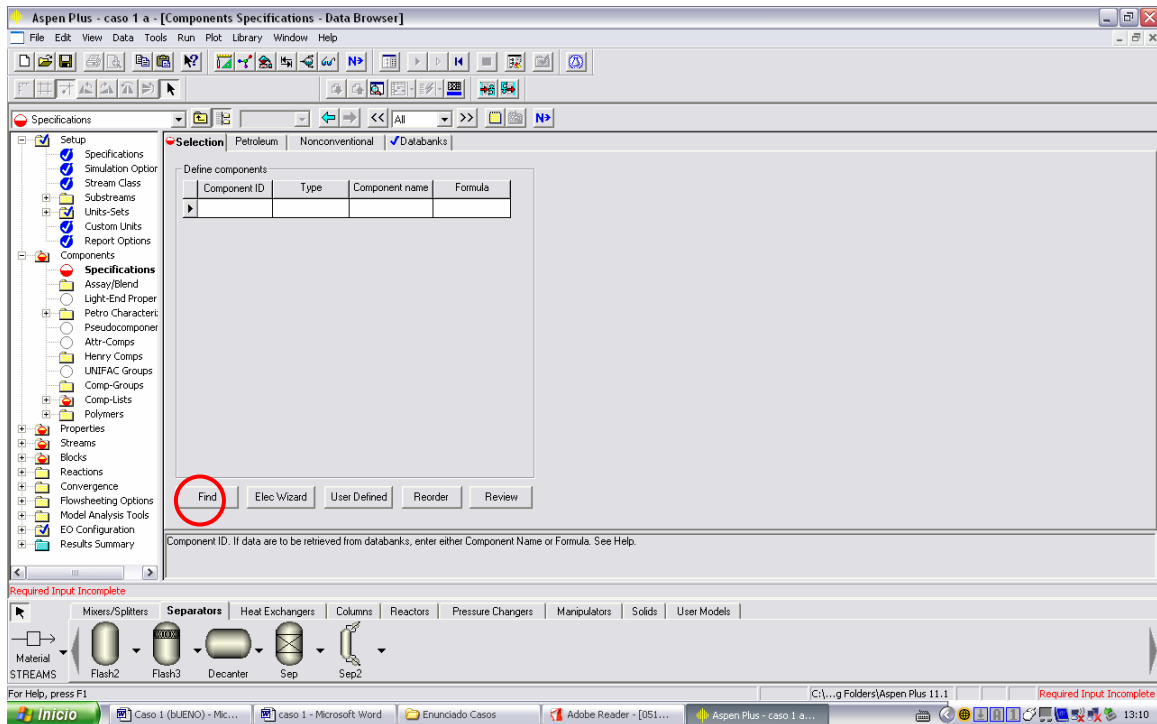
Para obtener los datos de equilibrio se pueden utilizar dos procedimientos:

Procedimiento 1

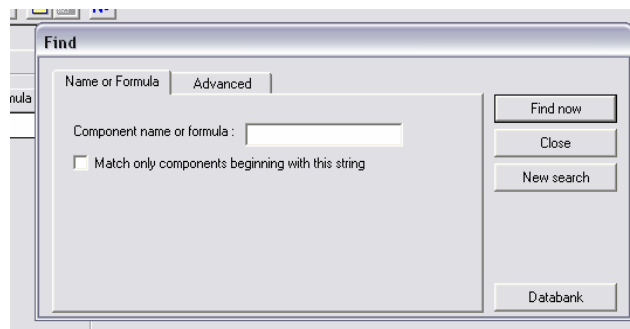
Lo primero es colocar tres corrientes materiales (Material Stream) y un separador Flash (Separador Flash2).



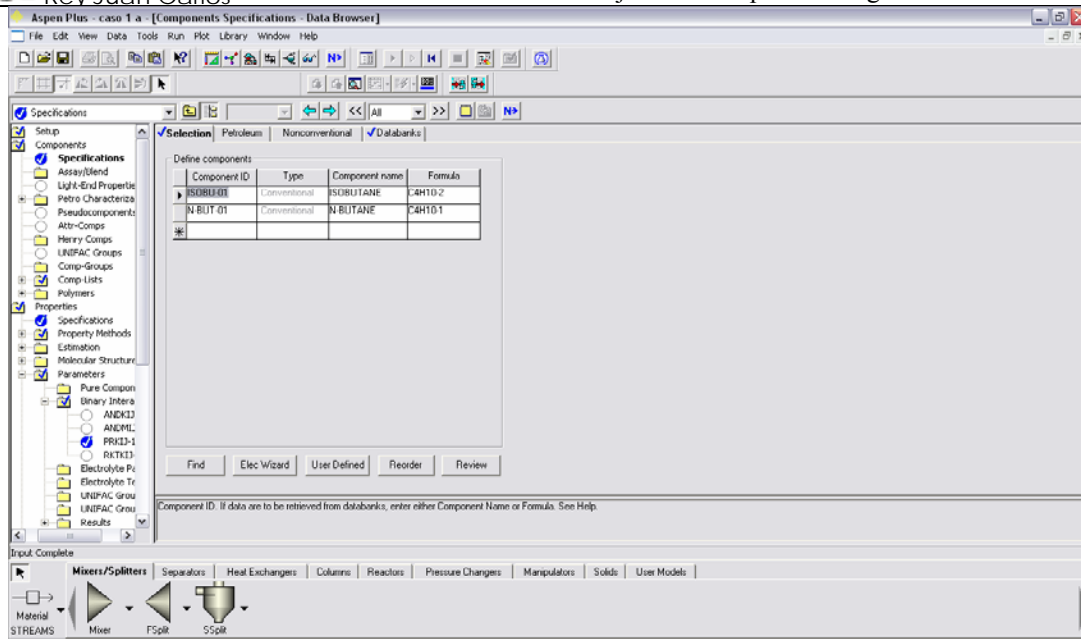
Posteriormente damos a  Next y le ponemos título al caso. Luego seleccionamos los componentes en la siguiente pantalla:



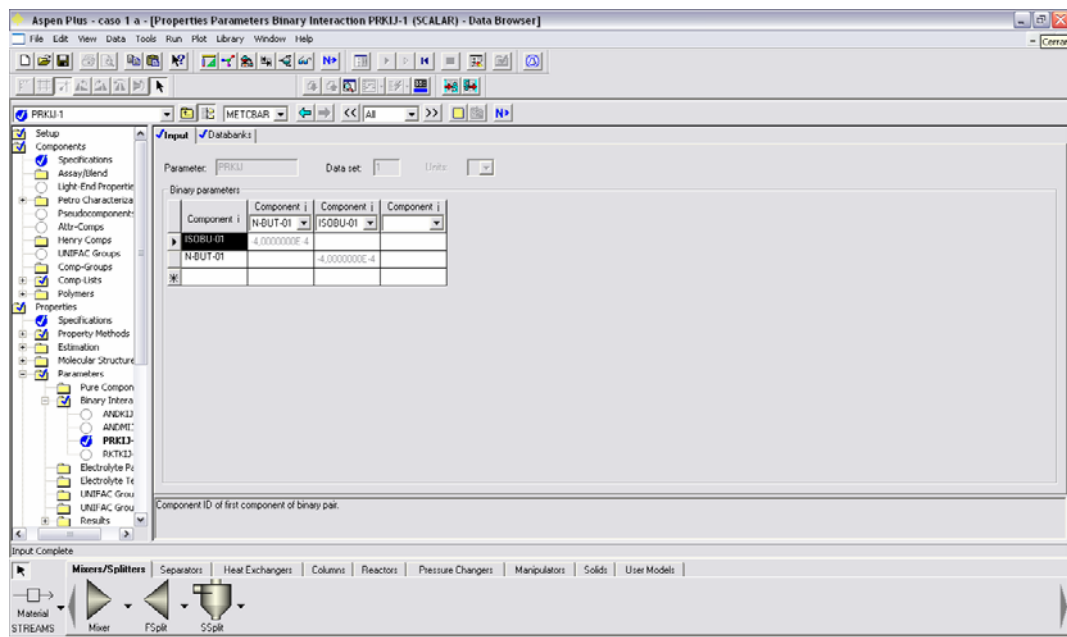
Pulsando el botón Find, podemos buscar los distintos componentes, con su nombre o fórmula en la pantalla:



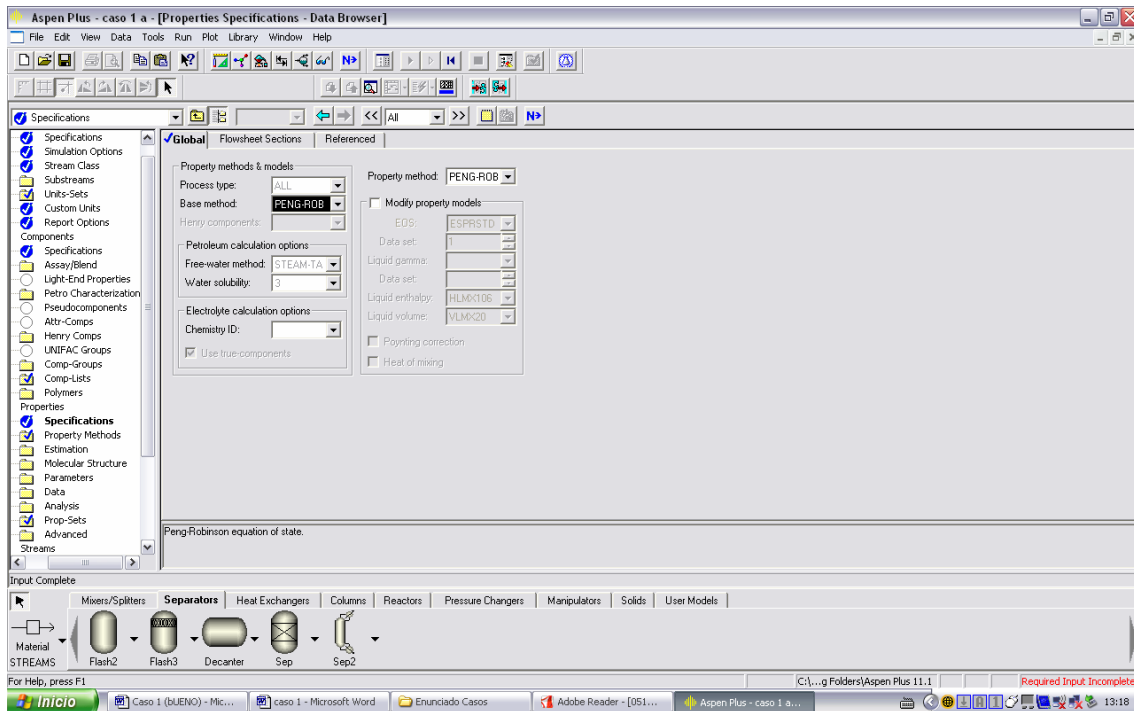
De esta forma añadimos el isobutano y el n-butano a la lista de componentes.



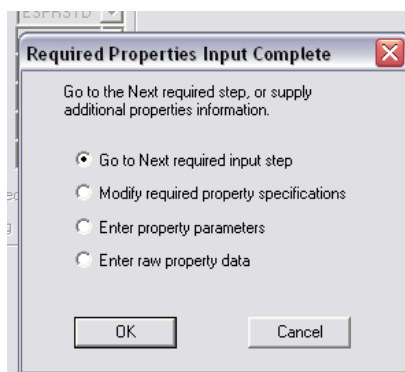
Una vez que tenemos seleccionados los componentes, dando a Next, nos aparece la pantalla en la que nos indica los parámetros binarios de interacción.



Una vez que tenemos seleccionados los componentes, dando a Next, nos aparece la pantalla que permite seleccionar la base de cálculo, que en este caso será Peng-Robinson.

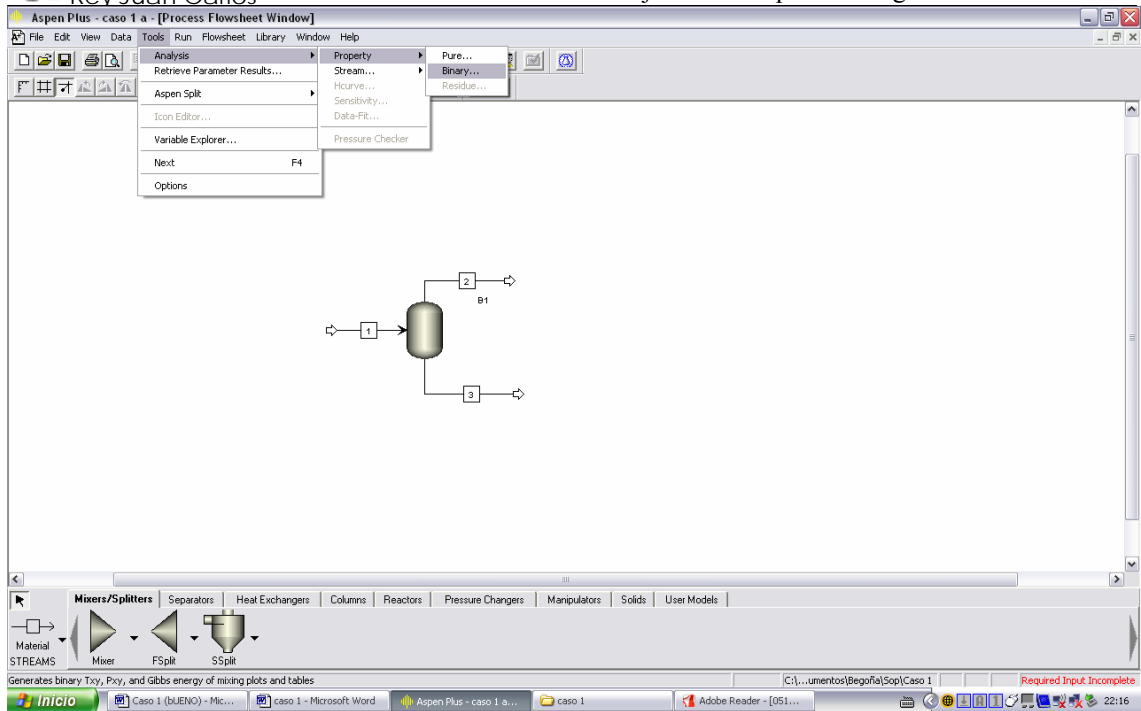


Volviendo a pulsar Next, el Aspen Plus, nos muestra la pantalla:

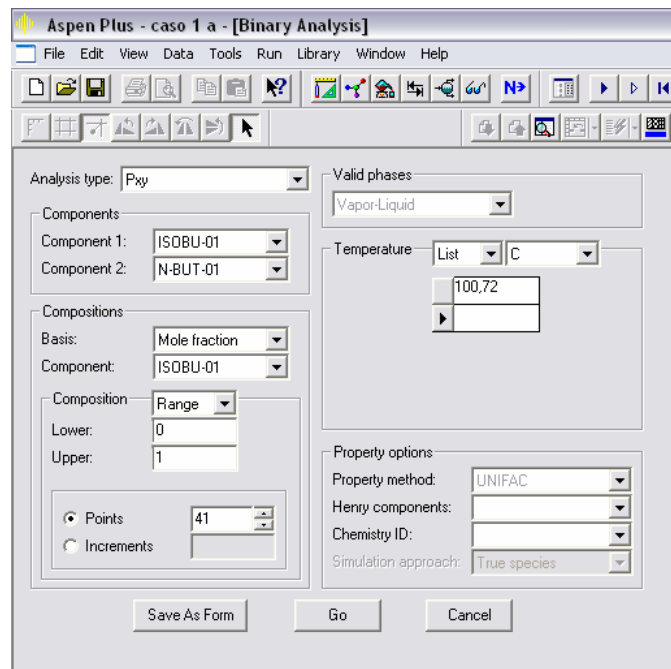


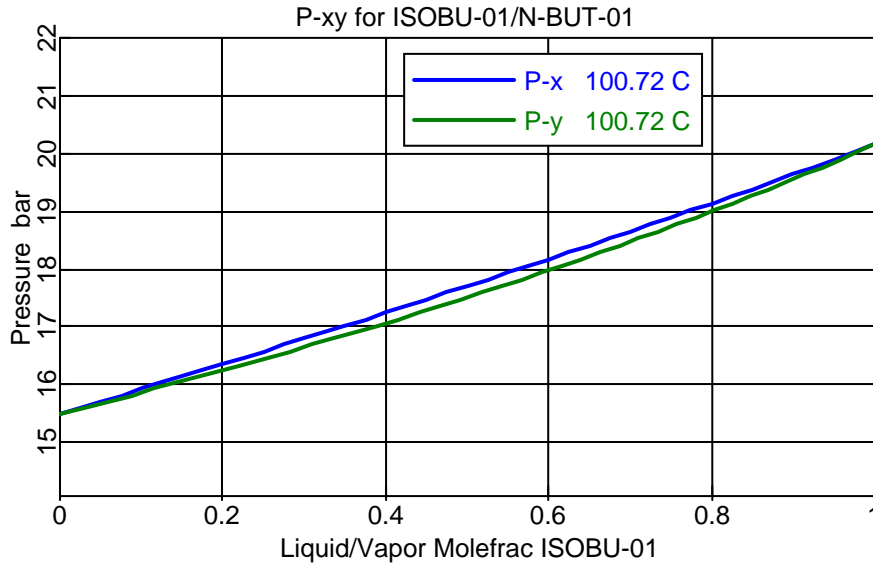
La respuesta a este mensaje será OK, a no ser que dispongamos de alguna información sobre determinadas propiedades de los componentes, que queramos introducir.

Indicada la base de cálculo y los componentes, ya podemos hacer uso de la herramienta TOOLS → Análisis → Property → Binary.



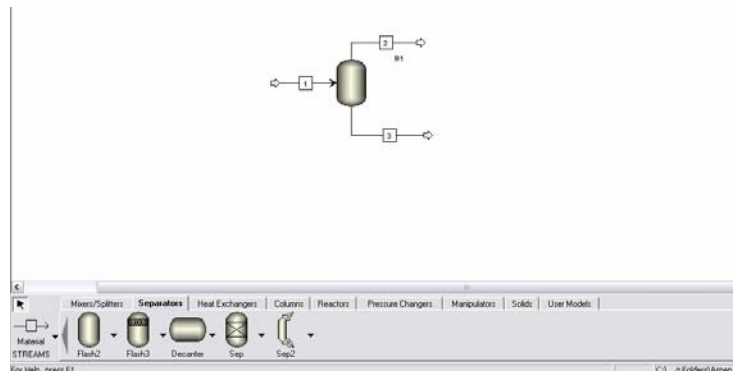
En este momento indicamos el tipo de gráfico a realizar (en este caso P-xy) ya que los datos bibliográficos de partida son datos de presión en función de la composición. La temperatura de trabajo es de 100,72°C.




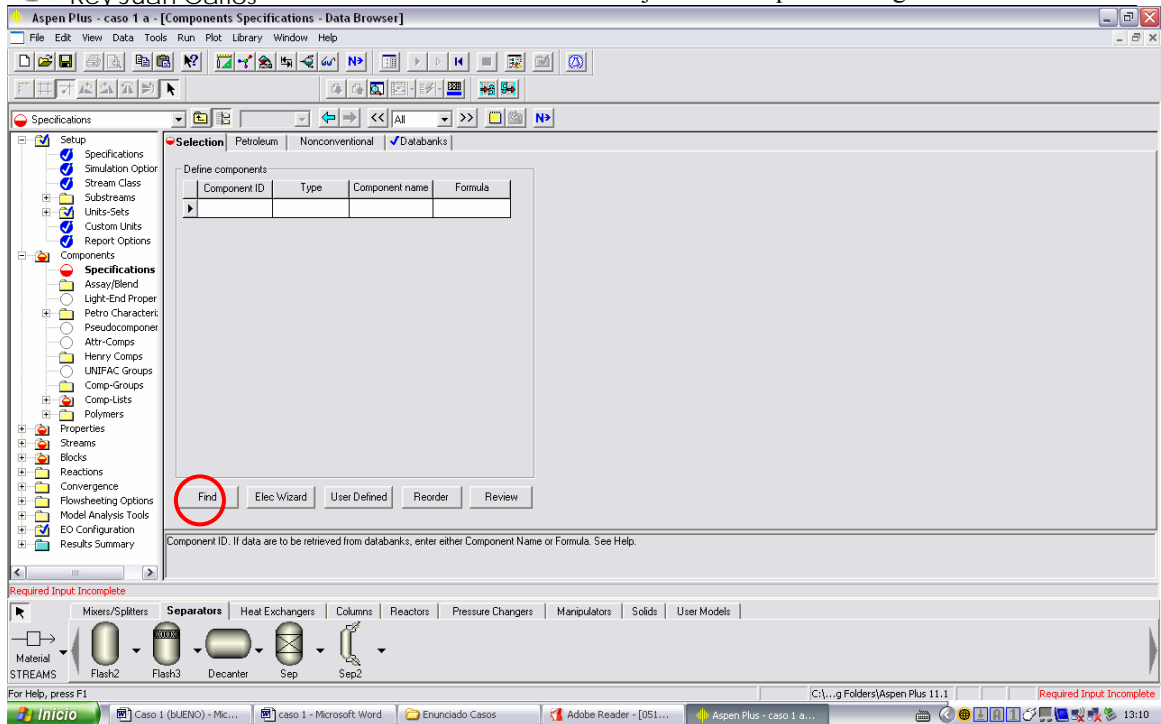


Procedimiento 2

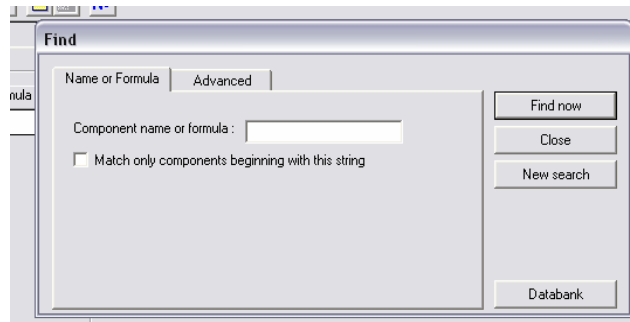
Lo primero es colocar tres corrientes materiales (Material Stream) y un separador Flash (Separador Flash2).



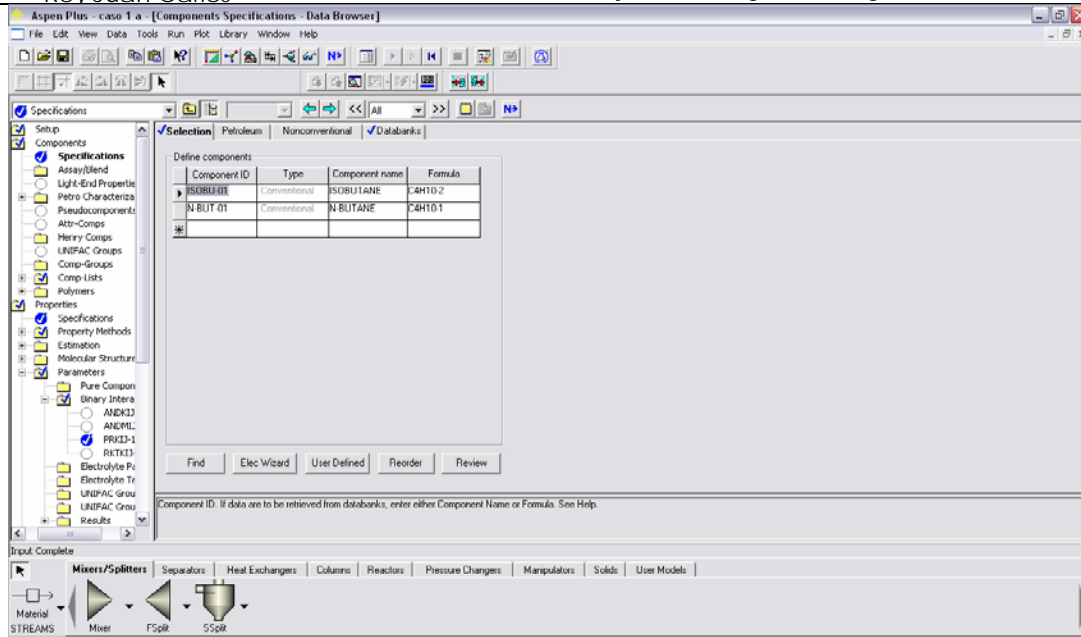
Posteriormente damos a  Next y le ponemos título al caso. Luego seleccionamos los componentes en la siguiente pantalla:



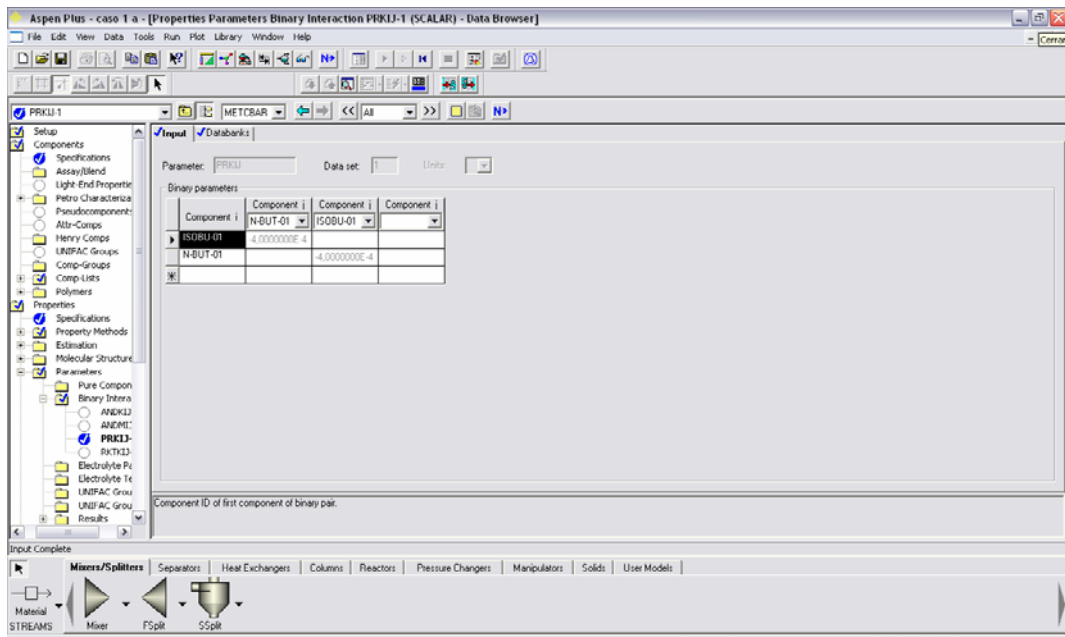
Pulsando el botón Find, podemos buscar los distintos componentes, con su nombre o fórmula en la pantalla:



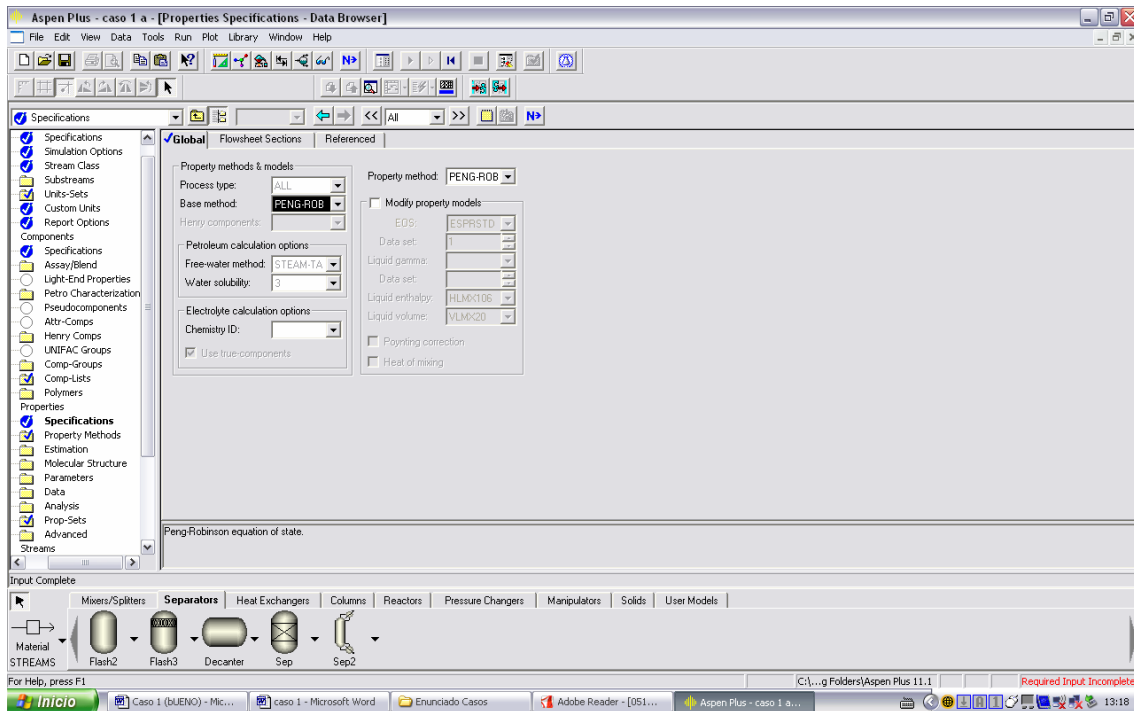
De esta forma añadimos el isobutano y el n-butano a la lista de componentes.



Una vez que tenemos seleccionados los componentes, dando a Next, nos aparece la pantalla en la que nos indica los parámetros binarios de interacción.



Posteriormente nos aparece la pantalla que permite seleccionar la base de cálculo, que en este caso será Peng-Robinson.

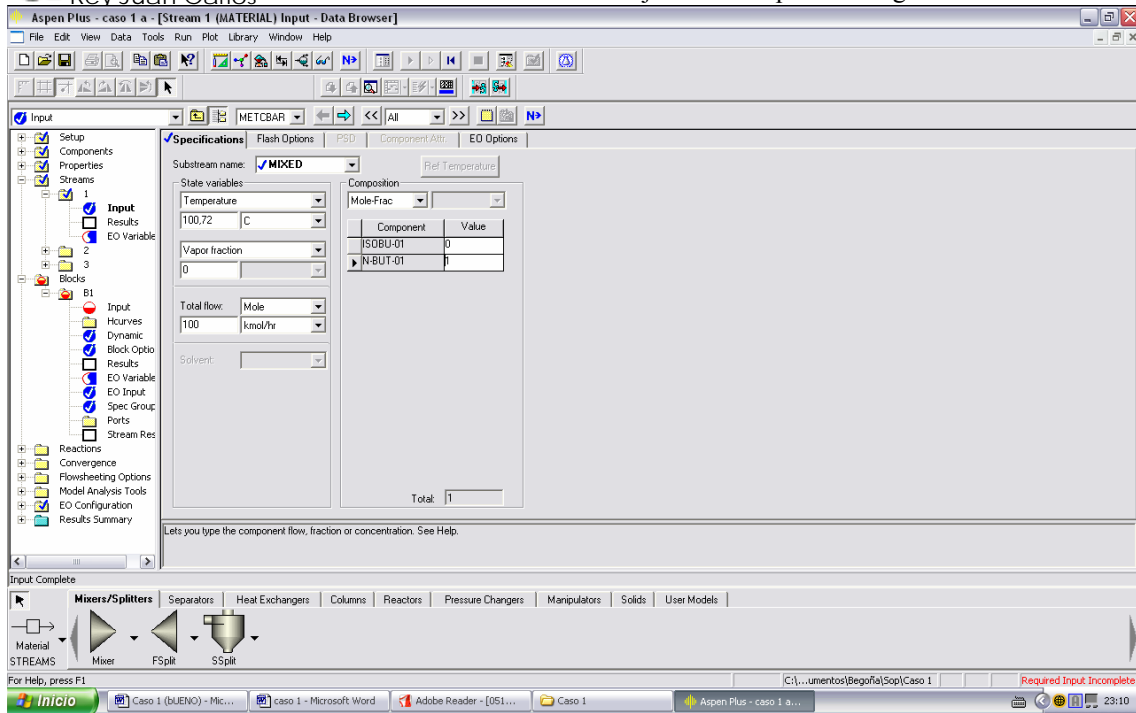


Volviendo a pulsar Next, el Aspen Plus, nos muestra la pantalla:



La respuesta a este mensaje será OK, a no ser que dispongamos de alguna información sobre determinadas propiedades de los componentes, que queramos introducir.

Posteriormente se indican las condiciones de la corriente de entrada. En primer lugar indicamos la temperatura, suponemos una temperatura de 100,72 °C. Posteriormente indicamos la fracción de vapor, que pondremos 0, ya que con este valor la corriente se encuentra en estado líquido. Después indicamos un caudal de alimento de 100 Kmol/h, y una composición de isobutano (se repite el procedimiento para composiciones de 0; 0,1; 0,2; 0,3; 0,4; 0,5; 0,6; 0,7; 0,8; 0,9; 1).



Aspen Plus - caso 1 a - [Stream 1 (MATERIAL) Input - Data Browser]

Specifications Flash Options PSD Component Alts EO Options

Substream name: **MIXED**

State variables:

Temperature: 100.72 C
 Vapor fraction: 1

Composition:

Component	Value
ISOBU-01	0
N-BUT-01	1

Total flow: Mole
 100 kmol/hr

Solvent:

Total: 1

Lets you type the component flow, fraction or concentration. See Help.

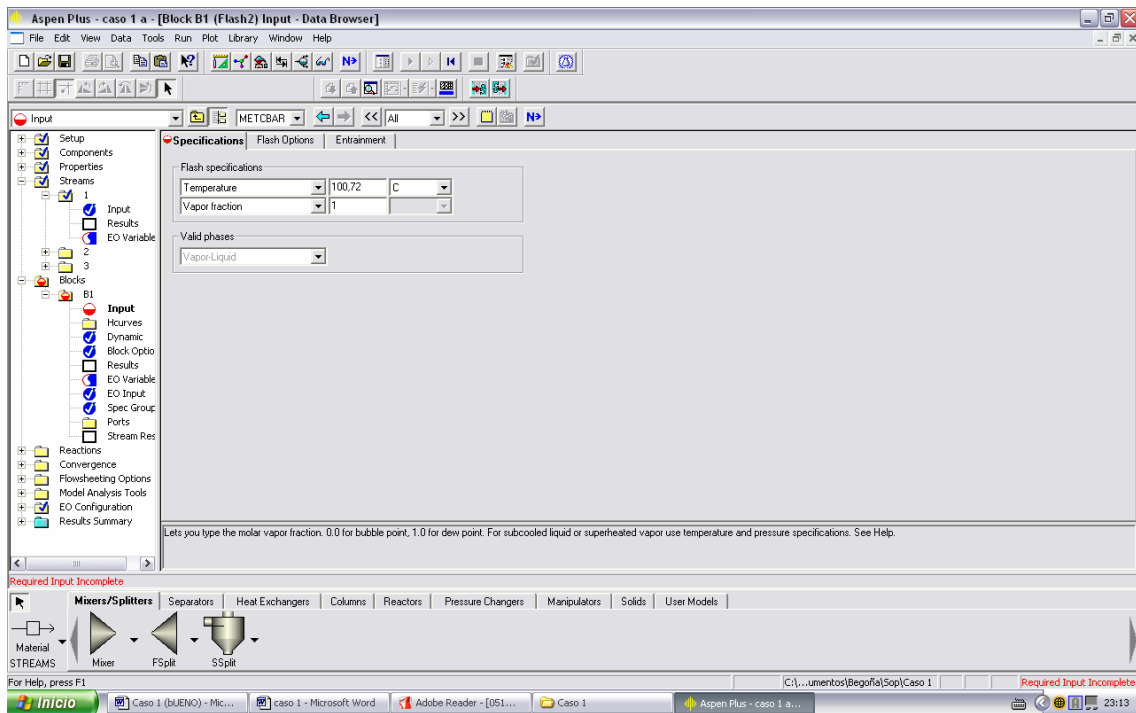
Input Complete

Mixers/Splitters Separators Heat Exchangers Columns Reactors Pressure Changers Manipulators Solids User Models

For Help, press F1

Required Input Incomplete

Posteriormente se indican las condiciones existentes en el flash. Se indica una temperatura de 100,72°C y una fracción de vapor 1.



Aspen Plus - caso 1 a - [Block B1 (Flash2) Input - Data Browser]

Specifications Flash Options Entrainment

Flash specifications:

Temperature: 100.72 C
 Vapor fraction: 1

Valid phases:

Vapor-Liquid

Lets you type the molar vapor fraction. 0.0 for bubble point, 1.0 for dew point. For subcooled liquid or superheated vapor use temperature and pressure specifications. See Help.

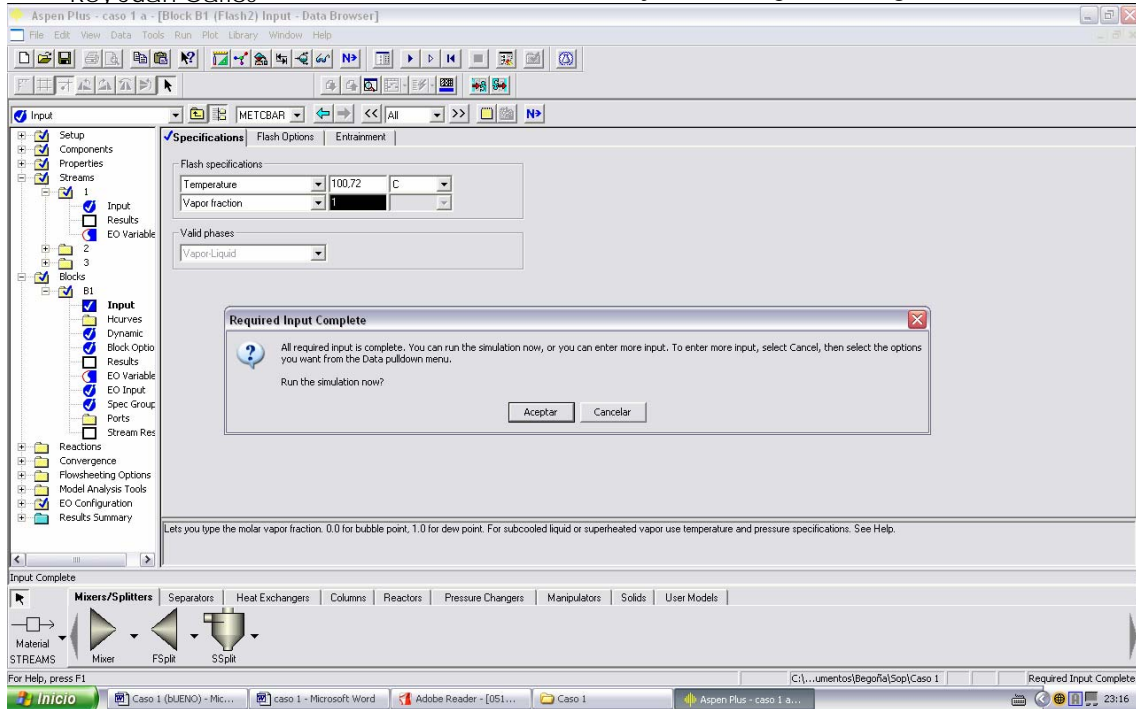
Required Input Incomplete

Mixers/Splitters Separators Heat Exchangers Columns Reactors Pressure Changers Manipulators Solids User Models

For Help, press F1

Required Input Incomplete

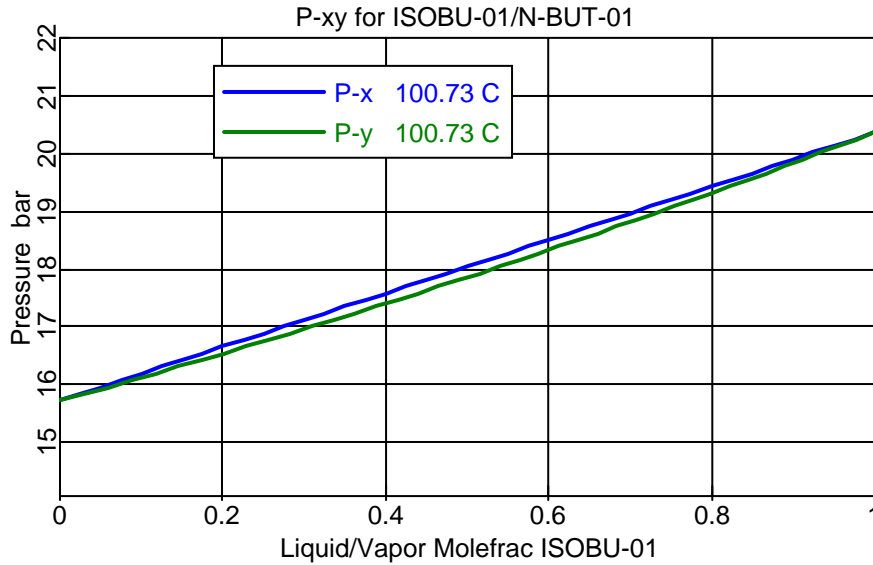
Luego damos a Next y le indicamos al programa que resuelva el caso planteado.



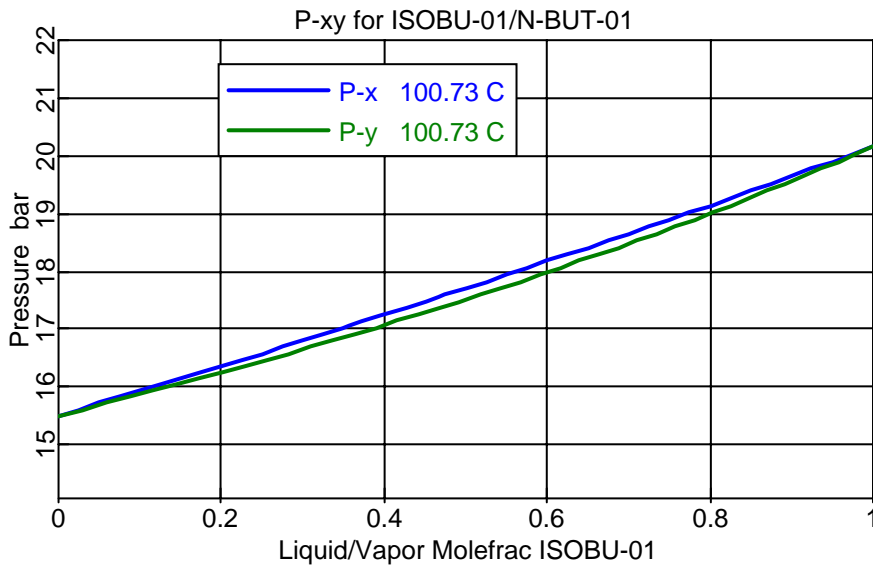
Los resultados obtenidos son:

Fracción molar i-butano	Presión de burbuja (bar)	Presión de rocío (bar)
0	15,55	15,55
0,1	15,99	15,93
0,2	16,44	16,33
0,3	16,89	16,74
0,4	17,35	17,17
0,5	17,81	17,62
0,6	18,28	18,10
0,7	18,74	18,59
0,8	19,21	19,10
0,9	19,70	19,63
1	20,19	20,19

Posteriormente repetimos el procedimiento con otra base de cálculo la *ecuación de estado RK-SOAVE*. En este caso utilizaremos el procedimiento de cálculo 2. La representación gráfica obtenida es la siguiente:



Posteriormente repetimos el procedimiento con otra base de cálculo un *modelo de coeficiente de Actividad: UNIFAC*. En este caso los datos de equilibrio obtenidos son:



CONCLUSIONES:

La ecuación de estado que más ajusta los datos obtenidos en simulación, con los datos bibliográficos es la ecuación de Peng-Robinson, aunque la bondad del ajuste de la ecuación de RK-Soave es aceptable.

En general para la mayoría de los hidrocarburos no polares, la ecuación de estado PENG-ROBINSON, suele dar buenos resultados, sobre todo a temperaturas y presiones no muy elevadas (donde la idealidad del sistema es mayor).

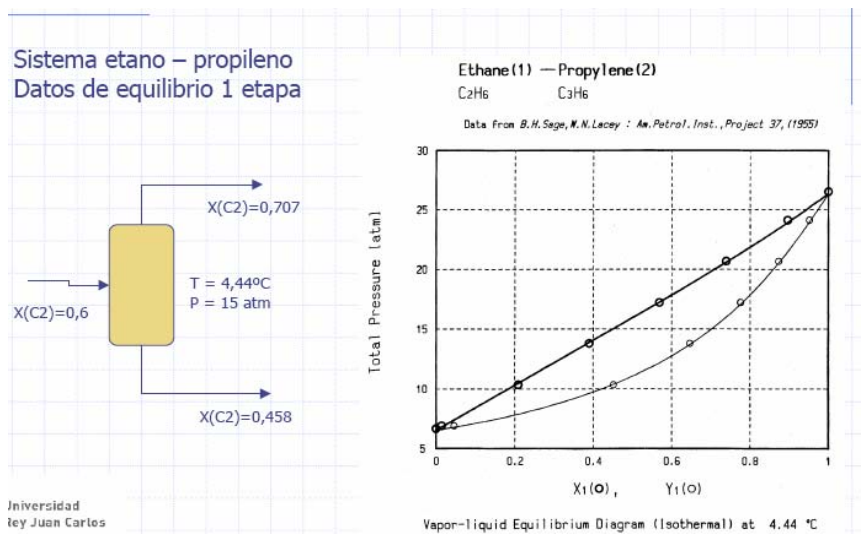
Caso 1 B

OBJETIVO:

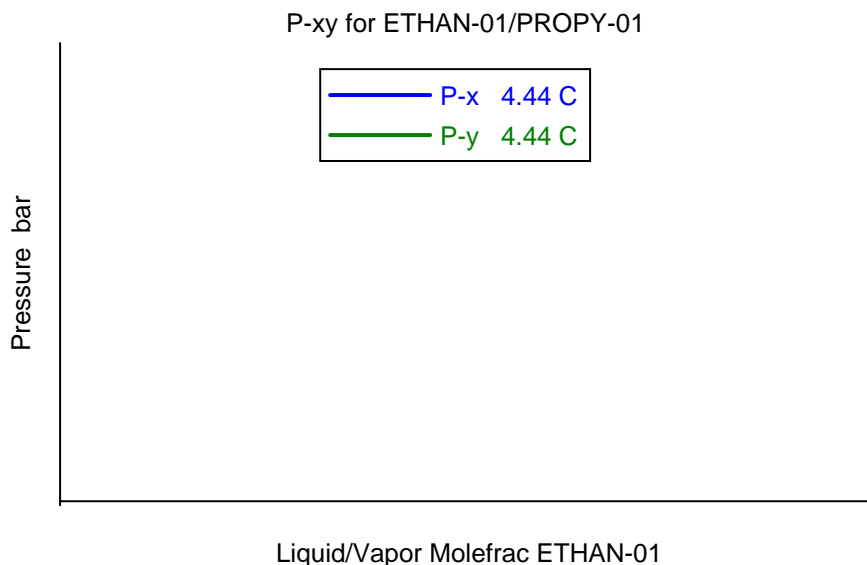
El objetivo de este caso es estudiar los modelos termodinámicos que mejor se ajustan al equilibrio de la mezcla etano-propileno.

PROCEDIMIENTO:

Para poder ver la bondad de los distintos modelos termodinámicos, se disponen de la gráfica de equilibrio, que se muestra en la figura, y del dato de la separación obtenida en un Flash, para una temperatura de 4,44°C y una presión de 15 atm.



En primer lugar se ha realizado la simulación con el modelo de actividad *Unifac*. La gráfica de equilibrio se muestra a continuación:

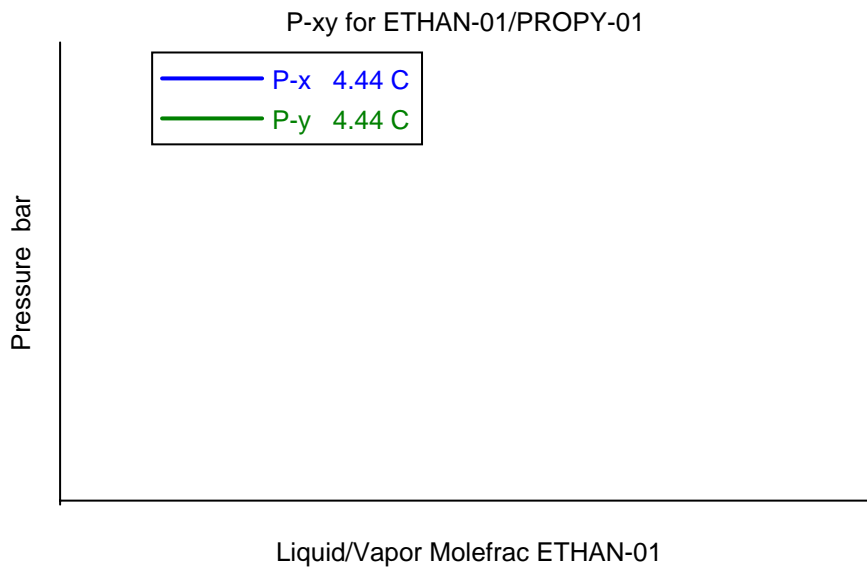


Si consideramos la separación de la corriente líquida y vapor a 4,44°C y presión de 15 atmósferas, las composiciones de las corrientes obtenidas serán:

Fracción molar etano, corriente vapor: 0,710
Fracción molar etano, corriente líquida: 0,447.

Como observamos, la desviación, con respecto a los datos teórico, es de 0,03 para el vapor y 0,11 para el líquido.

En segundo lugar se ha realizado la simulación con el modelo de actividad **Peng Robinson**. La gráfica de equilibrio se muestra a continuación:

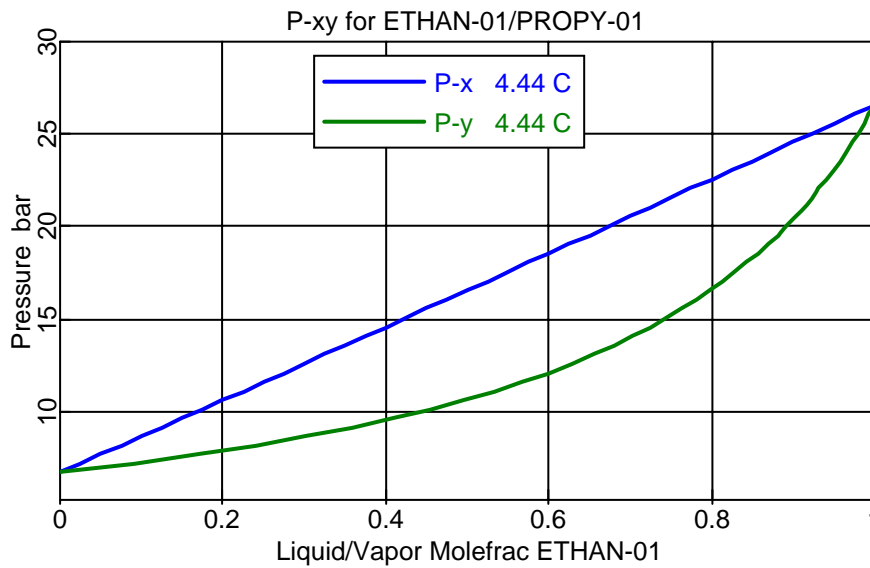


Si consideramos la separación de la corriente líquida y vapor a 4,44°C y presión de 15 atmósferas, las composiciones de las corrientes obtenidas serán:

Fracción molar etano, corriente vapor: 0,703
Fracción molar etano, corriente líquida: 0,445.

Como observamos, la desviación, con respecto a los datos teórico, es de 0,04 para el vapor y 0,13 para el líquido.

En tercer lugar se ha realizado la simulación con el modelo de actividad **Uniquac**. La gráfica de equilibrio se muestra a continuación:



Si consideramos la separación de la corriente líquida y vapor a 4,44°C y presión de 15 atmósferas, las composiciones de las corrientes obtenidas serán:

Fracción molar etano, corriente vapor: 0,737
Fracción molar etano, corriente líquida: 0,415.

Como observamos, la desviación, con respecto a los datos teórico, es de 0,30 para el vapor y 0,43 para el líquido.

CONCLUSIONES

La base de cálculo que mejor ajusta los datos experimentales a los teóricos es el modelo de actividad Unifac, ya que es el que obtiene menos desviación en la predicción del equilibrio.

Caso 1 C

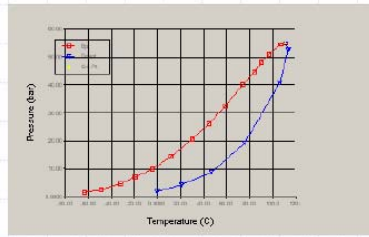
OBJETIVO:

El objetivo de este caso es estudiar los modelos termodinámicos que mejor se ajustan al equilibrio de la mezcla etano-butano.

PROCEDIMIENTO:

Para poder ver la bondad de los distintos modelos termodinámicos, se disponen de las gráficas de equilibrio, que se muestra en la figura

Sistema etano – butano
Envolvente fases

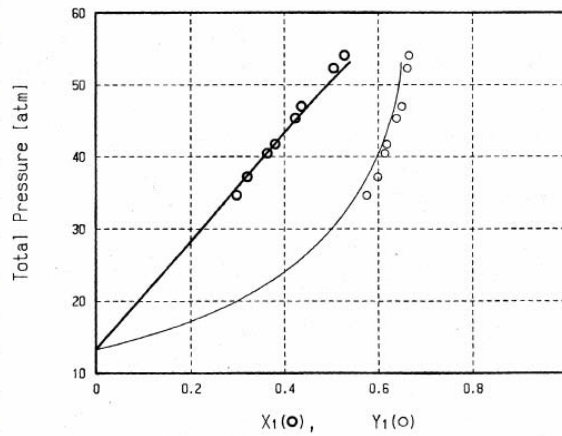


P (bar)	T (°C)
2,03	0,08
4,29	21,59
9,08	46,75
19,23	75,82
40,70	106,60
52,73	113,80
54,96	111,40

Universidad
Rey Juan Carlos

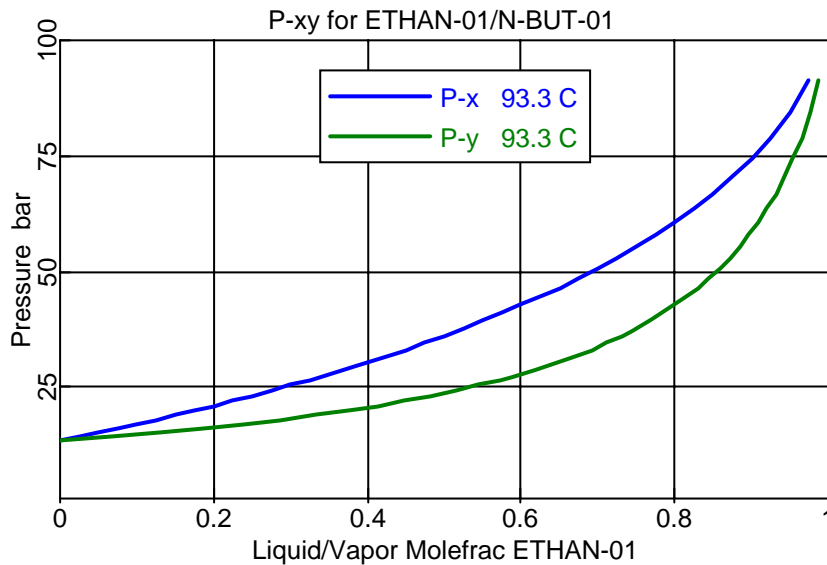
Ethane(1) — Butane (2)
C₂H₆ C₄H₁₀

Data From Mehra, V.S., Thodos, G. : J.Chem.Eng.Data. vol.10, p.307(1965)



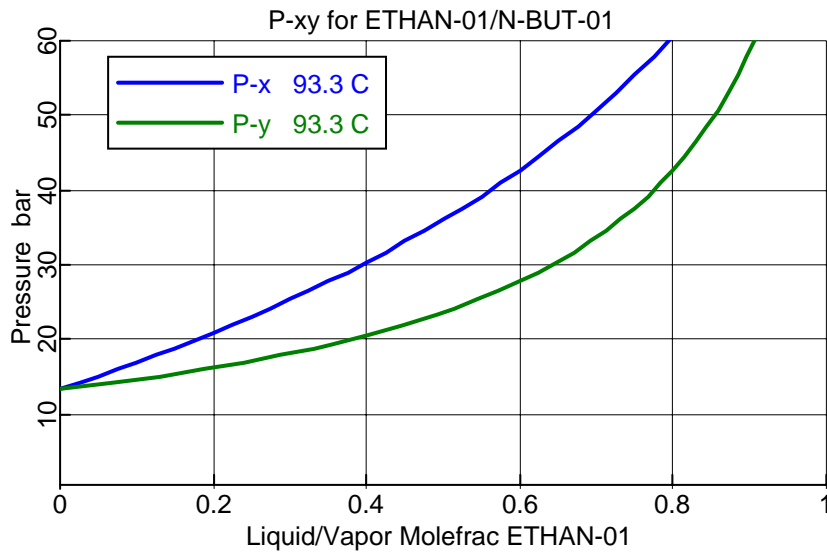
Vapor-liquid Equilibrium Diagram (Isothermal) at 93.3 °C

En primer lugar se ha realizado la simulación con el modelo de actividad *Unifac*. La gráfica de equilibrio se muestra a continuación:

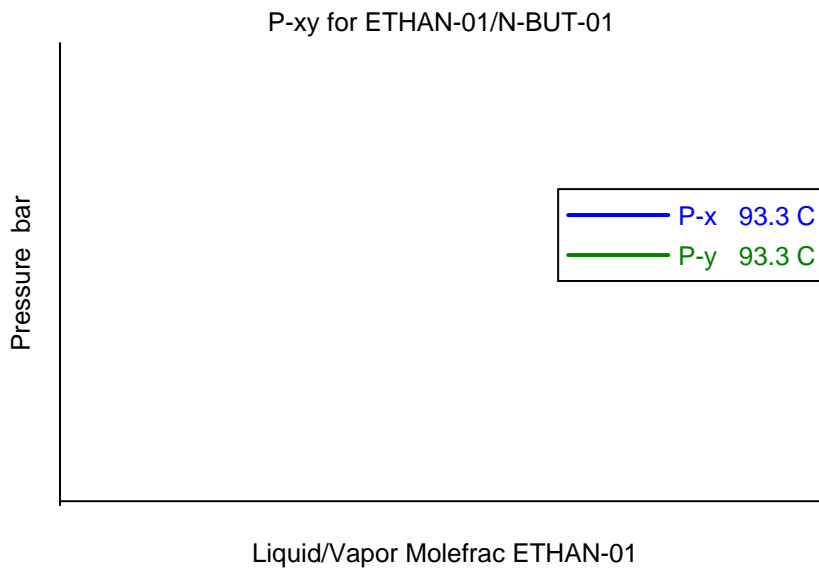


Como podemos apreciar, la gráfica presenta una forma distinta a la esperada, ya que, según los datos teóricos, las envolventes se encuentran a presiones de unas 60 atm mientras que según la simulación con el modelo de actividad Unifac se pueden llegar a presiones de unos 90 bares.

Además, para presiones de 60, con el modelo Unifac obtenemos composiciones de fracción molar de etano superiores a 0,8, mientras que los datos teóricos no dan valores de más de 0,7.



En segundo lugar se ha realizado la simulación con la ecuación de estado **Peng-Robinson**. La gráfica de equilibrio se muestra a continuación:



Como podemos observar, esta gráfica es mucho más parecida a la teórica.

CONCLUSIONES

La base de cálculo que mejor ajusta los datos experimentales a los teóricos es la ecuación de estado Peng-Robinson.

Caso 2

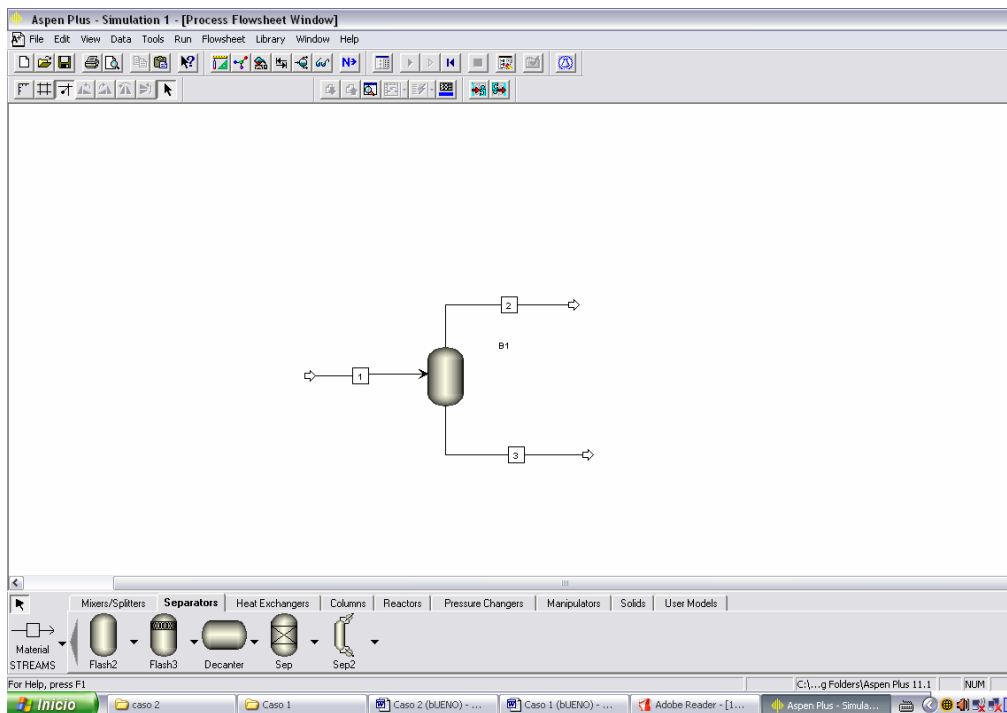
OBJETIVO

Los objetivos de este caso son la selección del modelo termodinámico más adecuado para la mezcla de hidrocarburos a estudiar, el cálculo del aumento de presión mínimo necesario para conseguir que el gas llegue a su destino, y las condiciones del separador líquido-vapor que evitan la condensación de líquidos.

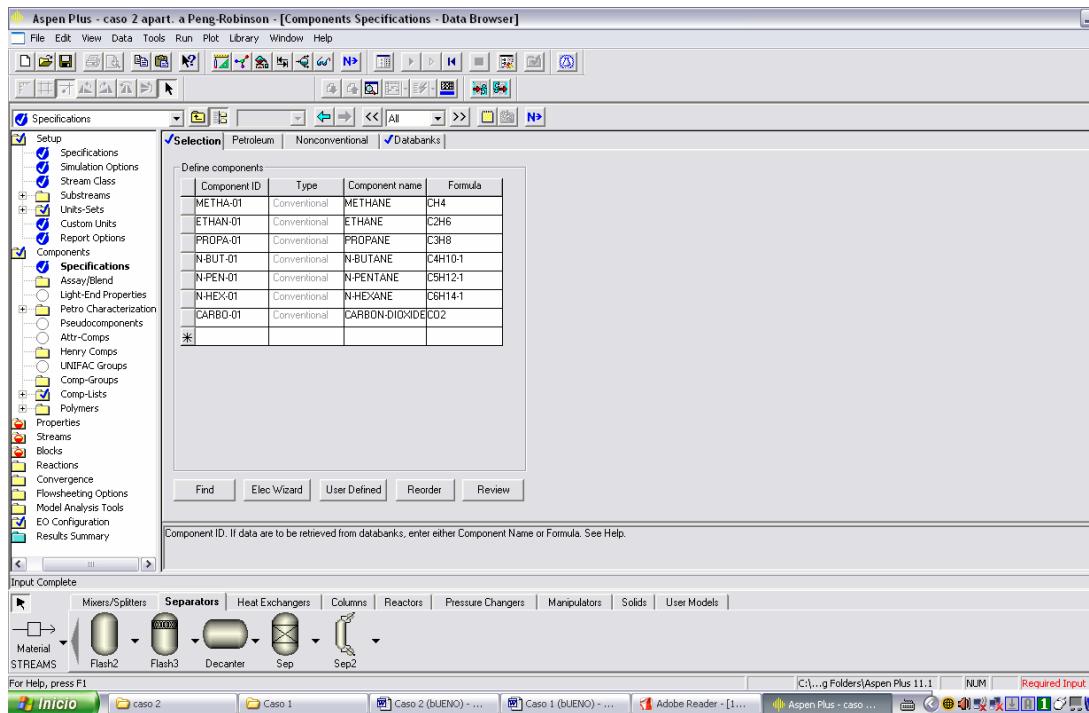
PROCEDIMIENTO APARTADO A:

Para poder ver la bondad de los distintos modelos termodinámicos, se dispone del dato de temperatura de rocío (-18.4°C) para una presión de 5 bares. Calcularemos la temperatura para la ecuación de estado *PENG-ROBINSON*.

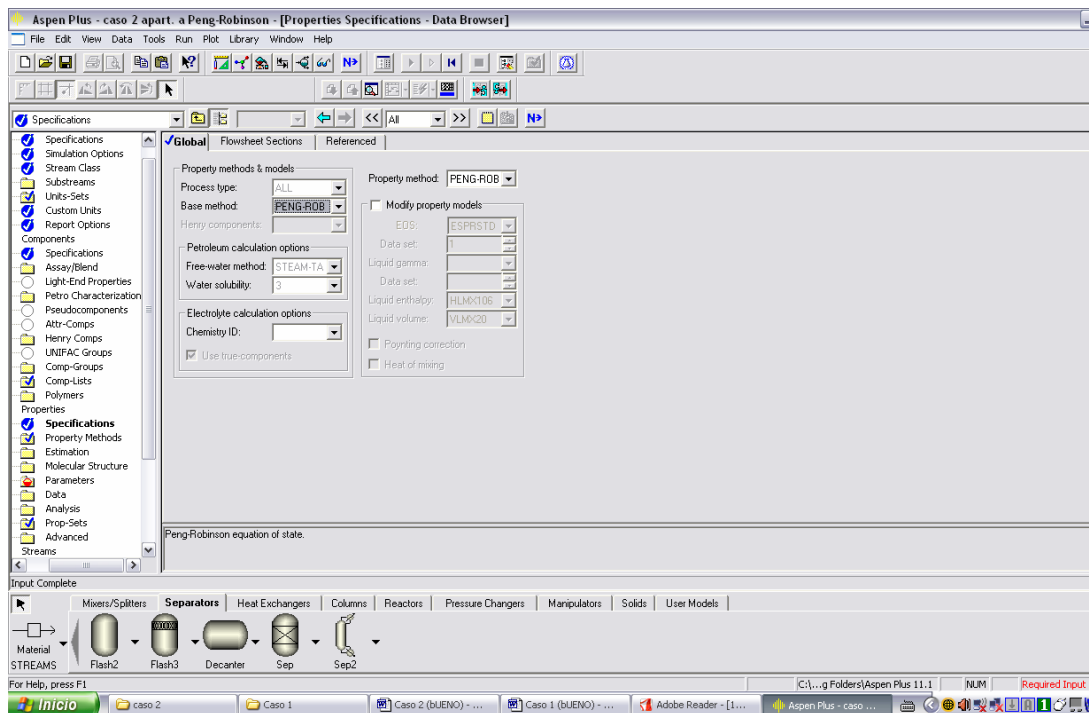
En primer lugar colocaremos un separador Flash con las corrientes materiales de entrada y salida correspondientes.



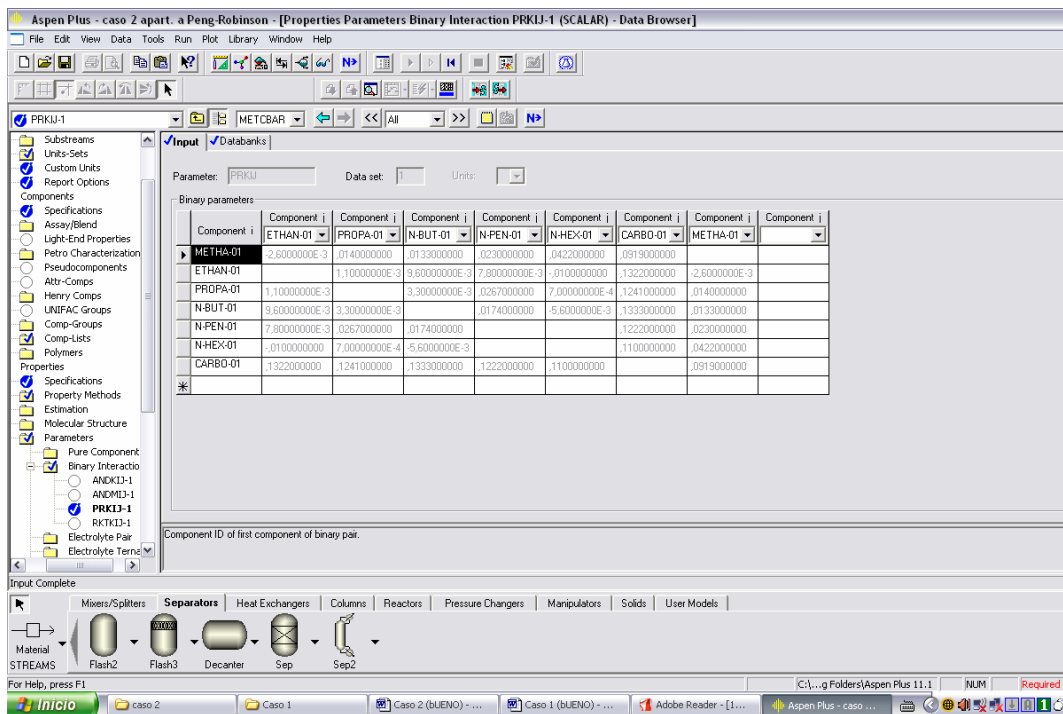
Posteriormente definimos los componentes que intervienen en el caso (metano, etano, propano, n-butano, n-pentano, n-hexano y dióxido de carbono).



Posteriormente indicamos la ecuación de estado utilizada (PENG-ROBINSON).

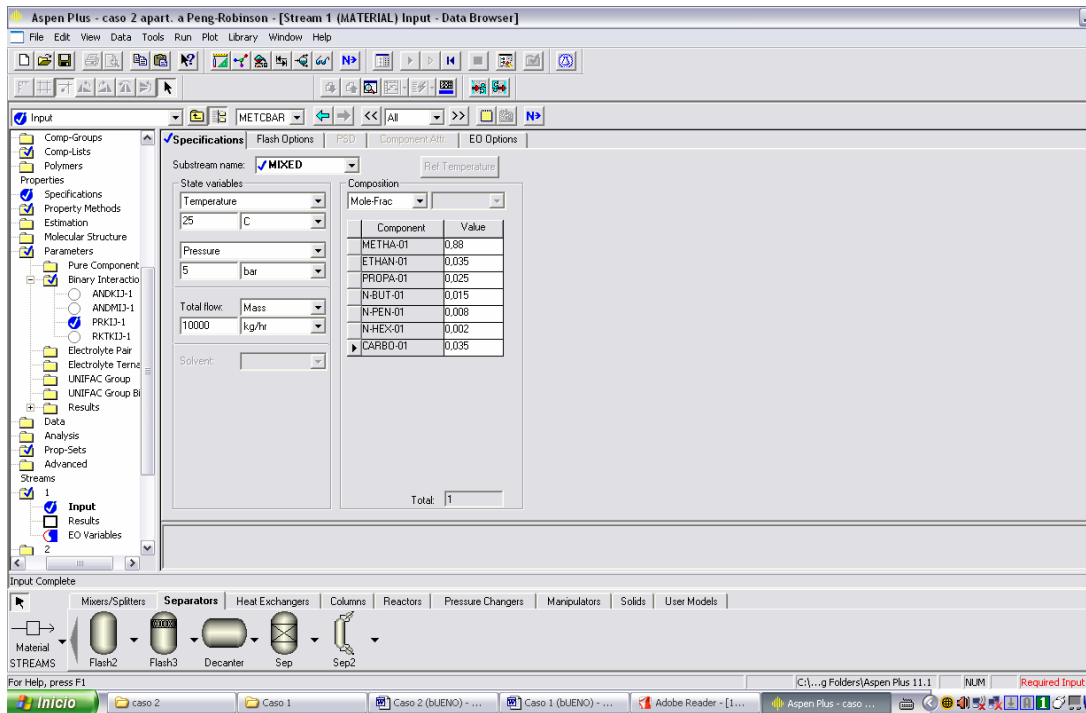


Posteriormente nos aparece una pantalla con el cálculo de los coeficientes binarios de interacción.



Posteriormente especificamos las condiciones de la corriente 1 (5 bares de presión, una temperatura de 25°C, caudal másico de 10000 Kg/h y composición molar:

Metano	0.88
Etano	0.035
Propano	0.025
n-butano	0.015
n-pentano	0.008
n-hexano	0.002
CO ₂	0.035



Aspen Plus - caso 2 apart. a Peng-Robinson - [Stream 1 (MATERIAL) Input - Data Browser]

Substream name: MIXED

State variables:

- Temperature: 25 C
- Pressure: 5 bar
- Total flow: Mass, 10000 kg/hr

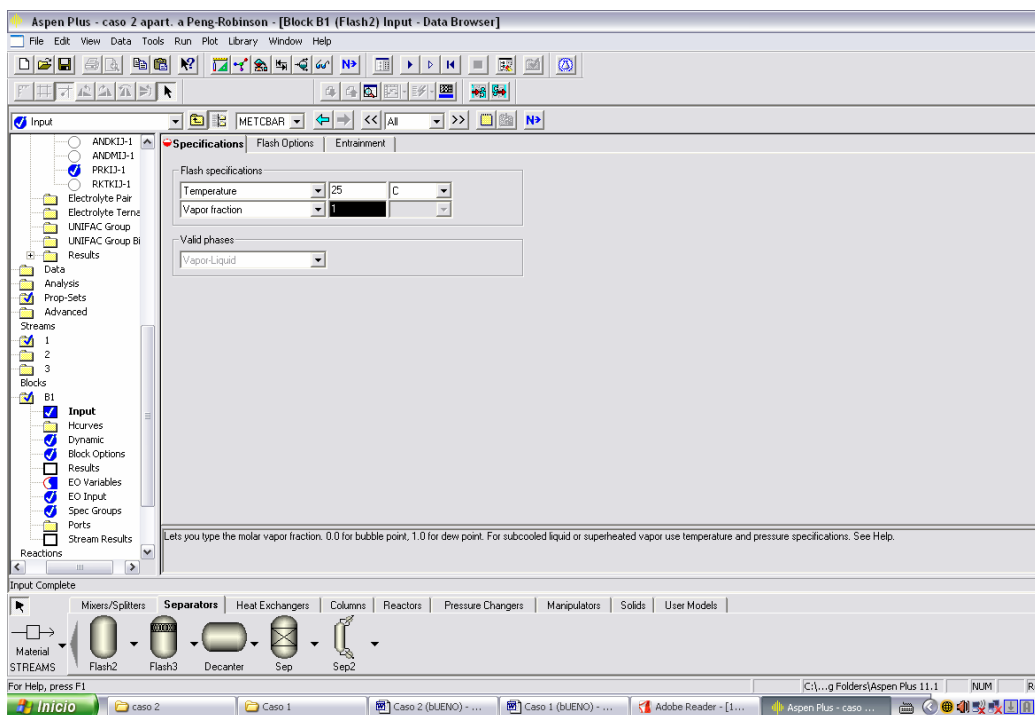
Composition:

Component	Value
METHA-01	0.88
ETHAN-01	0.035
PROPA-01	0.025
N-BUT-01	0.015
N-PEN-01	0.008
N-HEX-01	0.002
CARBD-01	0.035
Total	1

Input Complete

Process Flow Diagram: Mixers/Splitters, Separators, Heat Exchangers, Columns, Reactors, Pressure Changers, Manipulators, Solids, User Models.

Luego se especifican las condiciones en el Flash (5 bares de presión y fracción de vapor 1; con esta condición se calcula temperatura de rocío).



Aspen Plus - caso 2 apart. a Peng-Robinson - [Block B1 (Flash2) Input - Data Browser]

Flash specifications:

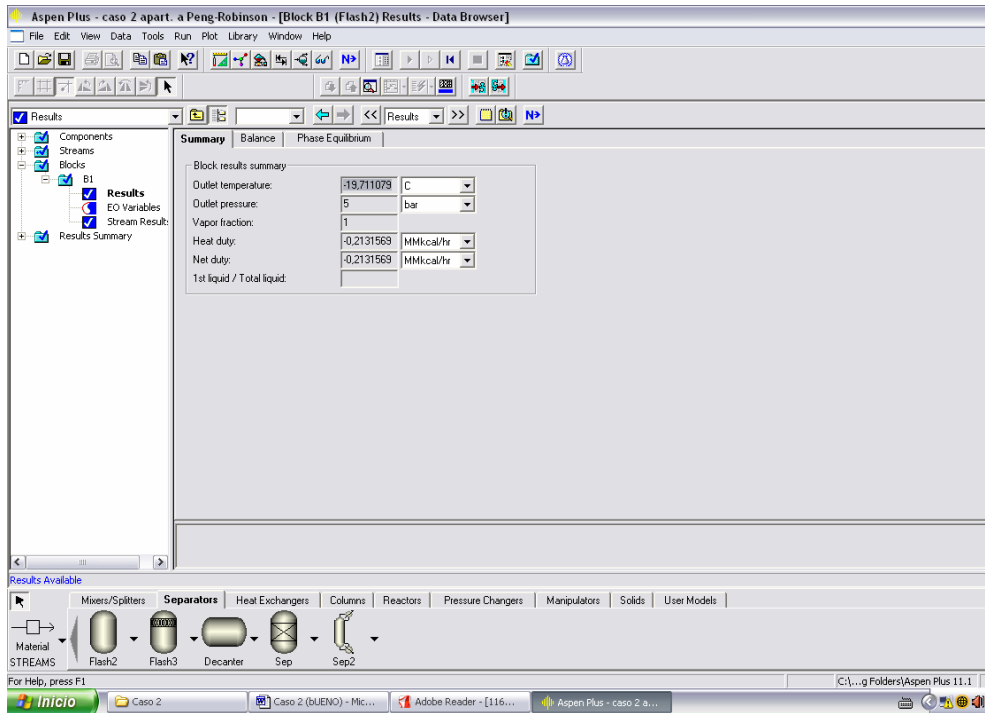
- Temperature: 25 C
- Vapor fraction: 1

Valid phases: Vapor-Liquid

Input Complete

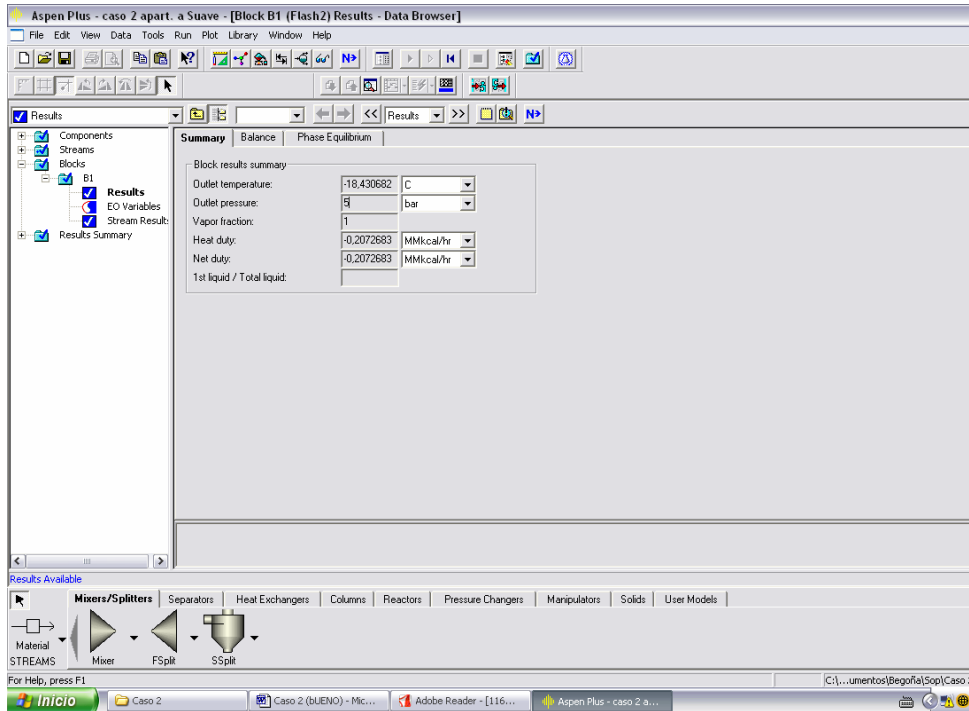
Process Flow Diagram: Mixers/Splitters, Separators, Heat Exchangers, Columns, Reactors, Pressure Changers, Manipulators, Solids, User Models.

Los resultados obtenidos, muestran una temperatura de rocío de $-19,7\text{ }^{\circ}\text{C}$:



Caso 2 A parta PENG-ROBINSON				
Stream ID		1	2	3
Temperature	C	25,0	-19,7	
Pressure	bar	5,000	5,000	5,000
Vapor Frac		1,000	1,000	
MoleFlow	kmol/hr	5145,56	5145,56	0,000
MassFlow	kg/hr	10000,000	10000,000	0,000
Volume Flow	cumhr	2512,951	2115,148	0,000
Enthalpy	MMkcal/hr	-10866	-11079	
MoleFlow	kmol/hr			
METHA-01		452809	452809	
ETHAN-01		18009	18009	
PROPA-01		12864	12864	
N-BUT-01		7,718	7,718	
N-PEN-01		4,116	4,116	
N-HEX-01		1,029	1,029	
CARBO-01		18009	18009	

El mismo procedimiento se repite para la base de cálculo de RK-SOAVE, y la temperatura de rocío calculada es de $-18,4^{\circ}\text{C}$

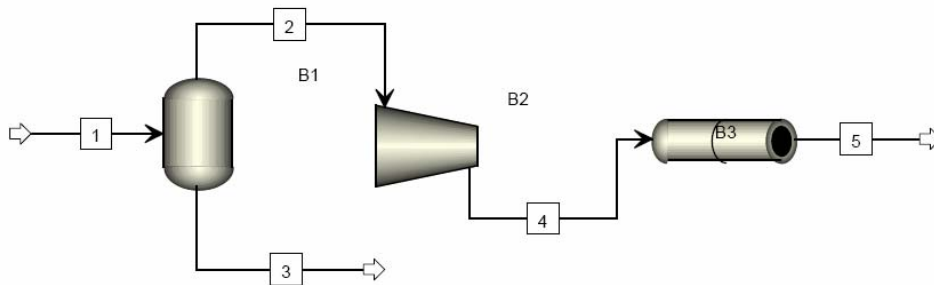


Caso2 apartado b				
Stream ID		1	2	3
Temperature	C	25,0	-18,4	
Pressure	bar	5000	5000	5000
Vapor Frac		1000	1000	
MoleFlow	kmol/hr	54,556	514,556	0000
MassFlow	kg/hr	10000,000	10000,000	0000
Volume Flow	cumhr	2520,126	2133,903	0000
Enthalpy	MMkcal/hr	-40,865	-11,072	
MoleFlow	kmol/hr			
METHA-01		42,809	452,809	
ETHAN-01		18009	18009	
PROPA-01		12864	12864	
N-BUT-01		7718	7718	
N-PEN-01		4116	4116	
N-HEX-01		1029	1029	
CARBO-01		18009	18009	

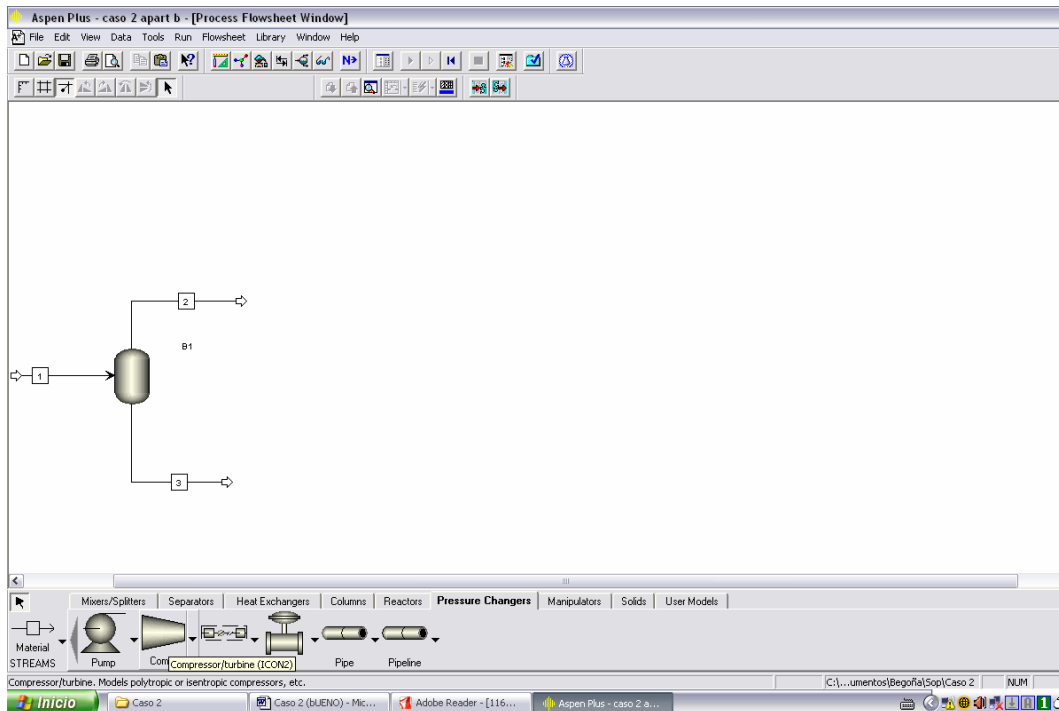
Entre PENG-ROBINSON y RK-SOAVE, el mejor resultado se obtiene con la base de cálculo RK-SOAVE, con lo que utilizaremos esta base de cálculo para resolver el problema.

PROCEDIMIENTO APARTADO B:

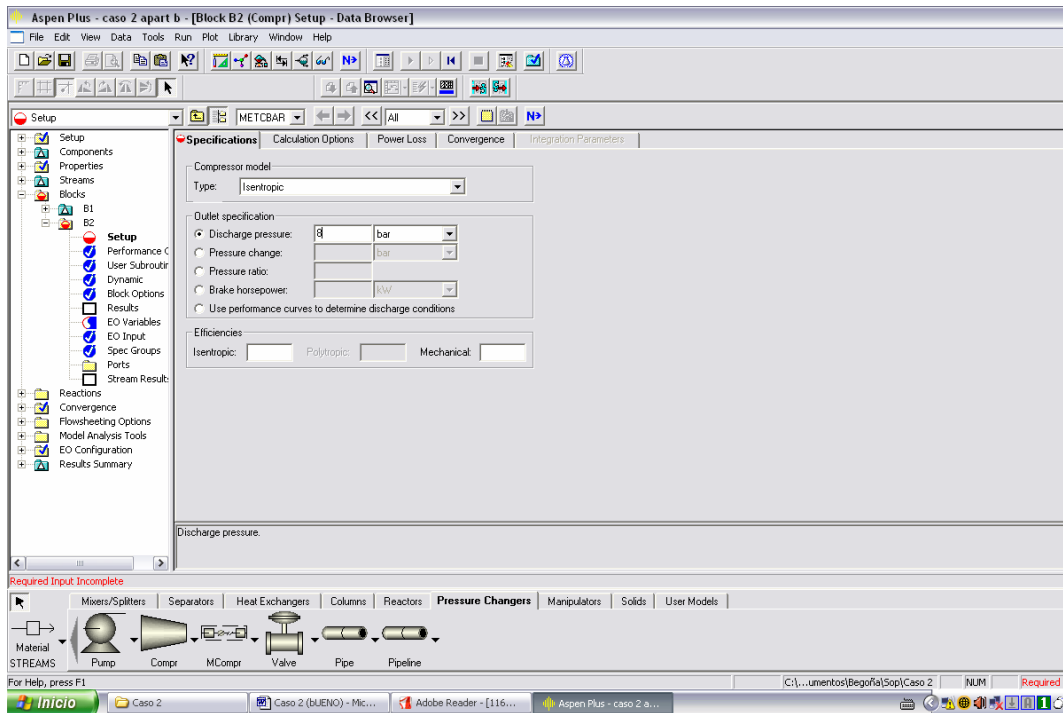
La presión que el compresor debe aportar, como mínimos, es aquella que permite que la presión en el punto de destino sea superior a la atmosférica (no queremos tener una tubería que tenga que soportar vacío) y que permite que todo lo que se encuentre en la tubería sea vapor (es decir que no halla líquido en el punto 5).



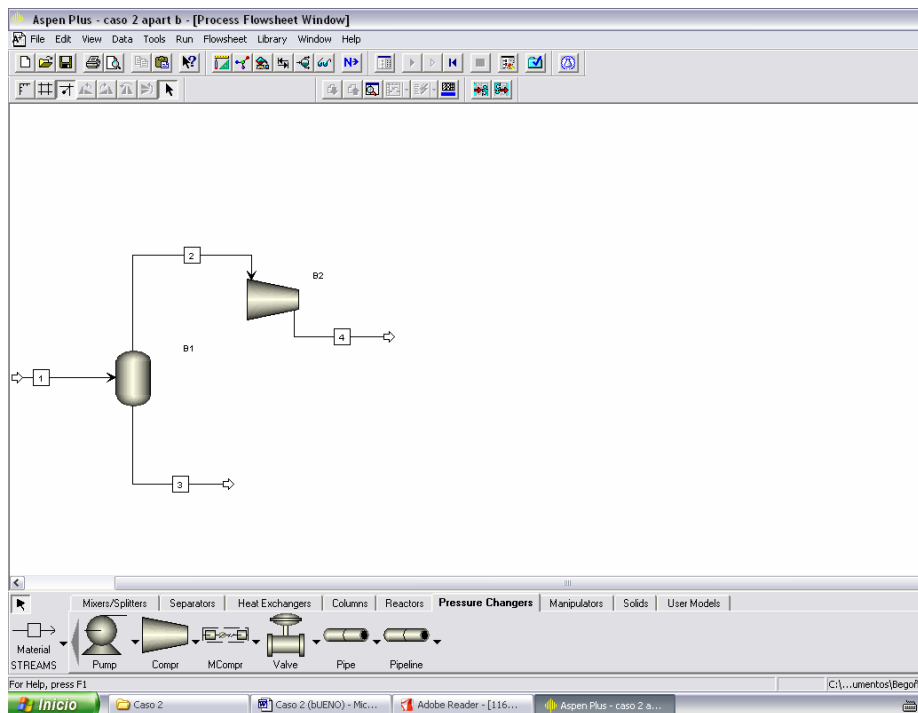
Una vez realizada la separación Flash, del apartado a, se somete el vapor obtenido (corriente 2) a una compresión isoentrópica. Para ello se elige un compresor en la sección de Pressure Changers.



Posteriormente se indica el tipo de compresor (isoentrópico) y se indica una presión de descarga (en principio se fijará una presión de descarga aleatoria, hasta calcular la mínima que cumple la condición de no permitir la condensación en el punto de destino 5).

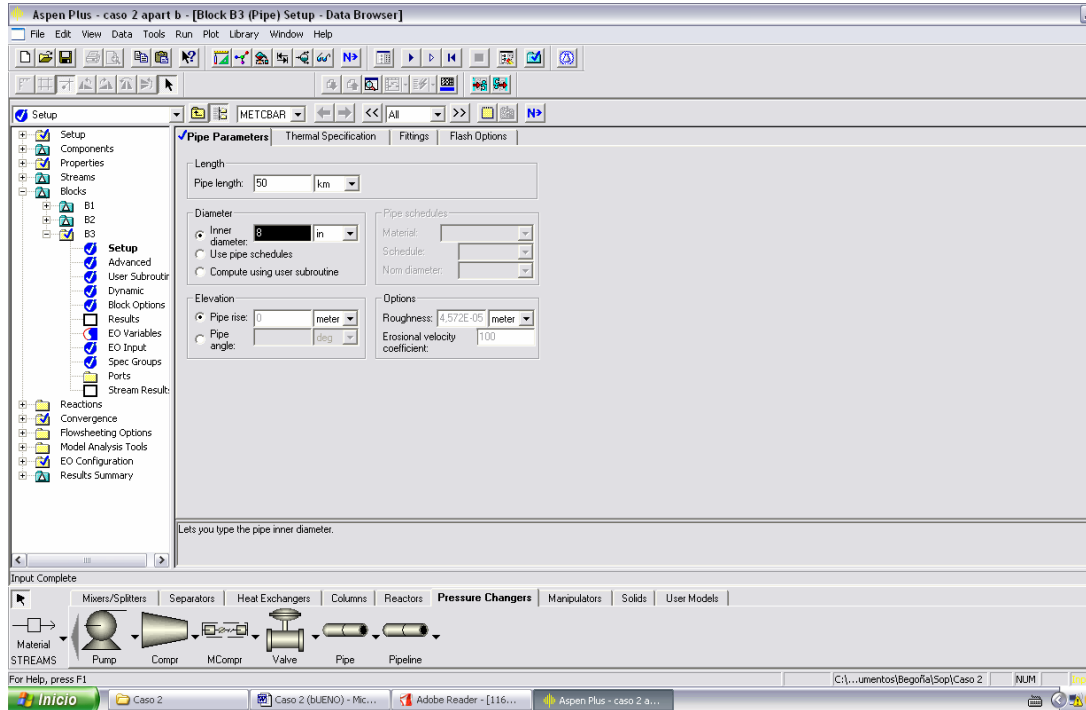


Una vez resuelta la parte correspondiente a la separación Flash y al compresor isoentrópico (como se muestra en la siguiente figura) y comprobando que la 4, es todo vapor, se procede a la instalación del tramo de tubería necesario para llegar al punto de destino.

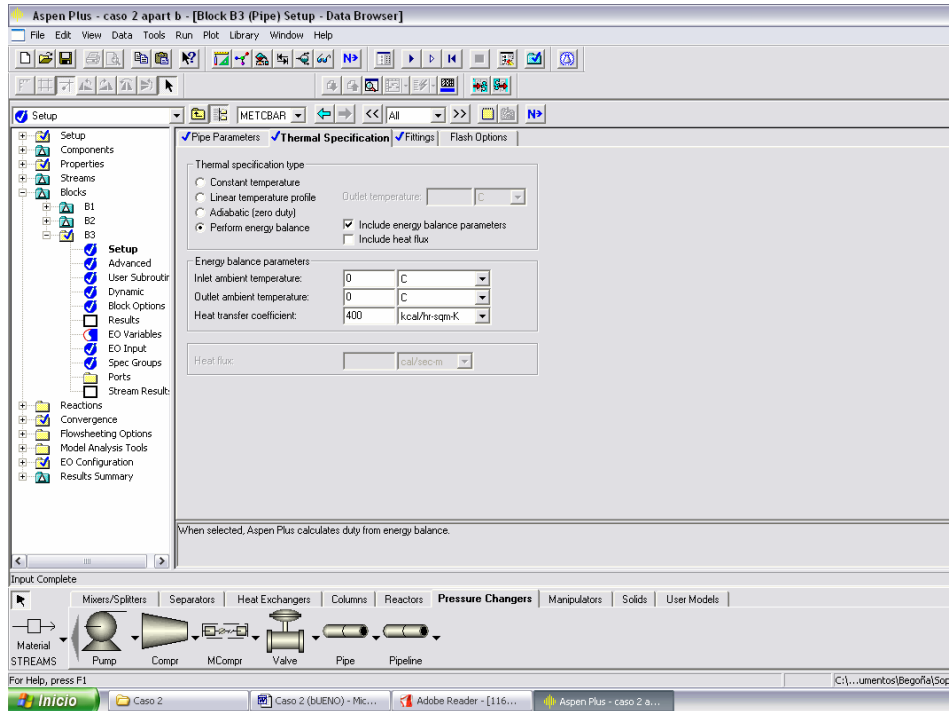


La tubería (Pipe) se selecciona de los Pressure Changers y se coloca en la salida del condensador. Como especificaciones se debe indicar la longitud (50 Km), 8

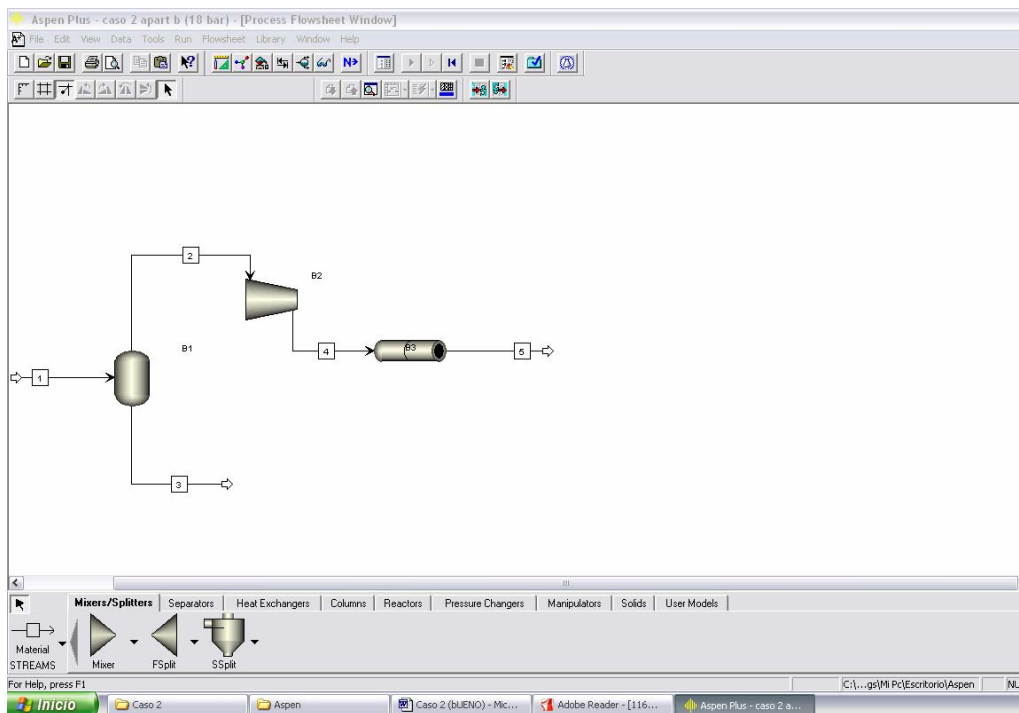
pulgadas (8 in) de diámetro, la elevación (en este caso es insignificante=0), la rugosidad de la tubería (en este caso coincide con el valor que nos da por defecto Aspen: $4.572 \cdot 10^{-5}$ m) y la velocidad erosional de 100 (que también coincide con la de defecto de Aspen).

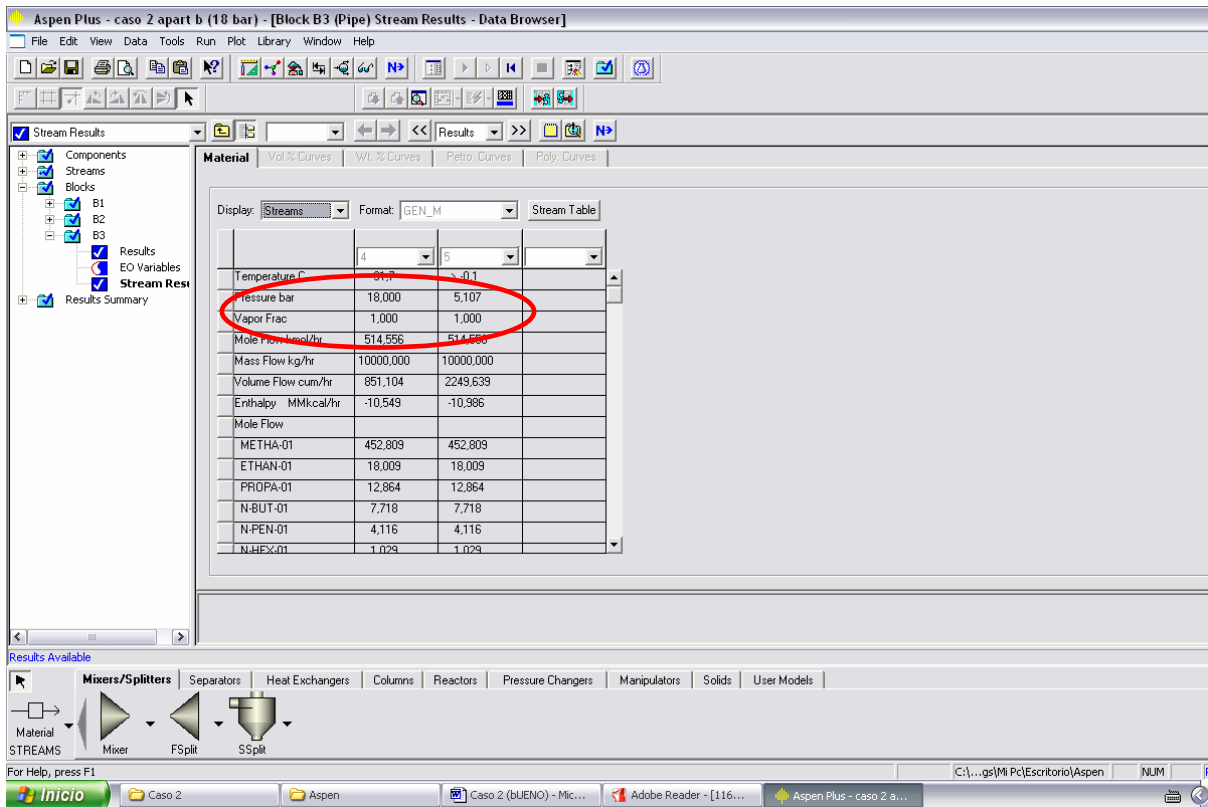


Además en la pestaña de Thermal Specifications debe estar indicado que nos incluya los parámetros del balance de materia. En este caso hay que indicar la temperatura ambiente (en este caso hemos considerado tanto la temperatura ambiente de entrada como la de salida de 0 °C) y el coeficiente de transferencia de materia del aislante de la conducción en $400 \text{ Kcal}/(\text{h} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{K})$.



La presión mínima necesaria que debe aportar el condensador para que a la salida de la tubería todo sea vapor y la presión sea superior a la atmosférica es, aproximadamente, de 18 bar.





PROCEDIMIENTO APARTADO C:

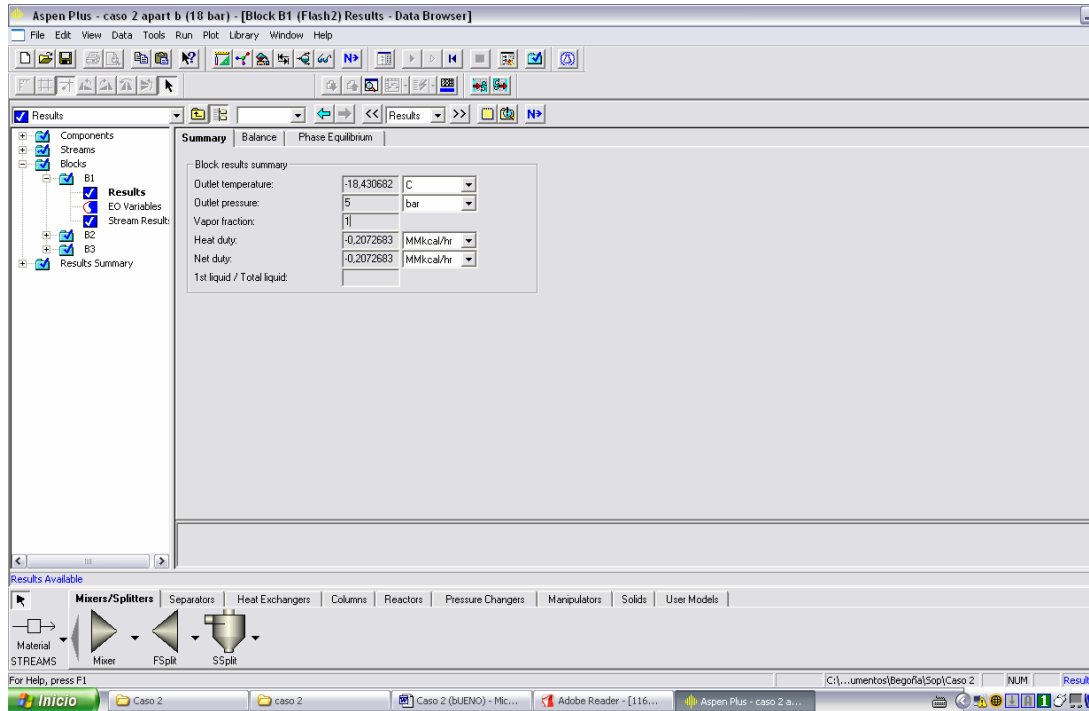
Las condiciones de operación del separador L-V (separador Flash 2), que se encuentra antes del compresor son:

$$T^a: -18.4^{\circ}\text{C}$$

$$P= 5 \text{ bar}$$

$$\text{Caudal de calor: } -0.207 \text{ MMKcal/hr}$$

Yo pondría el flash a 25°C y 5 bar aprovechando que así estaría más alejado de las condiciones de rocío a 5 bar, luego en la compresión el gas sube la P y T. Probar!!



Aspen Plus - caso 2 apart b (18 bar) - [Block B1 (Flash2) Results - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

Results

Components
Streams
Blocks
B1 Results
EO Variables
Stream Result:
B2
B3
Results Summary

Summary Balance Phase Equilibrium

Block results summary

Outlet temperature:	-18.430682	C
Outlet pressure:	5	bar
Vapor fraction:	1	
Heat duty:	-0.2072683	MMkcal/hr
Net duty:	-0.2072683	MMkcal/hr
1st liquid / Total liquid:		

Results Available

Mixers/Splitters Separators Heat Exchangers Columns Reactors Pressure Changers Manipulators Solids User Models

Material STREAMS Mixer FSplit SSplit

For Help, press F1

C:\...umentos\Begoña\Sop\Caso 2 NUM Result

Inicio Caso 2 caso 2 Caso 2 (BUENO) - Mic... Adobe Reader - [116... Aspen Plus - caso 2 a...

Caso 3

OBJETIVO

El objetivo es la separación de propano, i-butano, n-butano y i-pentano de una corriente que se encuentra a 40°C y 20 bar, y con una composición:

Propano:	100 Kmol/h
i-butano:	300 Kmol/h
n-butano:	500 Kmol/h
i-pentano:	400 Kmol/h

La separación se realiza con tres unidades Flash de separación Líquido-Vapor, que trabajan a presión entre 0.1 y 20 bar.

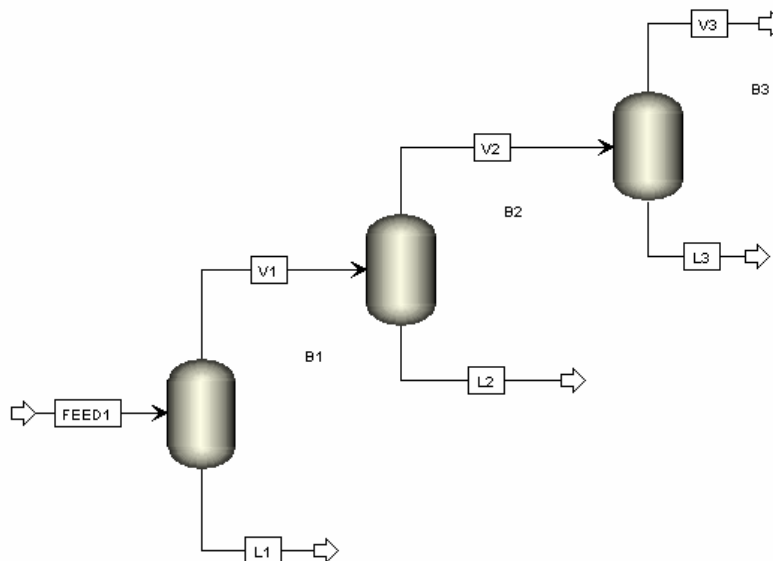
La separación debe realizarse para maximizar el beneficio obtenido de la venta de los productos obtenidos, sabiendo que:

Corrientes con pureza superior 95%:	10 €/Kmol
Corrientes con pureza entre 95-75%:	5 €/Kmol
Corrientes con pureza entre 75-50%:	3€/Kmol
Corrientes con pureza inferior al 50%:	1€/Kmol

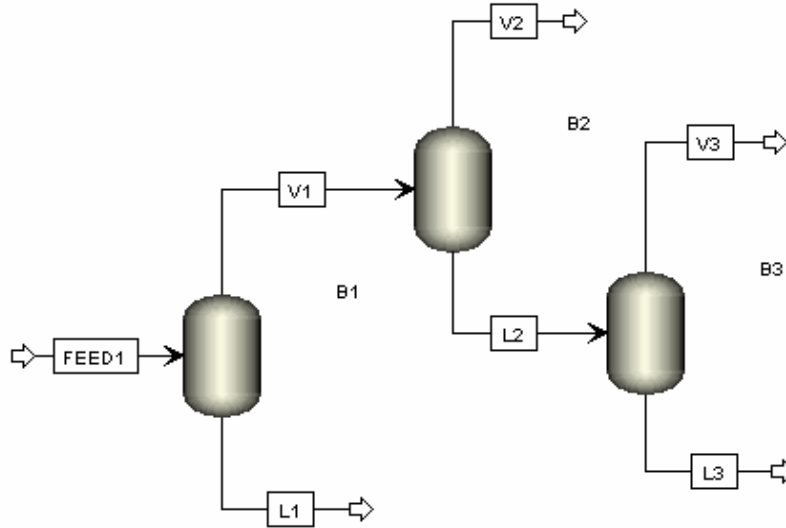
PROCEDIMIENTO:

Analizaremos tres disposiciones de las tres columnas Flash que disponemos:

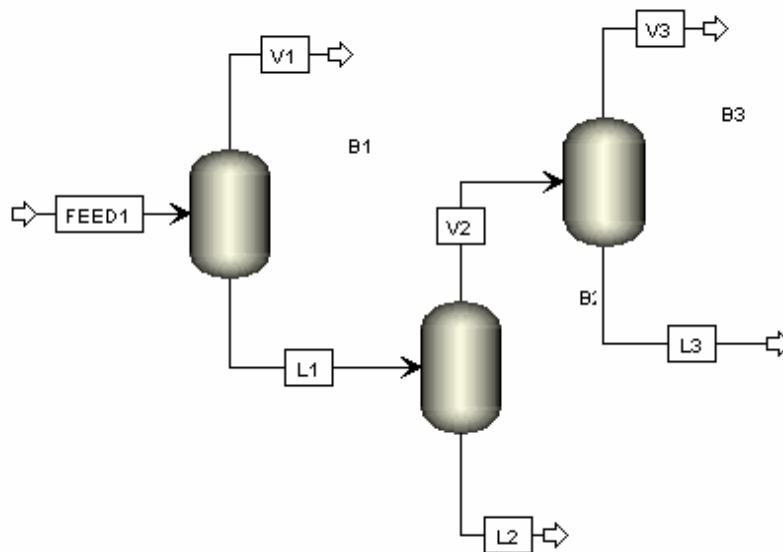
DISPOSICIÓN A



DISPOSICIÓN B

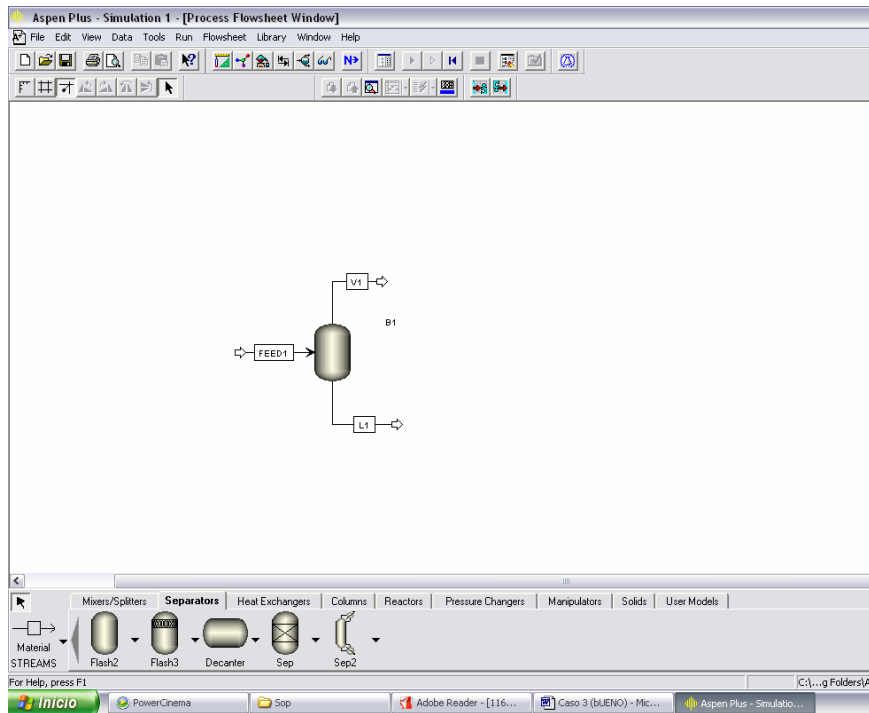


DISPOSICIÓN C

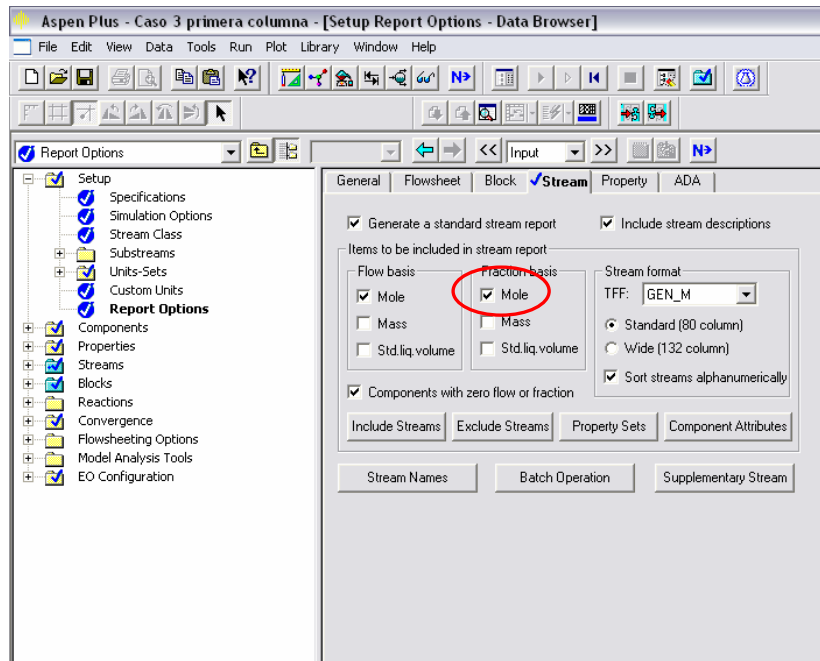


DISPOSICIÓN A: **Debe maximizar pureza y caudal->optimizar**

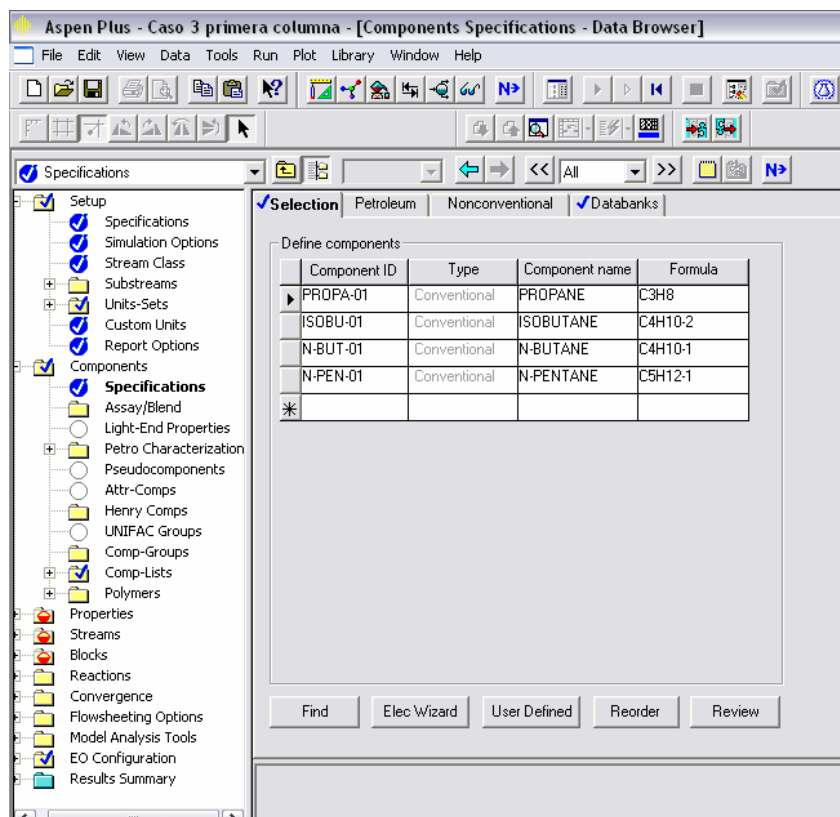
Lo primero es colocar tres corrientes materiales (entrada, vapor y líquido) y un Flash 2 (separador de fases L-V).



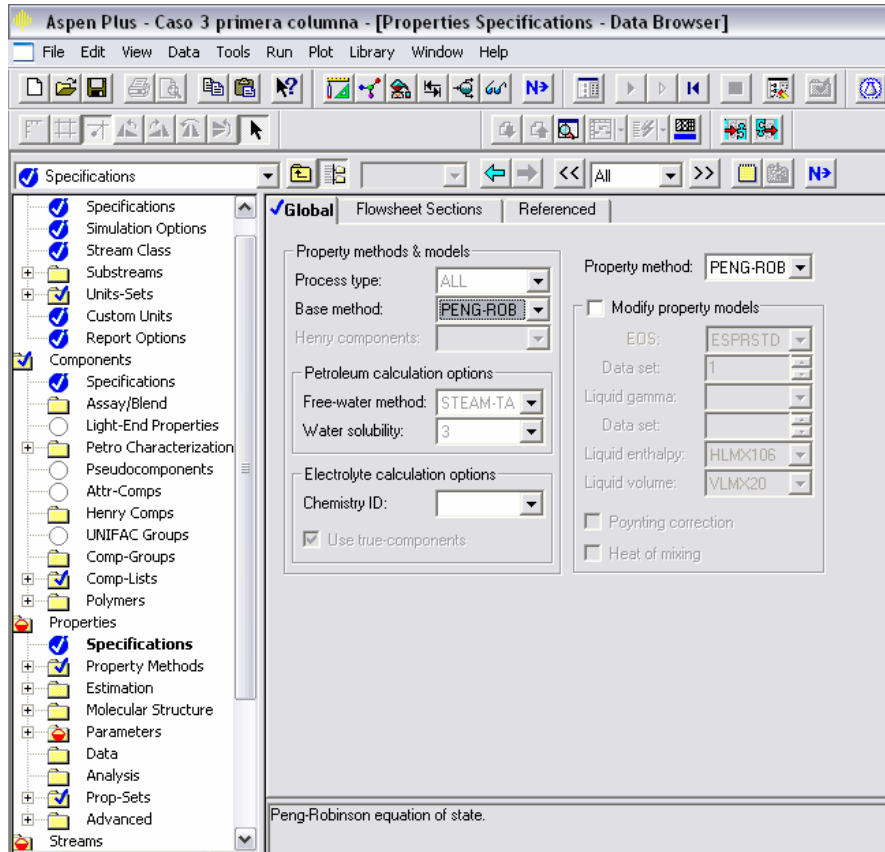
Para que nos indique las composiciones en moles de las corrientes se debe marcar un Tick en Report Option \longrightarrow Stream \longrightarrow Mole



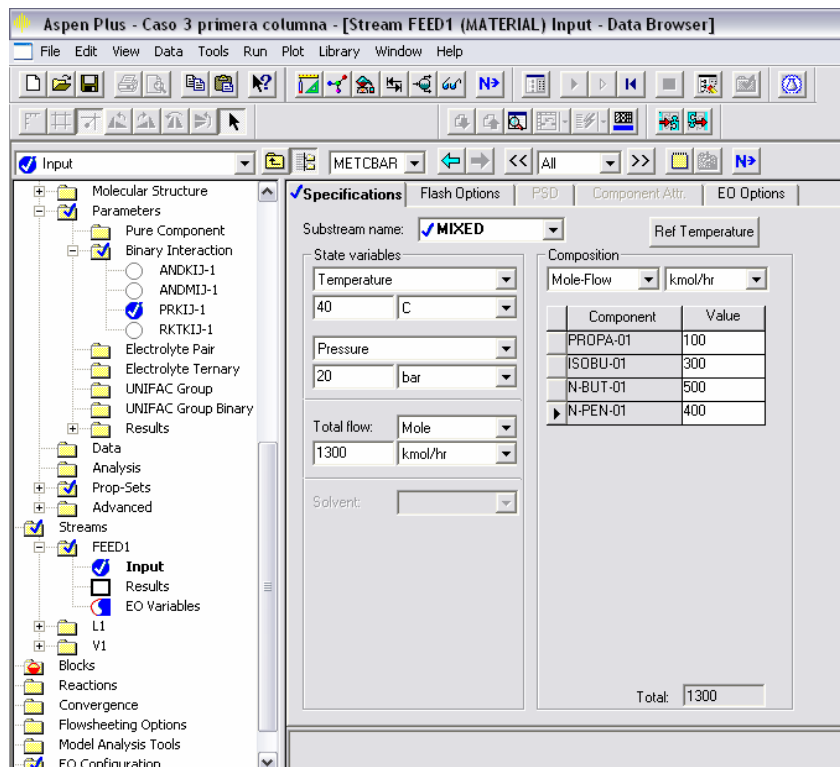
Posteriormente se indican los componentes que participan en la simulación:



Posteriormente se elige la ecuación de estado Peng-Robinson (para los hidrocarburos y condiciones de trabajo ofrece buenos resultados).



Posteriormente indicamos las condiciones de la corriente de alimentación (40 °C y 20 Bar):



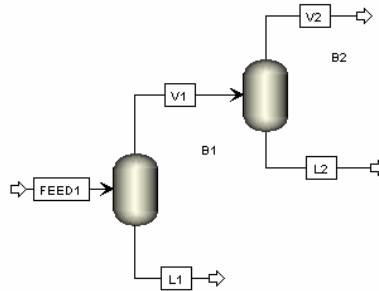
Posteriormente necesitamos las condiciones de trabajo de la columna Flash. Con respecto a la presión, sabemos que las condiciones deben de encontrarse entre la presión de burbuja y la presión de rocío, pues de lo contrario no habrá separación L-V. Para calcular la presión de burbuja indicamos la fracción de vapor igual a cero, y el valor es de: 4.08 bar. Para calcular la presión de rocío indicamos una fracción de vapor de 1 y se obtiene una presión de rocío de: 2.88 bar.

Una vez conocido el intervalo de valores de presión, se han probado diferentes opciones, y la que ofrece un mayor beneficio económico es una presión cercana a la presión de burbuja. Se ha realizado la simulación con una presión de 4 bares, para la primera columna. Los resultados obtenidos son:

Caso 3 primera columna				
Stream ID		FEED1	L1	V1
Temperature	C	40,0	40,0	40,0
Pressure	bar	20,000	4,000	4,000
Vapor Frac		0,000	0,000	1,000
MoleFlow	kmol/hr	1300,000	1291,841	8159
MassFlow	kg/hr	79768,484	79308,522	459962
Volume Flow	cm ³ /hr	141668	140817	48089
Enthalpy	MMkcal/hr	47,417	-47,149	-0244
MassFrac				
PROPA-01		0,055	0,055	0,180
ISOBU-01		0,219	0,218	0,296
N-BUT-01		0,364	0,364	0,389
N-PEN-01		0,362	0,363	0,135
MoleFlow	kmol/hr			
PROPA-01		100000	98121	1879
ISOBU-01		300000	297662	2338
N-BUT-01		500000	496923	3077
N-PEN-01		400000	399136	0864

Como se observa el caudal de líquido obtenido es muy elevado, puesto que la presión esta muy cercana a la presión de burbuja.

Una vez resuelta la primera columna Flash, podemos resolver la segunda columna:



Lo primero que haremos es recalculer las presiones de burbuja y rocío de la segunda columna (al cambiar las condiciones cambia). Procediendo como en la primera columna se obtiene una presión de rocío de 4 bar y una presión de burbuja de 5.98 bar.

Una vez conocido el intervalo de valores de presión, se han probado diferentes opciones, y la que ofrece un mayor beneficio económico es una presión intermedia entre la de burbuja y rocío. Se ha realizado la simulación con una presión de 4.9 bares, para la segunda columna. Los resultados obtenidos son:

Caso 3 primera columna						
Stream ID		FEED1	L1	L2	V1	V2
Temperature	C	40,0	40,0	40,0	40,0	40,0
Pressure	bar	20,000	4,000	4,900	4,000	4,900
Vapor Frac		0,000	0,000	0,000	1,000	1,000
Mole Flow	kmol/hr	1300,000	1291,841	3,762	8,159	4,397
Mass Flow	kg/hr	79768,484	79308,522	220,789	459,962	239,173
Volume Flow	cum/hr	141,668	140,817	0,401	48,089	20,804
Enthalpy	MM kcal/hr	-47,417	-47,149	-0,133	-0,244	-0,128
Mass Frac						
PROPA-01		0,055	0,055	0,097	0,180	0,257
ISOBU-01		0,219	0,218	0,277	0,296	0,312
N-BUT-01		0,364	0,364	0,416	0,389	0,364
N-PEN-01		0,362	0,363	0,209	0,135	0,068
Mole Flow	kmol/hr					
PROPA-01		100,000	98,121	0,488	1,879	1,392
ISOBU-01		300,000	297,662	1,054	2,338	1,284
N-BUT-01		500,000	496,923	1,581	3,077	1,496
N-PEN-01		400,000	399,136	0,639	0,864	0,225

Para la tercera columna calcular las presiones de burbuja y rocío. Procediendo como se ha indicado anteriormente se obtiene una presión de rocío de 4.90 bar y una presión de burbuja de 6.93 bar.

Una vez conocido el intervalo de valores de presión, se han probado diferentes opciones, y la que ofrece un mayor beneficio económico es una presión cercana a la presión de burbuja. Se ha realizado la simulación con una presión de 6.5 bares, para la tercera columna. Los resultados obtenidos son:

Caso 3 primera columna								
StreamID		FEED1	L1	L2	L3	V1	V2	V3
Temperature	C	40,0	40,0	40,0	40,0	40,0	40,0	40,0
Pressure	bar	20,000	4,000	4,900	6,500	4,000	4,900	6,500
Vapor Frac		0,000	0,000	0,000	0,000	1,000	1,000	1,000
Mole Flow	kmol/hr	1300,000	1291,841	3,762	3,532	8,159	4,397	0,864
Mass Flow	kg/hr	79768,484	79308,522	220,789	194,839	459,962	239,173	44,335
Volume Flow	cum/hr	141,668	140,817	0,401	0,365	48,089	20,804	3,002
Enthalpy	MMkcal/hr	-47,417	-47,149	-0,133	-0,120	-0,244	-0,128	-0,024
Mass Frac								
PROPA-01		0,055	0,055	0,097	0,217	0,180	0,257	0,432
ISOBU-01		0,219	0,218	0,277	0,319	0,296	0,312	0,282
N-BUT-01		0,364	0,364	0,416	0,386	0,389	0,364	0,265
N-PEN-01		0,362	0,363	0,209	0,078	0,135	0,068	0,021
Mole Flow	kmol/hr							
PROPA-01		100,000	98,121	0,488	0,958	1,879	1,392	0,434
ISOBU-01		300,000	297,662	1,054	1,069	2,338	1,284	0,215
N-BUT-01		500,000	496,923	1,581	1,294	3,077	1,496	0,202
N-PEN-01		400,000	399,136	0,639	0,211	0,864	0,225	0,013

Con estos resultados se puede calcular el beneficio económico que se obtendría con la venta de las corrientes obtenidas:

Corriente	X>95% (Kmol/h)	X=75-95% (Kmol/h)	X=50-75% (Kmol/h)	X<50% (Kmol/h)	Beneficio (€)
L1	0	0	0	1291,842	1291,842
L2	0	0	0	3,762	3,762
L3	0	0	0	7,237	7,237
V3	0	0	0	4,397	4,397
TOTAL	0	0	0	1307,238	1307,238

DISPOSICIÓN B:

Se procede de la misma forma que para la disposición A, pero cambiando la disposición. Las condiciones utilizadas han sido:

Columna	Presión Burbuja	Presión Rocío	Presión trabajo
1º	4,08	2,88	3
2º	5,98	4	4,2
3º	4,2	2,78	3,8

Los resultados obtenidos son:

Caso 3 primera columna								
Stream ID		FEED1	L1	L2	L3	V1	V2	V3
Temperature	C	40,0	40,0	40,0	40,0	40,0	40,0	40,0
Pressure	bar	20,000	3,000	4,200	3,800	3,000	4,200	3,800
Vapor Frac		0,000	0,000	0,000	0,000	1,000	1,000	1,000
Mole Flow	kmol/hr	1300,000	463,356	659,375	484,764	83 6,644	177,269	174,611
Mass Flow	kg/hr	79768,484	29939,497	39862,450	29830,565	49828,986	9966,537	10031,886
Volume Flow	cum/hr	141,668	51,896	71,328	52,917	6697,067	990,198	1085,382
Enthalpy	MMkcal/hr	-47,417	-17,510	-23,829	-17,731	-25,859	-5,293	-5,289
Mole Flow	kmol/hr							
PROPA-01		100,000	11,791	49,879	23,279	88,209	38,331	26,600
ISOBU-01		300,000	76,366	169,302	115,148	223,634	54,332	54,154
N-BUT-01		500,000	148,989	280,717	205,113	351,011	70,294	75,603
N-PEN-01		400,000	226,211	159,478	141,224	173,789	14,311	18,254
Mole Frac								
PROPA-01		0,077	0,025	0,076	0,048	0,105	0,216	0,152
ISOBU-01		0,231	0,165	0,257	0,238	0,267	0,306	0,310
N-BUT-01		0,385	0,322	0,426	0,423	0,420	0,397	0,433
N-PEN-01		0,308	0,488	0,242	0,291	0,208	0,081	0,105

Con estos resultados se puede calcular el beneficio económico que se obtendría con la venta de las corrientes obtenidas:

Corriente	X>95% (Kmol/h)	X=75-95% (Kmol/h)	X=50-75% (Kmol/h)	X<50% (Kmol/h)	Beneficio (€)
L1	0	0	0	463,256	463,256
L3	0	0	0	484,764	484,764
V2	0	0	0	177,268	177,268
V3	0	0	0	174,611	174,611
TOTAL	0	0	0	1299,899	1299,899

DISPOSICIÓN C

Se procede de la misma forma que para el resto de disposiciones, pero cambiando la colocación de los flashes. Las condiciones utilizadas han sido:

Columna	Presión Burbuja	Presión Rocío	Presión trabajo
1º	4,08	2,88	4
2º	4	2,49	3

3°	4,56	3	3,03
----	------	---	------

Los resultados obtenidos son:

Caso 3 primera columna								
StreamID		FEED1	L1	L2	L3	V1	V2	V3
Temperature	C	40,0	40,0	40,0	40,0	40,0	40,0	40,0
Pressure	bar	20,000	4,000	3,000	3,030	4,000	3,000	3,030
Vapor Frac		0,000	0,000	0,000	0,000	1,000	1,000	1,000
Mole Flow	kmol/hr	1300,000	1291,841	467,809	14,802	8,159	824,032	809,231
Mass Flow	kg/hr	79768,484	79308,522	30224,859	954,535	459,962	49083,662	48129,127
Volume Flow	cum/hr	141,668	140,817	52,392	1,656	48,089	6595,992	6409,351
Enthalpy	MMkcal/hr	-47,417	-47,149	-17,677	-0,559	-0,244	-25,472	-24,993
Mole Flow	kmol/hr							
PROPA-01		100,000	98,121	11,825	0,384	1,879	86,296	85,912
ISOBU-01		300,000	297,662	77,178	2,482	2,338	220,484	218,002
N-BUT-01		500,000	496,923	150,668	4,837	3,077	346,255	341,419
N-PEN-01		400,000	399,136	228,139	7,100	0,864	170,997	163,898
Mole Frac								
PROPA-01		0,077	0,076	0,025	0,026	0,230	0,105	0,106
ISOBU-01		0,231	0,230	0,165	0,168	0,287	0,268	0,269
N-BUT-01		0,385	0,385	0,322	0,327	0,377	0,420	0,422
N-PEN-01		0,308	0,309	0,488	0,480	0,106	0,208	0,203

Con estos resultados se puede calcular el beneficio económico que se obtendría con la venta de las corrientes obtenidas:

Corriente	X>95% (Kmol/h)	X=75-95% (Kmol/h)	X=50-75% (Kmol/h)	X<50% (Kmol/h)	Beneficio (€)
L2	0	0	0	467,81	467,81
L3	0	0	0	14,803	14,803
V1	0	0	0	8,158	8,158
V3	0	0	0	809,231	809,231
TOTAL	0	0	0	1300,002	1300,002

CONCLUSIÓN

De las tres disposiciones, la que ofrece un mayor rendimiento es la disposición a, con un beneficio de 1307 €. Aún así, la diferencia entre las distintas disposiciones no es muy acusada. Donde si se han apreciado diferencias, ha sido en las presiones de trabajo utilizada por cada una de las columnas flash. También se ha observado que no se obtienen ninguna corriente con pureza superior al 50 %. Esto es debido a que, el separador flash no permite eficiencias de separación altas, al tratarse de una sola etapa de equilibrio. Se podría haber considerado la opción de colocar los tres Flash en serie, simulando tres etapas de equilibrio, y con la obtención de una corriente vapor y una corriente líquida. Con esta disposición, la pureza de las corrientes obtenidas hubiera sido mayor. ¿?¿?¿?

Caso 4

OBJETIVO

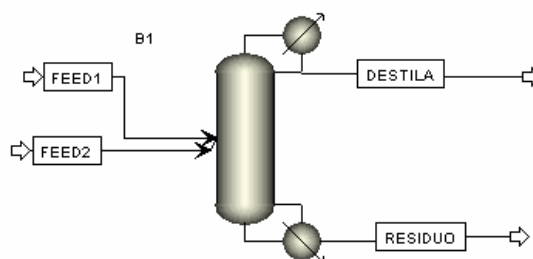
El objetivo es la simulación de una desetanizadora con un número de etapas de separación de 50, que opera a una presión de cabeza de 390 psi y una presión de fondo de 396 psi. A la desetanizadora se alimentan dos corrientes una en el piso 15 y piso 26, con las siguientes composiciones:

ID	Compuesto	Corr. 1	Corr. 2
C2 =	ethylene	0.775	0.430
C2	ethane	0.155	0.165
C3 =	propadiene	0.005	0.015
C3=	propylene	0.065	0.280
C3	propane		0.010
13C4=	1,3-butadiene		0.045
iC4 =	isobutylene		0.025
nC4 =	1-butene		0.015
nC5 =	1-pentene		0.015
-	Caudal	96500 lb/h	113000 lb/h
-	Presión	400 psi	400 psi
-	Temperatura	18°F	74°F

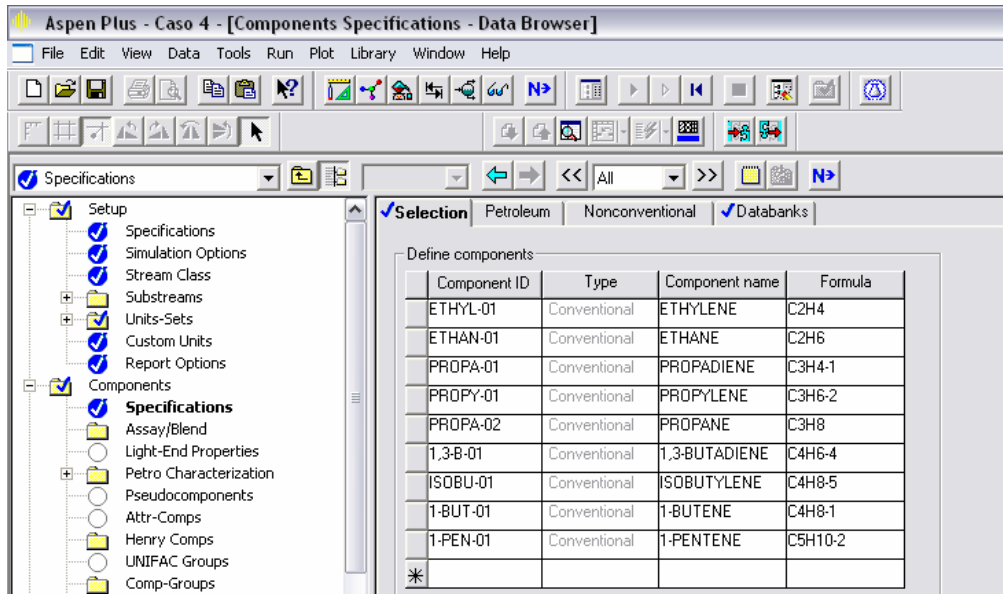
Se desea conocer la cantidad de calor retirado en el condensador, el caudal de calor aportado en el calderín y las condiciones de operación necesarias para obtener una concentración de popileno por cabeza de 200 ppm y una concentración de etilino de 80 ppm por fondo.

PROCEDIMIENTO:

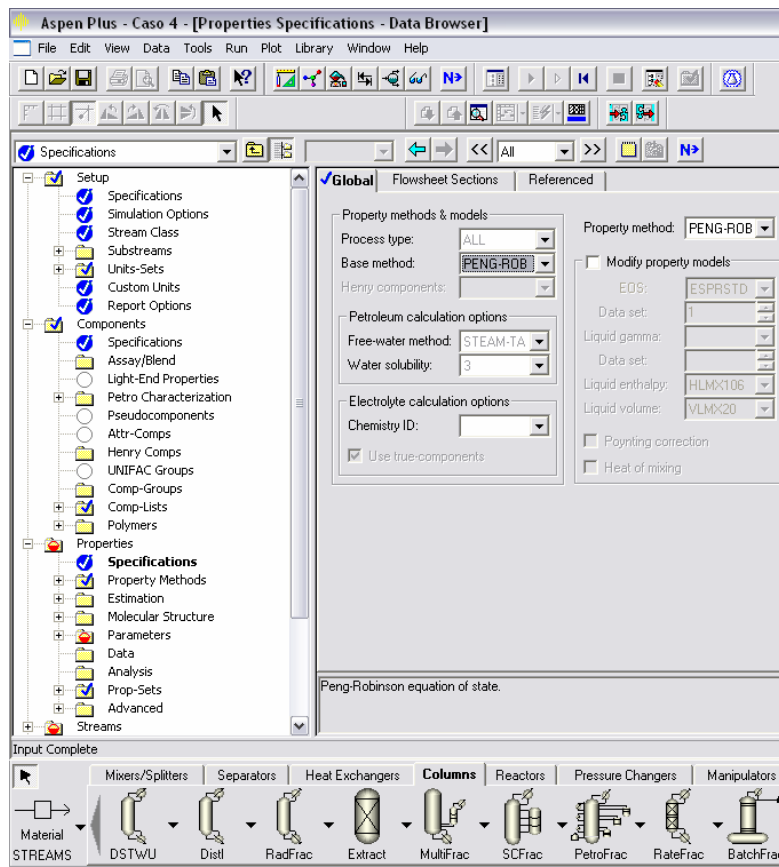
En primer lugar se coloca una columna RadFrac y 4 corrientes materiales (2 alimentaciones y dos corrientes de salida).



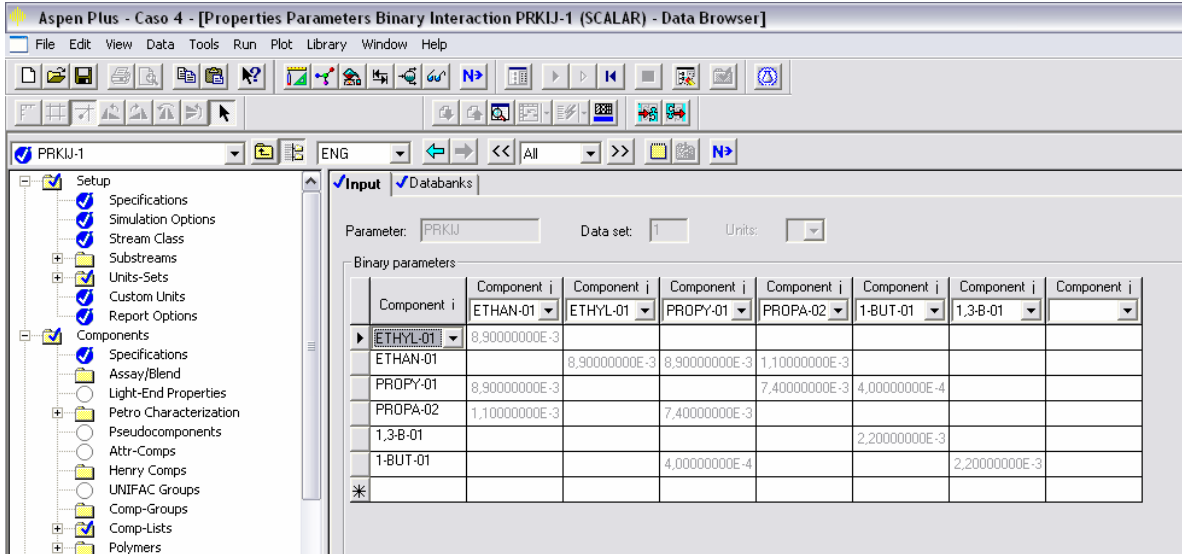
Posteriormente se seleccionan los compuestos que intervienen en la simulación:



Posteriormente se indica el modelo termodinámico a utilizar (PENG-ROBINSON).



Posteriormente el programa nos indica los parámetros binarios de interacción:

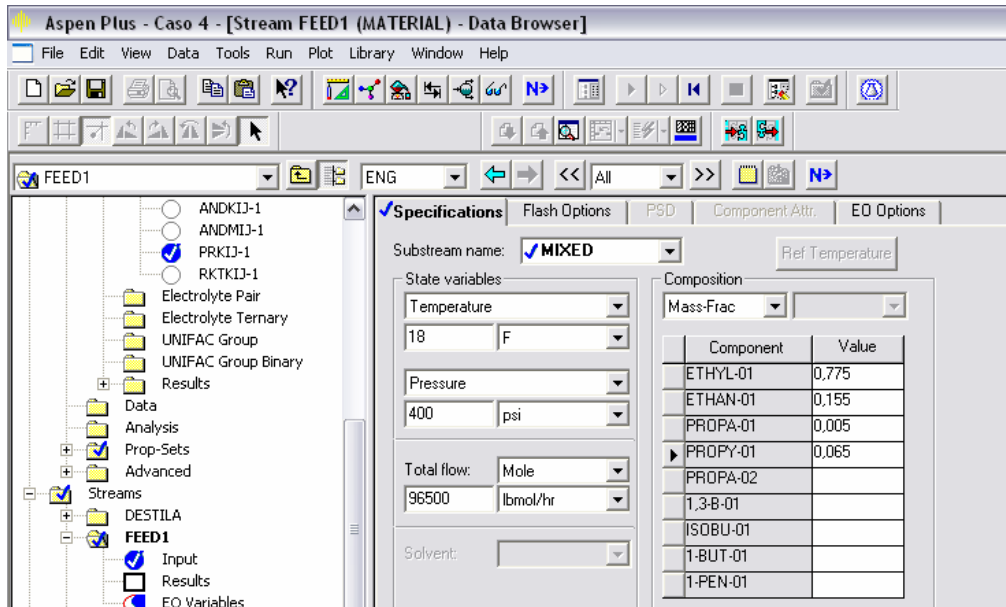


Aspen Plus - Caso 4 - [Properties Parameters Binary Interaction PRKJ-1 (SCALAR) - Data Browser]

Parameter: PRKJ Data set: 1 Units: []

Component i	Component j	Component i	Component j	Component i	Component j	Component i	Component j
ETHAN-01	ETHYL-01	PROPY-01	PROPA-02	1-BUT-01	1,3-B-01		
ETHYL-01	8,90000000E-3						
ETHAN-01		8,90000000E-3	8,90000000E-3	1,10000000E-3			
PROPY-01	8,90000000E-3		7,40000000E-3	4,00000000E-4			
PROPA-02	1,10000000E-3		7,40000000E-3				
1,3-B-01				2,20000000E-3			
1-BUT-01		4,00000000E-4			2,20000000E-3		
*							

Posterior se indica las condiciones y composiciones de las corrientes 1 y 2:



Aspen Plus - Caso 4 - [Stream FEED1 (MATERIAL) - Data Browser]

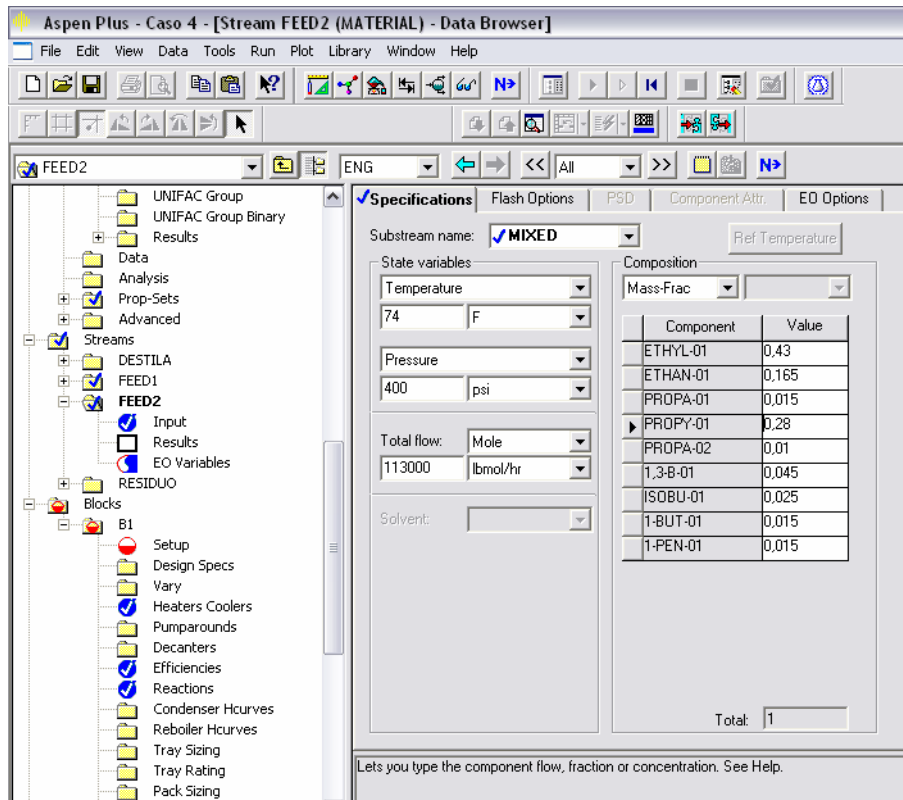
Substream name: MIXED Ref Temperature

State variables:

- Temperature: 18 F
- Pressure: 400 psi
- Total flow: 96500 Mole lbmol/hr
- Solvent: []

Composition:

Component	Value
ETHYL-01	0,775
ETHAN-01	0,155
PROPA-01	0,005
PROPY-01	0,065
PROPA-02	
1,3-B-01	
ISOBU-01	
1-BUT-01	
1-PEN-01	



Aspen Plus - Caso 4 - [Stream FEED2 (MATERIAL) - Data Browser]

Substream name: **MIXED**

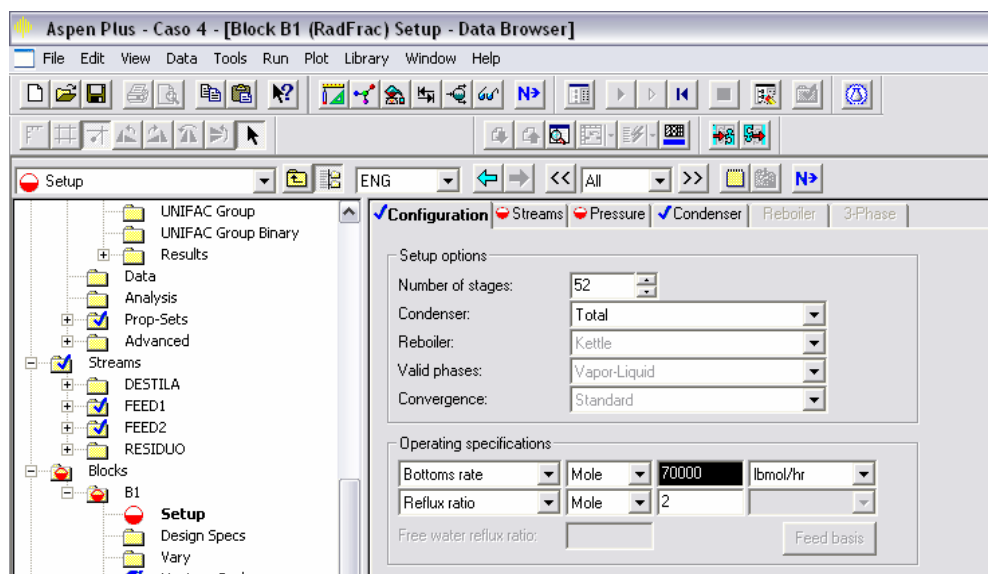
State variables:
 Temperature: 74 F
 Pressure: 400 psi
 Total flow: 113000 lbmol/hr

Composition (Mass-Frac):

Component	Value
ETHYL-01	0,43
ETHAN-01	0,165
PROPA-01	0,015
PROPY-01	0,28
PROPA-02	0,01
1,3-B-01	0,045
ISOBU-01	0,025
1-BUT-01	0,015
1-PEN-01	0,015
Total:	1

Posteriormente se indican las condiciones de la columna:

- n° de pisos=50+2=52, ya que hay que sumar el condensador y el calderín
- tipo de condensador: Total
- Condiciones iniciales de reflujo=2
- Caudal inicial de fondo=70000lb/h



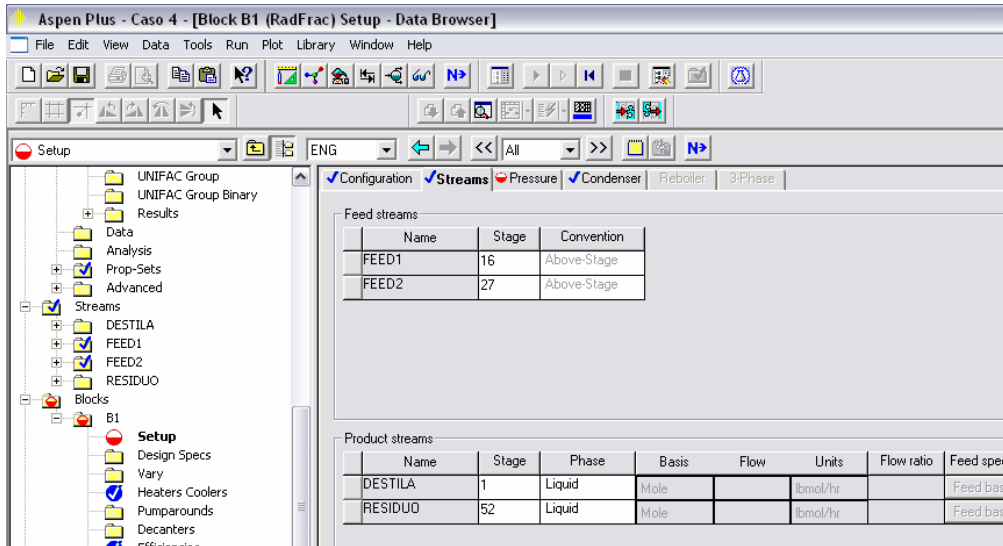
Aspen Plus - Caso 4 - [Block B1 (RadFrac) Setup - Data Browser]

Configuration: Configuration Streams Pressure Condenser Reboiler 3-Phase

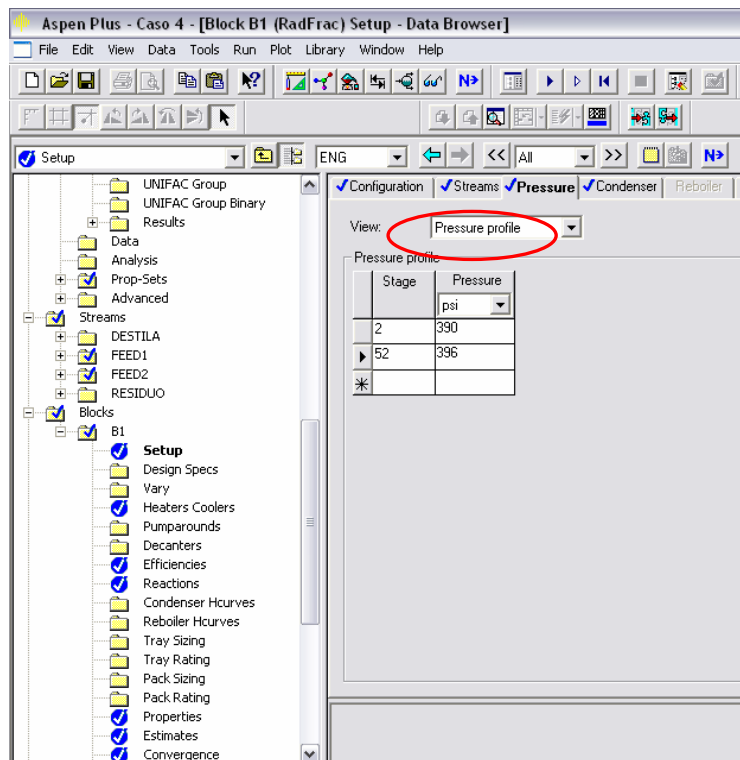
Setup options:
 Number of stages: 52
 Condenser: Total
 Reboiler: Kettle
 Valid phases: Vapor-Liquid
 Convergence: Standard

Operating specifications:
 Bottoms rate: 70000 lbmol/hr
 Reflux ratio: 2

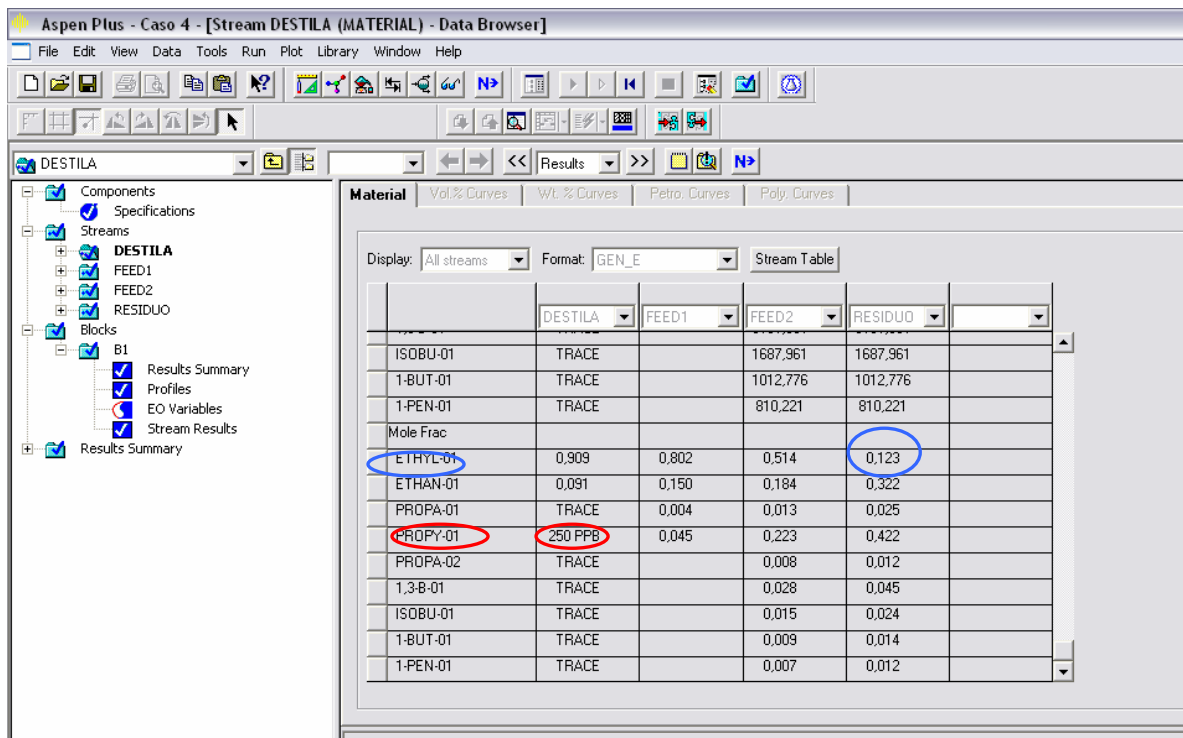
También se indican los platos de alimentación de las corrientes, en la pestaña Stream (del apartado Set Up del Bloque 1). Se considera para la corriente 1, que se alimenta en el piso 17 (plato 16 + 1 por el condensador) y la corriente 2 en el piso 27 (plato 26+1 por el condensador):



Posteriormente en la pestaña Pressure (del apartado Set Up del Bloque 1) se indica la presión de cabeza (piso 2, pues el piso 1 es el condensador) y la presión de fondo, piso 52).



Los resultados obtenidos son:



Aspen Plus - Caso 4 - [Stream DESTILA (MATERIAL) - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

DESTILA

Material

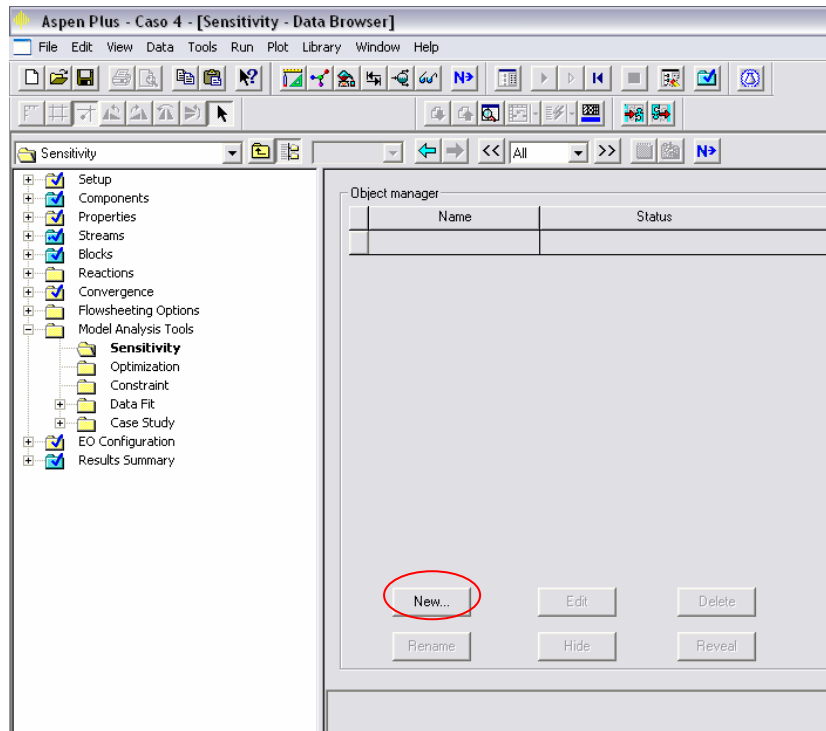
Display: All streams Format: GEN_E Stream Table

	DESTILA	FEED1	FEED2	RESIDUO	
ISOBU-01	TRACE		1687,961	1687,961	
1-BUT-01	TRACE		1012,776	1012,776	
1-PEN-01	TRACE		810,221	810,221	
Mole Frac					
ETHYL-01	0,909	0,802	0,514	0,123	
ETHAN-01	0,091	0,150	0,184	0,322	
PROPA-01	TRACE	0,004	0,013	0,025	
PROPY-01	250 PPB	0,045	0,223	0,422	
PROPA-02	TRACE		0,008	0,012	
1,3-B-01	TRACE		0,028	0,045	
ISOBU-01	TRACE		0,015	0,024	
1-BUT-01	TRACE		0,009	0,014	
1-PEN-01	TRACE		0,007	0,012	

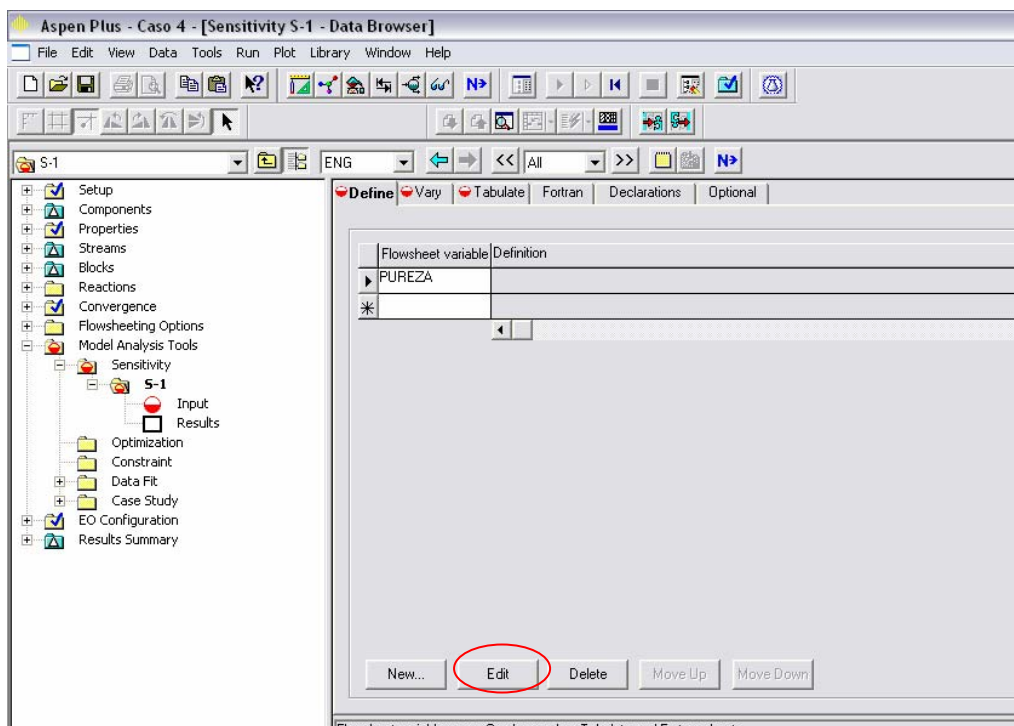
Como observamos la especificación de propileno en la corriente de cabeza se cumple (la concentración es incluso inferior a la indicada), pero no se consigue la especificación de etileno que se deseaba. Para conseguirlo se puede utilizar un análisis de sensibilidad o una especificación de diseño.

ANÁLISIS DE SENSIBILIDAD

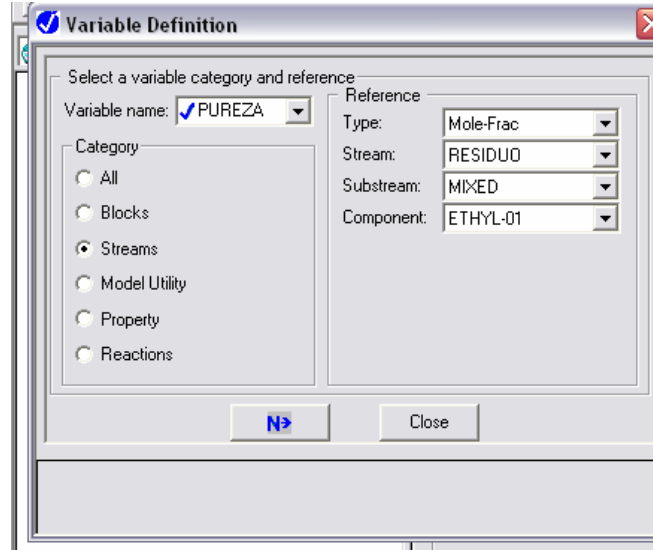
Para realizar un análisis de sensibilidad nos colocamos en Models Analysis tools → Sensitivity. Y pinchamos en New.



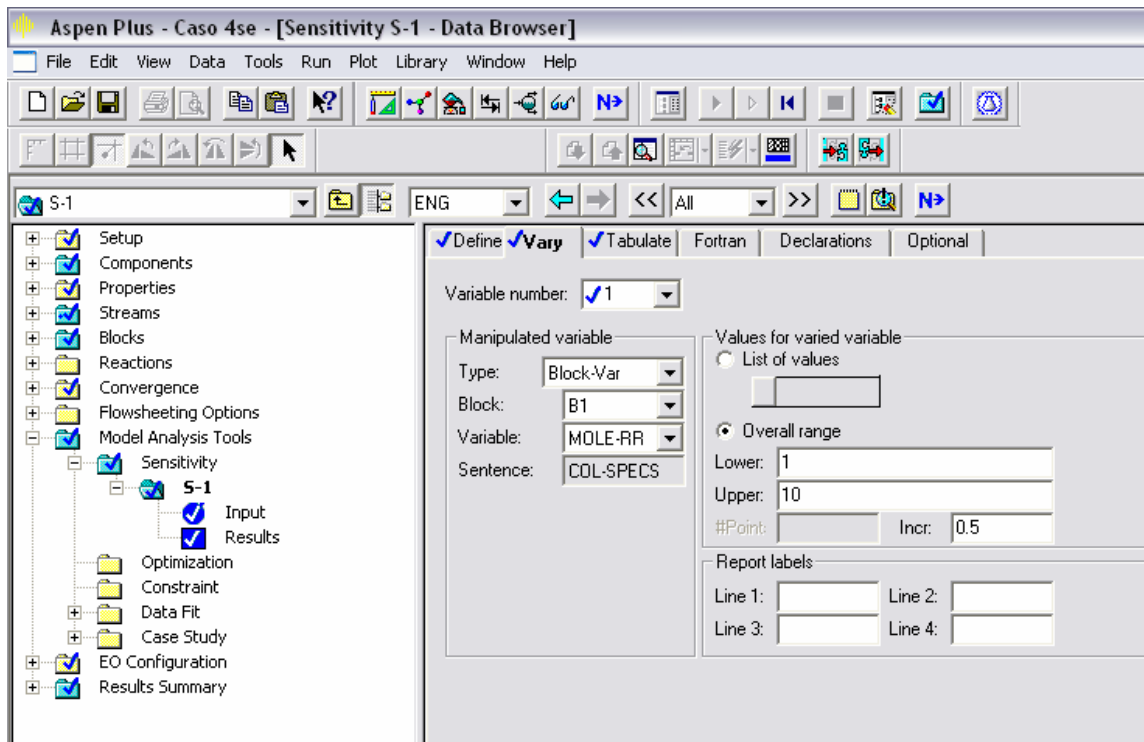
Luego en la pestaña de Define, indicamos la variable que vamos a estudiar en nuestro análisis de sensibilidad (en este caso la pureza), y pulsamos el botón Edit.



Entonces indicamos que la variable es de corriente (la pureza a definir es de una corriente), y es del tipo fracción másica de etileno en la corriente de fondo.



Posteriormente en la pestaña Vary se indica la variable a variar para conseguir la pureza. En este caso consideraremos la variable Vary la relación de reflujo. Consideramos un intervalo de 1 a 10, con un intervalo de 0.5.



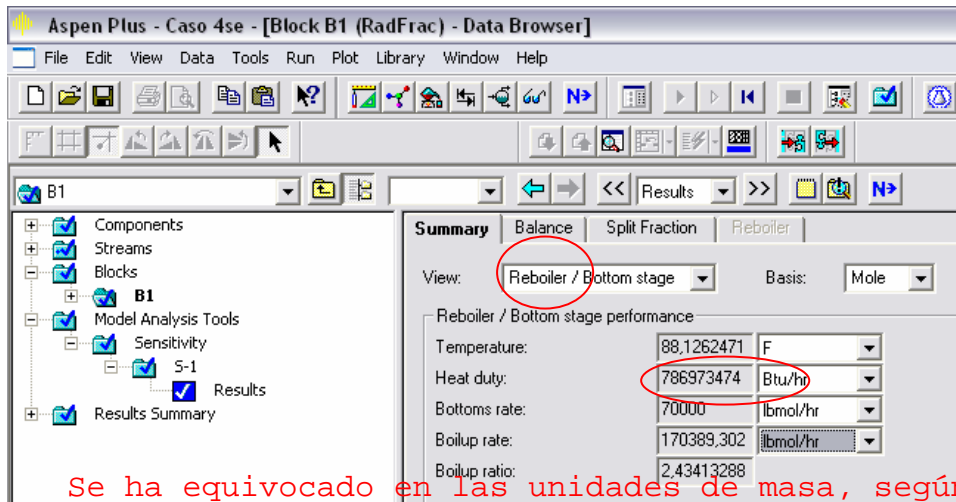
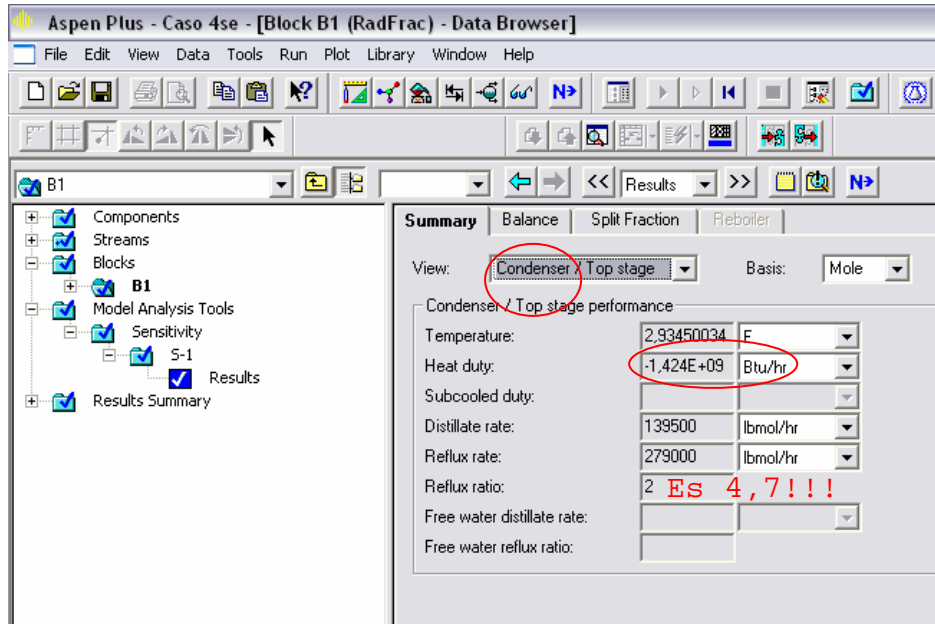
Relación de reflujo	Fracción molar etileno residuo
1	0,2367139
1,5	0,17765533
2	0,12339112
2,5	0,07543337
3	0,03684682
3,5	0,01104694
4	0,00237562
4,5	0,00094278
5	0,00052388
5,5	0,00034133
6	0,00024412
6,5	0,00018569
7	0,00014755
7,5	0,00012113
8	0,00010197
8,5	8,76E-05
9	7,65E-05
9,5	6,76E-05
10	6,05E-05

Como podemos observar, para obtener el valor deseado (0.0008) la relación de reflujo debe encontrarse entre 4.5 y 5. Para ver el valor más exacto podemos realizar otro análisis de sensibilidad considerando un intervalo de relación de reflujo de 4.5 a 5 con un intervalo de 0.1.

Relación de reflujo	Fracción molar etileno residuo
4,5	0,00094319
4,6	0,00082374
4,7	0,00072657
4,8	0,0006467
4,9	0,00058015
5	0,00052406

El valor de relación de reflujo es de aproximadamente 4.7.

Las caudales de calor del condensador y el calderín son:

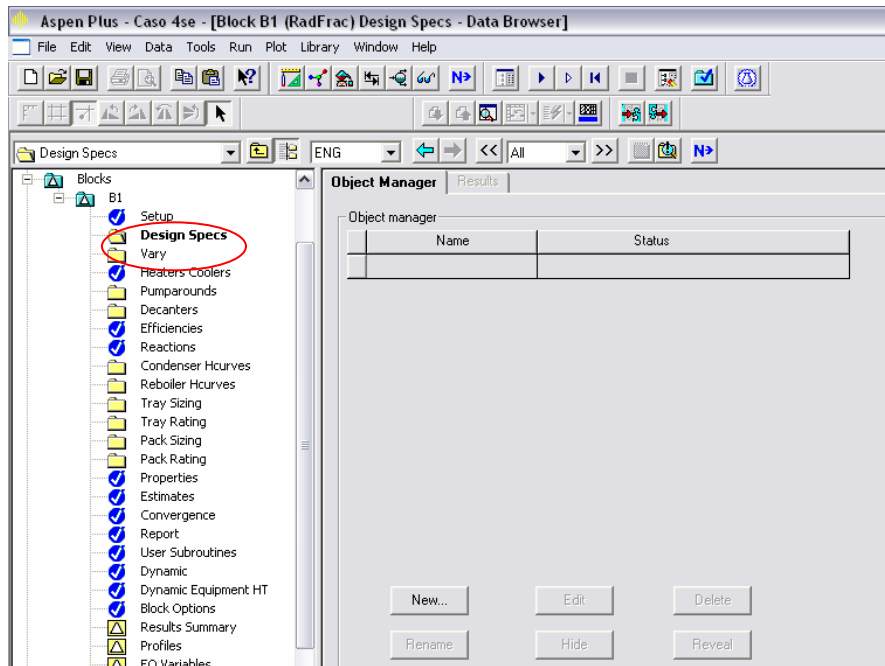


Se ha equivocado en las unidades de masa, según el enunciado son lb/h no lbmol/h. Luego al determinar las condiciones debe fijar el valor de RR=4,7 y volver a simular puesto que el análisis de sensibilidad le indica eso pero la simulación original no ha cambiado, lo tiene que cambiar. Hacer prueba

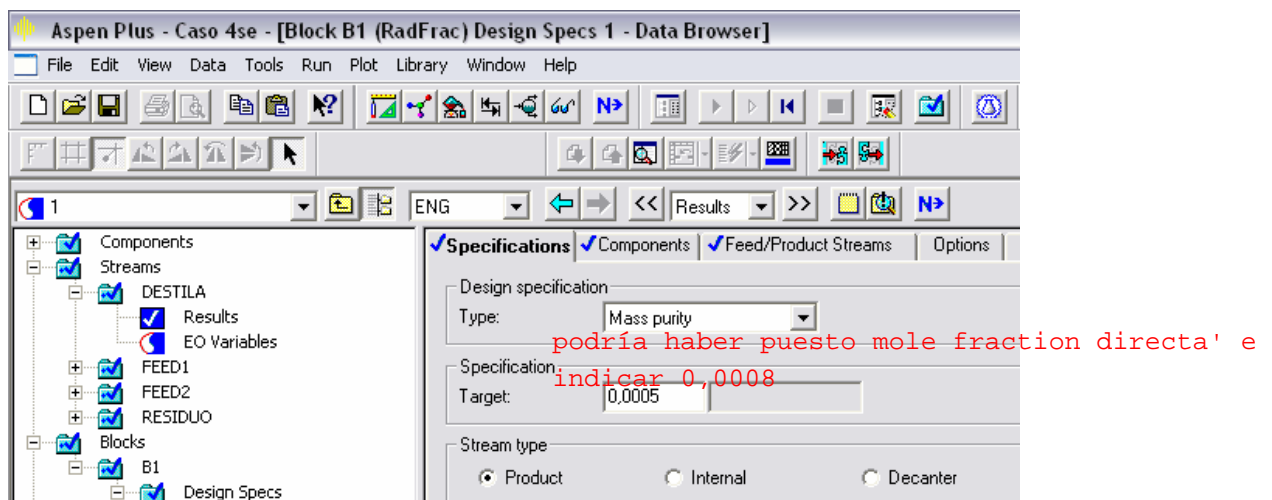
Las condiciones de operación son: Caudal de fondo 70000lb/h y relación de reflujo 4.7.

ESPECIFICACIÓN DE DISEÑO

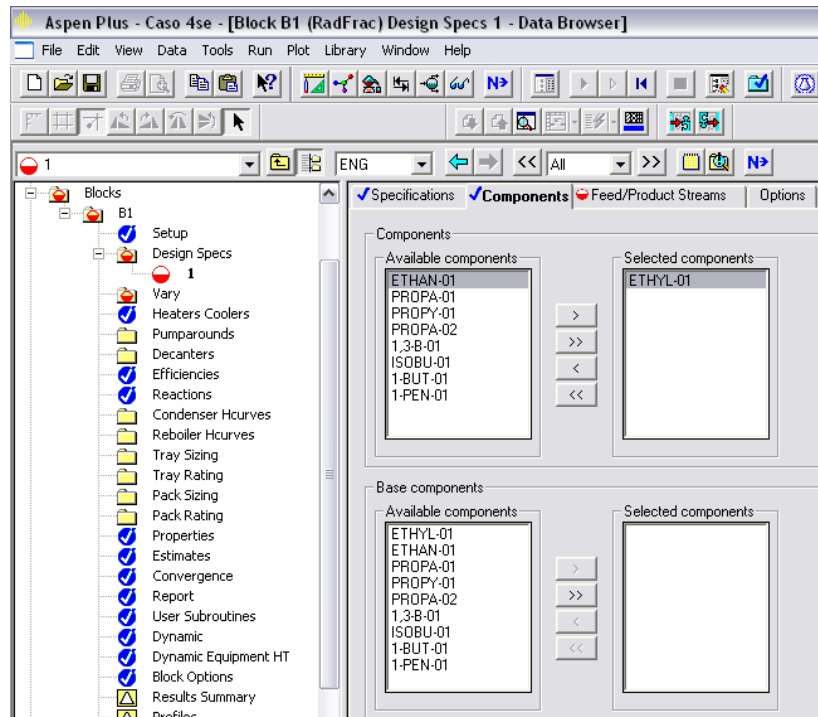
Para hacer la especificación de diseño vamos a la carpeta del bloque y seleccionamos Design Sepcs



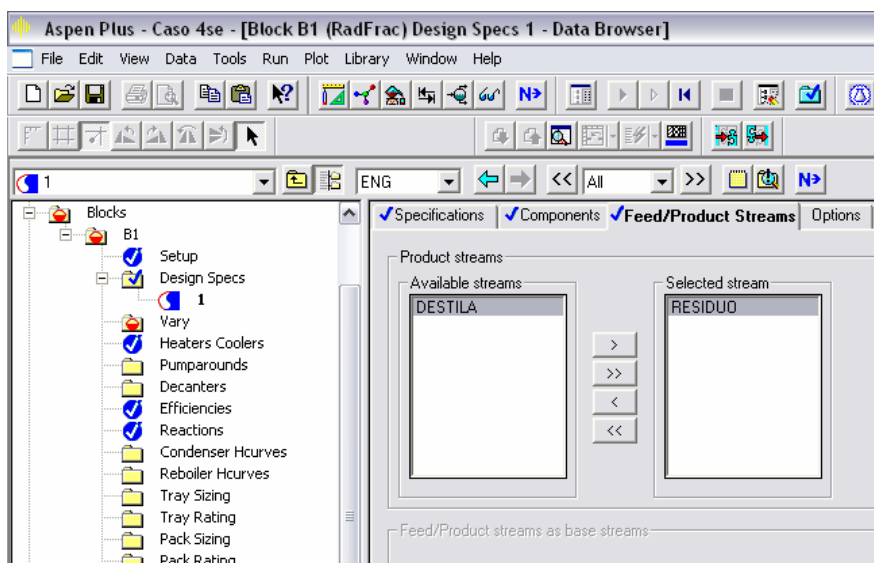
Luego damos a New y en la pestaña a specifications, indicamos que la especificación es del tipo pureza (en masa) y que el valor a tomar es 0.0005 (para que la fracción molar sea 0.0008), en un producto.



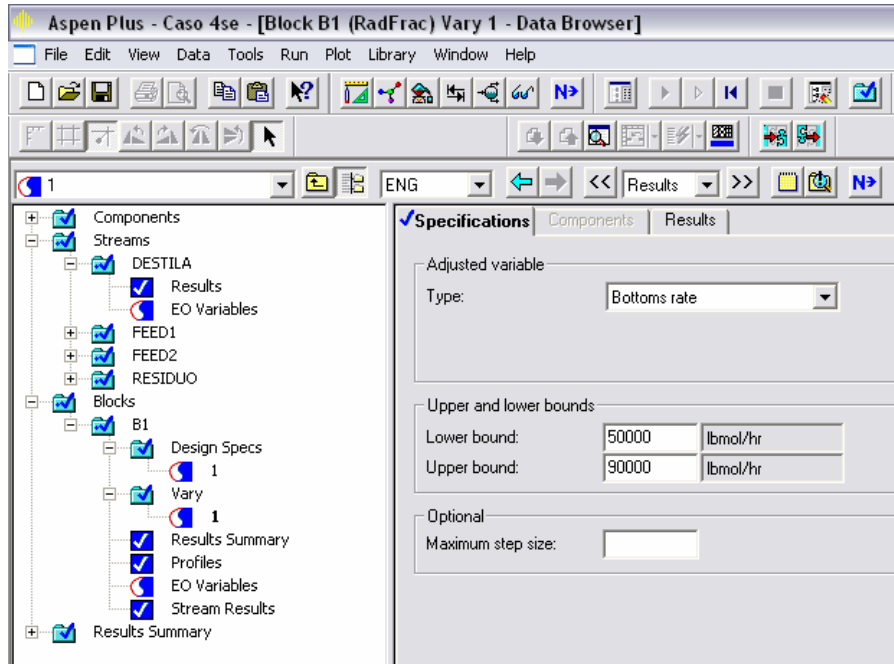
Posteriormente en la pestaña componentes indicamos el componente al que se refiere la especificación (etileno).



En la pestaña de Feed/Product Stream indicamos la corriente a la que se refiere la especificación.



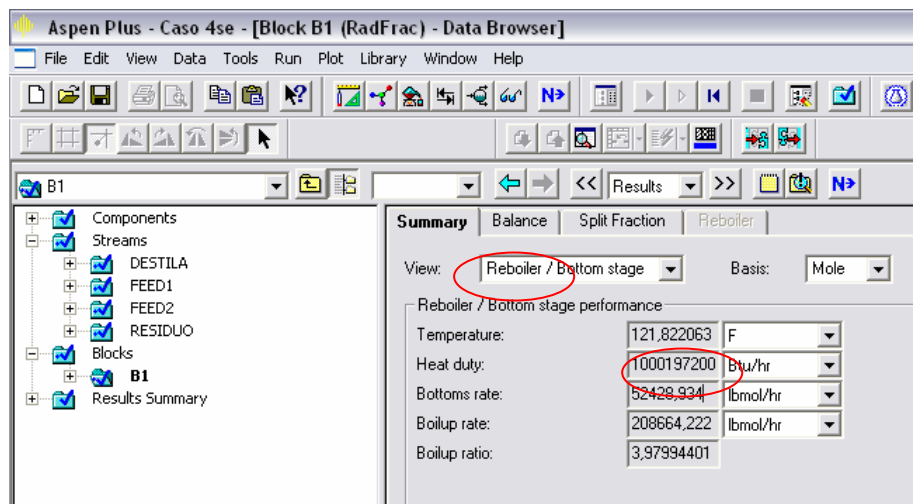
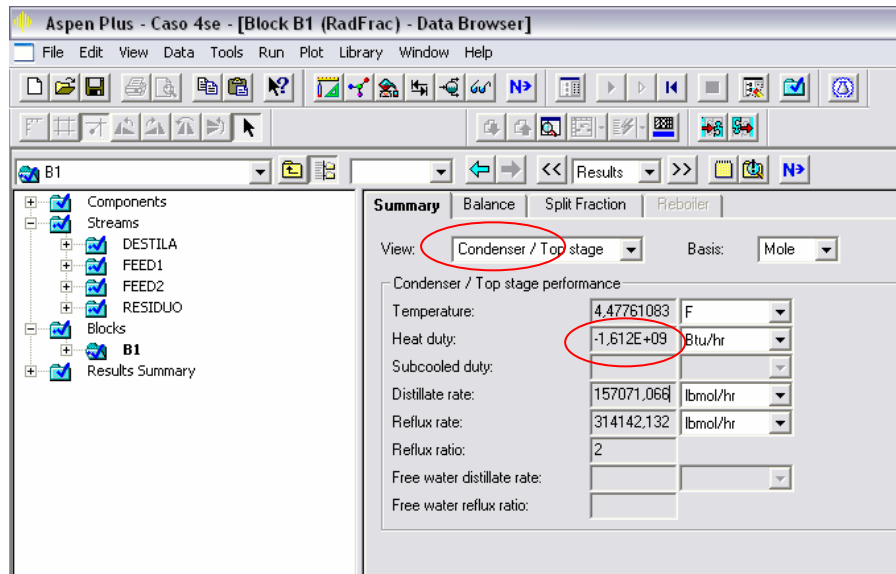
Luego en Vary indicamos la variable que vamos a permitir variar. Podríamos considerar la relación de reflujo de nuevo, pero en este caso vamos a probar a variar el caudal de la corriente de residuo. Suponemos un intervalo entre 50000 lb/h y 90000lb/h.



Los resultados obtenidos se muestran en la tabla siguiente. Las condiciones de operación de la columna son: relación de refujo =2 y caudal de fondo = 52428,933 lb/h.

Caso 4					
Stream ID		DESTILA	FEED1	FEED2	RESIDUO
Temperature	F	4,5	18,0	74,0	121,8
Pressure	psi	390,00	400,00	400,00	396,00
Vapor Frac		0,000	0,827	0,757	0,000
Mole Flow	lbmol/hr	157071,066	96500,000	113000,000	52428,934
Mass Flow	lb/hr	4,45010E+6	2,80119E+6	3,78829E+6	2,13938E+6
Volume Flow	cuft/hr	174185,637	696318,587	903129,893	77080,830
Enthalpy	MMBtu/hr	1480,465	1080,846	739,226	-272,034
Mole Flow	lbmol/hr				
ETHYL-01		135411,992	77384,274	58065,848	38,130
ETHAN-01		21659,013	14439,281	20787,349	13567,617
PROPA-01		< 0,001	349,582	1418,313	1767,895
PROPY-01		0,061	4326,863	25206,880	29533,681
PROPA-02		trace		859,091	859,091
1,3-B-01		trace		3151,561	3151,561
ISOBU-01		trace		1687,961	1687,961
1-BUT-01		trace		1012,776	1012,776
1-PEN-01		trace		810,221	810,221
Mole Frac					
ETHYL-01		0,862	0,802	0,514	727 PPM
ETHAN-01		0,138	0,150	0,184	0,259
PROPA-01		trace	0,004	0,013	0,034
PROPY-01		389 PPB	0,045	0,223	0,563
PROPA-02		trace		0,008	0,016
1,3-B-01		trace		0,028	0,060
ISOBU-01		trace		0,015	0,032
1-BUT-01		trace		0,009	0,019
1-PEN-01		trace		0,007	0,015

Los caudales de calor que se necesitan en este caso son:



CONCLUSIONES

Se han simulado dos posibles condiciones en las que se consiguen las especificaciones indicadas. De ambos casos el que menos energía consume es el caso en el que las condiciones de operación son:

Relación de reflujo=2

Caudal de fondo = 52428,933 lb/h.

Calor aportado calderín= 1000197200 Btu/h

Calor retirado en el condensador = $1,612 \cdot 10^9$ Btu/h

Caso 5

OBJETIVO

El objetivo es la separación de una mezcla de cuatro hidrocarburos en sus componentes individuales con una pureza superior al 98%. La corriente de alimentación se alimenta a 40°C 20 bar, y su composición es:

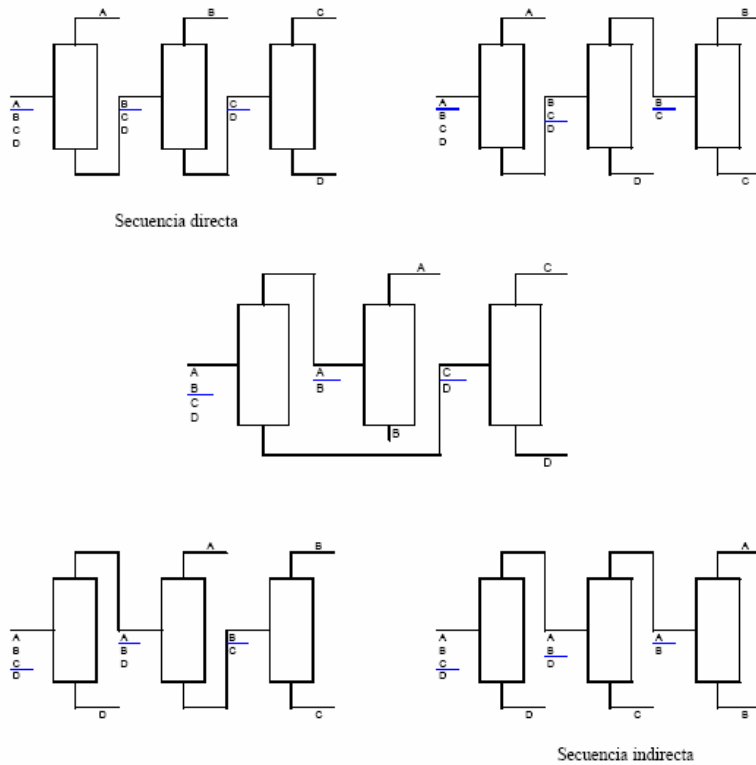
Propano:	100 Kmol/h
i-butano:	300 kmol/h
n-butano:	500 Kmol/h
i-pentano:	400 Kmol/h

Para la separación se dispone de 3 columnas diseñadas para trabajar entre 1-20 bares y la relación de reflujo máxima 10.

- a°) Justificar el esquema de separación más adecuado.
- b°) Determinar con modelos de destilación shortcut el mínimo número de pisos necesarios para realizar la separación de cada columna.
- c°) Determinar las condiciones de operación en cada columna de forma que se cumpla que cada una de las cuatro corrientes de productos tengan una pureza mínima del 98%.
- d°) Optimizar las condiciones de operación del sistema para minimizar el consumo energético de las columnas

PROCEDIMIENTO A:

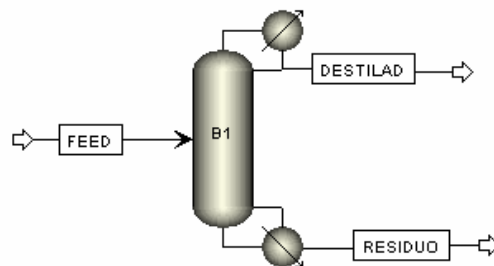
De todas las secuencias posibles:



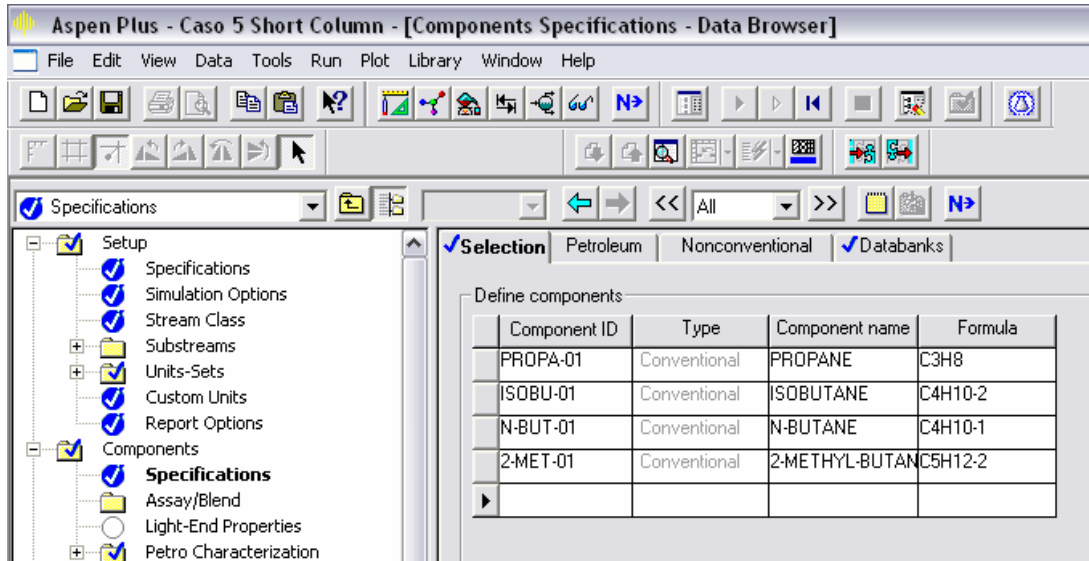
Se ha seleccionado la secuencia directa, por ser la más sencilla y permitir la separación de los productos finales uno a uno en el destilado. Además no existe ningún componente inestable o corrosivo, que haga necesario la separación de este componente en primer lugar.

PROCEDIMIENTO B:

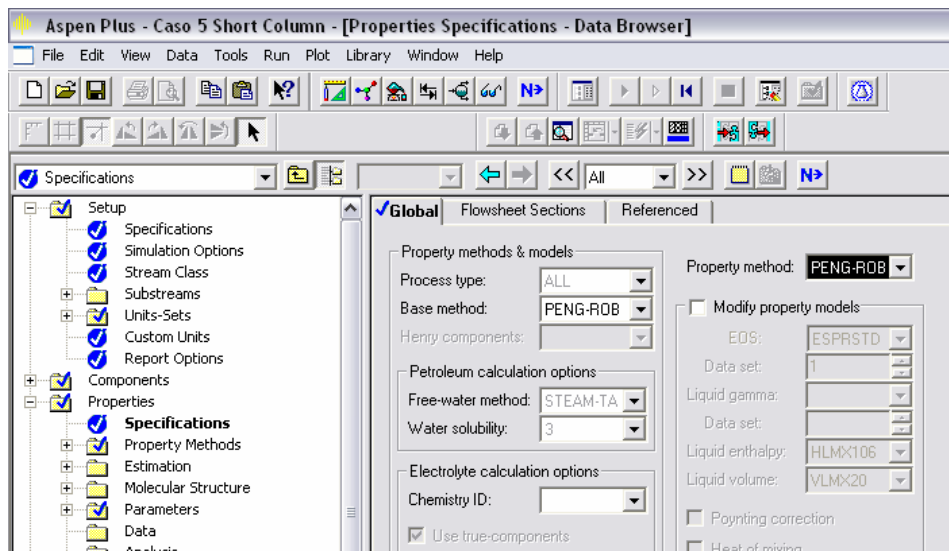
En primer lugar colocamos la Shortcut (DSTWU) y tres corrientes materiales (alimentación y dos salidas).



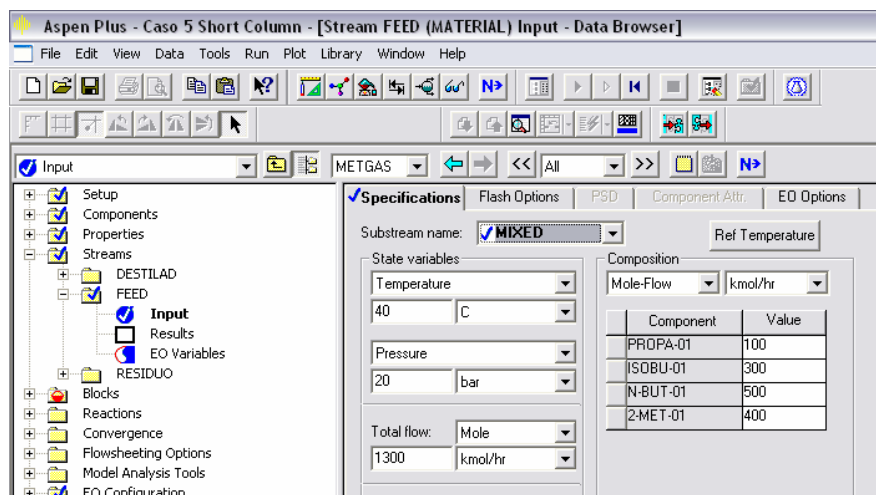
Posteriormente indicamos los componentes que intervienen en la simulación:



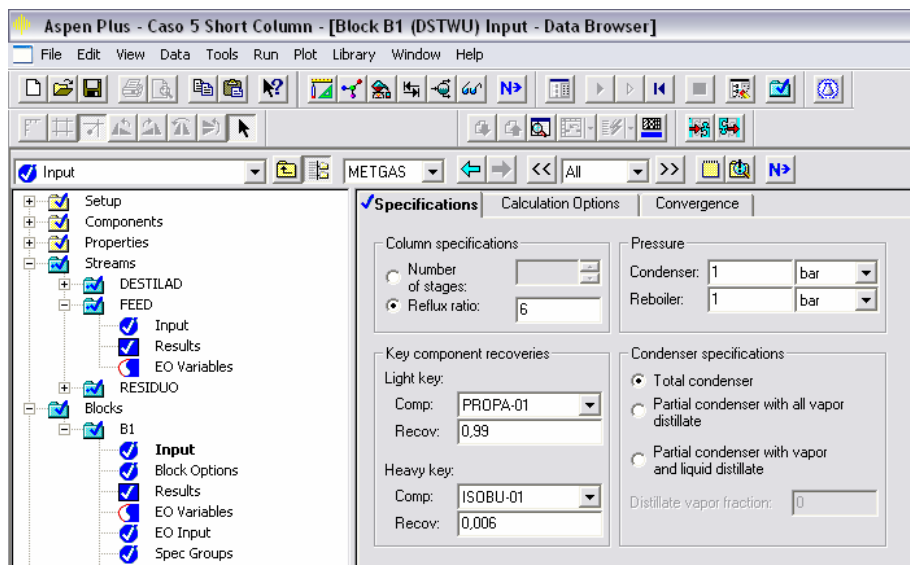
Luego indicamos el método de cálculo Peng-Robinson.



Posteriormente se indican las condiciones de la corriente de alimentación:

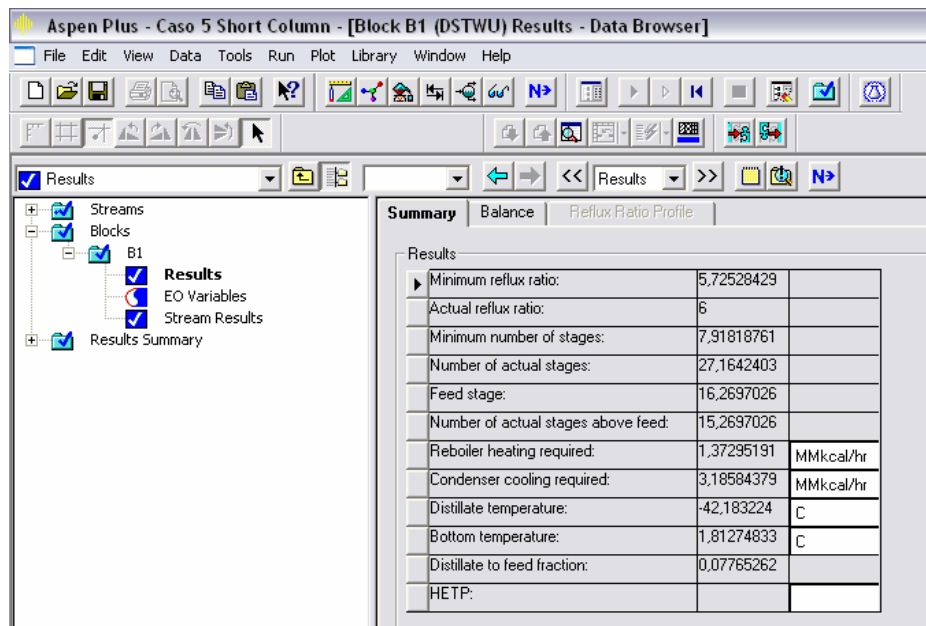


Después se indican las condiciones de la Shortcut. Pondremos una relación de reflujo de 6 (inferior al máximo, pero elevada para asegurarnos que puede cumplirse la especificación del 98 % de pureza). Luego se fija una recuperación del componente clave ligero (propano) del 0.99 (la adecuada para que la pureza sea superior al 98 %) y del clave pesado (i-butano) se fija una recuperación, por el destilado, baja (en este caso se ha considerado un 0.006). La presión del condensador y destilado se han considerado iguales (no hay pérdidas de rozamiento) y de valor 1 bar (a menor presión mejor es la separación). ¿Por qué 1 bar??



Los resultados obtenidos son los siguientes:

Caso 5 ShortCut				
Stream ID		DESTILAD	FEED	RESIDUO
Temperature	C	-42,2	40,0	1,8
Pressure	bar	1,000	20,000	1,000
Vapor Frac		0,000	0,000	0,000
Mass Flow	tonne/hr	4,479	79,768	75,290
Volume Flow	cum/hr	7,659	142,059	123,381
Enthalpy	MMkcal/hr	-3,103	-47,969	-46,679
Density	kg/cum	584,789	561,517	610,222
Mole Flow	MMscmh			
PROPA-01		0,002	0,002	< 0,001
ISOBU-01		< 0,001	0,007	0,007
N-BUT-01		trace	0,011	0,011
2-MET-01			0,009	0,009
Mole Frac				
PROPA-01		0,981	0,077	834 PPM
ISOBU-01		0,018	0,231	0,249
N-BUT-01		0,001	0,385	0,417
2-MET-01			0,308	0,334
*** VAPOR PHASE ***				
Mole Flow				
Volume Flow				
Compressibility				
HeatCapRatio				



Aspen Plus - Caso 5 Short Column - [Block B1 (DSTWU) Results - Data Browser]

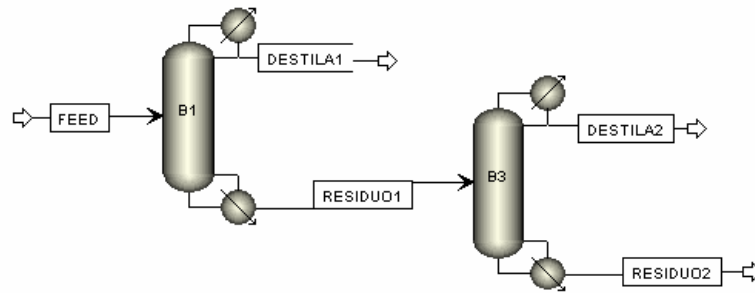
File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

Results Summary

Summary		Balance	Reflux Ratio Profile
Results			
Minimum reflux ratio:	5,72528429		
Actual reflux ratio:	6		
Minimum number of stages:	7,91818761		
Number of actual stages:	27,1642403		
Feed stage:	16,2697026		
Number of actual stages above feed:	15,2697026		
Reboiler heating required:	1,37295191	MMkcal/hr	
Condenser cooling required:	3,18584379	MMkcal/hr	
Distillate temperature:	-42,183224	C	
Bottom temperature:	1,81274833	C	
Distillate to feed fraction:	0,07765262		
HETP:			

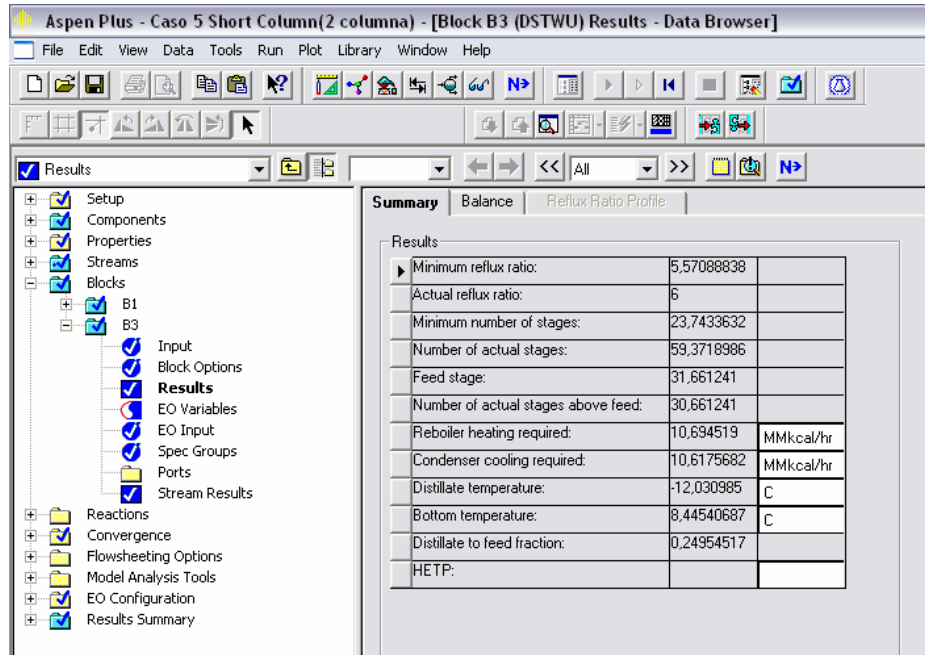
Como se observa el m ínimo número de pisos necesarios para la separación, en esta primera columna es de 8 pisos.

Para seguir simulando la secuencia se coloca otra Shortcut (DSTWU) conectada a la corriente de residuo obtenida.



Luego hay que considerar las condiciones de esta segunda columna. Se ha considerado una relación de reflujo de 6 (inferior al máximo, pero elevada para asegurarnos que puede cumplirse la especificación del 98 % de pureza). Luego se fija una recuperación del componente clave ligero (i-butano) del 0.99 (la adecuada para que la pureza sea superior al 98 %) y del componente clave pesado (n-butano) se fija una recuperación, por el destilado, baja (en este caso se ha considerado un 0.006). La presión del condensador y destilado se han considerado iguales (no hay pérdidas de rozamiento) y de valor 1 bar (a menor presión mejor es la separación). Los resultados obtenidos son:

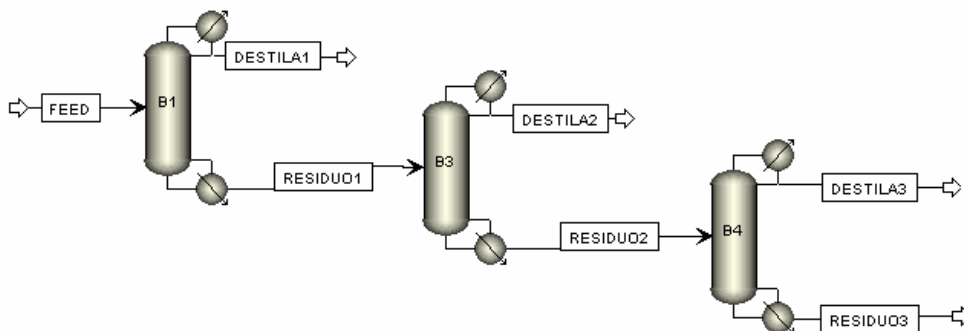
Caso 5 ShortCut						
Stream ID		DESTILA1	DESTILA2	FEED	RESIDUO1	RESIDUO2
Temperature	C	-42,2	-12,0	40,0	1,8	8,4
Pressure	bar	1,000	1,000	20,000	1,000	1,000
Vapor Frac		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Mass Flow	tonne/hr	4,479	17,378	79,768	75,290	57,912
Volume Flow	cum/hr	7,659	29,187	142,059	123,381	94,533
Enthalpy	MM kcal/hr	-3,103	-11,404	-47,969	-46,679	-35,197
Density	kg/cum	584,789	595,388	561,517	610,222	612,616
Mole Flow	MM scmh					
PROPA-01		0,002	< 0,001	0,002	< 0,001	trace
ISOBU-01		< 0,001	0,007	0,007	0,007	< 0,001
N-BUT-01		trace	< 0,001	0,011	0,011	0,011
2-MET-01			trace	0,009	0,009	0,009
Mole Frac						
PROPA-01		0,981	0,003	0,077	834 PPM	trace
ISOBU-01		0,018	0,987	0,231	0,249	0,003
N-BUT-01		0,001	0,010	0,385	0,417	0,552
2-MET-01			1 PPM	0,308	0,334	0,445
*** VAPOR PHASE ***						
Mole Flow						
Volume Flow						
Compressibility						
Heat Cap Ratio						



Results		
Minimum reflux ratio:	5.57088838	
Actual reflux ratio:	6	
Minimum number of stages:	23.7433632	
Number of actual stages:	59.3718986	
Feed stage:	31.661241	
Number of actual stages above feed:	30.661241	
Reboiler heating required:	10.694519	MMkcal/hr
Condenser cooling required:	10.6175682	MMkcal/hr
Distillate temperature:	-12.030985	C
Bottom temperature:	8.44540687	C
Distillate to feed fraction:	0.24954517	
HETP:		

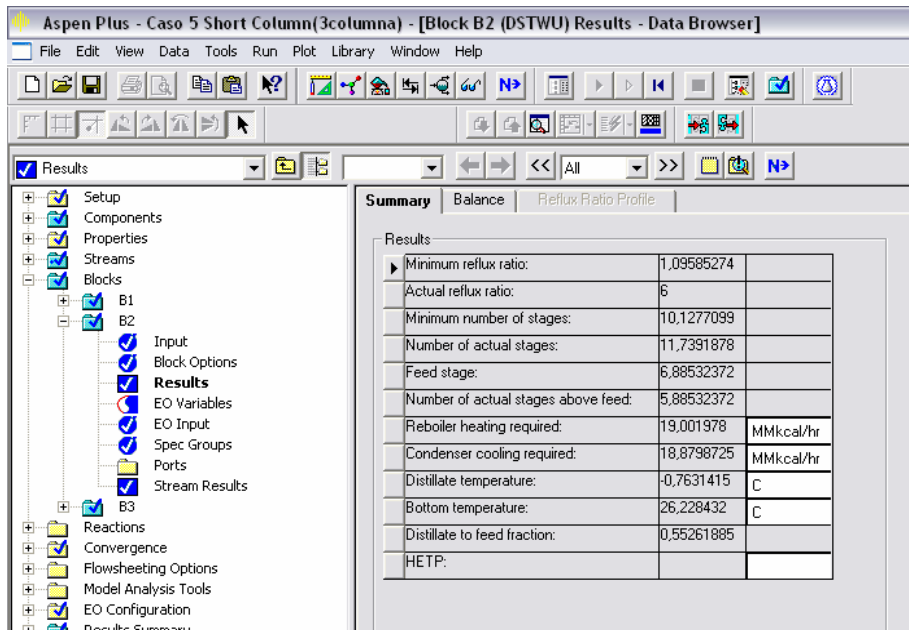
El número de pisos mínimos es de 24 pisos, para esta segunda columna.

Para seguir simulando la secuencia se coloca otra Shortcut (DSTWU) conectada a la corriente de residuo obtenida de la segunda columna.



Luego hay que considerar las condiciones de esta tercera columna. Se ha considerado una relación de reflujo de 6 (inferior al máximo, pero elevada para asegurarnos que puede cumplirse la especificación del 98 % de pureza). Luego se fija una recuperación del componente clave ligero (n-butano) del 0.99 (la adecuada para que la pureza sea superior al 98 %) y del clave pesado (i-pentano) se fija una recuperación, por el destilado, baja (en este caso se ha considerado un 0.006). La presión del condensador y destilado se han considerado iguales (no hay pérdidas de rozamiento) y de valor 1 bar (a menor presión mejor es la separación). Los resultados obtenidos son:

Caso 5 ShortCut								
Stream ID		DESTILA1	DESTILA2	DESTILA3	FEED	RESIDUO1	RESIDUO2	RESIDUO3
Temperature	C	-42,2	-12,0	-0,8	40,0	1,8	8,4	26,2
Pressure	bar	1,000	1,000	1,000	20,000	1,000	1,000	1,000
Vapor Frac		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Mass Flow	tonne/hr	4,479	17,378	28,936	79,768	75,290	57,912	28,976
Volume Flow	cum/hr	7,659	29,187	47,980	142,059	123,381	94,533	47,136
Enthalpy	MMkcal/hr	-3,103	-11,404	-17,948	-47,969	-46,679	-35,197	-17,127
Density	kg/cum	584,789	595,388	603,093	561,517	610,222	612,616	614,726
Mole Flow	MMscmh							
PROPA-01		0,002	< 0,001		0,002	< 0,001	trace	
ISOBU-01		< 0,001	0,007	< 0,001	0,007	0,007	< 0,001	trace
N-BUT-01		trace	< 0,001	0,011	0,011	0,011	0,011	< 0,001
2-MET-01			trace	< 0,001	0,009	0,009	0,009	0,009
Mole Frac								
PROPA-01		0,981	0,003		0,077	834 PPM	trace	
ISOBU-01		0,018	0,987	0,006	0,231	0,249	0,003	2 PPM
N-BUT-01		0,001	0,010	0,989	0,385	0,417	0,552	0,012
2-MET-01			1 PPM	0,005	0,308	0,334	0,445	0,988
*** VAPOR PHASE ***								
Mole Flow								
Volume Flow								
Compressibility								
HeatCapRatio								



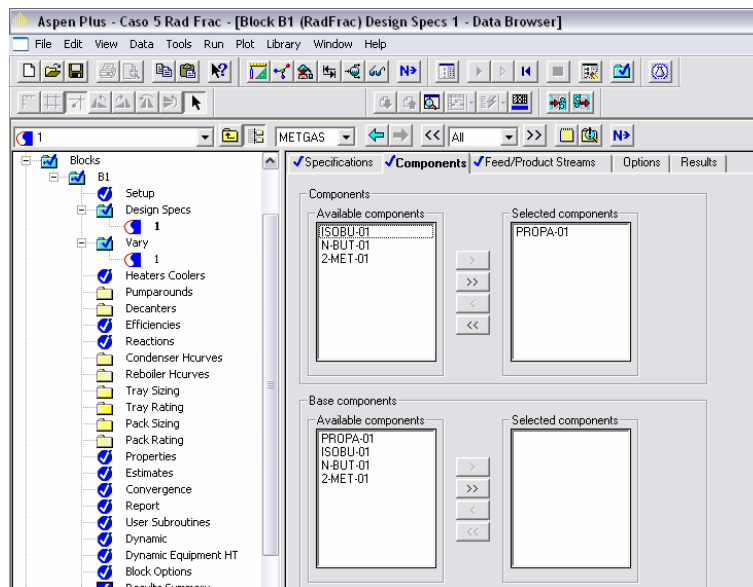
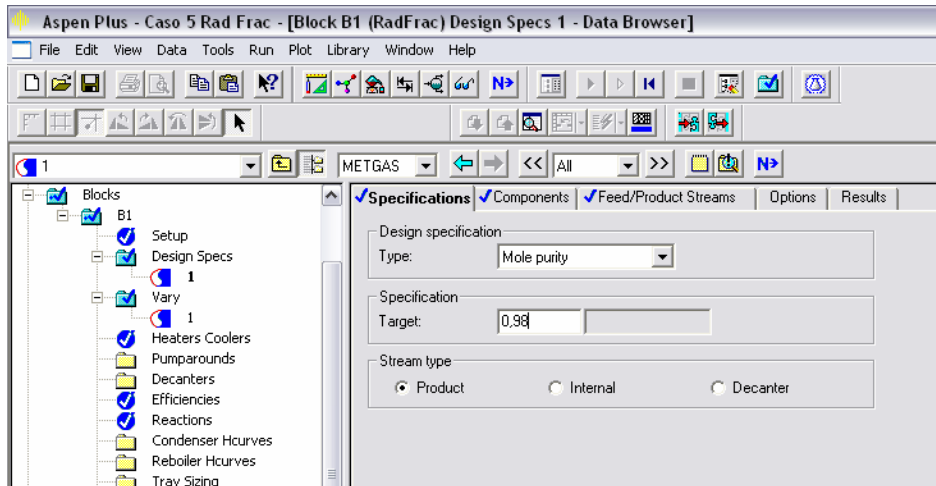
Summary		
Minimum reflux ratio:	1,09585274	
Actual reflux ratio:	6	
Minimum number of stages:	10,1277099	
Number of actual stages:	11,7391878	
Feed stage:	6,88532372	
Number of actual stages above feed:	5,88532372	
Reboiler heating required:	19,001978	MMkcal/hr
Condenser cooling required:	18,8798725	MMkcal/hr
Distillate temperature:	-0,7631415	C
Bottom temperature:	26,228432	C
Distillate to feed fraction:	0,55261885	
HETP:		

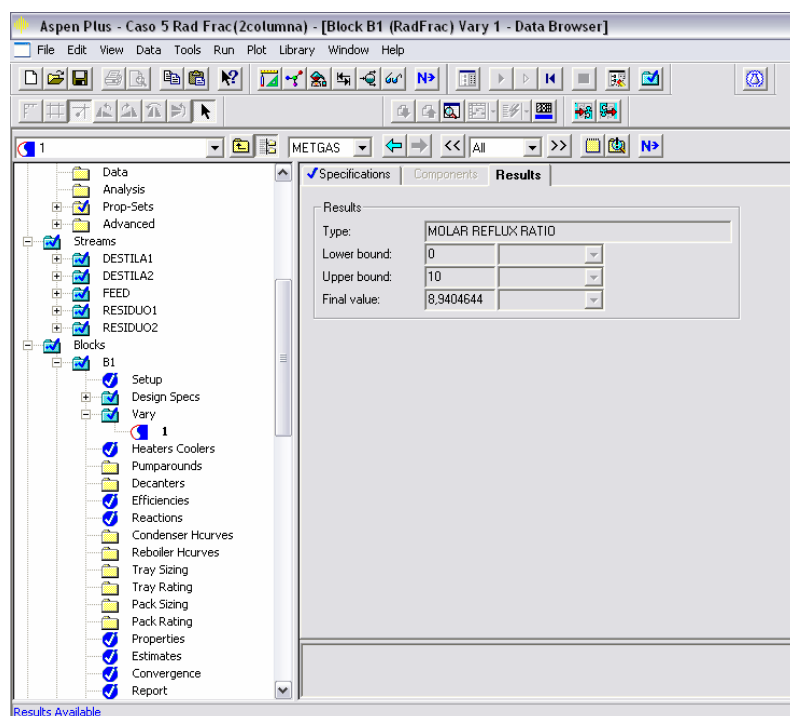
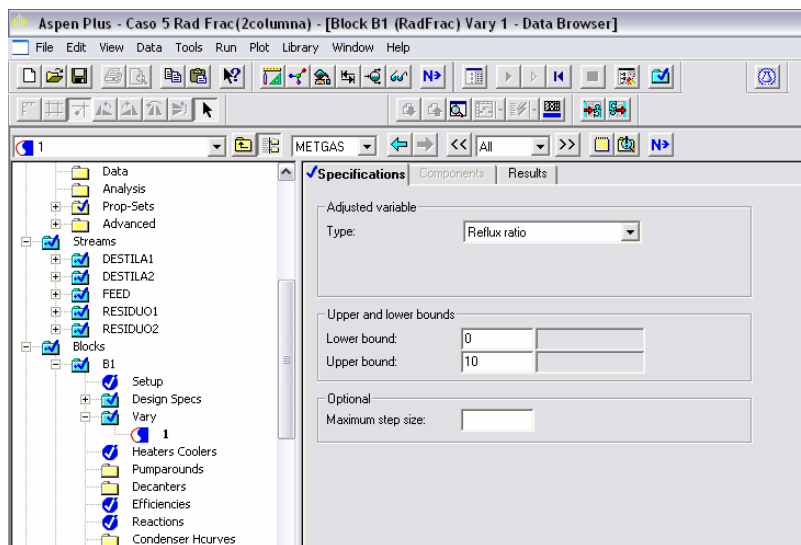
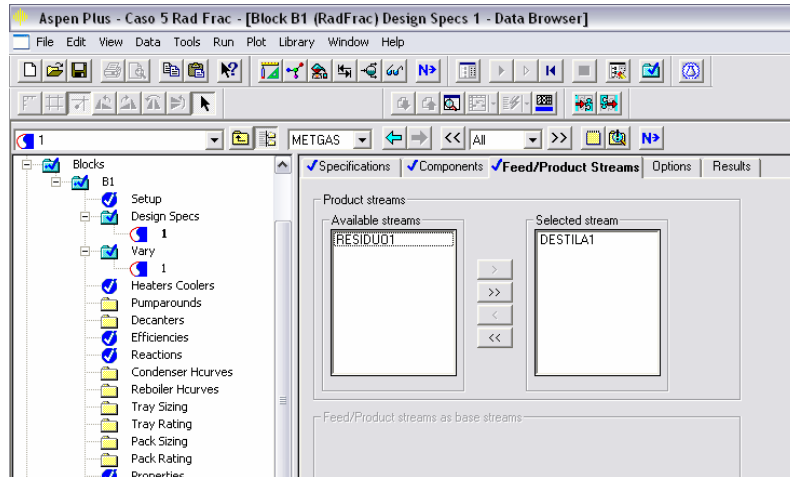
El número de pisos mínimos es de 11 pisos, para esta tercera columna.

PROCEDIMIENTO C:

Para conocer las condiciones de operación de la columna se hace la simulación con una columna RadFrac, utilizando los datos obtenidos en la ShortCut (número de pisos, relación destilado/carga y relación de reflujo).

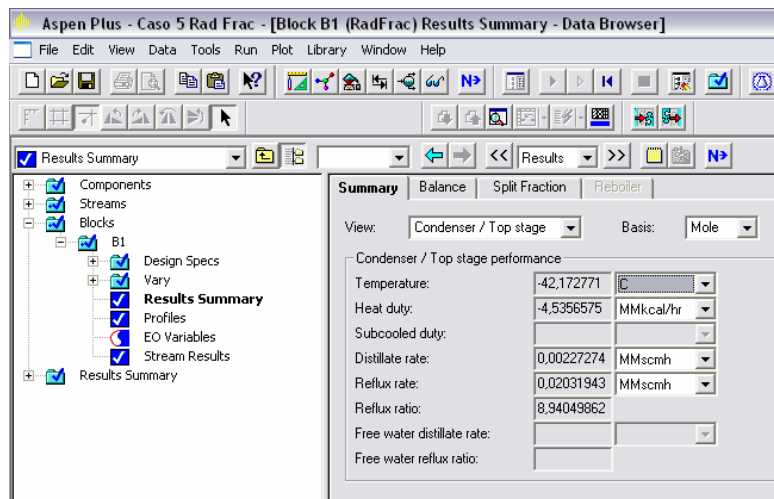
Para la primera columna se considera un número de pisos de 30 (28 + 2), D/F → 0.078, relación de reflujo de 6. Se resuelve y se observa que no se consigue la pureza requerida. Para conseguir que la pureza sea de 0.98, se realiza un DESIGN SPECS. Como especificación se considera a una pureza de 0.98, de Propano, en la corriente de destilado. Como variable que permitimos cambiar para conseguir la pureza, indicamos la relación de reflujo. El intervalo en el que permitimos que varíe es entre 0 y 10.





Los resultados obtenidos son:

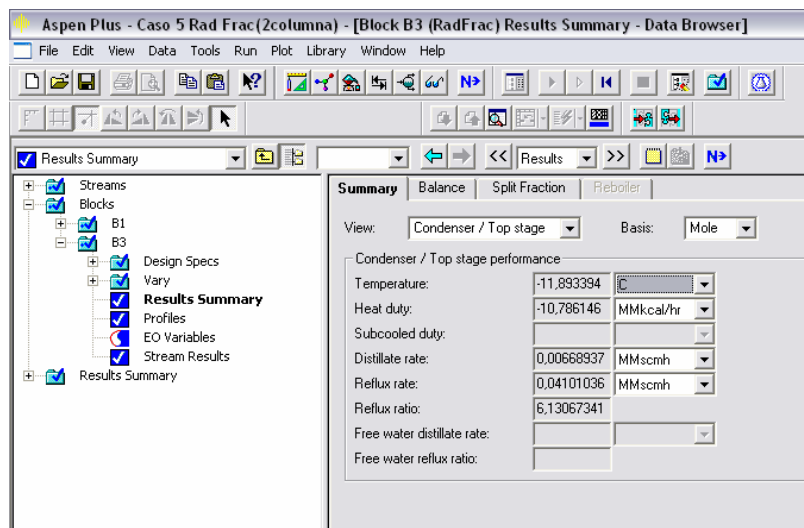
Caso 5 ShortCut				
Stream ID		DESTILA 1	FEED	RESIDUO 1
Temperature	C	-42,2	40,0	1,8
Pressure	bar	1,000	20,000	1,000
Vapor Frac		0,000	0,000	0,000
Mass Flow	tonne/hr	4,500	79,768	75,269
Volume Flow	cum/hr	7,695	142,059	123,349
Enthalpy	MMkcal/hr	-3,118	-47,969	-46,663
Density	kg/cum	584,783	561,517	610,207
Mole Flow	MMscmh			
PROPA-01		0,002	0,002	< 0,001
ISOBU-01		< 0,001	0,007	0,007
N-BUT-01		trace	0,011	0,011
2-MET-01		trace	0,009	0,009
Mole Frac				
PROPA-01		0,980	0,077	524 PPM
ISOBU-01		0,020	0,231	0,249
N-BUT-01		43 PPM	0,385	0,417
2-MET-01		trace	0,308	0,334
*** VAPOR PHASE ***				
Mole Flow				
Volume Flow				
Compressibility				
HeatCapRatio				



Para la segunda columna se considera un número de pisos de 62 (60 + 2), D/F → 0.2498, relación de reflujo de 6. Se resuelve y se observa que no se consigue la pureza requerida. Para conseguir que la pureza sea de 0.98, se realiza un DESIGN SPECS. Como especificación se considera una pureza de 0.98, de i-butano, en la corriente de destilado. Como variable que permitimos cambiar para conseguir la pureza,

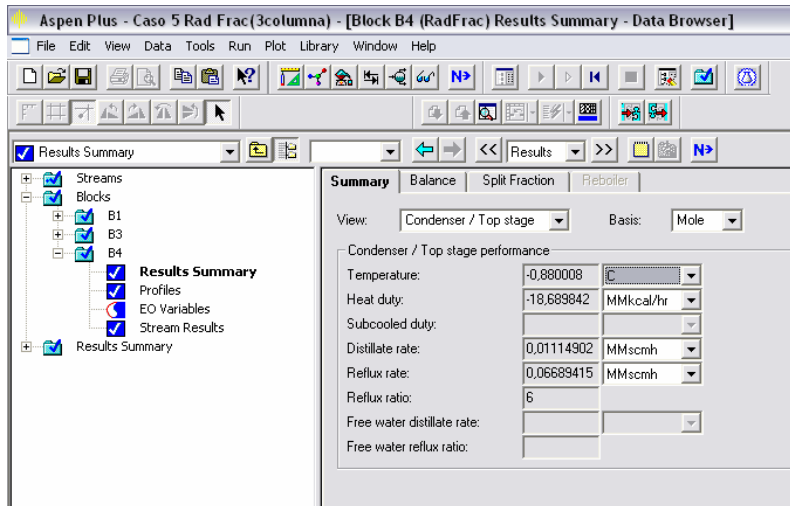
indicamos la relación de reflujo. El intervalo en el que permitimos que varíe es entre 0 y 10. Los resultados obtenidos son:

Caso 5 ShortCut						
Stream ID		DESTILA1	DESTILA2	FEED	RESIDUO1	RESIDUO2
Temperature	C	-42,2	-11,9	40,0	1,8	8,4
Pressure	bar	1,000	1,000	20,000	1,000	1,000
Vapor Frac		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Mass Flow	tonne/hr	4,500	17,338	79,768	75,269	57,930
Volume Flow	cum/hr	7,695	29,118	142,059	123,349	94,563
Enthalpy	MMkcal/hr	-3,118	-11,373	-47,969	-46,663	-35,215
Density	kg/cum	584,783	595,448	561,517	610,207	612,614
Mole Flow	MMscmh					
PROPA-01		0,002	< 0,001	0,002	< 0,001	trace
ISOBU-01		< 0,001	0,007	0,007	0,007	< 0,001
N-BUT-01		trace	< 0,001	0,011	0,011	0,011
2-MET-01		trace	trace	0,009	0,009	0,009
Mole Frac						
PROPA-01		0,980	0,002	0,077	524 PPM	trace
ISOBU-01		0,020	0,980	0,231	0,249	0,006
N-BUT-01		43 PPM	0,018	0,385	0,417	0,549
2-MET-01		trace	trace	0,308	0,334	0,444
*** VAPOR PHASE ***						
Mole Flow						
Volume Flow						
Compressibility						
Heat Cap Ratio						



Para la tercera columna se considera un número de pisos de 14 (12 + 2), $D/F \rightarrow 0.5526$, relación de reflujo de 6. En este caso se cumplen las especificaciones con estas condiciones, de manera que no es necesario realizar el Design Specs. Los resultados obtenidos son:

Caso 5 ShortCut								
Stream ID		DESTILA1	DESTILA2	DESTILA3	FEED	RESIDUO1	RESIDUO2	RESIDUO3
Temperature	C	-42,2	-11,9	-0,9	40,0	1,8	8,4	26,3
Pressure	bar	1,000	1,000	1,000	20,000	1,000	1,000	1,000
Vapor Frac		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Mass Flow	tonne/hr	4,500	17,338	28,928	79,768	75,269	57,930	29,002
Volume Flow	cum/hr	7,695	29,118	47,974	142,059	123,349	94,563	47,181
Enthalpy	MMkcal/hr	-3,118	-11,373	-17,951	-47,969	-46,663	-35,215	-17,140
Density	kg/cum	584,783	595,448	602,992	561,517	610,207	612,614	614,701
Mole Flow	MMscmh							
PROPA-01		0,002	<0,001		0,002	<0,001	trace	
ISOBU-01		<0,001	0,007	<0,001	0,007	0,007	<0,001	trace
N-BUT-01		trace	<0,001	0,011	0,011	0,011	0,011	<0,001
2-MET-01		trace	trace	<0,001	0,009	0,009	0,009	0,009
Mole Frac								
PROPA-01		0,980	0,002		0,077	524 PPM	trace	
ISOBU-01		0,020	0,980	0,011	0,231	0,249	0,006	4 PPM
N-BUT-01		43 PPM	0,018	0,986	0,385	0,417	0,549	0,010
2-MET-01		trace	trace	0,002	0,308	0,334	0,444	0,990
*** VAPOR PHASE ***								
Mole Flow								
Volume Flow								
Compressibility								
HeatCapRatio								



En el siguiente cuadro se resumen las condiciones de operación de cada una de las columnas para conseguir la especificación de pureza requerida.

Columna	Relación de reflujo	Presión (Bar)	Nº de platos	D/F
1	8.94	1	30	0.078
2	6.13	1	62	0.249
3	6.00	1	14	0,553

Como podemos observar, la separación más compleja es la del i-butano y n-butano (por eso se necesitan más pisos para la separación). Esto es debido a que son isómeros y la diferencia en el punto de ebullición es baja.

PROCEDIMIENTO D:

Para observar como varia el consumo energético de las columnas vamos a estudiar otra forma de operación, que permita obtener la separación deseada. En este caso, en las especificaciones de diseño, permitiremos variar la relación destilado carga.

Para la primera columna se indica una relación de reflujo de 9 y se realiza un Design Specs de D/F entre 0.01 y 0.5. La solución es $D/F = 0.0022$.

Para la segunda columna se considera una relación de reflujo de 6 y se realiza un Design Specs de D/F entre 0.01 y 0.6. La solución es $D/F = 0.0397$.

En la tercera columna se han considerado las mismas condiciones que en el procedimiento C.

Los resultados de calor para cada uno (en valor absoluto):

Caso	Columna 1 ^o (MMKcal/h)		Columna 2 ^o (MMKcal/h)		Columna 3 ^o (MMKcal/h)		Total (MMKcal/h)
	Condensador	Calderín	Condensador	Calderín	Condensador	Calderín	
C ^o)	4,5356534	2,72359992	10,78672	10,861851	18,689842	18,8138438	66,4115101
D ^o)	4,5328466	2,7209509	10,491145	10,5651475	18,750419	18,874598	65,935107

A la vista de estos datos, podemos concluir que las condiciones del apartado d^o) consiguen unos consumos energéticos más óptimos.

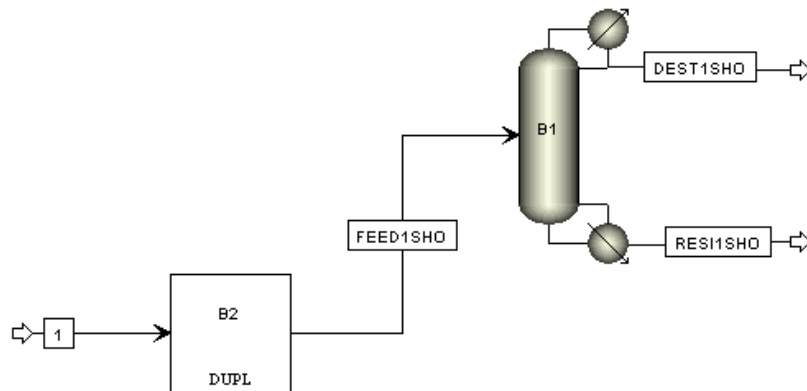
Caso 6

OBJETIVO

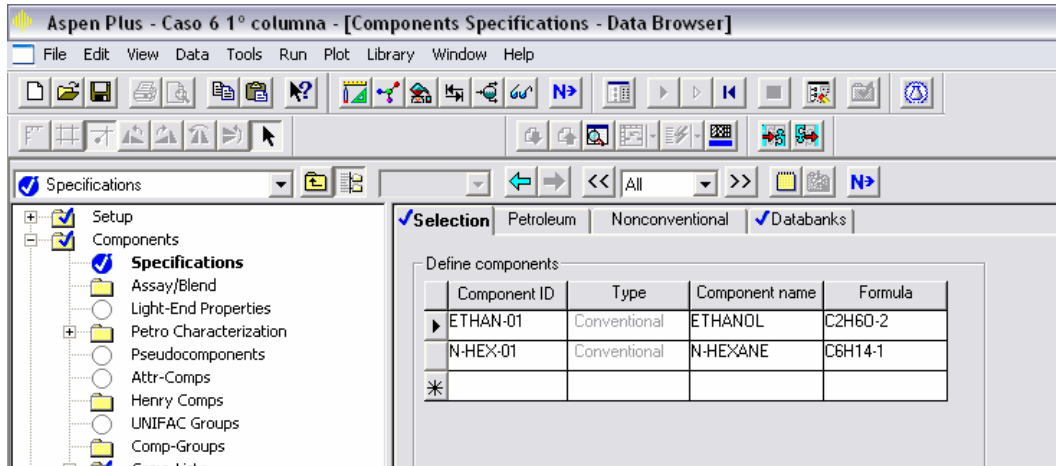
El objetivo de es la recuperación de etanol y n-hexano con una pureza superior al 95%, de una corriente alimento constituida por una fracción molar de etanol de 0.65 y una de n-hexano de 0.35. Para ello disponemos de dos columna de destilación que pueden trabajar con una relación de reflujo máxima de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

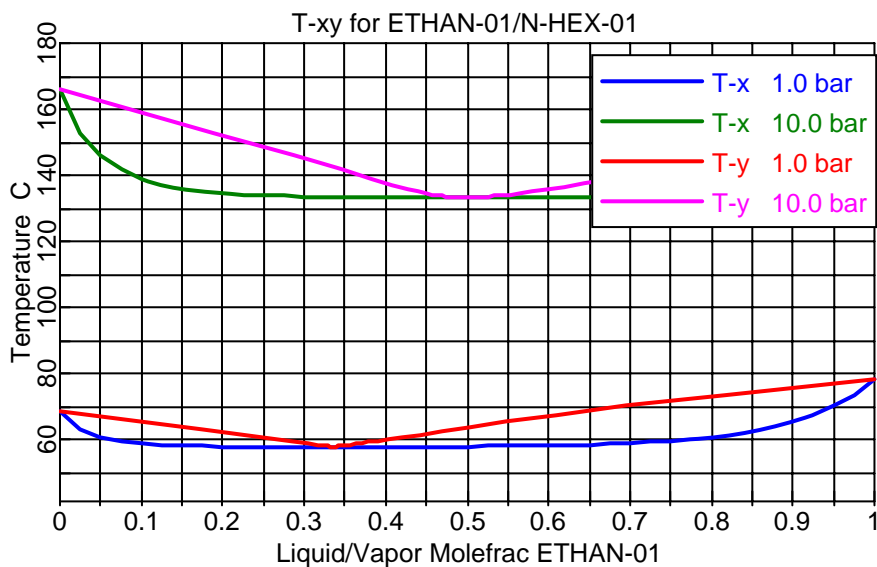


Posteriormente se indican los componentes que participan en la simulación:



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).

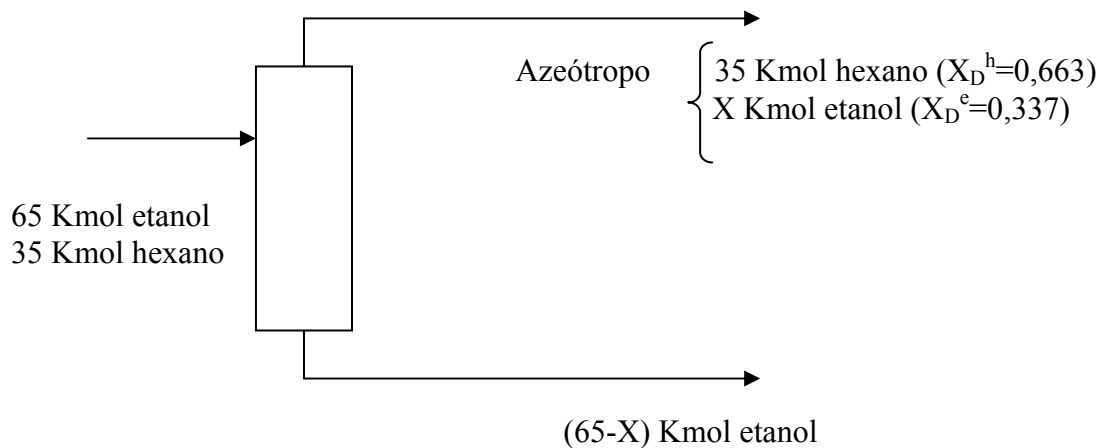


Como se observa en la representación el sistema etanol,n-hexano forma un azeótropo. Para una presión de 10 atmósferas la composición del azeótropo es de una fracción molar de etanol de 0,5 y para 1 atmósfera la composición es de 0,337 de etanol.

La forma de separar los azeótropos, para este sistema, es utilizar una primera columna a baja presión (1 atmósferas) y posteriormente una columna a alta presión (10 atmósfera). De la columna de baja presión se obtiene, como producto de fondo, etanol de gran pureza, y por cabeza se obtiene el azeótropo correspondiente. En la columna de alta presión se obtiene, como producto de fondo, hexano de gran pureza, y por cabeza se obtiene el azeótropo correspondiente.

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 0,99999999) 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

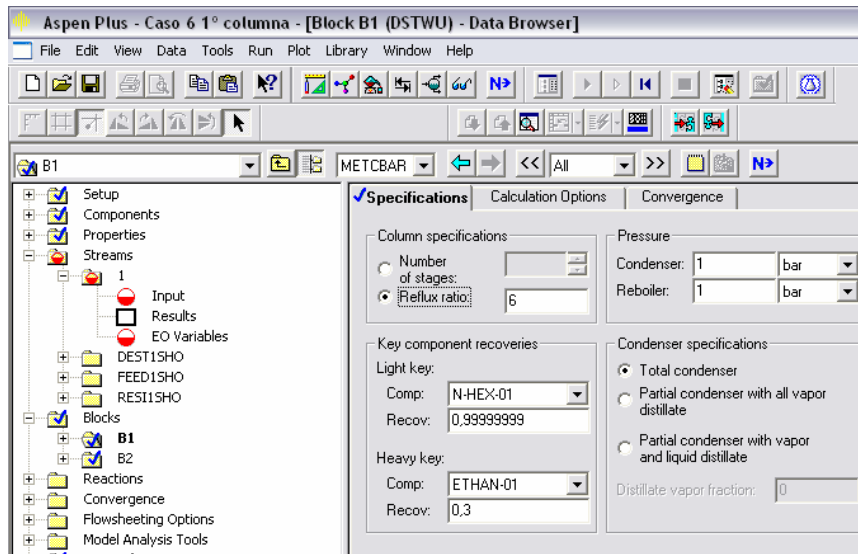
- o Cálculo del caudal de etanol en el destilado

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

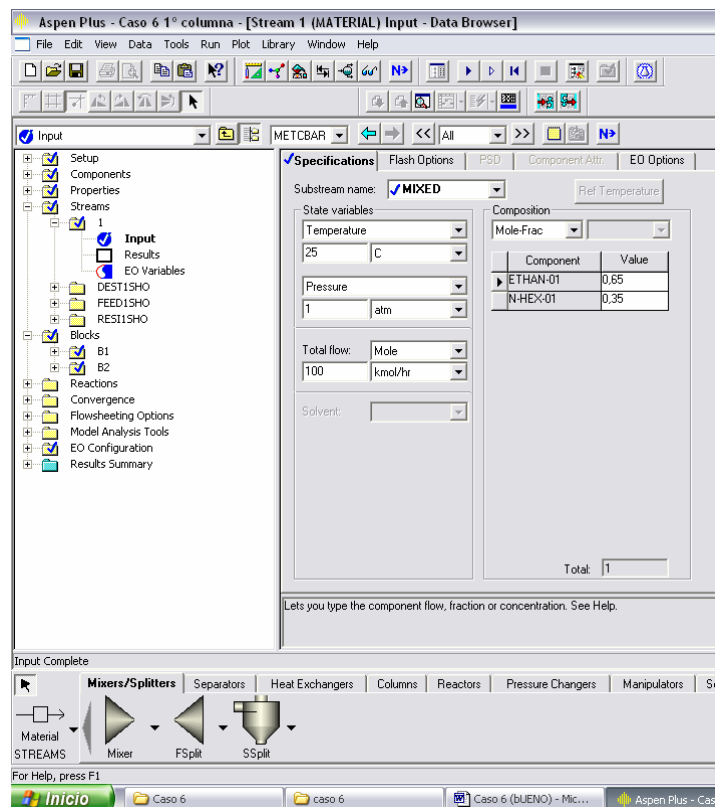
- o Cálculo de la pérdida de etanol por cabeza

$$\text{pérdida de etanol por cabeza} = \frac{\text{etanol en el destilado}}{\text{etanol alimentado}} = \frac{17,79}{65} = 0,274$$

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

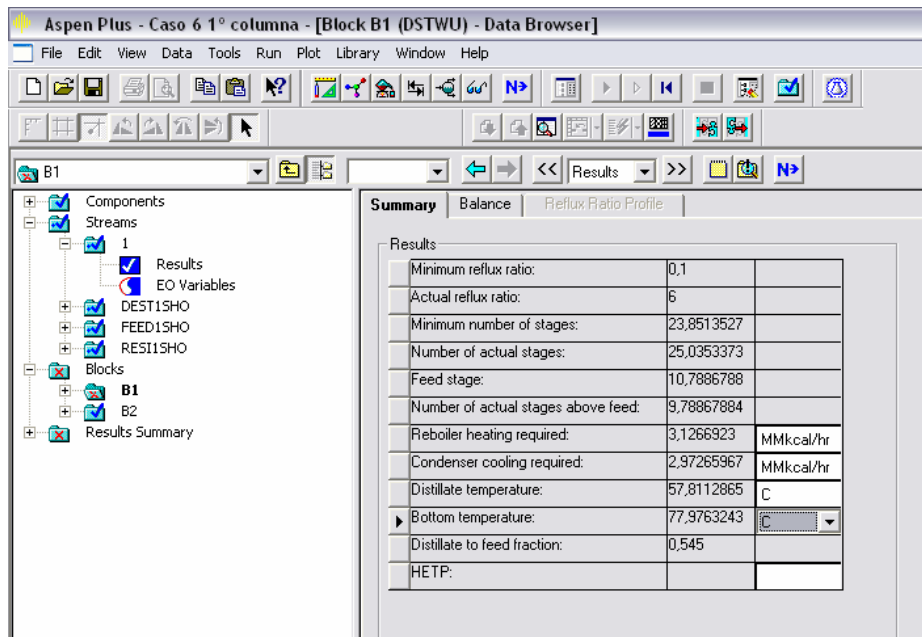


Posteriormente indicamos las condiciones de la corriente de entrada (25°C, 1 atm, fracción molar de etanol 0,65 y fracción molar de n-hexano 0,35).



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 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



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

Aspen Plus - Caso 6 1º columna - [Block B3 (RadFrac) - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

B3 METCBAR Input

Configuration
 Streams
 Pressure
 Condenser
 Reboiler
 3-Phase

Setup options

Number of stages: 28

Condenser: Total

Reboiler: Kettle

Valid phases: Vapor-Liquid

Convergence: Standard

Operating specifications

Reflux ratio: Mole 0,5

Distillate to feed ratio: Mole 0,545

Free water reflux ratio:

Feed basis

Aspen Plus - Caso 6 1º columna - [Block B3 (RadFrac) - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

B3 METCBAR Input

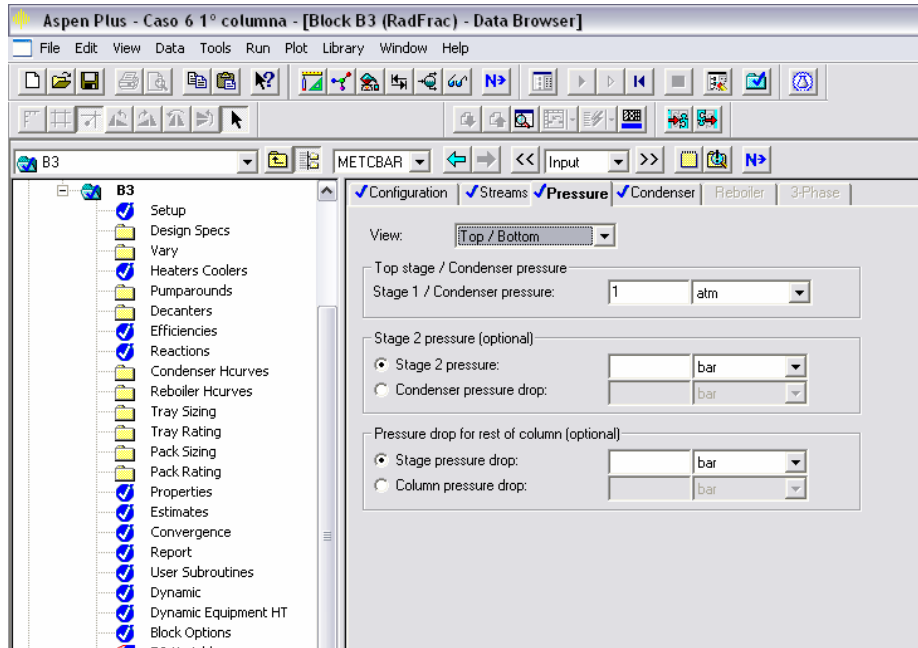
Configuration
 Streams
 Pressure
 Condenser
 Reboiler
 3-Phase

Feed streams

Name	Stage	Convention
FEED2RAD	12	Above-Stage

Product streams

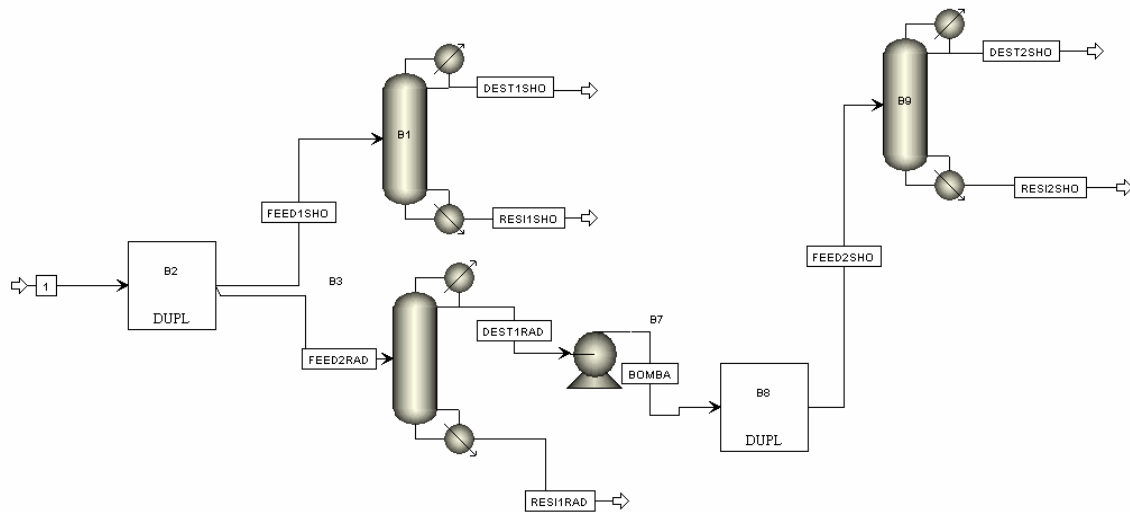
Name	Stage	Phase	Basis	Flow	Units	Flow ratio	Feed specs
DEST1RAD	1	Liquid	Mole		kmol/hr		Feed basis
RES11RAD	28	Liquid	Mole		kmol/hr		Feed basis



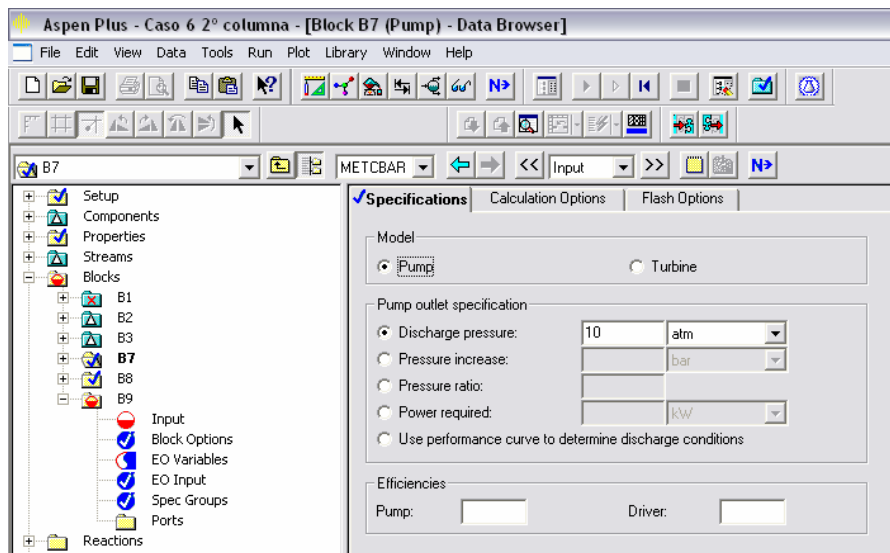
Caso 6 1º Columna								
Stream ID		1	DEST1RAD	DEST1SHO	FEED1SHO	FEED2RAD	RESI1RAD	RESI1SHO
Temperature	C	25,0	58,2	57,8	25,0	25,0	78,3	78,0
Pressure	bar	1,013	1,013	1,000	1,013	1,013	1,013	1,000
Vapor Frac		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Mole Fbw	kmol/hr	100,000	54,500	54,500	100,000	100,000	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 obtiene en 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.

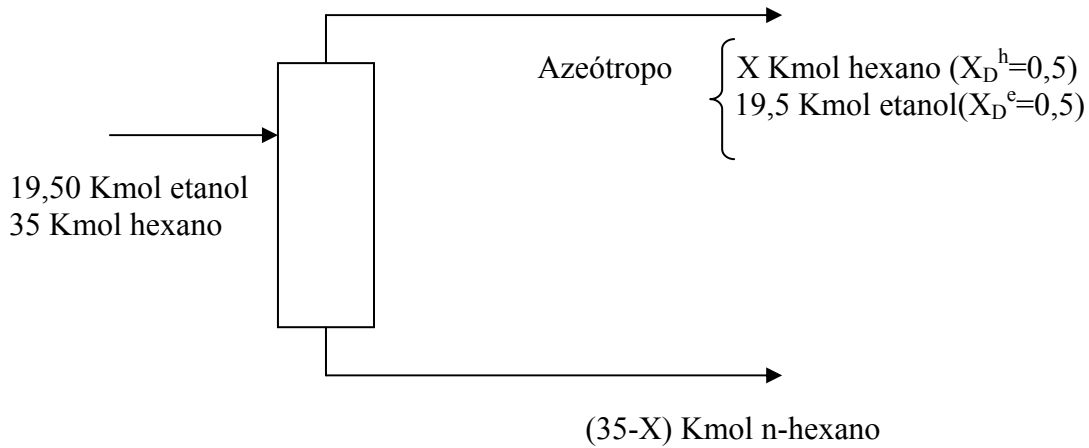


Para simular la bomba simplemente es necesario indicar del equipo que se trata y la presión de descarga.



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:

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

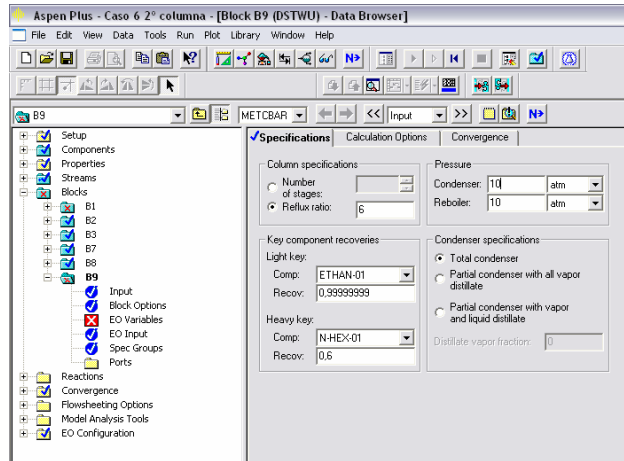
$$\text{n-hexano en el destilado} = \text{Destilado} \cdot X_D^e = 39 \cdot 0,5 = 19.5 \text{ Kmol}$$

- Cálculo de la pérdida de n-hexano por cabeza

$$\text{pérdida de etanol por cabeza} = \frac{\text{n-hexano en el destilado}}{\text{n-hexano alimentado}} = \frac{19.5}{35} = 0,557$$

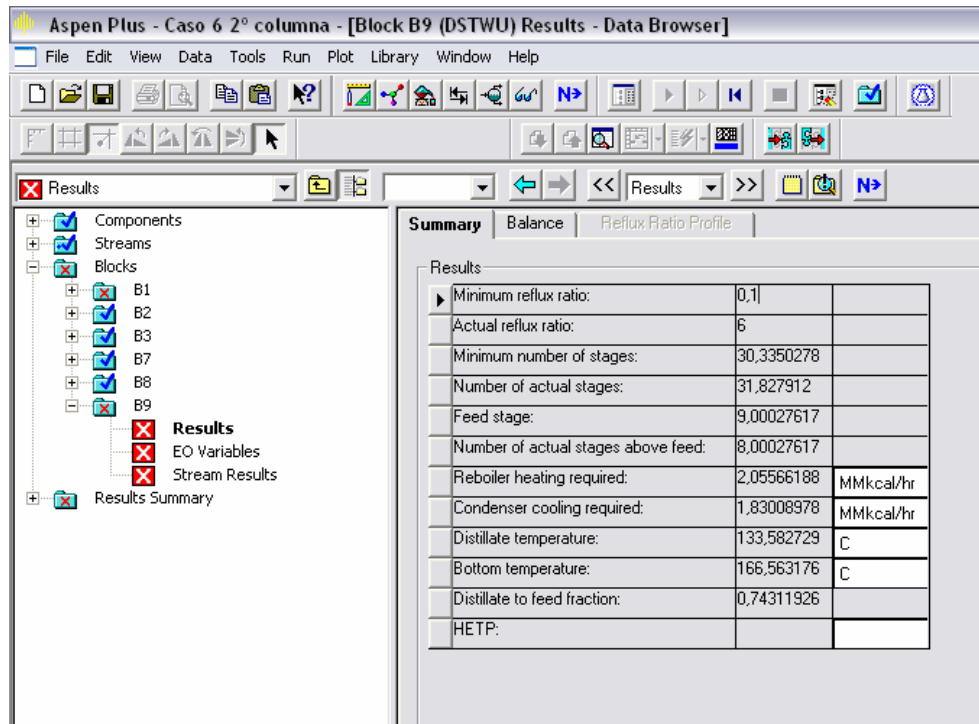
Hexano

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

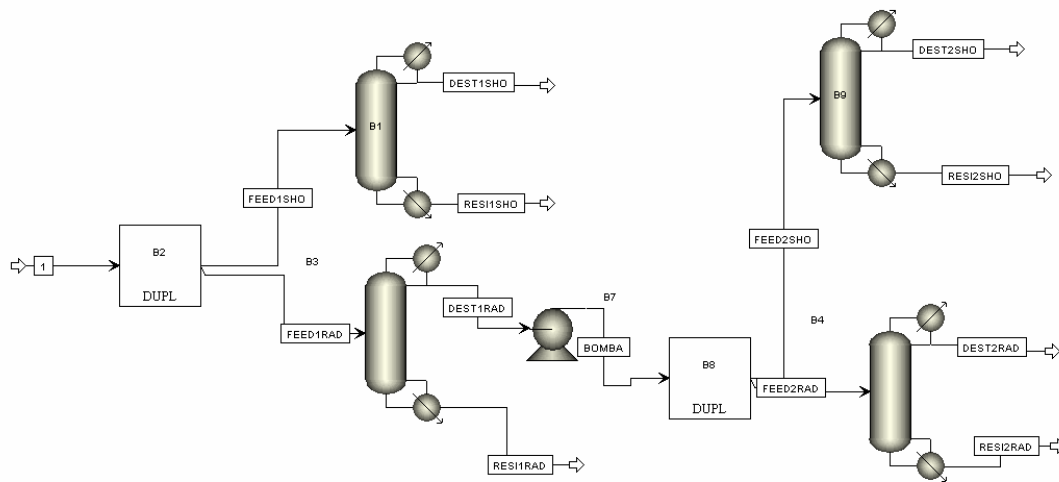


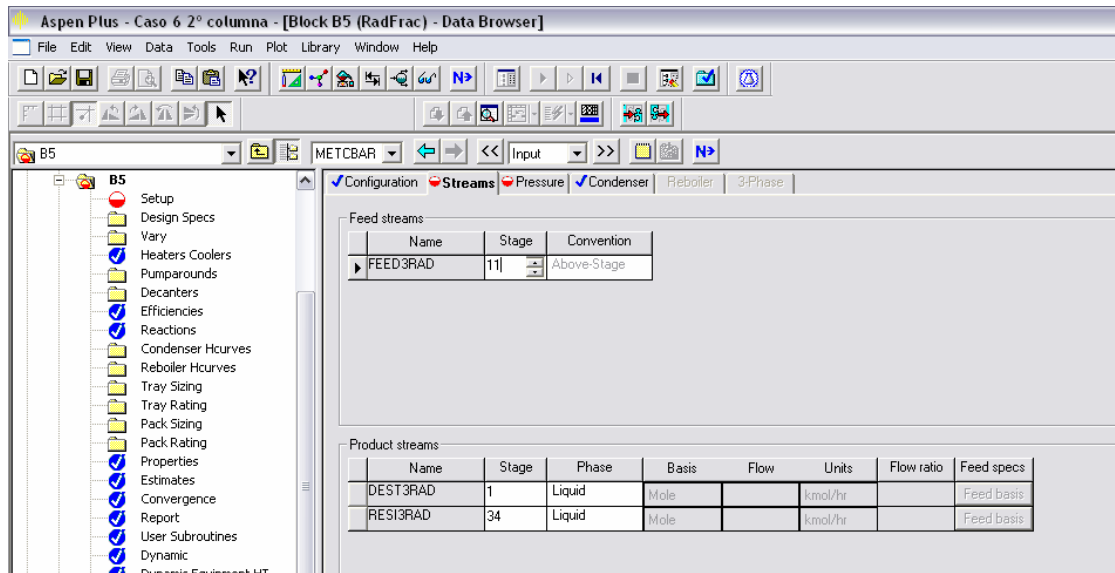
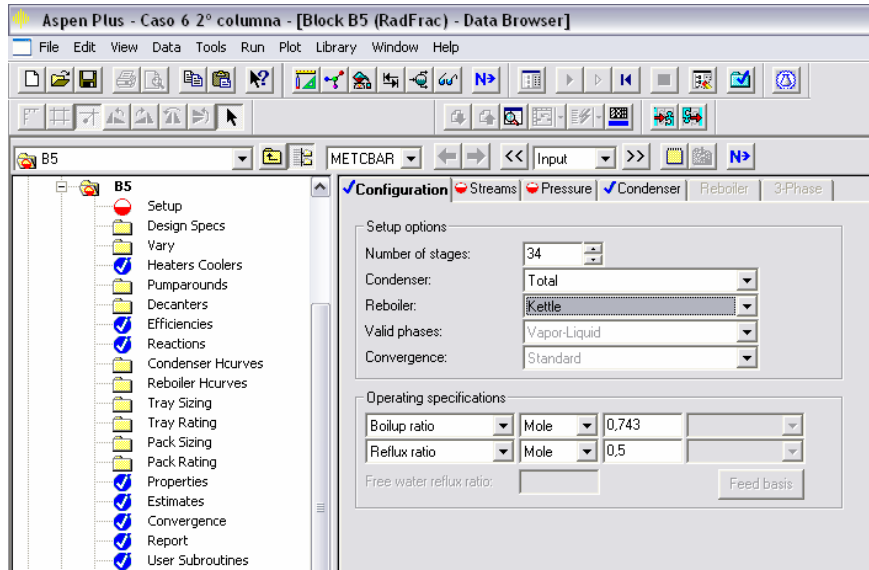
Al resolver aparece un error, que indica que la relación de reflujo mínima calculada es negativa. Esto quiere decir que la separación es tan fácil, que sin reflujo sería capaz de conseguirse. Aún así, Aspen indica un valor de relación de reflujo mínima de 0,1. Los resultados obtenidos son:

Caso 6 1ª Columna												
Stream ID		1	BOMBA	DEST1RAD	DEST1SHO	DEST2SHO	FEED1SHO	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



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





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	cm ³ /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
Enthalpy	MMkcal/hr	-5,957	-2,860	-2,864	-2,865	-2,082	-2,083	-5,957	-5,957	-2,860	-2,860	-2,938	-2,938	-0,553	-0,553
Mole Flow	kmol/hr														
ETHAN-01		65,000	19,500	19,500	19,500	19,500	19,500	65,000	65,000	19,500	19,500	45,500	45,500	trace	trace
N-HEX-01		35,000	35,000	35,000	35,000	20,993	21,000	35,000	35,000	35,000	35,000	trace	trace	14,007	14,000
Mole Frac															
ETHAN-01		0,650	0,358	0,358	0,358	0,482	0,481	0,650	0,650	0,358	0,358	1,000	1,000	trace	14 PPB
N-HEX-01		0,350	0,642	0,642	0,642	0,518	0,519	0,350	0,350	0,642	0,642	trace	8 PPB	1,000	1,000

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 resume en 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

Se podría recircular el destilado de la 2ª columna uniéndola a la alimentación de la primera.

Caso 7

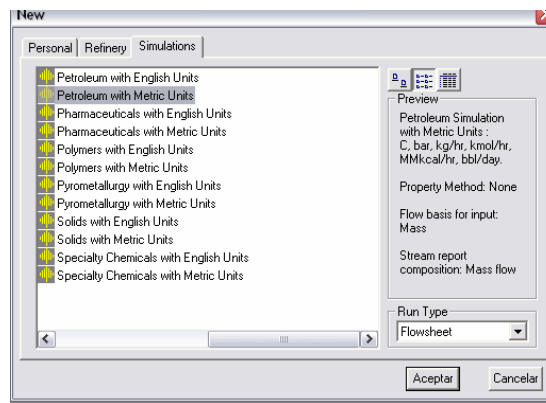
OBJETIVO

El objetivo de este caso es el cálculo de las condiciones de operación para la obtención, como destilado, de una nafta cuya curva ASTM-D-86 tenga un 10% de destilado a 110°C. Para ello se tiene una columna de destilación de 25 etapas y una corriente alimento formada por tres naftas (A, B y C) y ETBE. Las proporciones son de: 25 % Nafta A, 25% Nafta B, 35% Nafta C y 15% de ETBE. Las curvas ASTM de las Naftas son:

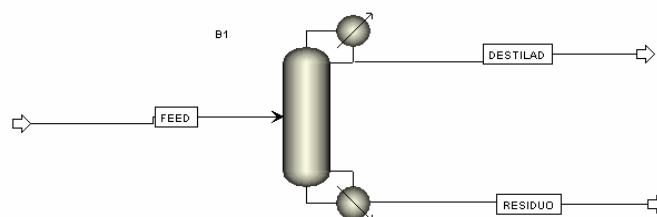
ASTM D-86, % vol	0	5	10	20	30	40	50	60	70	80	90	95	100	SG
Nafta A	78	85	86	88	89	90	92	93	95	96	99	101	114	0,7098
Nafta B	108	120	122	125	127	129	132	135	138	142	147	152	162	0,7447
Nafta C	153	164	165	167	168	169	170	172	174	176	179	183	191	0,7780

PROCEDIMIENTO:

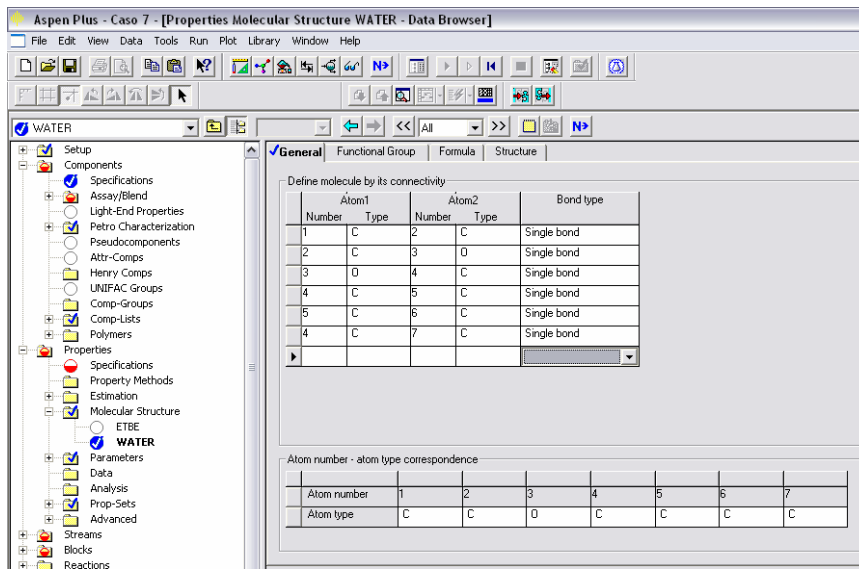
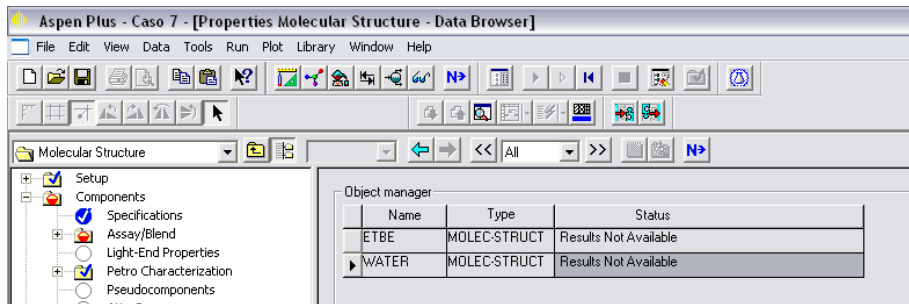
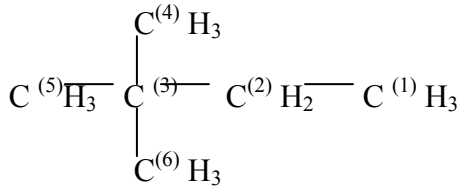
En primer lugar se selecciona como plantilla el modelo de petróleo con unidades métricas.



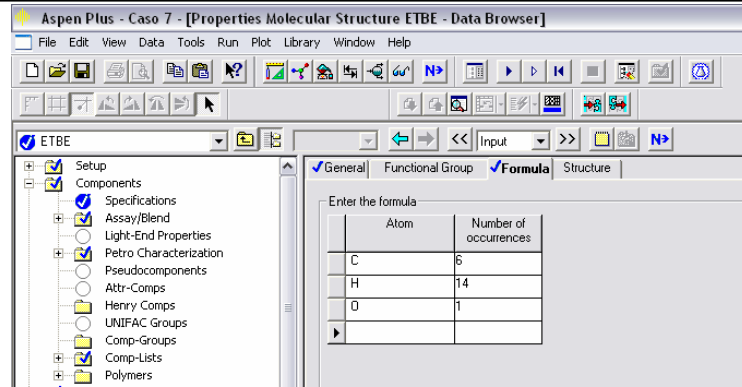
Posteriormente colocamos una columna Radfrac y tres corrientes materiales (entrada, destilado y residuo).



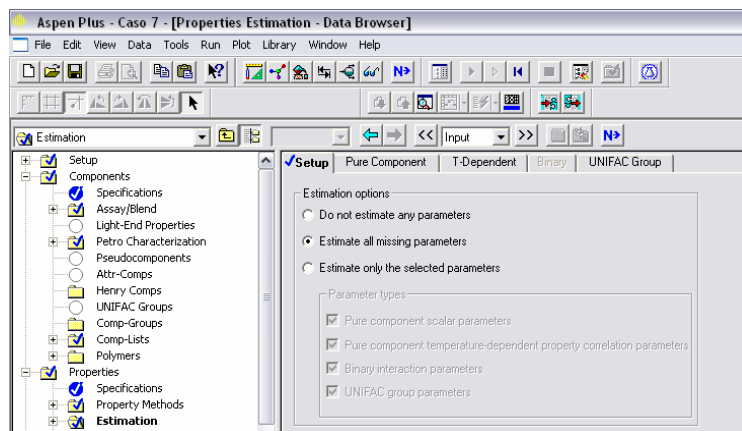
Posteriormente indicamos los compuestos que intervienen en la simulación. Las tres naftas se indican como tipo Assay. Además hay que indicar agua. El ETBE se indica como tipo convencional y en el apartado component en properties en Molecular Structure pinchas Edit e indicas la estructura de la molécula:



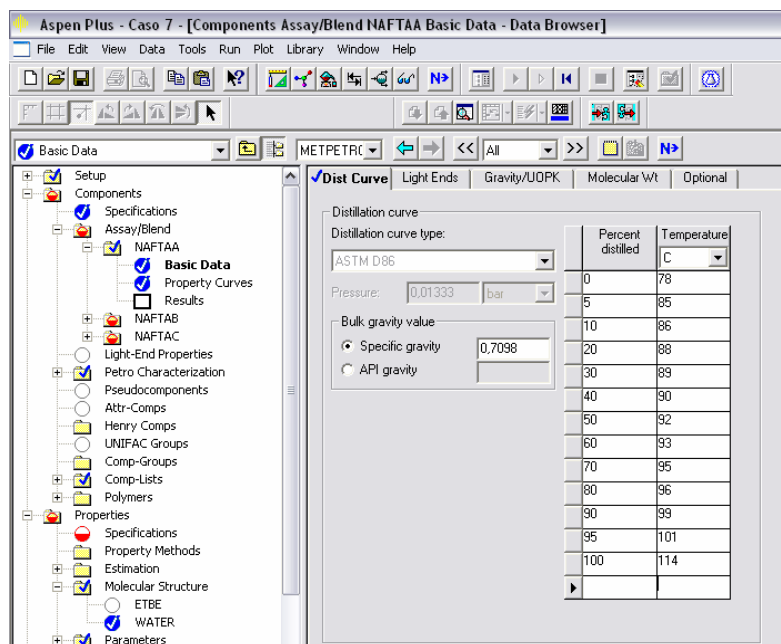
Hay que indicar la cantidad de átomos que hay en cada tipo

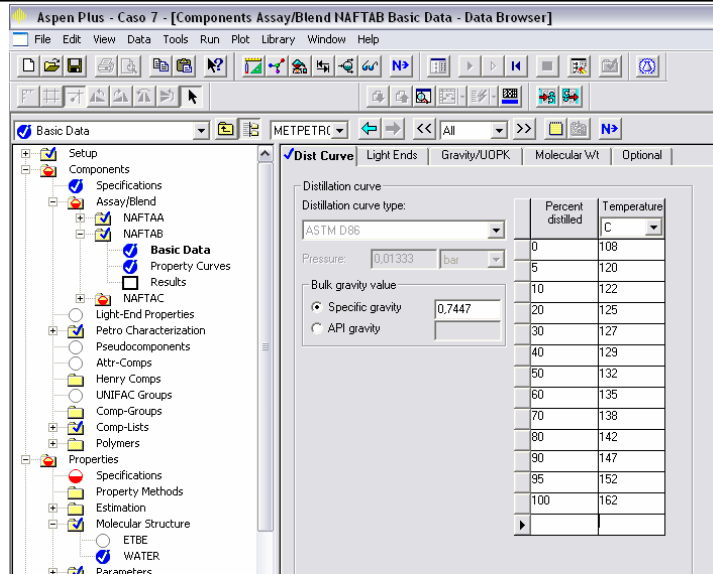


Hay que indicar que se estimen los parámetros que faltan en la carpeta properties, Estimations.



Posteriormente hay que indicar la curva de destilación de cada una de las naftas.





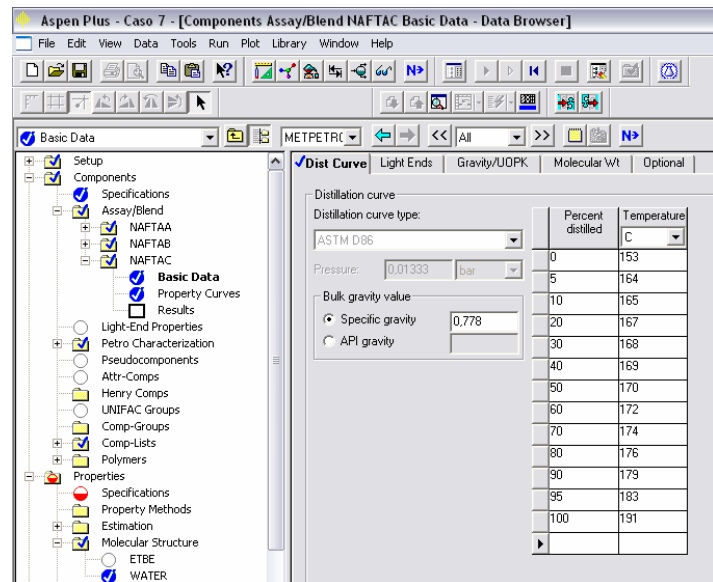
Aspen Plus - Caso 7 - [Components Assay/Blend NAFTAB Basic Data - Data Browser]

Distillation curve type: ASTM D86

Pressure: 0.01333 bar

Bulk gravity value:
 Specific gravity: 0.7447
 API gravity

Percent distilled	Temperature
0	108
5	120
10	122
20	125
30	127
40	129
50	132
60	135
70	138
80	142
90	147
95	152
100	162



Aspen Plus - Caso 7 - [Components Assay/Blend NAFTAC Basic Data - Data Browser]

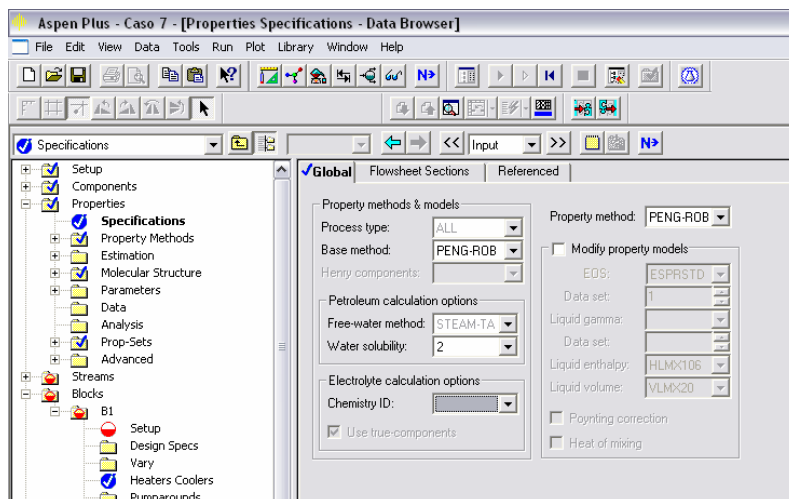
Distillation curve type: ASTM D86

Pressure: 0.01333 bar

Bulk gravity value:
 Specific gravity: 0.778
 API gravity

Percent distilled	Temperature
0	153
5	164
10	165
20	167
30	168
40	169
50	170
60	172
70	174
80	176
90	179
95	183
100	191

Posteriormente indicamos la base de cálculo (Peng Robinson).



Aspen Plus - Caso 7 - [Properties Specifications - Data Browser]

Property methods & models
 Process type: ALL
 Base method: PENG-ROB
 Henry components:

Petroleum calculation options
 Free-water method: STEAM-TA
 Water solubility: 2

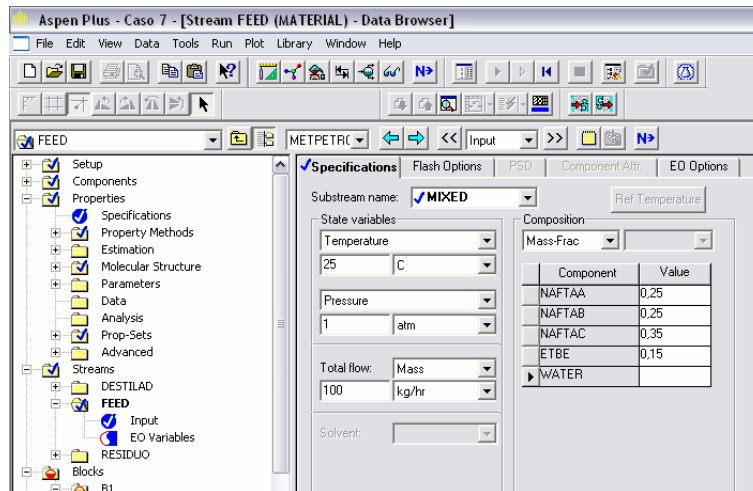
Electrolyte calculation options
 Chemistry ID:

Property method: PENG-ROB

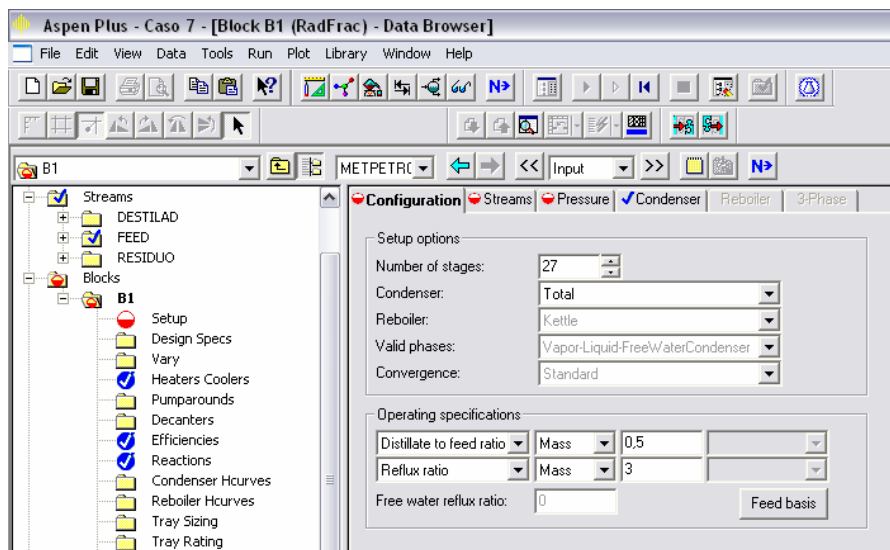
Modify property models
 EOS: ESPRSTD
 Data set: 1
 Liquid gamma:

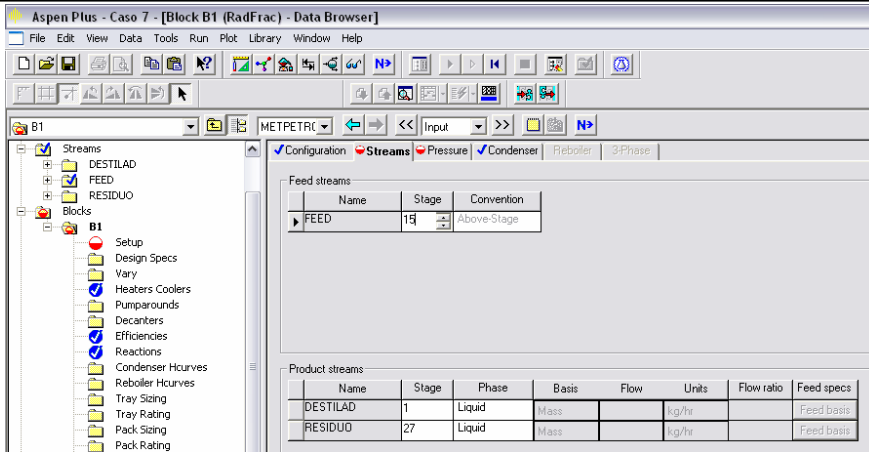
Poynting correction
 Heat of mixing

Posteriormente indicamos las condiciones de la corriente de entrada (25°C, 1 atm, un caudal de 100 Kg/h y una composición en fracción másica del 25% de la nafta A y B, un 35% de la nafta c y un 15% del ETBE).



Posteriormente indicamos las condiciones de la columna. El número de pisos es 27 (25+2), condensador total, y supondremos una relación de reflujo de 3 y una relación destilado carga de 0.5.



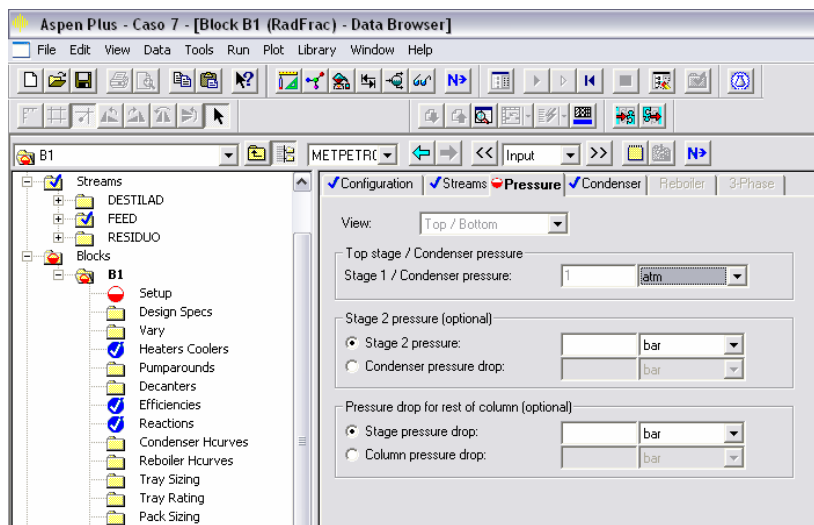


Aspen Plus - Caso 7 - [Block B1 (RadFrac) - Data Browser]

Configuration: Streams Pressure Condenser Reboiler 3Phase

Name	Stage	Convention
FEED	15	Above-Stage

Name	Stage	Phase	Basis	Flow	Units	Flow ratio	Feed specs
DESTILAD	1	Liquid	Mass		kg/hr		Feed basis
RESIDUO	27	Liquid	Mass		kg/hr		Feed basis



Aspen Plus - Caso 7 - [Block B1 (RadFrac) - Data Browser]

Configuration: Configuration Streams Pressure Condenser Reboiler 3Phase

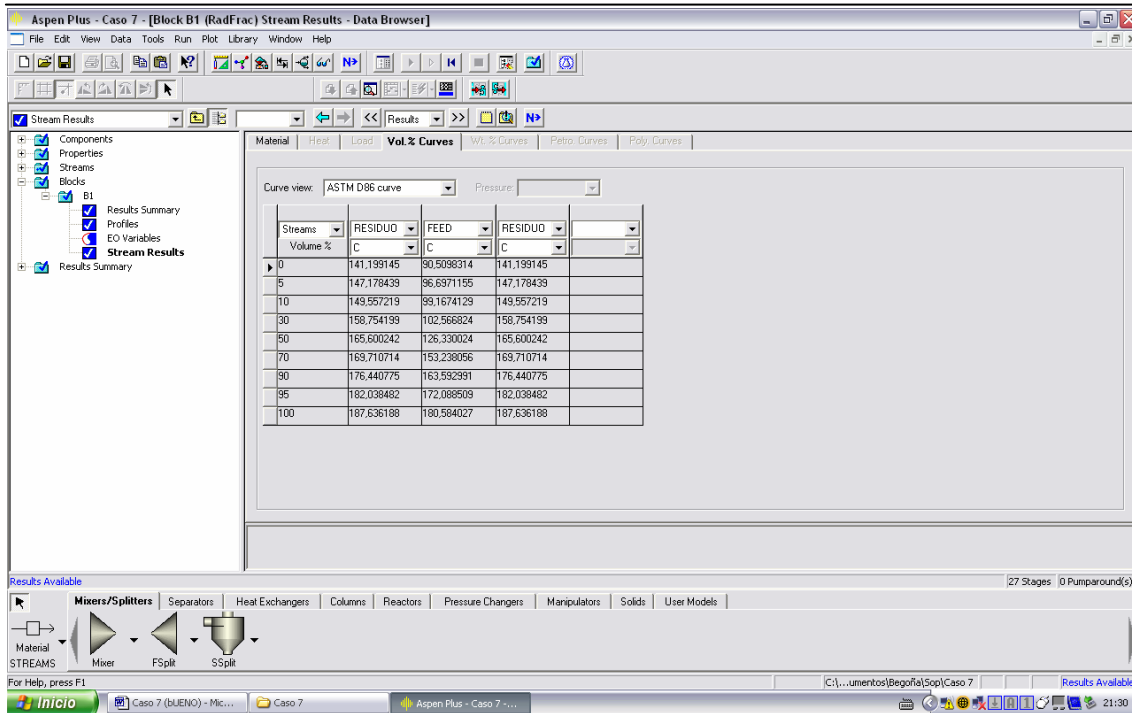
View: Top / Bottom

Top stage / Condenser pressure
 Stage 1 / Condenser pressure: 1 atm

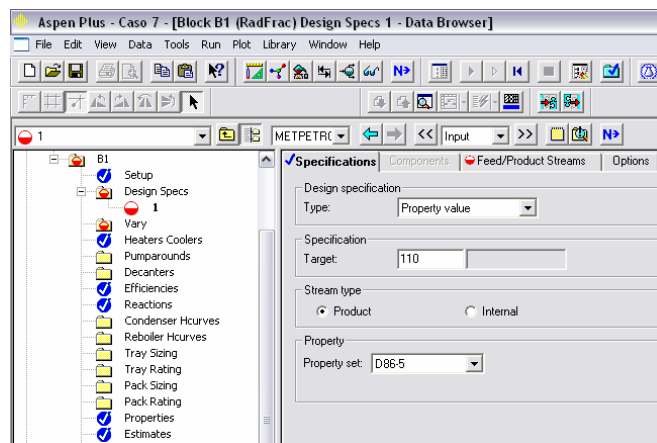
Stage 2 pressure (optional)
 Stage 2 pressure: bar
 Condenser pressure drop: bar

Pressure drop for rest of column (optional)
 Stage pressure drop: bar
 Column pressure drop: bar

Resolvemos el caso y vemos los resultados obtenidos en la corriente de residuo, para la curva ASTM D86.

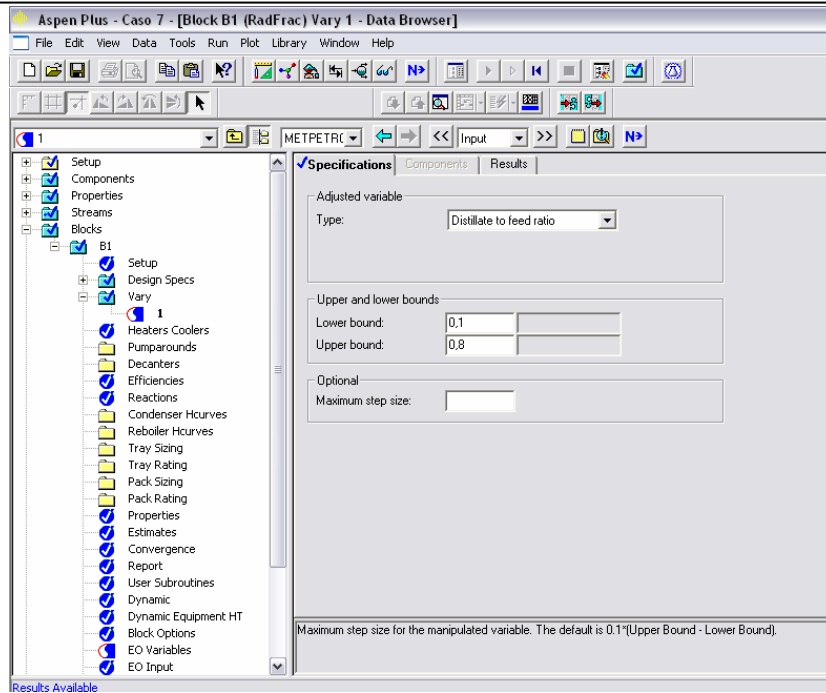


Se observa que el 5% destila a 147,18° C, temperatura superior a la que necesitamos.
 Para conseguir el valor deseado se puede hacer una especificación de diseño. Se indica como especificación el valor del D86-5 en 110°C.

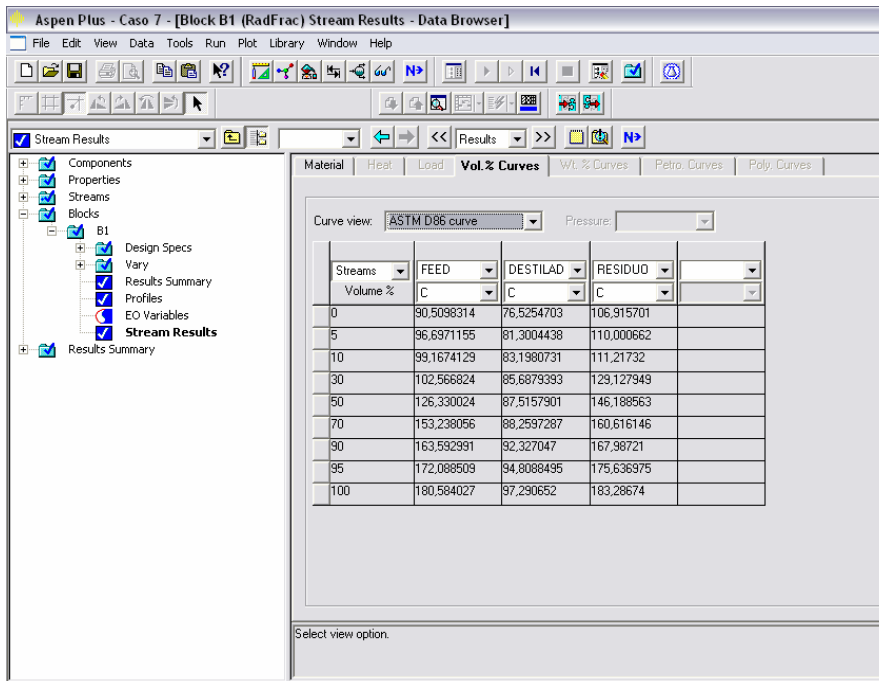


Luego se indica la corriente que queremos que cumpla esta especificación (el residuo)

Luego como Vary indicamos la variable que queremos variar. En este caso consideramos la relación destilado carga entre 0,1 y 0,8.



Como se observa, con esta especificación se consigue que la temperatura El resultado obtenido del diseño de especificaciones es:



Aspen Plus - Caso 7 - [Block B1 (RadFrac) Stream Results - Data Browser]

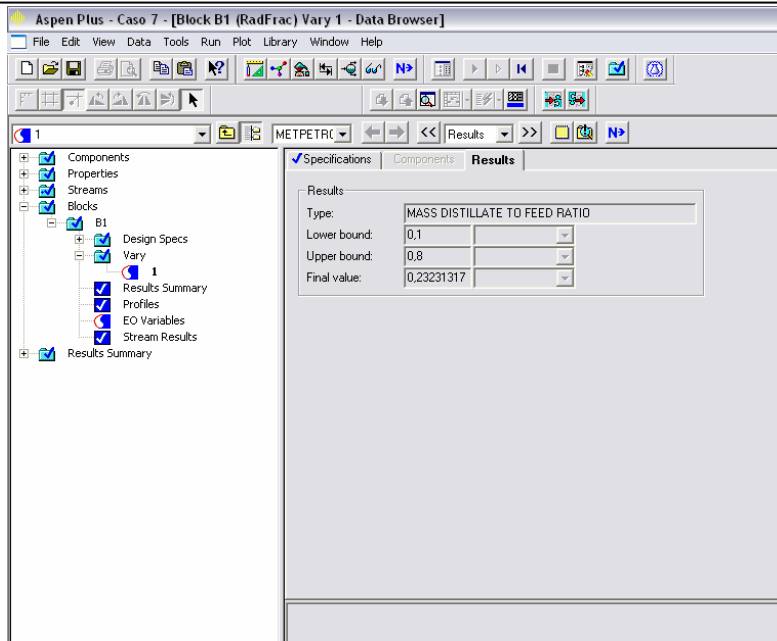
Stream Results Components Properties Streams Blocks

Material Heat Load Vol. % Curves Wt. % Curves Petro. Curves Poly. Curves

Curve view: ASTM D86 curve Pressure:

Streams	FEED	DESTILAD	RESIDUO	
Volume %	C	C	C	
0	90,5098314	76,5254703	106,915701	
5	96,6971155	81,3004438	110,000662	
10	99,1674129	83,1980731	111,21732	
30	102,566824	85,6879393	129,127949	
50	126,330024	87,5157901	146,188563	
70	153,238056	88,2597287	160,616146	
90	163,592991	92,327047	167,98721	
95	172,089509	94,8088495	175,636975	
100	180,584027	97,290652	183,28674	

Select view option.



CONCLUSIONES:

Las condiciones de operación necesarias en las columna para obtener un destilado con el 10% a 110°C, se han calculado mediante un Design Spec y son las siguientes:

Presión	Relación de reflujo	Destilado/carga	Nº pisos	Piso alimentación
1 atm	3	0,23	27 (25+2)	15

Caso 8

OBJETIVO

Cálculo de las condiciones de operación necesarias en una columna para obtener un destilado del 5% con una temperatura superior a 85°C y un contenido en pesados (superiores a C5) inferior al 5 % en peso.

La corriente alimentada presenta la siguiente curva de destilación y análisis de “light end”.

<u>Curva destilación ASTM D-86</u>		<u>Análisis "light ends"</u>	
<u>Dest (% vol.)</u>	<u>Temp (°C)</u>	<u>Componente</u>	<u>% peso</u>
0	41	isobutano	0,02
5	59	n-butano	0,43
10	67	2-Me-butano	3,90
30	89	n-pentano	6,74
50	100	22-DiMe-butano	0,05
70	118	2-Me-pentano	4,46
90	134	3-Me-pentano	1,82
95	143	n-hexano	5,89
100	153	Me-Ciclopentano	3,73

Specific Gravity carga: 0,7298

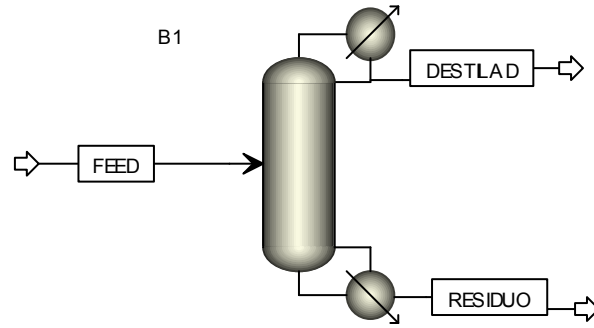
La columna a emplear tiene las siguientes características:

- Número de platos: 20
- Plato de alimentación:10
- Pérdida de carga no significativa.

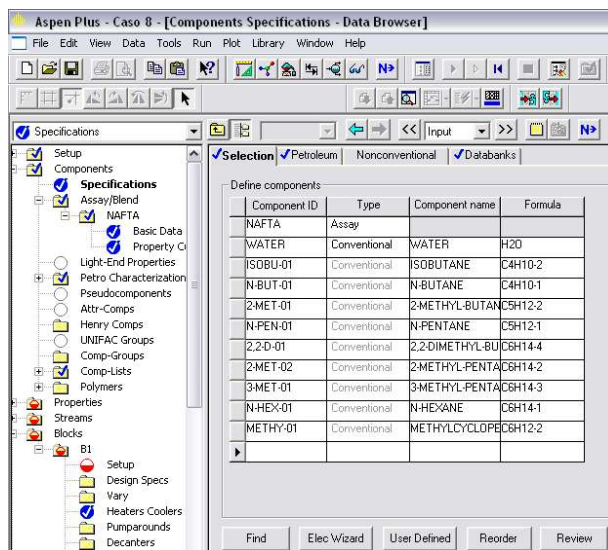
PROCEDIMIENTO:

Comenzamos el caso eligiendo como plantilla un modelo de petróleo con unidades métricas.

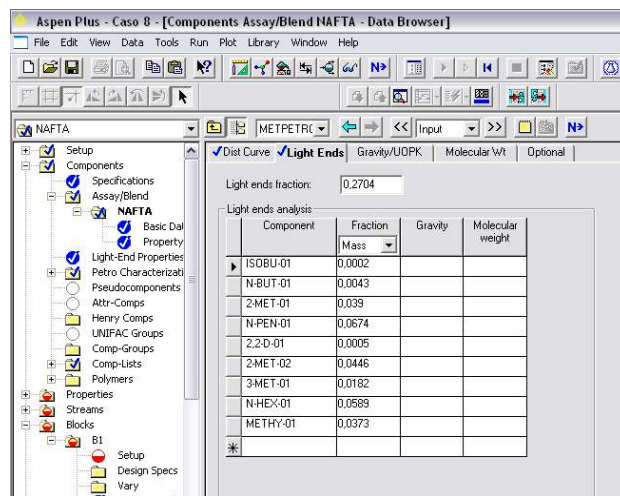
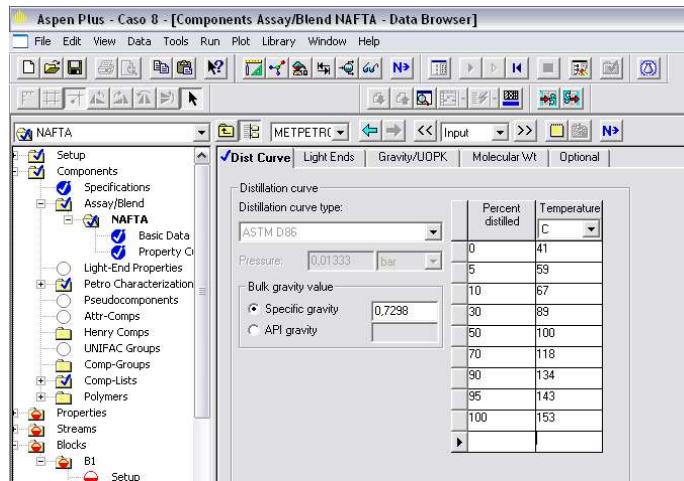
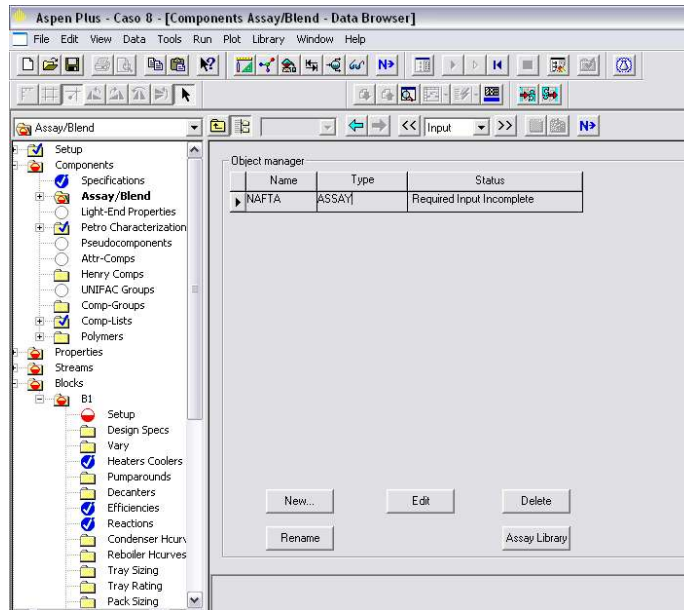
Posteriormente colocamos una columna RadFrac y tres corrientes materiales (alimentación, destilado y residuo).



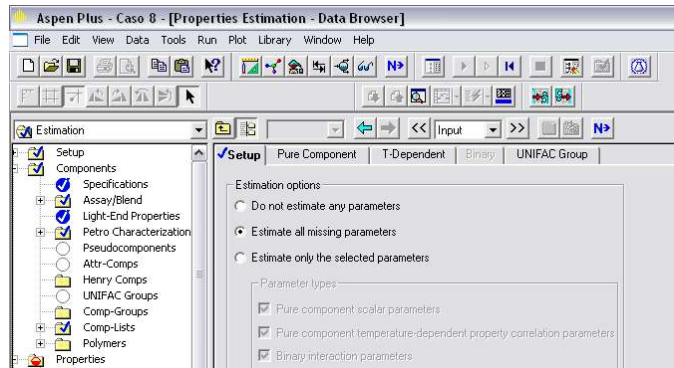
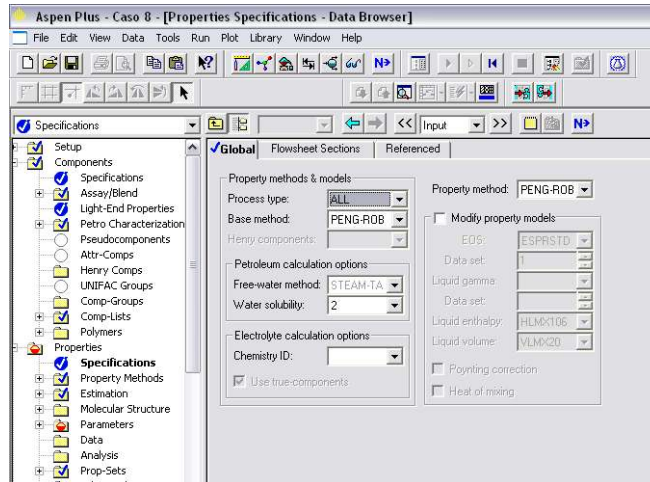
Luego indicamos los componentes (la nafta, los componentes del light end y el agua).



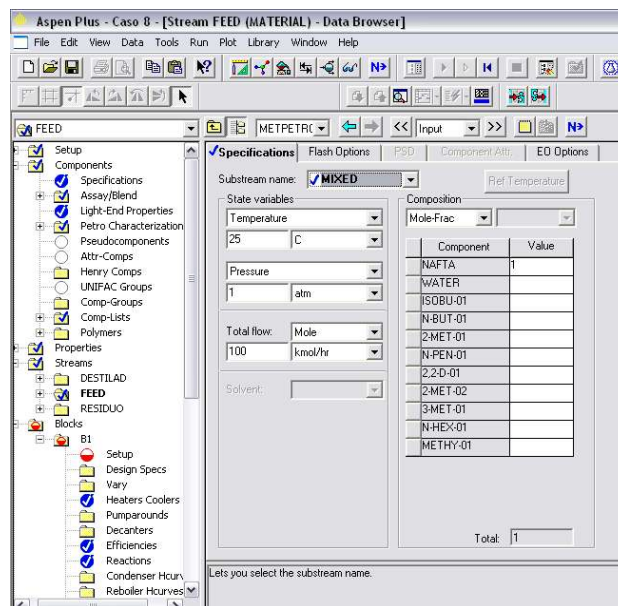
Luego en la carpeta de Component \rightarrow Assay/Blend seleccionamos la nafta y pinchamos en Edit e indicamos la composición de la curva de destilación y la composición de los light end.



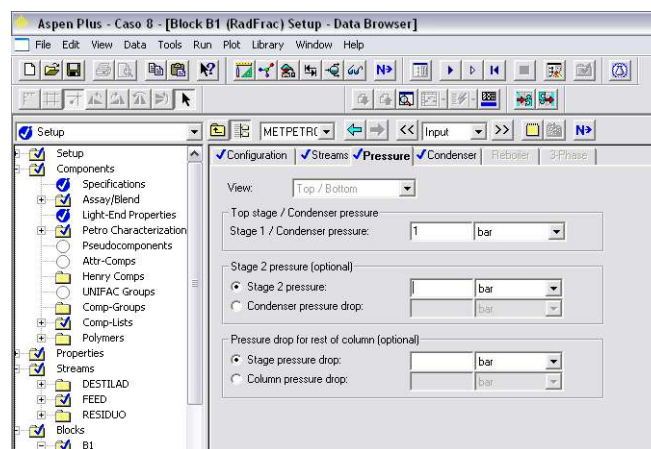
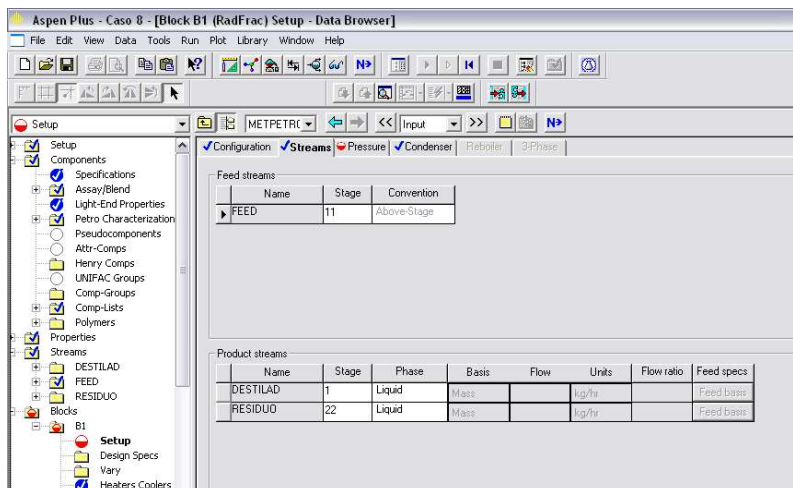
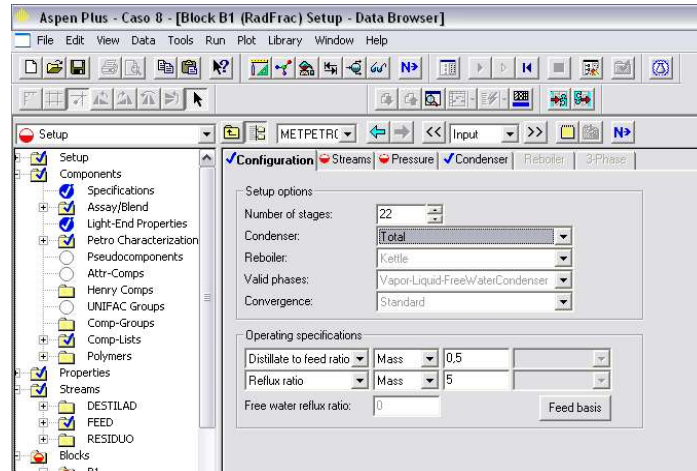
Posteriormente indicamos la base de cálculo Peng-Robinson y que el programa estime los parámetros desconocidos.



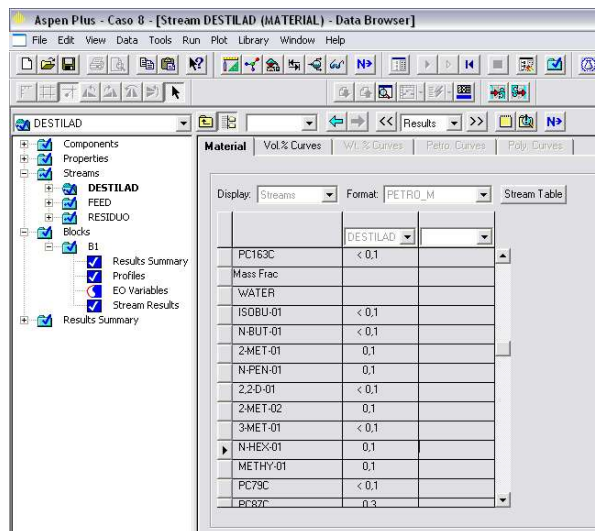
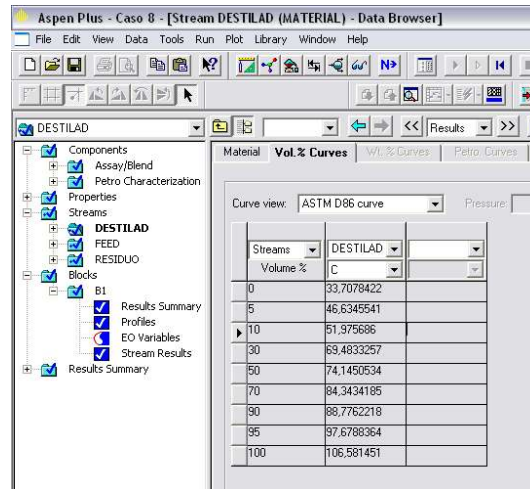
Posteriormente indicamos las condiciones de la corriente de alimentación (25°C, presión 1 atmósfera, 100 kmol/h)



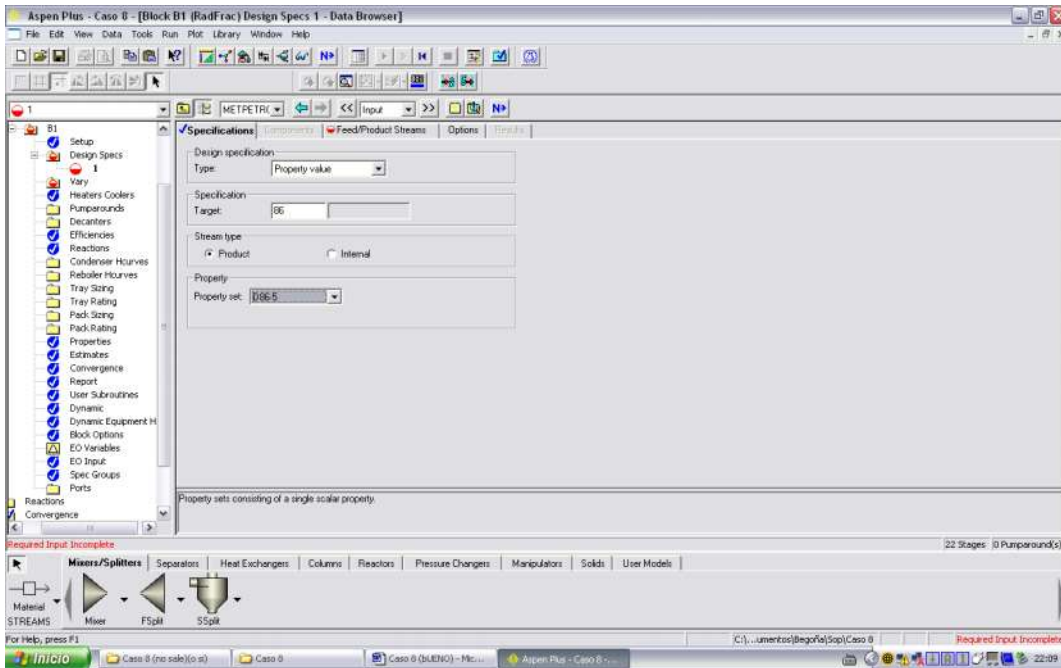
Luego indicamos unas condiciones de operación para la columna, y en caso de no cumplirse las especificaciones necesarias se utilizará un diseño de especificaciones. Se pondrá un número de pisos de 22 (20 +2), relación de reflujo de 5 y una relación destilado carga de 0.5. La alimentación se introduce en el piso 11 (10+1). Y la presión se supone atmosférica.



Los resultados obtenidos son:

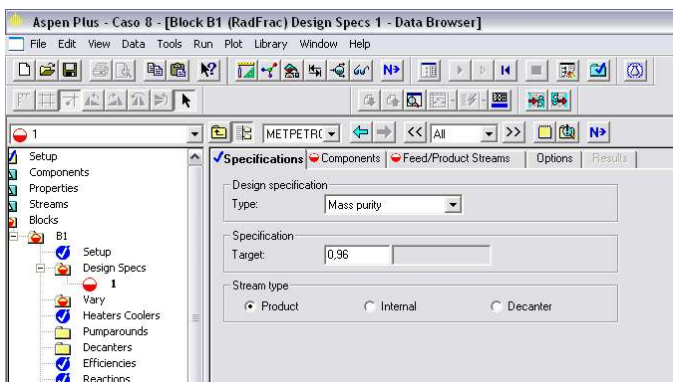


Como se observa no se cumple la especificación del 5% temperatura igual o superior a 85°C. Para conseguirlo utilizamos un diseño de especificaciones. Consideramos en Define la variable D-85 5 en el valor de Property Value en un valor de 86°C en el residuo. En Vary consideramos la relación D/F que varíe entre 0,1 y 0,99.



Para conseguir la especificación del contenido en pesados (superiores a C5) inferior al 5% se varia la relación de reflujo, pero sin embargo no se consigue la especificación deseada.

(DEJAR, pero quitar en el de mandar).



CONCLUSIONES:

Recortar pantallas

Caso 9

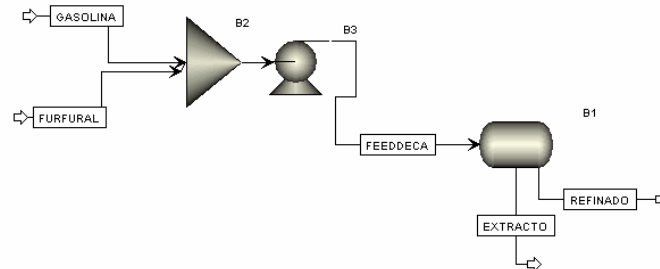
OBJETIVO

El objetivo de este caso es reducir el contenido de benceno (inferior al 1%) de una gasolina mediante una extracción líquido-líquido. Como gasolina se utiliza una mezcla de n-hexano y benceno (con 95 y 5% en peso respectivamente) y como disolvente se utiliza furfural. Se determinarán las condiciones de operación (relación furfural/carga y temperatura) para los siguientes casos:

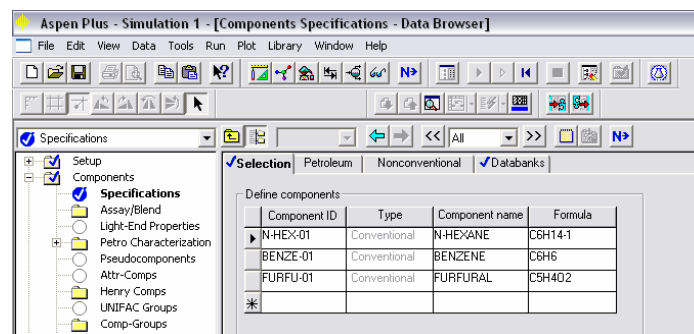
- Utilizando un decantador existente en la planta y con una presión de 3 atmósferas.
- Con una columna de extracción de 5 etapas a una presión de 3 atmósferas.

PROCEDIMIENTO A:

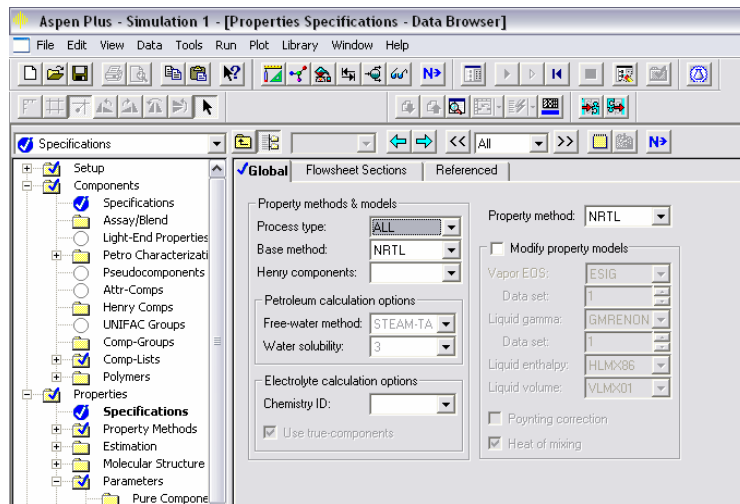
En primer lugar colocamos un mezclador, para mezclar la gasolina y el disolvente (furfural) que entran como una única corriente (feed) al decantador disponible en la planta. Del decantador se obtienen dos corrientes (la fase extracto y refinado). Entre el mezclador y el decantador se ha considerado una bomba para alcanzar la presión de 3 atmósferas requerida en el decantador.



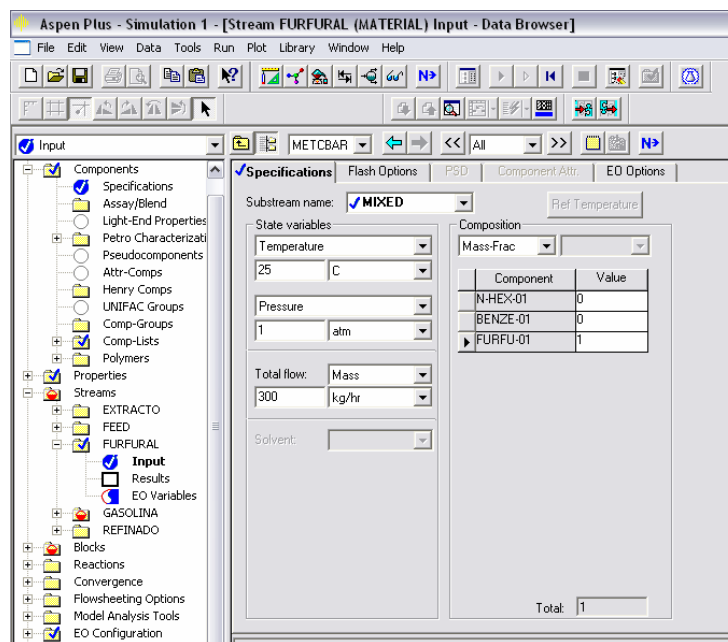
Posteriormente indicamos los compuestos que intervienen en la simulación (n-hexano, benceno y furfural)

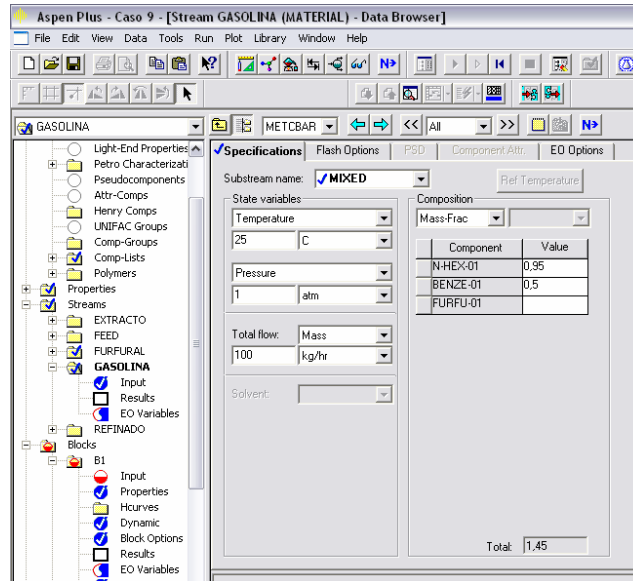


Posteriormente seleccionamos el modelo termodinámico, en este caso se utilizará el modelo de coeficiente de actividad NRTL, ya que, tenemos compuesto no ideales con gran polaridad.

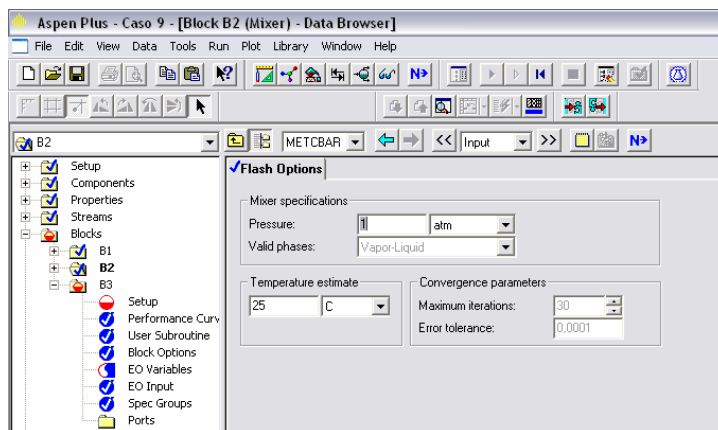


Posteriormente indicamos las condiciones de las corrientes. Supondremos que todas se encuentran a 25°C y 1 atm ósfera. Además supondremos un caudal de disolvente de 300 Kg/h y un caudal de gasolina de 100 Kg/h. Una vez resuelto el caso se comprueba si la corriente obtenida tiene menos de un 1% de benceno. Si no se cumple esta especificación, se hará un análisis de sensibilidad para determinar las condiciones necesarias.

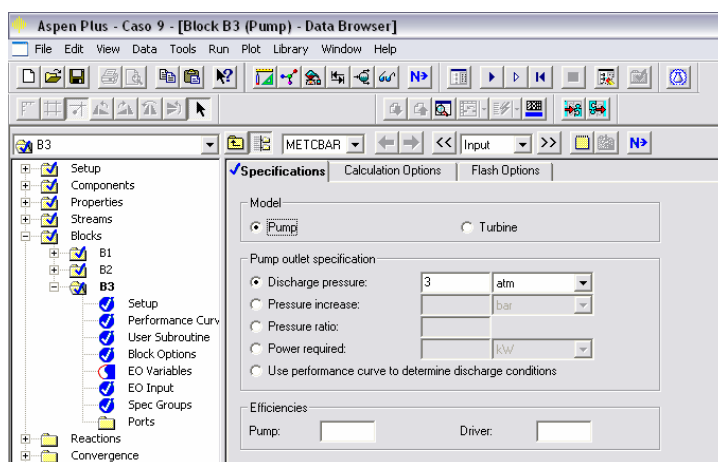




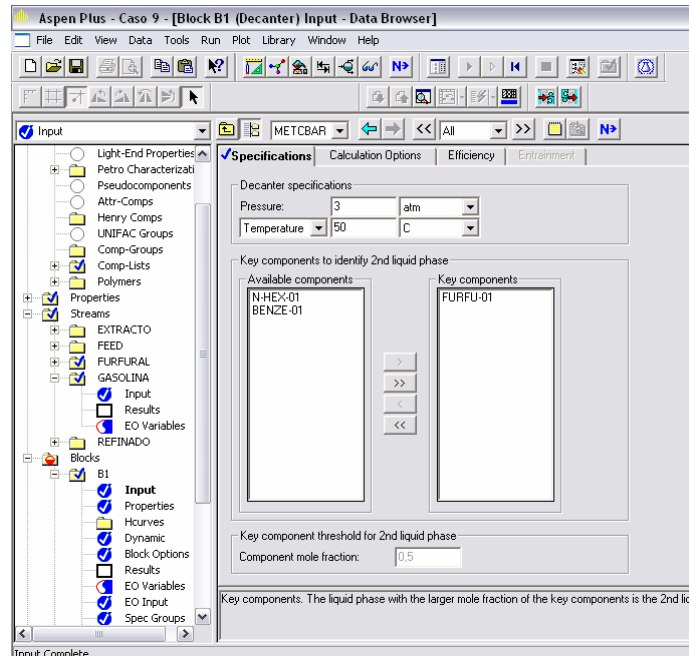
Luego indicamos las condiciones del mezclador (25°C y 1 atmósfera).



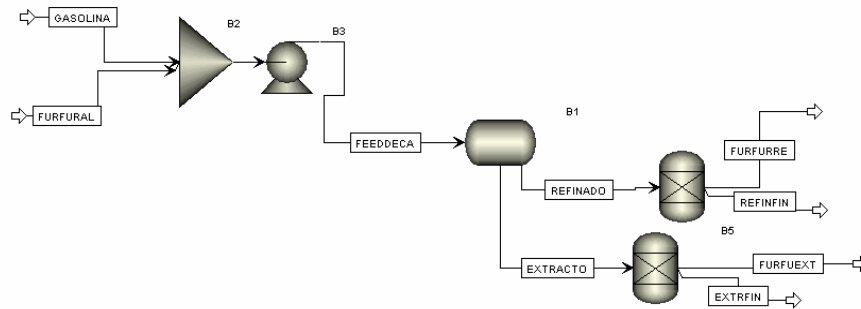
Indicamos la presión de descarga de la bomba en tres atmósferas.



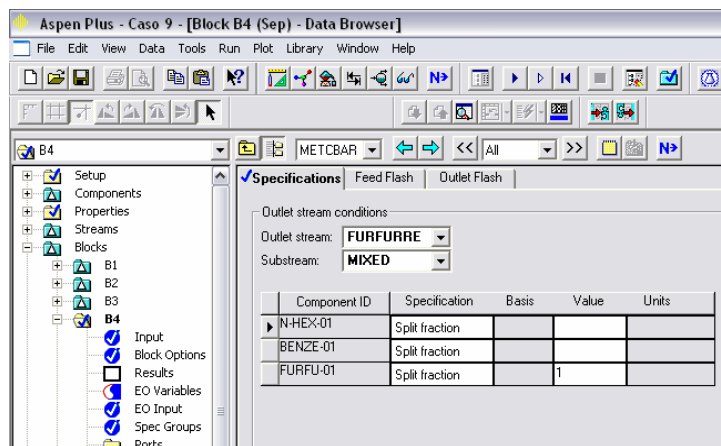
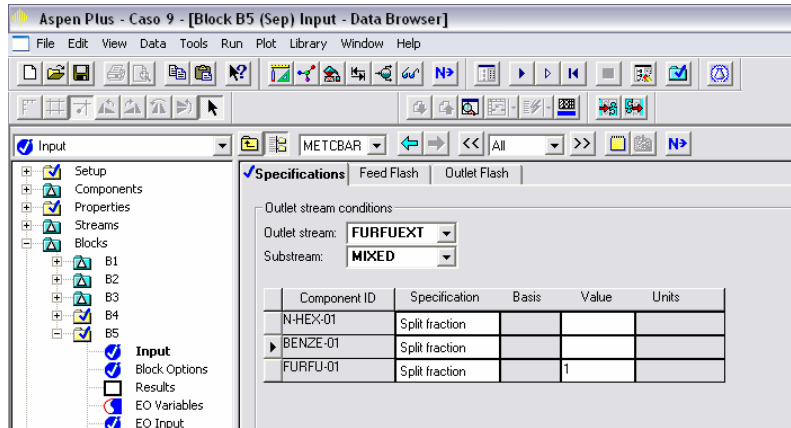
Posteriormente se indica las condiciones del decantador se considerará la presión dada por el problema (3 atm) y una temperatura de 50°C (las extracciones suelen operar entre 25 y 50°C). Como Key componente indicamos el agente extractor (furfural).



Ahora se colocan dos separadores simples para eliminar el furfural de la corriente de extracto y refinado.



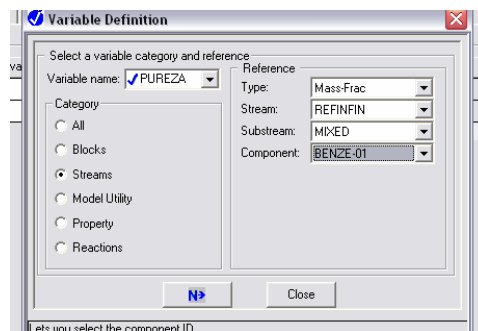
En los separadores indicamos que las corrientes que tienen furfural (furfurre y furfuext) presenten un split fracción de 1. con esta especificación se indica que en dicha corrientes sólo sale furfural (separación perfecta 100% del furfural).

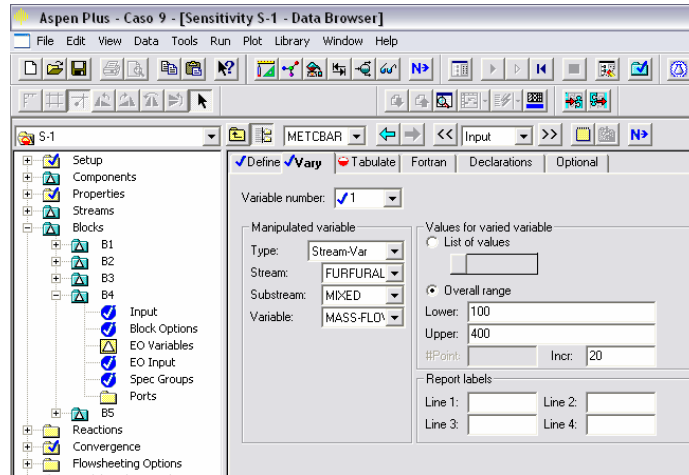


Los resultados obtenidos son:

caso 9			
Stream ID		EXTRFIN	REFINFIN
Temperature	C	50,0	50,0
Pressure	bar	3,040	3,040
Vapor Frac		0,000	0,000
Mole Flow	kmol/hr	0,561	0,606
Mass Flow	kg/hr	47,860	52,140
Volume Flow	cum/hr	0,073	0,081
Enthalpy	MM kcal/hr	-0,022	-0,028
Mass Flow	kg/hr		
N-HEX-01		43,368	51,632
BENZE-01		4,492	0,508
FURFU-01			
Mass Frac			
N-HEX-01		0,906	0,990
BENZE-01		0,094	0,010
FURFU-01			
Mole Flow	kmol/hr		
N-HEX-01		0,503	0,599
BENZE-01		0,058	0,007
FURFU-01			
Mole Frac			
N-HEX-01		0,897	0,989
BENZE-01		0,103	0,011
FURFU-01			

La concentración de benceno obtenida en la corriente de refinado es superior al 1%, con lo cual las condiciones de operación seleccionadas no son las adecuadas. Se hace un análisis de sensibilidad en el que como variable a obtener (define) se define la fracción másica de benceno en el refinado. Como variable manipulada (vary) se varía el caudal másico de la corriente de disolvente (furfural).





Los resultados obtenidos se muestran en la siguiente tabla:

Caudal furfural (Kg/h)	Fracción másica (extracto final)
100	0,02338905
120	0,02052634
140	0,01828493
160	0,01647969
180	0,01500039
200	0,01376414
220	0,01271561
240	0,0118152
260	0,01103362
280	0,01034889
300	0,00974257
320	0,00920455
340	0,00872275
360	0,00828881
380	0,007896
400	0,00753867

Podemos repetir la simulación a una temperatura más baja (25°C), para ver cómo influye la temperatura en la solubilidad disuelve nte- gasolina. Repitiendo el análisis de sensibilidad considerando un intervalo de fu rfural entre 25 y 100 Kg/h, se obtienen los siguientes resultados:

Caudal furfural (Kg/h)	Fracción másica (extracto final)
25	0,03495834
30	0,02950652
35	0,02526414
40	0,02191257
45	0,01922235
50	0,01703165
55	0,01522621
60	0,01372207

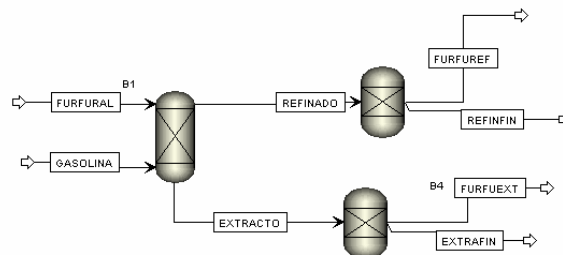
Caudal furfural (Kg/h)	Fracción másica (extracto final)
65	0,01245098
70	0,01137119
75	0,01044501
80	0,0096439
85	0,00894636
90	0,00833412
95	0,00779207
100	0,0073084

Según los resultados obtenidos a menor temperatura la separación es más fácil, pues se necesita un caudal de disolvente inferior.

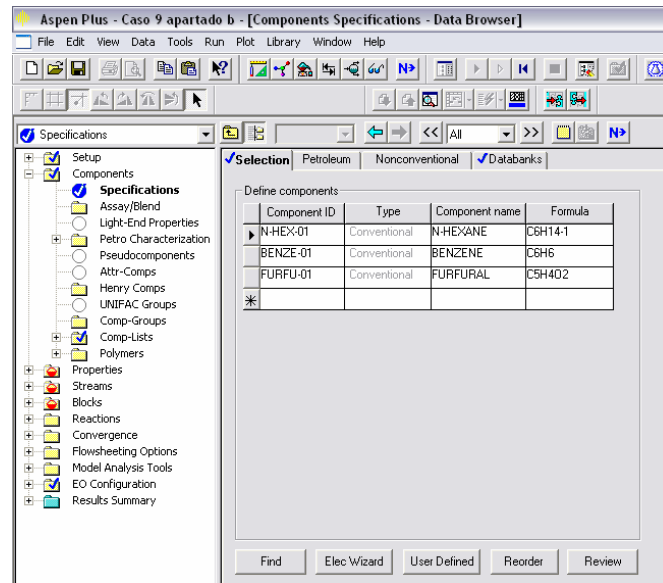
PROCEDIMIENTO B:

Para esta simulación consideramos una columna de extracción de 5 etapas y con una presión de 3 atm. Además se colocarán dos columnas de separación simples para recuperar el furfural de la corriente de extracto y refinado.

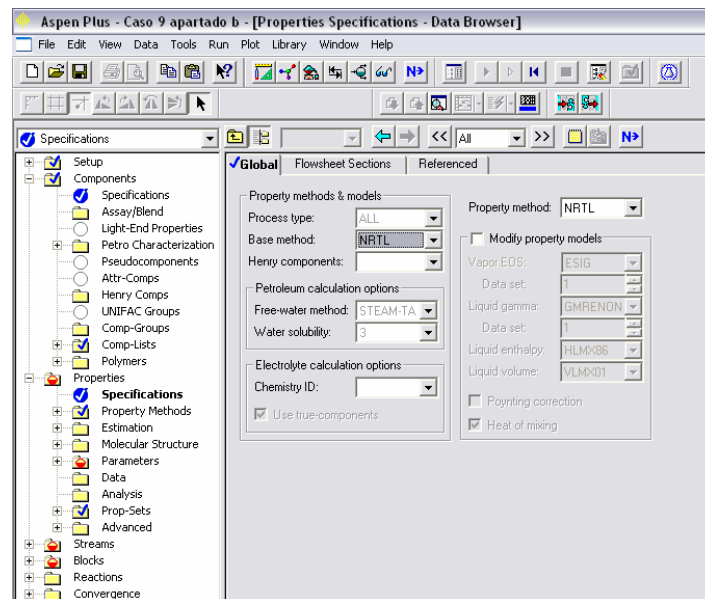
El furfural se introduce por la parte superior de la torre de extracción, ya que es más pesado que la gasolina. Como productos se obtienen dos corrientes: una de refinado por la parte superior (gasolina con menor cantidad de benceno) y otra de extracto por la parte inferior (contiene la mayoría del disolvente).



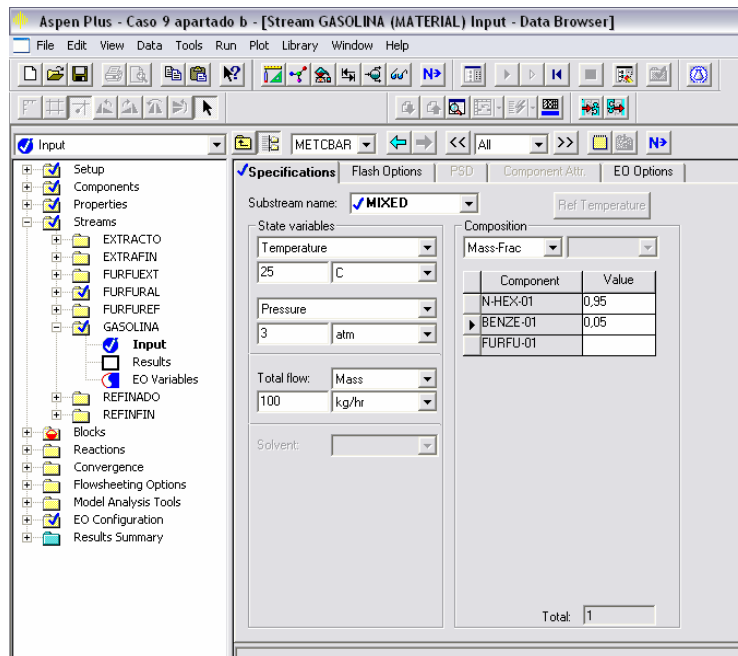
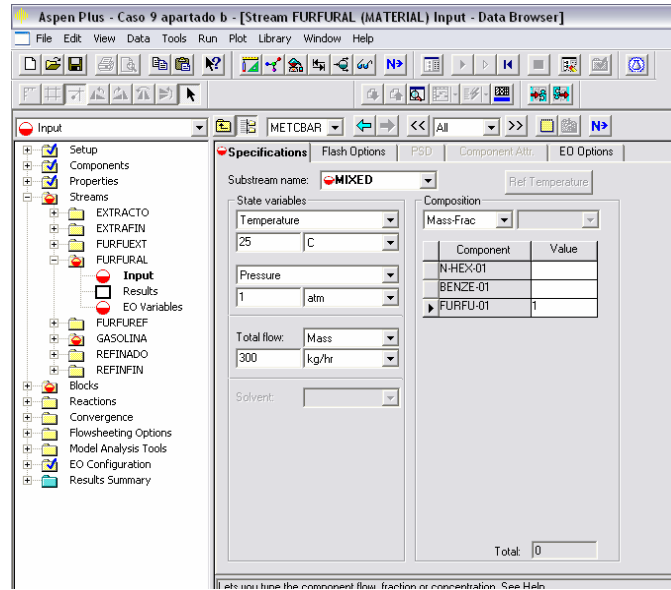
Indicamos los componentes que intervienen en la simulación:



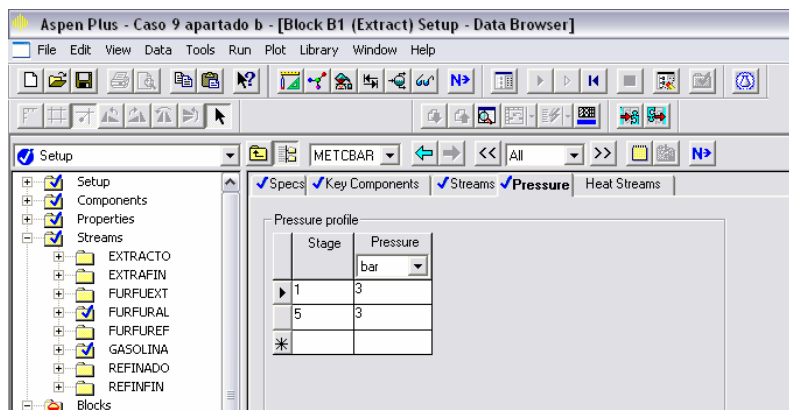
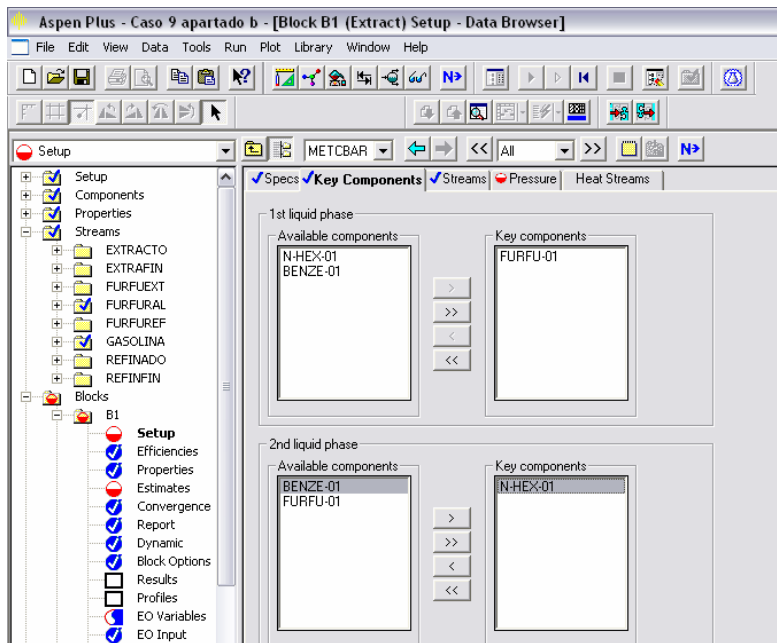
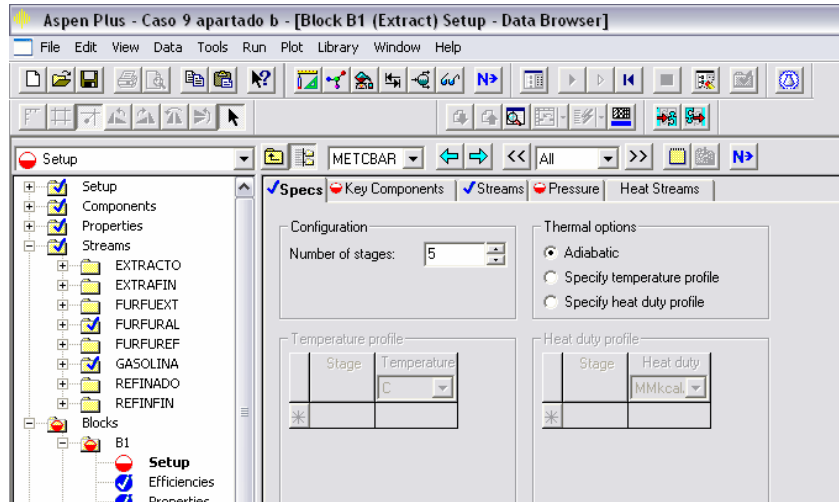
Posteriormente seleccionamos el modelo termodinámico, en este caso se utilizará el modelo de coeficiente de actividad NRTL, ya que, tenemos compuesto no ideales con gran polaridad.

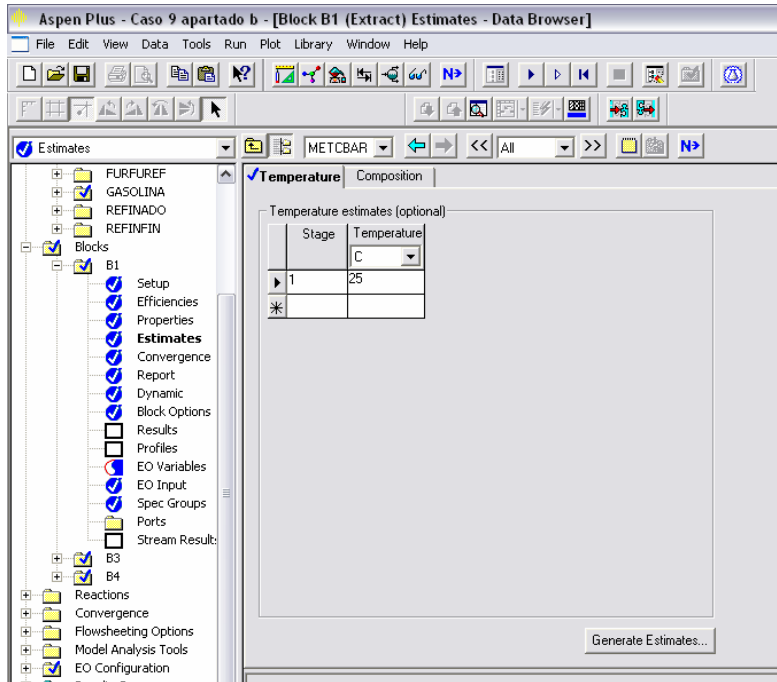


Indicamos las condiciones de las corrientes de entrada (25°C y 3 atm) y supondremos una corriente de furfural de 300 kg/h para un caudal de gasolina de 100 Kg/h. Para ajustar las condiciones, posteriormente se realizará un análisis de sensibilidad.



En las especificaciones de la columna de extracción indicamos el número de etapas (5), que el Key component de la primera fase líquida es el furfural y el de la segunda es el n-hexano (componentes mayoritarios de ambas corrientes). Además indicaremos el perfil de presiones (presión 3 atmósferas en el plato 1 y 5). También hay que indicar la temperatura en el primer plato (25°C).

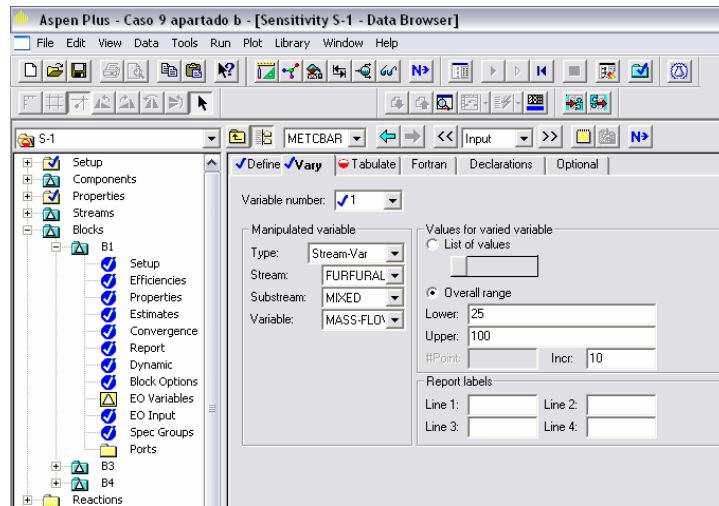
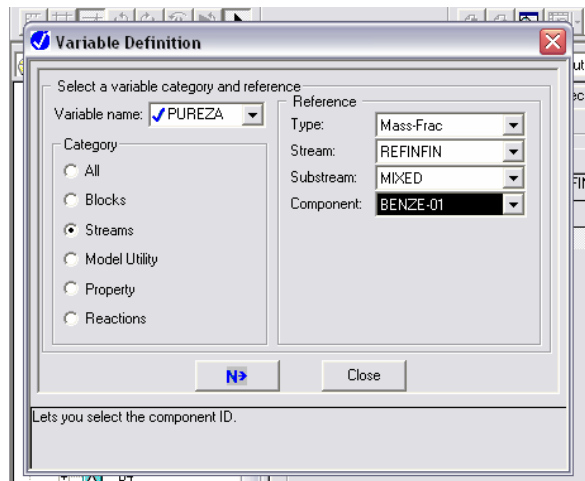




Para las columnas de separación de furfural se procede exactamente igual que en el apartado a. Los resultados obtenidos son:

caso 9 apartado b		
Stream ID		REFINFIN
Temperature	C	22,1
Pressure	bar	3,000
Vapor Frac		0,000
Mole Flow	kmol/hr	0,692
Mass Flow	kg/hr	59,632
Volume Flow	cum/hr	0,089
Enthalpy	MMkcal/hr	-0,033
Mass Flow	kg/hr	
		N-HEX-01 59,632
		BENZE-01 trace
		FURFU-01
Mass Frac		
		N-HEX-01 1,000
		BENZE-01 2 PPB
		FURFU-01
Mole Flow	kmol/hr	
		N-HEX-01 0,692
		BENZE-01 trace
		FURFU-01

Como la fracción de benceno puede ser superior a la obtenida (es decir la cantidad de disolvente puede ser inferior), hacemos un análisis de sensibilidad considerando una caudal de furfural entre 25 y 100 Kg/h.



Los resultados obtenidos se muestran en la siguiente tabla:

Caudal furfural (Kg/h)	Fracción másica (extracto final)
25	0,02555095
30	0,01632786
35	0,0107826
40	0,00719947
45	0,0049054
50	0,00334519
55	0,00227913
60	1,54E-03
65	1,03E-03
70	0,00068852
75	0,00045872
80	0,00030412
85	0,00020097
90	0,00013403
95	8,77E-05
100	5,76E-05

CONCLUSIONES:

Como hemos estudiado en el apartado a, la temperatura es un factor que afecta a la extracción (a diferencia de en destilación, donde influyen menos). En este sistema, a mayor temperatura más fácil es conseguir la extracción deseada.

Comparando la utilización de un decantador y de una columna de extracción, se observa como en la columna de extracción la operación es más sencilla (se necesita menos disolvente para producir la extracción). Esto es debido a que se tienen varias etapas de equilibrio y el contacto del disolvente y la alimentación es más eficaz.

Caso	T ^a (°C)	Presión (atm)	relación furfural/carga
decantador	50	3	3
decantador	25	3	0,8
columna	25	3	0,4

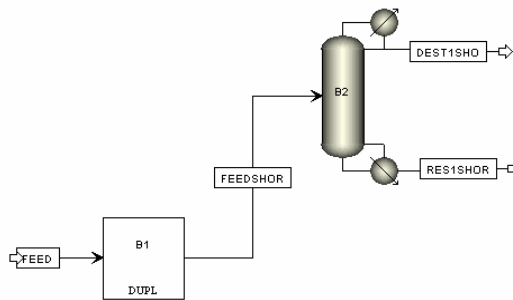
Caso 10

OBJETIVO

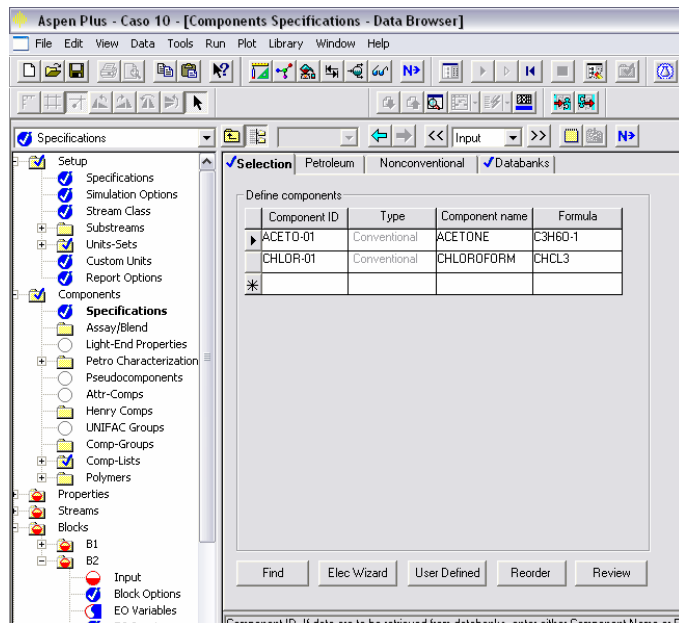
Obtener acetona y cloroformo con una pureza superior al 99% partiendo de una mezcla equimolar de dichos compuestos. Para ello se disponen de dos columnas que pueden operar entre 1 y 5 atm. De presión y sin límite de relación de reflujo.

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 RadFrac.



Posteriormente se indican los componentes que participan en la simulación:



Aspen Plus - Caso 10 - [Components Specifications - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

Specifications

- Setup
 - Specifications
 - Simulation Options
 - Stream Class
 - Substreams
 - Units-Sets
 - Custom Units
 - Report Options
- Components
 - Specifications
 - Assay/Blend
 - Light-End Properties
 - Petro Characterization
 - Pseudocomponents
 - Attr-Comps
 - Henry Comps
 - UNIFAC Groups
 - Comp-Groups
 - Comp-Lists
 - Polymers
 - Properties
 - Streams
 - Blocks
 - B1
 - B2
 - Input
 - Block Options
 - EO Variables
 - CO Variables

Selection Petroleum Nonconventional Databanks

Define components

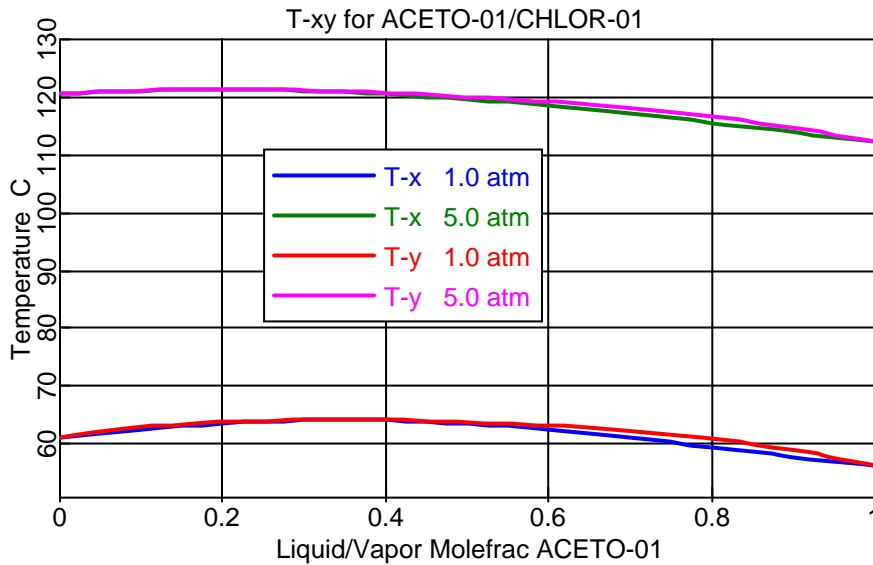
Component ID	Type	Component name	Formula
ACETO-01	Conventional	ACETONE	C3H6O-1
CHLOR-01	Conventional	CHLOROFORM	CHCL3
*			

Find Elec Wizard User Defined Reorder Review

Component ID: If data are to be retrieved from databanks, enter either Component Name or Formula

Después indicamos el modelo termodinámico a utilizar. En este caso se ha considerado adecuado un modelo NRTL, que es el que nos indica el problema.

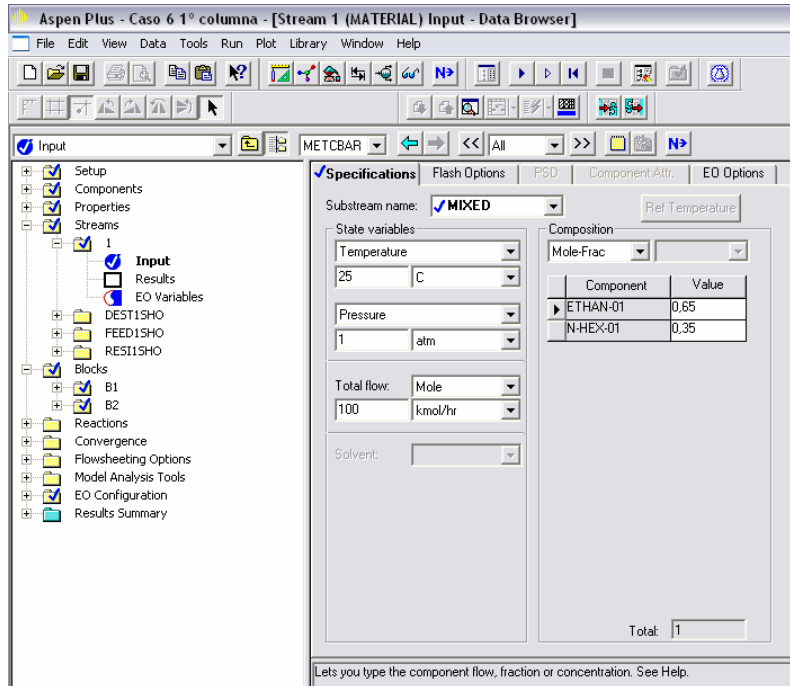
Para verificar que en esta mezcla existe un azeótropo, se representa los datos de equilibrio. (Tools → Análisis → Property → Binary) . Se indica el tipo de gráfico T-xy y la presión a la que se quieren obtener los datos (se ha indicado una presión de 1 y 5 atm).



Como se observa en la representación el sistema acetona-cloroformo forma un azeótropo. Para una presión de 5 atmósferas la composición del azeótropo es, aproximadamente, de una fracción molar de acetona de 0.2 y para 1 atmósfera la composición es de 0.35 de acetona.

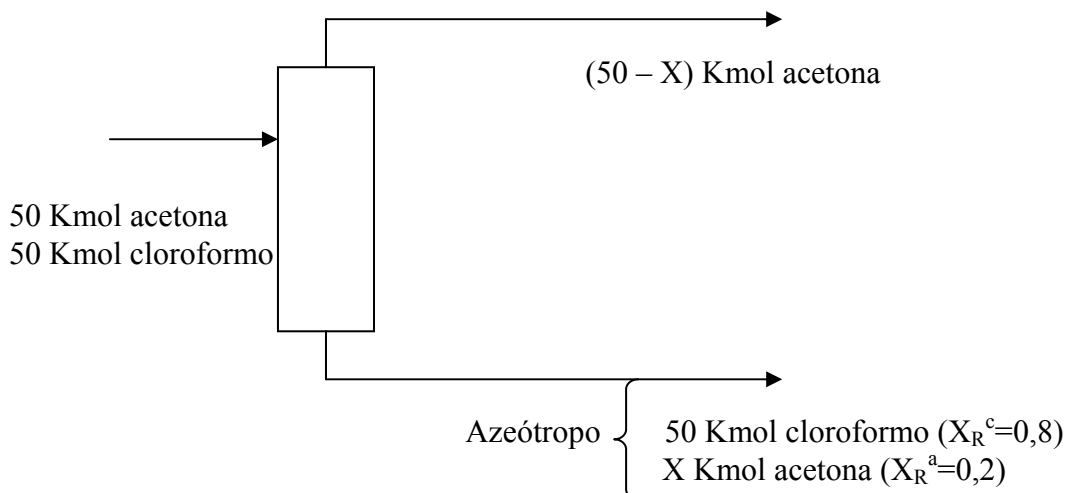
La forma de separar los azeótropos, para este sistema, es utilizar un sistema de separación PSD, utilizando una primera columna a alta presión (5 atmósferas) y posteriormente una columna a alta presión (1 atmósfera). De la columna de alta presión se obtiene, como producto de cabeza, acetona de gran pureza, y por fondo se obtiene el azeótropo correspondiente. En la columna de baja presión se obtiene, como producto de cabeza, cloroformo de gran pureza, y por fondo se obtiene el azeótropo correspondiente. El problema que presenta la separación es el elevado número de platos que serán necesarios, ya que, las curvas de equilibrio se encuentran muy juntas.

Indicamos las condiciones de la corriente de entrada (25°C, 5 atm, fracción molar de cloroformo y acetona 0,5 en fracción molar).



Para la primera columna, a alta presión, en la simulación de la Shortcut indicamos una relación de reflujo inicial de 15 (valor muy elevado, ya que la separación es muy compleja). Después indicamos la recuperación del componente clave pesado (cloroformo) en un valor muy bajo (por ejemplo 0,0000001) y el componente clave ligero es la acetona. Para fijar la recuperación de esta debemos realizar el siguiente cálculo:

- Datos iniciales supuestos:
- Alimentación 100 Kmol.
 - cloroformo en el destilado: 0 Kmol.



- Cálculo del caudal de residuo

Aplicando la siguiente regla de tres:

$$\left. \begin{array}{l} 50 \text{ Kmol cloroformo} \text{ ————— } 0,8 \\ \text{¿ (residuo total)} \text{ ————— } 1 \end{array} \right\}$$

Residuo total: 62,5 Kmol

- Cálculo del caudal de acetona en el residuo

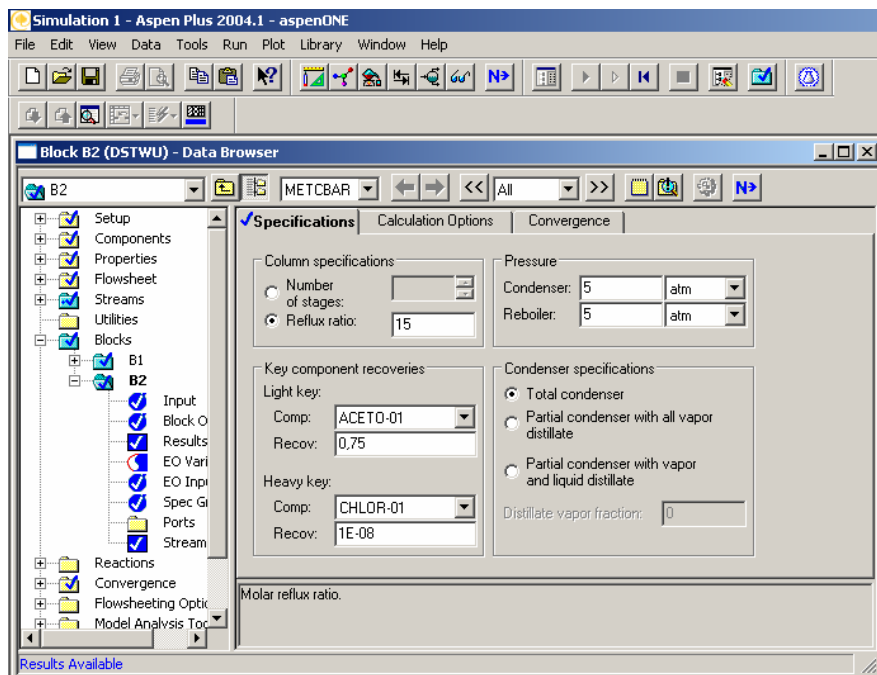
$$\text{Acetona en el residuo} = \text{Residuo} \cdot X_R^a = 62,5 \cdot 0,2 = 12,5 \text{ Kmol}$$

- Pérdida de acetona por fondo

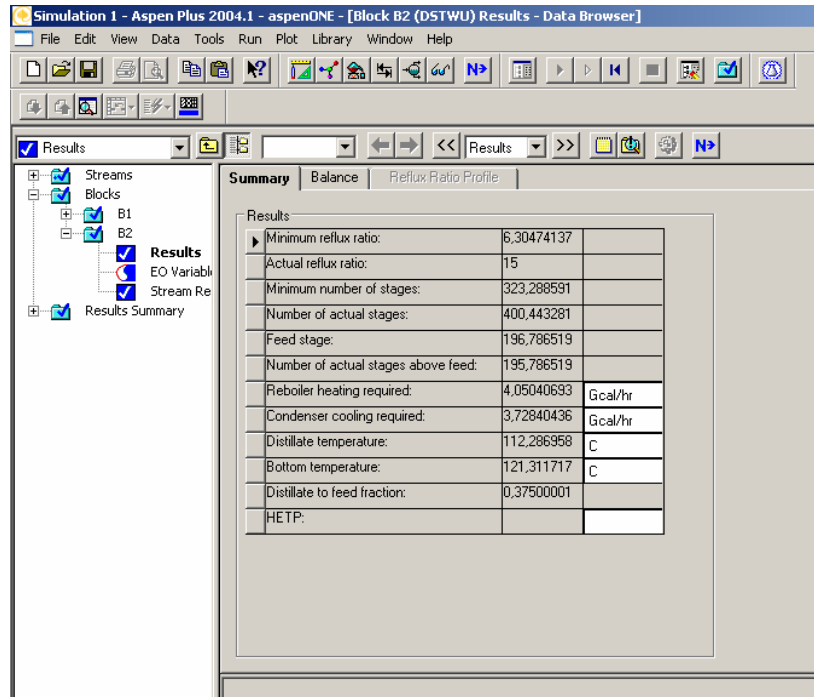
$$\text{pérdida de acetona por fondo} = \frac{\text{acetona en el residuo}}{\text{acetona alimentado}} = \frac{12,5}{50} = 0,25$$

- Recuperación de acetona por cabeza:

$$\text{Recuperación de acetona por cabeza} = 1 - \text{pérdida de acetona por fondo} = 1 - 0,25 = 0,75$$



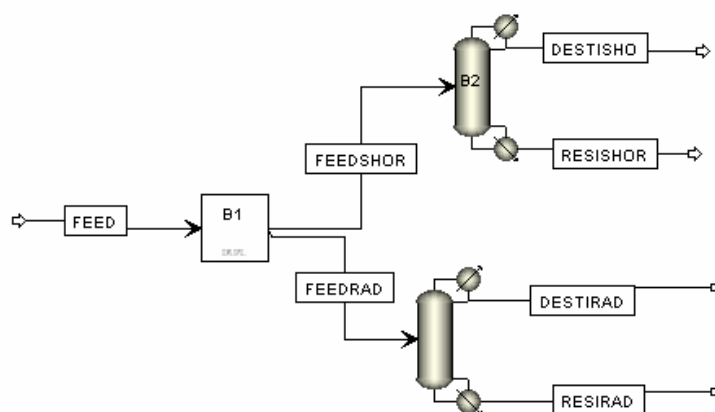
Los resultados obtenidos son:

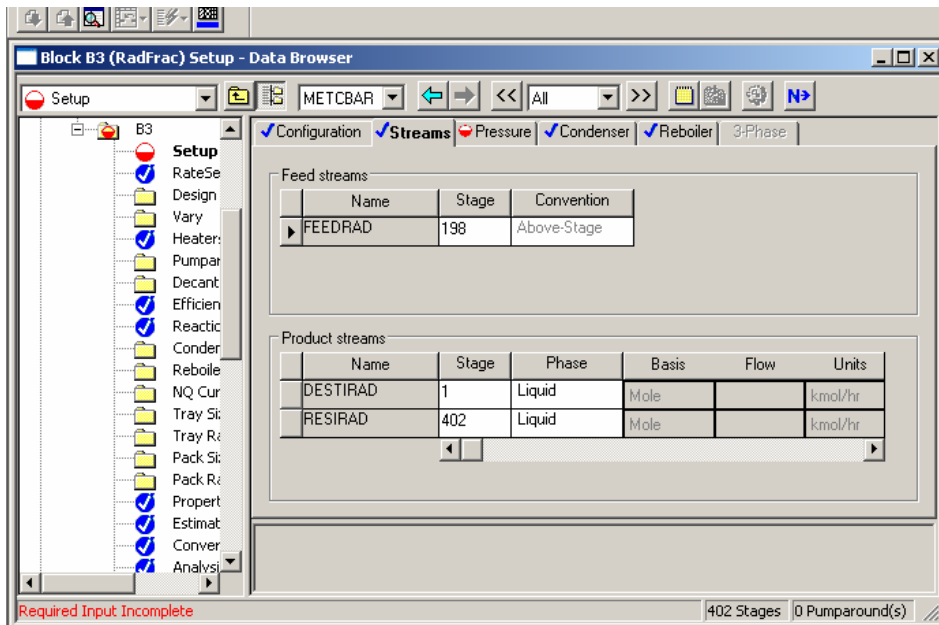
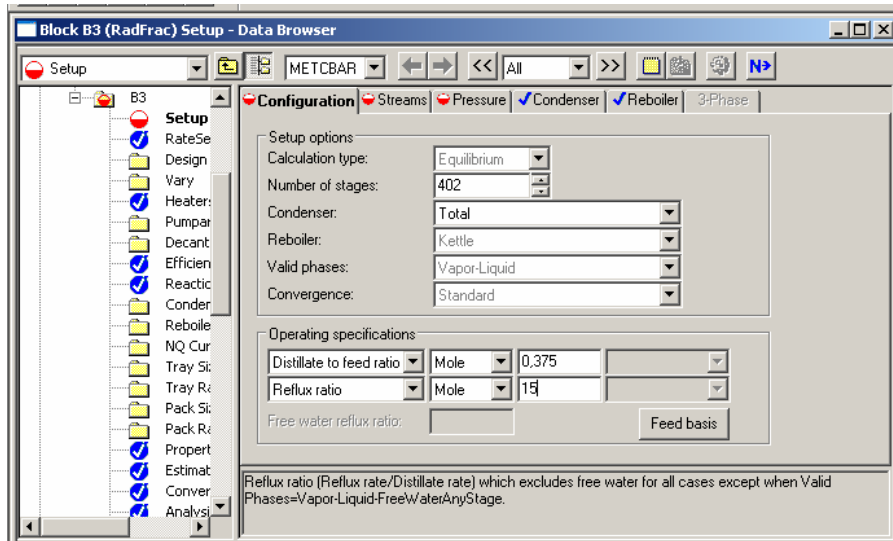


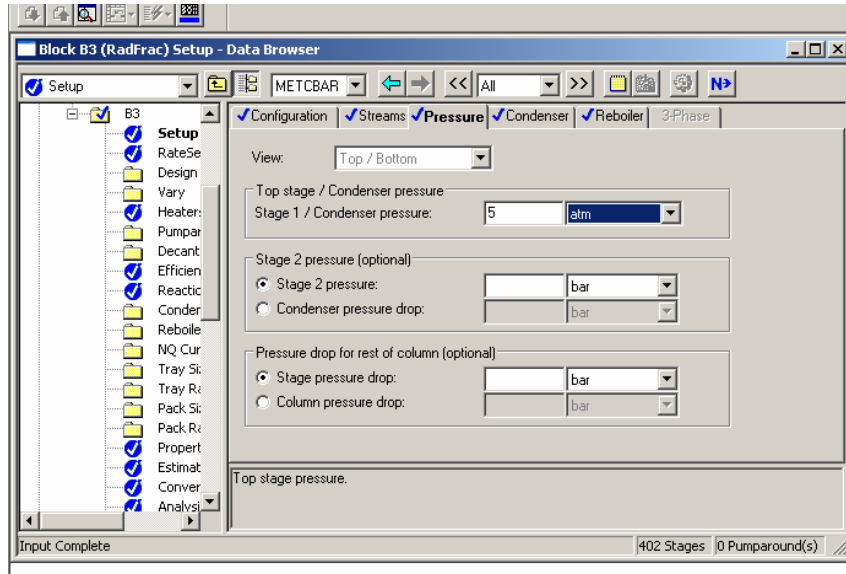
Results	
Minimum reflux ratio:	6.30474137
Actual reflux ratio:	15
Minimum number of stages:	323.288591
Number of actual stages:	400.443281
Feed stage:	196.786519
Number of actual stages above feed:	195.786519
Reboiler heating required:	4.05040693 Gcal/hr
Condenser cooling required:	3.72840436 Gcal/hr
Distillate temperature:	112.286958 C
Bottom temperature:	121.311717 C
Distillate to feed fraction:	0.37500001
HETP:	

El número de pisos obtenidos es muy elevado (400), a pesar de utilizar una relación de reflujo muy elevada. El número de pisos mínimos que se necesitan es también muy alto 323, lo que indica que la separación es muy difícil, lo cual ya se sospechaba por la forma de la curva de los datos de equilibrio.

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



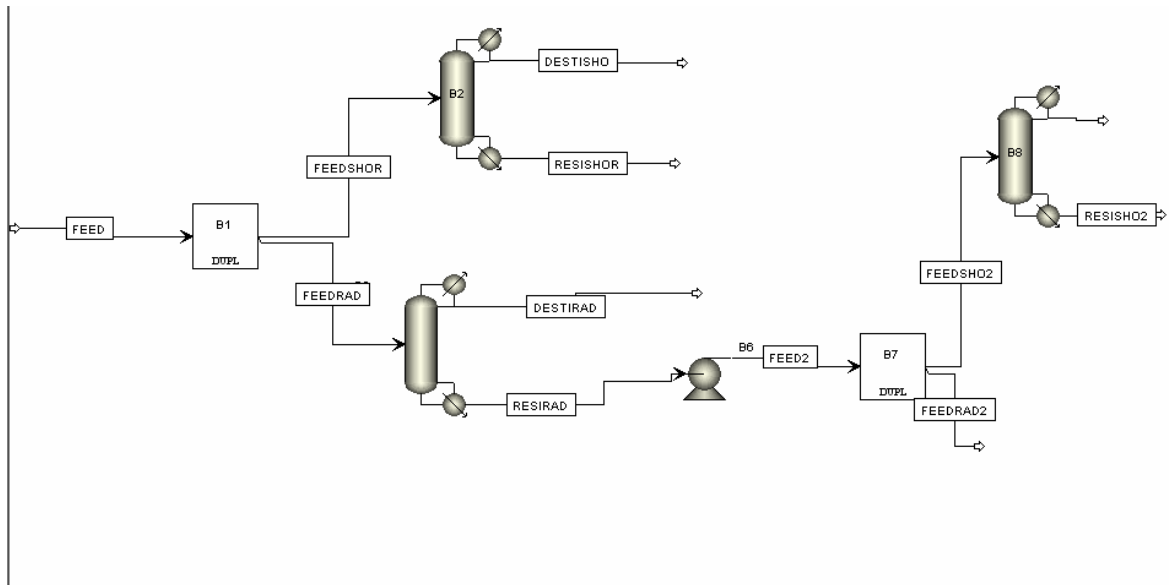




caso 10								
Stream ID		DESTIRAD	DESTISHO	FEED	FEEDRAD	FEEDSHOR	RESIRAD	RESISHOR
Temperature	C	112,3	112,3	25,0	25,0	25,0	121,3	121,3
Pressure	bar	5,066	5,066	5,066	5,066	5,066	5,066	5,066
Vapor Frac		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Mole Flow	kmol/hr	37,500	37,500	100,000	100,000	100,000	62,500	62,500
Mass Flow	kg/hr	2178,001	2178,002	8872,854	8872,854	8872,854	6694,853	6694,852
Volume Flow	cum/hr	3,228	3,228	7,731	7,731	7,731	5,744	5,744
Enthalpy	MMkcal/hr	-2,101	-2,101	-4,595	-4,595	-4,595	-2,172	-2,172
Mole Flow	kmol/hr							
ACETO-01		37,500	37,500	50,000	50,000	50,000	12,500	12,500
CHLOR-01		trace	trace	50,000	50,000	50,000	50,000	50,000
Mole Frac								
ACETO-01		1,000	1,000	0,500	0,500	0,500	0,200	0,200
CHLOR-01		trace	13 PPB	0,500	0,500	0,500	0,800	0,800

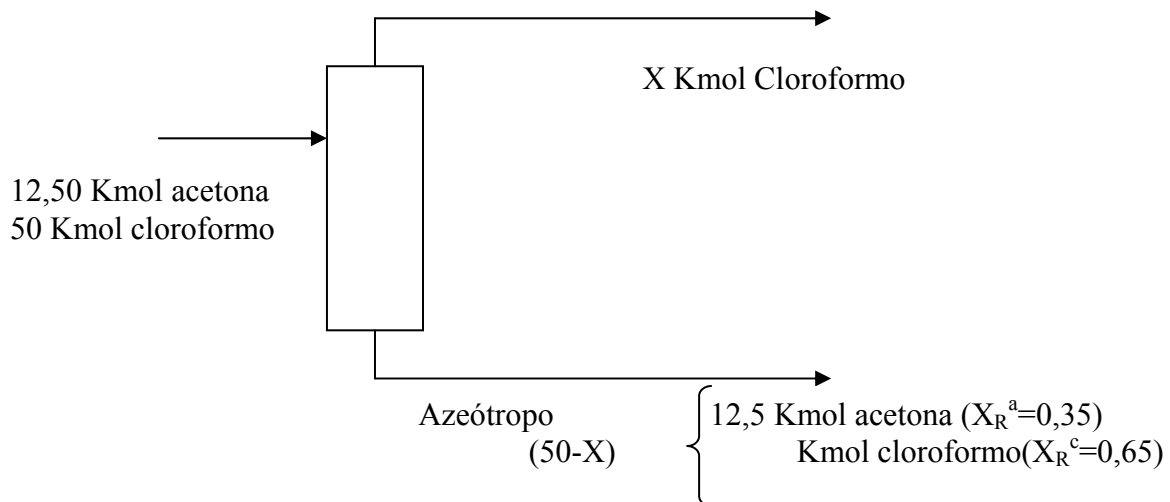
Los resultados obtenidos muestran como la acetona se obtiene prácticamente pura en el destilado y por fondo se obtienen el azeotropo correspondiente a una presión de 5 atm.

Una vez conseguido la acetona prácticamente pura utilizaremos una columna a baja presión para separar el cloroformo. En primer lugar colocamos una bomba para disminuir la presión hasta un valor de 1 atmósfera. Posteriormente colocamos un duplicador para facilitar la simulación con la Shortcut y posteriormente con la RadFrac.



Para la simulación de la Shortcut indicamos una relación de reflujo inicial de 15. Después indicamos la recuperación del componente clave pesado (acetona) en un valor muy bajo (0,00000001) y el componente clave ligero es el cloroformo. Para fijar la recuperación debemos de realizar el siguiente cálculo:

Datos iniciales:- Composición y caudal de la corriente de residuo de la 1º columna
 - Cloroformo en el destilado: 0 Kmól.



○ Cálculo del caudal de residuo

Aplicando la siguiente regla de tres:

$$\left. \begin{array}{l} 12,5 \text{ Kmól acetona} \text{-----} 0,35 \\ \text{¿ (residuo total)} \text{-----} 1 \end{array} \right\}$$

Residuo total: 35,71 Kmól

- Cálculo del caudal de cloroformo en el residuo

$$\text{cloroformo en el residuo} = \text{Residuo} \cdot X_r^c = 35,71 \cdot 0,65 = 23,21 \text{ Kmol}$$

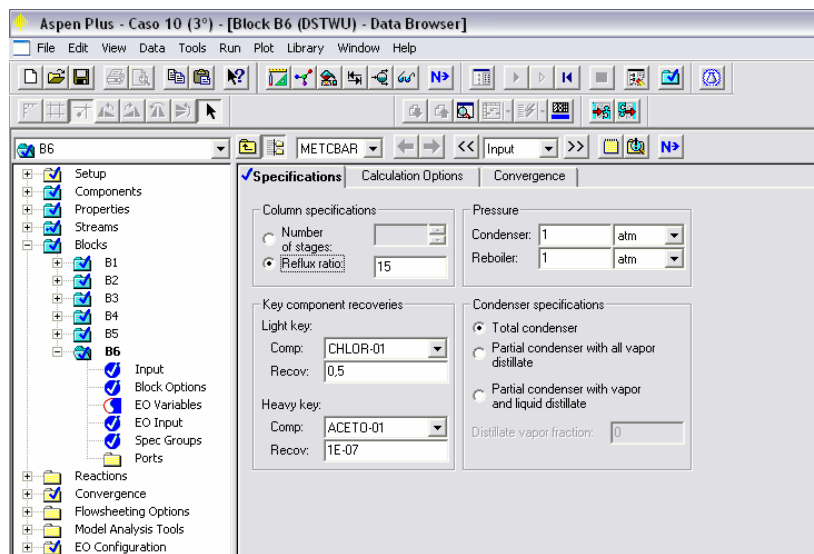
- Cálculo de la pérdida de cloroformo por fondo

$$\text{pérdida de cloroformo por fondo} = \frac{\text{cloroformo en el residuo}}{\text{cloroformo alimentado}} = \frac{23,21}{50} = 0,464$$

- Recuperación de cloroformo por cabeza:

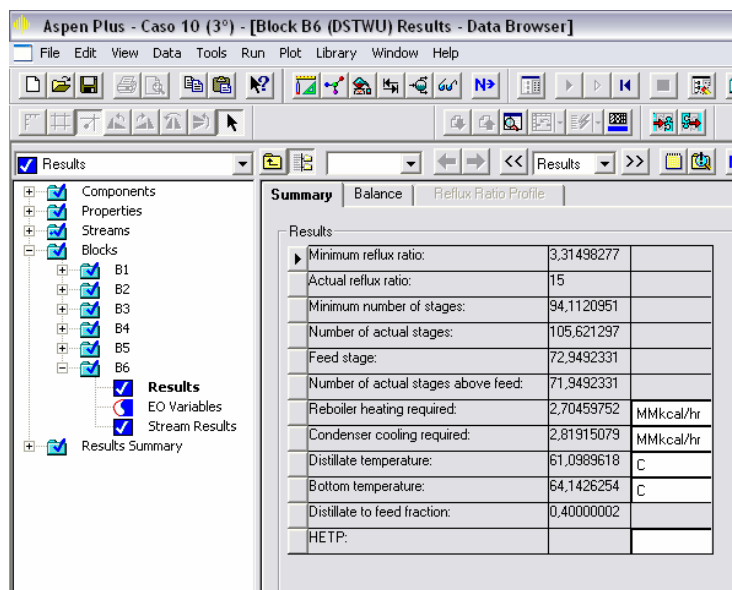
$$\text{Recuperación de cloroformo cabeza} = 1 - \text{pérdida de cloroformo fondo} = 1 - 0,464 = 0,54$$

Para la segunda columna, indicaremos un valor inferior a este teórico, 0,5, y simulamos el comportamiento de esta columna con las siguientes condiciones:

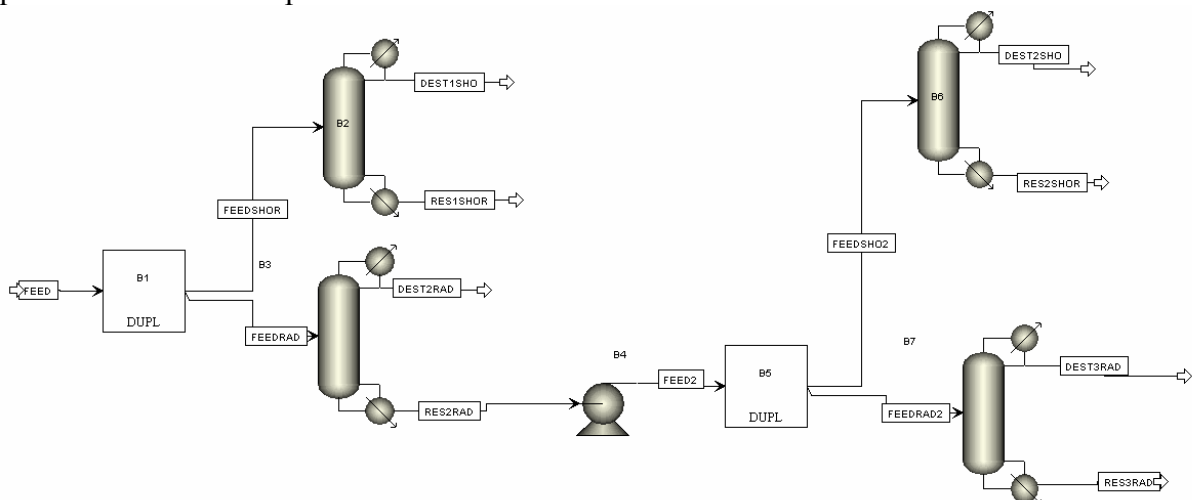


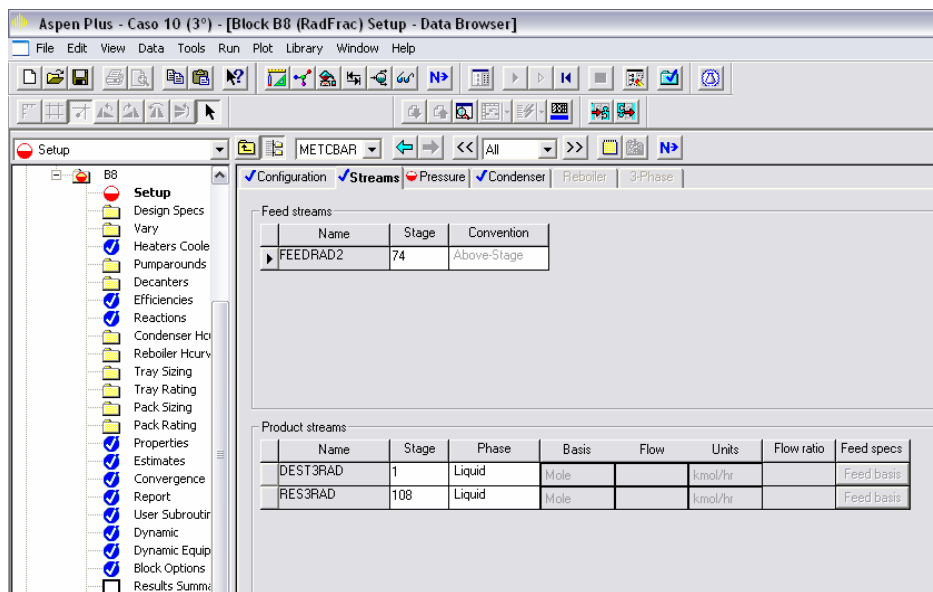
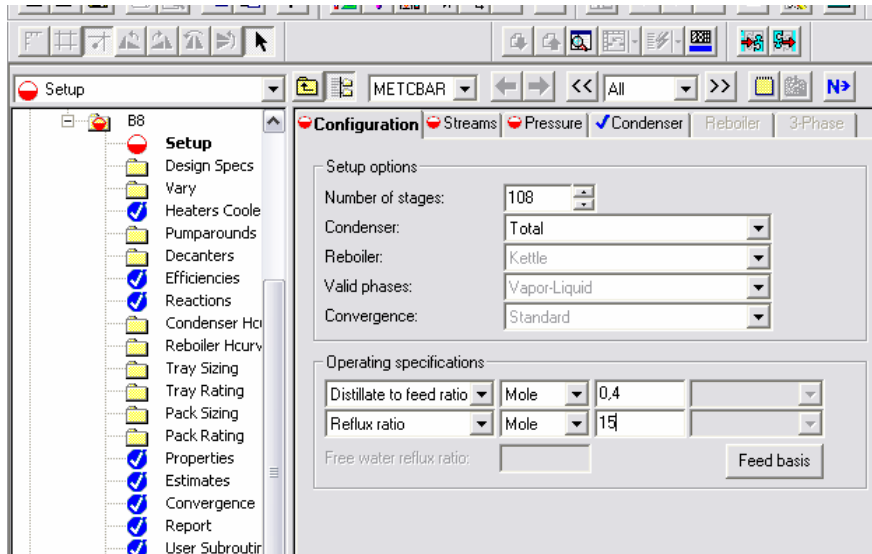
Los resultados obtenidos son los siguientes:

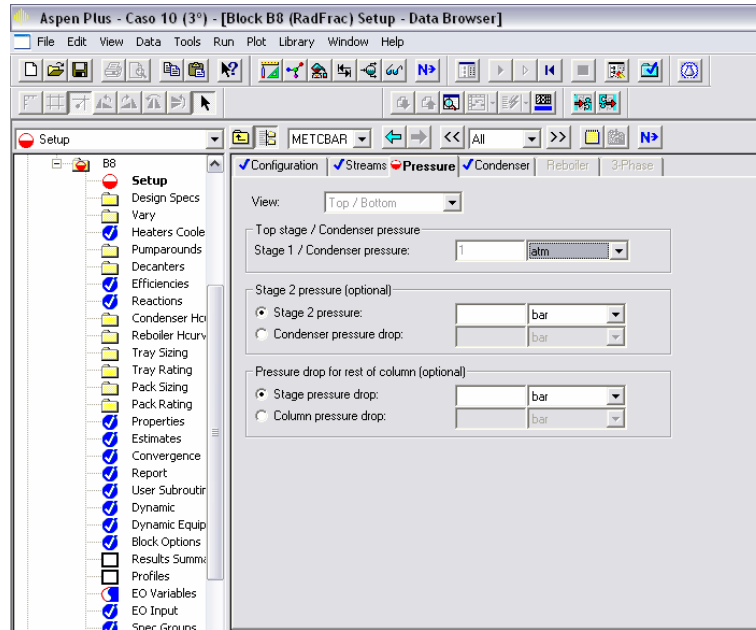
caso 10													
Stream ID		DEST1SHO	DEST2RAD	DEST2SHO	FEED	FEED2	FEEDRAD	FEEDRAD2	FEEDSHO2	FEEDSHOR	RES1SHOR	RES2RAD	RES2SHOR
Temperature	C	112,3	112,3	61,1	25,0	121,2	25,0	121,2	121,2	25,0	121,3	121,3	64,1
Pressure	bar	5,066	5,066	1,013	5,066	1,013	5,066	1,013	1,013	5,066	5,066	5,066	1,013
Vapor 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
Mole Flow	kmol/hr	37,500	37,500	25,000	100,000	62,500	100,000	62,500	62,500	100,000	62,500	62,500	37,500
Mass Flow	kg/hr	2178,002	2178,001	2984,426	8872,854	6694,853	8872,854	6694,853	6694,853	8872,854	6694,852	6694,853	3710,426
Volume Flow	cum/hr	3,239	3,239	2,110	7,737	5,738	7,737	5,738	5,738	7,737	5,739	5,739	3,107
Enthalpy	MMkcal/hr	-2,101	-2,101	-0,776	-4,595	-2,172	-4,595	-2,172	-2,172	-4,595	-2,172	-2,172	-1,510
Mole Flow	kmol/hr												
ACETO-01		37,500	37,500	trace	50,000	12,500	50,000	12,500	12,500	50,000	12,500	12,500	12,500
CHLOR-01		trace	trace	25,000	50,000	50,000	50,000	50,000	50,000	50,000	50,000	50,000	25,000
Mole Frac													
ACETO-01		1,000	1,000	50 PPB	0,500	0,200	0,500	0,200	0,200	0,500	0,200	0,200	0,333
CHLOR-01		13 PPB	trace	1,000	0,500	0,800	0,500	0,800	0,800	0,500	0,800	0,800	0,667



Conocida la relación destilado carga, la relación de reflujo y el número de pisos podemos simular la separación utilizando la columna Radfrac.







Los resultados obtenidos son:

caso 10															
Stream ID		DEST1SHO	DEST2RAD	DEST2SHO	DEST3RAD	FEED	FEED2	FEEDRAD	FEEDRAD2	FEEDSHO2	FEEDSHOR	RES1SHOR	RES2RAD	RES2SHOR	RES3RAD
Temperature	C	112,3	112,3	61,1	61,1	25,0	121,2	25,0	121,2	121,2	25,0	121,3	121,3	64,1	64,1
Pressure	bar	5,066	5,066	1,013	1,013	5,066	1,013	5,066	1,013	1,013	5,066	5,066	5,066	1,013	1,013
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	37,500	37,500	25,000	25,000	100,000	62,500	100,000	62,500	62,500	100,000	62,500	62,500	37,500	37,500
Mass Flow	kg/hr	2178,002	2178,001	2984,426	2984,426	8872,854	6694,853	8872,854	6694,853	6694,853	8872,854	6694,852	6694,853	3710,426	3710,427
Volume Flow	cm ³ /hr	3,239	3,239	2,110	2,110	7,737	5,738	7,737	5,738	5,738	7,737	5,739	5,739	3,107	3,107
Enthalpy	MMkcal/hr	-2,101	-2,101	-0,776	-0,776	-4,595	-2,172	-4,595	-2,172	-2,172	-4,595	-2,172	-2,172	-1,510	-1,510
Mole Flow	kmol/hr														
ACETO-01		37,500	37,500	trace	trace	50,000	12,500	50,000	12,500	12,500	50,000	12,500	12,500	12,500	12,500
CHLOR-01		trace	trace	25,000	25,000	50,000	50,000	50,000	50,000	50,000	50,000	50,000	50,000	25,000	25,000
Mole Frac															
ACETO-01		1,000	1,000	50 PPB	trace	0,500	0,200	0,500	0,200	0,200	0,500	0,200	0,200	0,333	0,333
CHLOR-01		13 PPB	trace	1,000	1,000	0,500	0,800	0,500	0,800	0,800	0,500	0,800	0,800	0,667	0,667

Los resultados obtenidos muestran como el cloroformo se obtiene prácticamente puro por cabeza, obteniéndose la composición del azeotropo en el producto de fondo.

CONCLUSIONES:

Las condiciones necesarias para cada una de las columnas se recogen en la siguiente tabla. Como se observa, incluso para columnas con elevada relación de reflujo, el número de platos obtenidos es elevadísimo. Esto es debido a la dificultad de separación de los componentes. Si se tuviera que realizar esta separación a escala industrial, sería necesaria la construcción de varias torres, pues una torre sólo la tendría una altura y diámetros excesivamente altos. Seguramente se podría pensar en otra operación de separación para esta mezcla cloroformo-acetona.

Columna	Presión	Relación de reflujo	Nº pisos	D/F
1	5 atm.	15	402	0,375
2	1atm.	15	107	0,4

Caso 11

OBJETIVO

Analizar el comportamiento en un reactor de polimerización de una corriente de 100 Kg/h de butenos empleando diferentes tipos de reactores. Las condiciones de alimentación son 20°C y 2 bar y la composición másica se indica a continuación

Compuesto	Fracción másica
n- Butano	0,600
1-buteno	0,200
c-2-buteno	0,075
t-2-buteno	0,100
isobuteno	0,025
Total	1,000

CASO A:

Suponiendo que la reacción de isomerización tiene lugar a 400°C y que todos los butenos se convierten en isobutenos en un reactor RYield, determinar el “duty” necesario en el reactor.

CASO B:

Desarrollar el modelo RStoic del sistema. Considerando las siguientes conversiones para cada una de las reacciones determinar la composición del producto de reacción:

Reacción	Conversión (fracción)
1-buteno \longrightarrow Isobuteno	0,360
4(1-buteno) \longrightarrow Propileno + 2-Me-2-Buteno+1-Octeno	0,04
Cis-2-Buteno \longrightarrow Isobuteno	0,36
4 (Cis-2-Buteno) \longrightarrow Propileno + 2-Me-2-Buteno+1-Octeno	0,04
Trans-2-Buteno \longrightarrow Isobuteno	0,36
4 (Trans-2-Buteno) \longrightarrow Propileno + 2-Me-2-Buteno+1-Octeno	0,04

CASO C:

Determinar la composición en equilibrio a 400°C suponiendo que las reacciones que tienen lugar son las mismas del caso b) empleando el modelo REquil

CASO D:

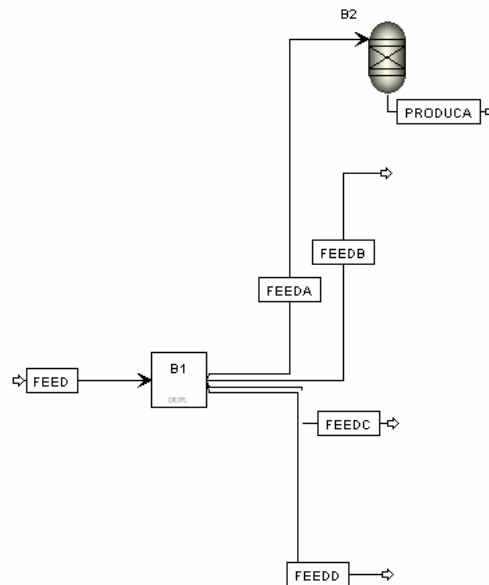
Determinar la composición en equilibrio a 400°C empleando el modelo RGibbs.

PROCEDIMIENTO :

CASO A:

Para realizar la simulación, utilizaremos un duplicador, ya que de esta forma podemos comparar el comportamiento de diferentes reactores, introduciendo una única vez los datos de la corriente de entrada (el duplicador aplica las mismas características a la corriente de entrada que a las de salida).

Una vez que tenemos las corrientes duplicadas, colocamos el primer reactor a estudiar (RYield) y la corriente de salida de dicho reactor.



Posteriormente indicamos los componentes que intervienen en la simulación:

Case 11.apw - Aspen Plus 2004.1 - aspenONE - [Components Specifications - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

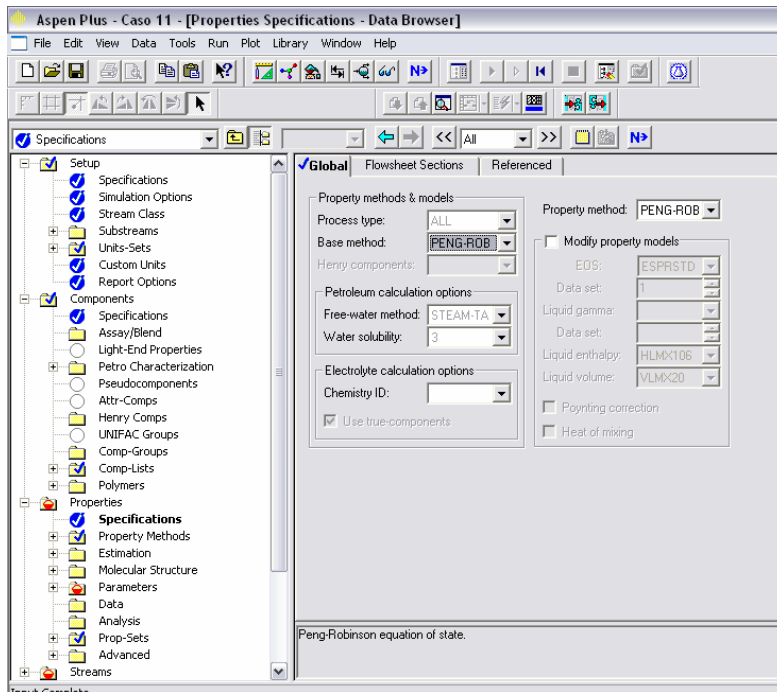
Specifications

Setup Components Specifications Assay/Blend Light-End Properties Petro Characterization Pseudocomponents Attr-Comps Henry Comps Moisture Comps UNIFAC Groups Comp-Groups Comp-Lists Properties Flowsheet Streams Utilities Blocks B1 B2 Setup

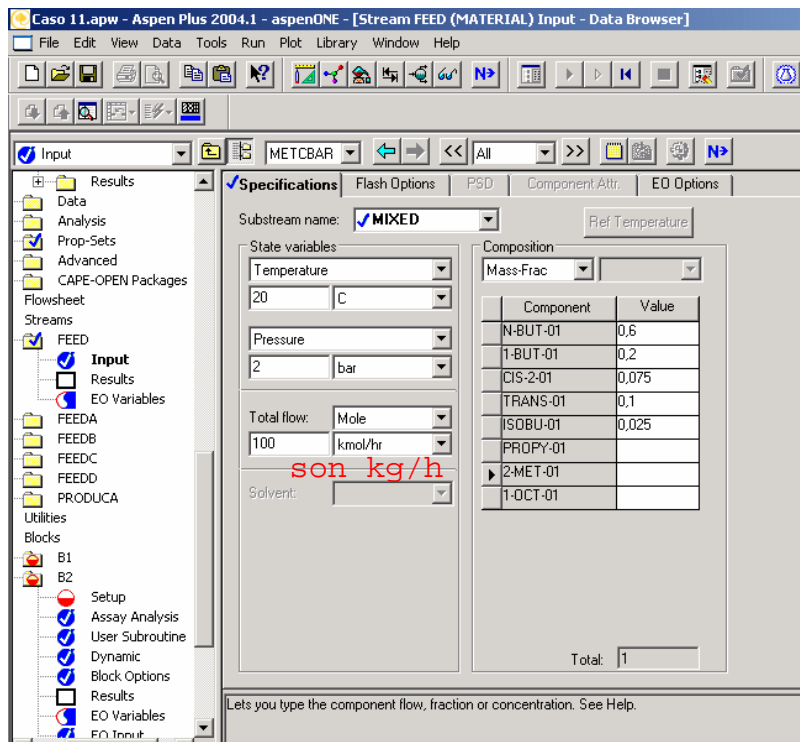
Selection Petroleum Nonconventional Databanks

Component ID	Type	Component name	Formula
N-BUT-01	Conventional	N-BUTANE	C4H10-1
1-BUT-01	Conventional	1-BUTENE	C4H8-1
CIS-2-01	Conventional	CIS-2-BUTENE	C4H8-2
TRANS-01	Conventional	TRANS-2-BUTENE	C4H8-3
ISOBU-01	Conventional	ISOBUTYLENE	C4H8-5
PROPY-01	Conventional	PROPYLENE	C3H6-2
2-MET-01	Conventional	2-METHYL-2-BUTENE	C5H10-6
1-OCT-01	Conventional	1-OCTENE	C8H16-16
*			

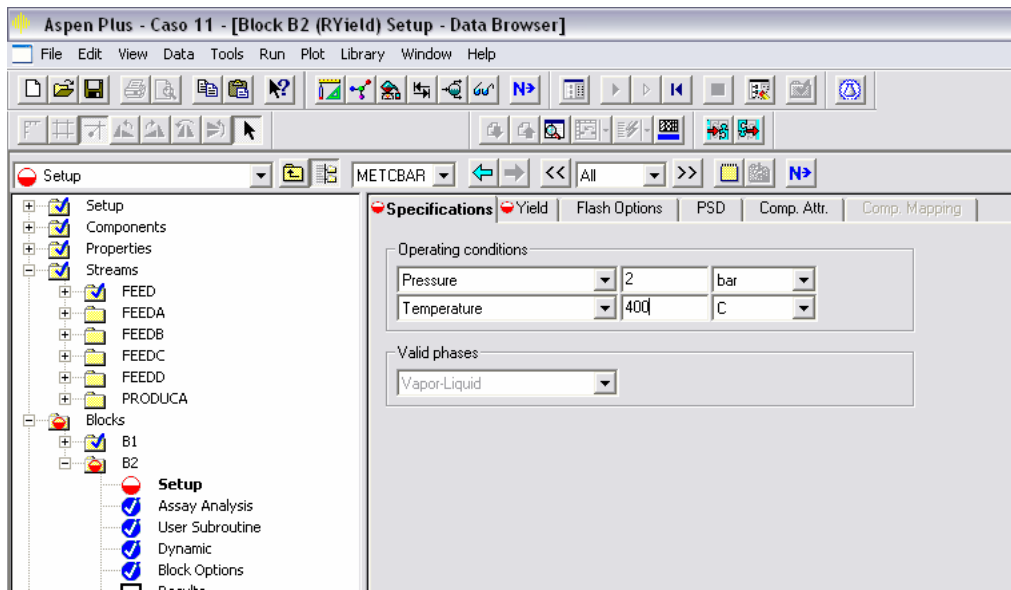
Luego se indica el modelo termodinámico a utilizar. Al ser hidrocarburos no polares utilizamos el modelo Peng-Robinson.



Posteriormente indicamos las condiciones de la corriente de entrada (20°C, 2 bar y la composición indicada anteriormente).

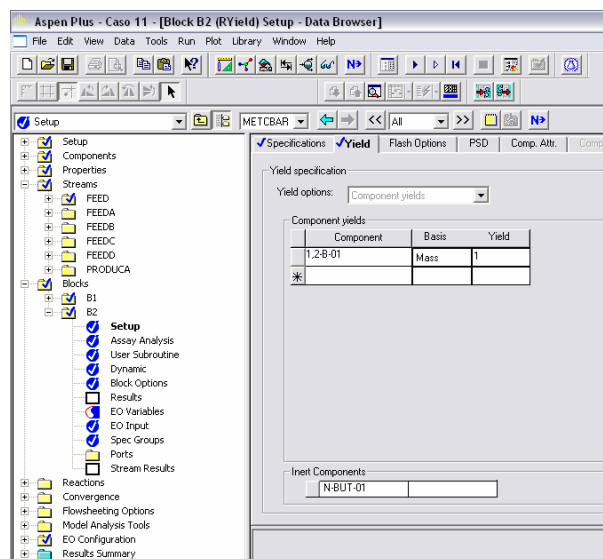


Posteriormente indicamos las condiciones en el reacto r: 400°C, y suponemos la presión de entrada 2 bar.



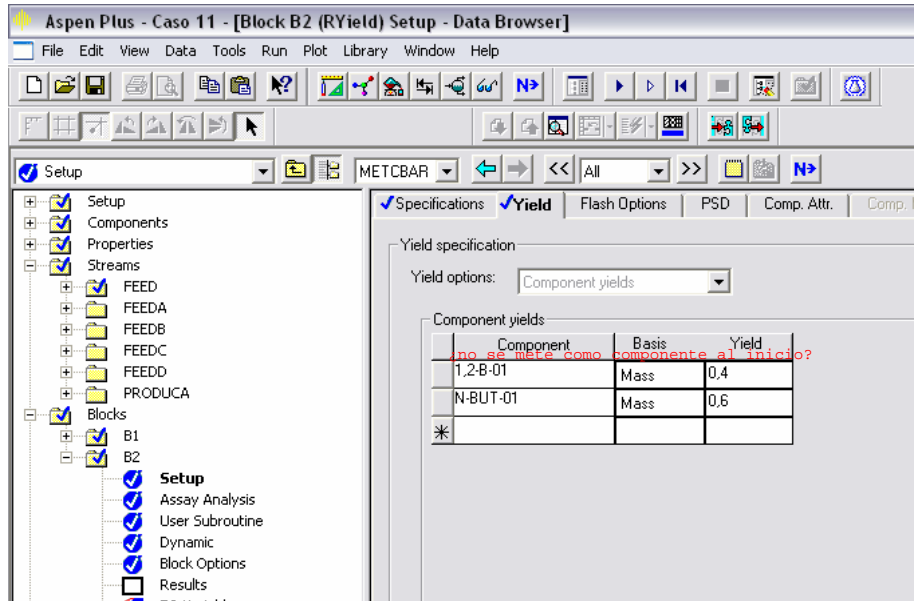
Posteriormente en la carpeta Yield debemos indicar el rendimiento de la reacción. Se puede realizar el cálculo de dos formas:

aº) Considerando el n-butano como inerte, se considera un rendimiento del isobuteno de 1:



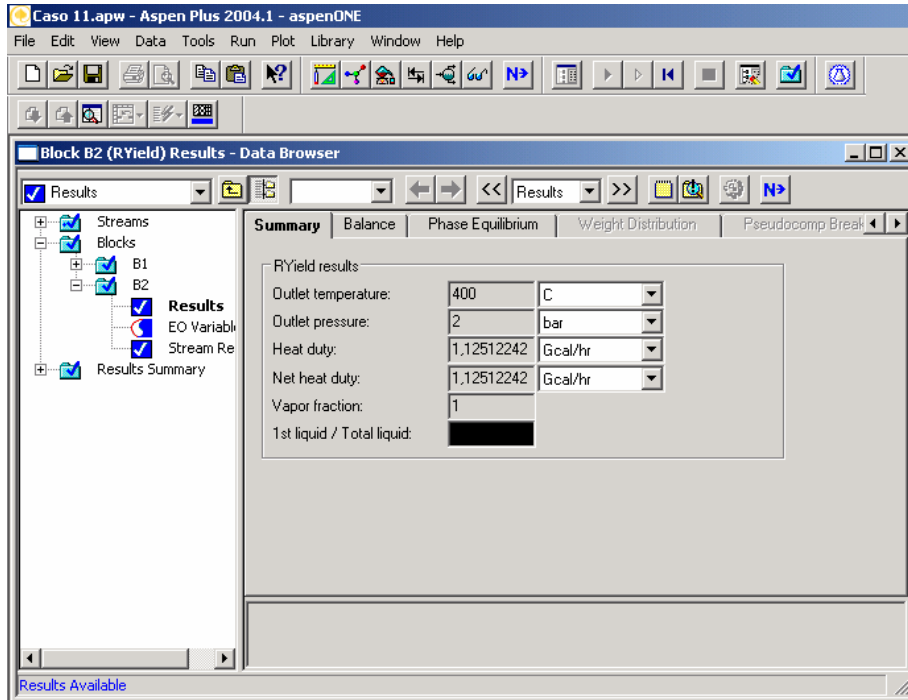
bº) No considerando el n-butano como inerte. En este caso se considerará el isobutano y el n-butano con valores de 0,4 y 0,6, respectivamente. ¿?¿?

es isobuteno!



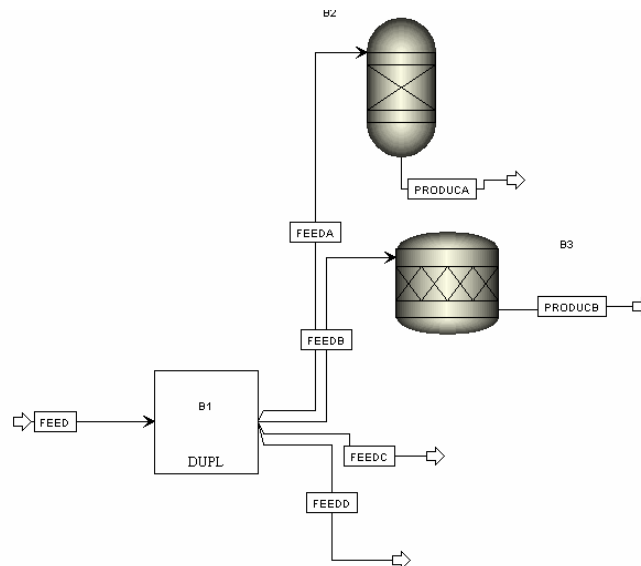
Los resultados de la corriente obtenida se muestran en la siguiente tabla:

Heat and Material Balance Table							
Stream ID		FEED	FEEDA	FEEDB	FEEDC	FEEDD	PRODUCA
Temperature	C	20,0	20,0	20,0	20,0	20,0	400,0
Pressure	bar	2,000	2,000	2,000	2,000	2,000	2,000
Vapor Frac		1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
Mole Flow	kmol/hr	100,000	100,000	100,000	100,000	100,000	100,000
Mass Flow	kg/hr	5729,991	5729,991	5729,991	5729,991	5729,991	5729,991
Volume Flow	cum/hr	1148,198	1148,198	1148,198	1148,198	1148,198	2787,878
Enthalpy	MMkcal/hr	-1,851	-1,851	-1,851	-1,851	-1,851	-0,725
Mass Flow	kg/hr						
N-BUT-01		3437,995	3437,995	3437,995	3437,995	3437,995	3437,995
1-BUT-01		1145,998	1145,998	1145,998	1145,998	1145,998	
CIS-2-01		429,749	429,749	429,749	429,749	429,749	
TRANS-01		572,999	572,999	572,999	572,999	572,999	
ISOBU-01		143,250	143,250	143,250	143,250	143,250	2291,996
PROPY-01							
2-MET-01							
1-OCT-01							
Mass Frac							
N-BUT-01		0,600	0,600	0,600	0,600	0,600	0,600
1-BUT-01		0,200	0,200	0,200	0,200	0,200	
CIS-2-01		0,075	0,075	0,075	0,075	0,075	
TRANS-01		0,100	0,100	0,100	0,100	0,100	
ISOBU-01		0,025	0,025	0,025	0,025	0,025	0,400
PROPY-01							
2-MET-01							
1-OCT-01							

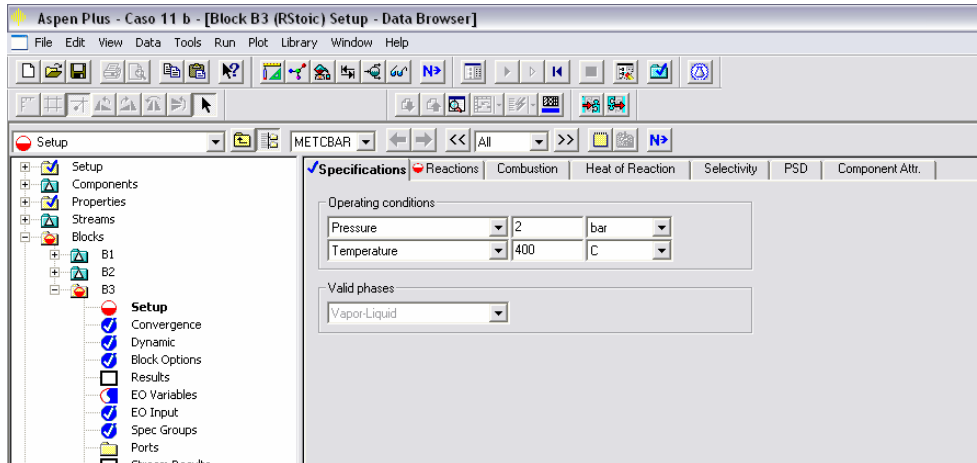


CASO B:

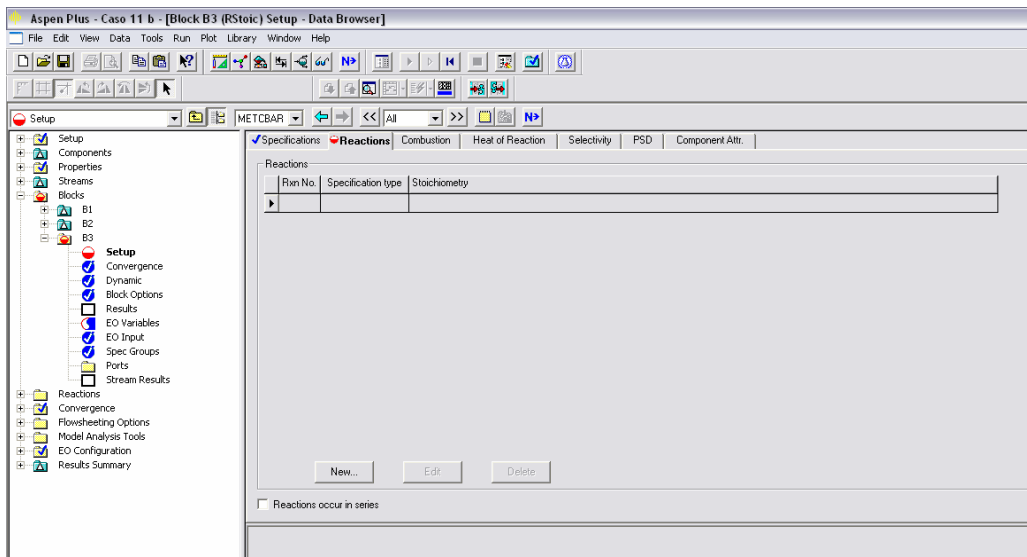
Lo primero es colocar el reactor RStoic, para poder realizar la simulación.



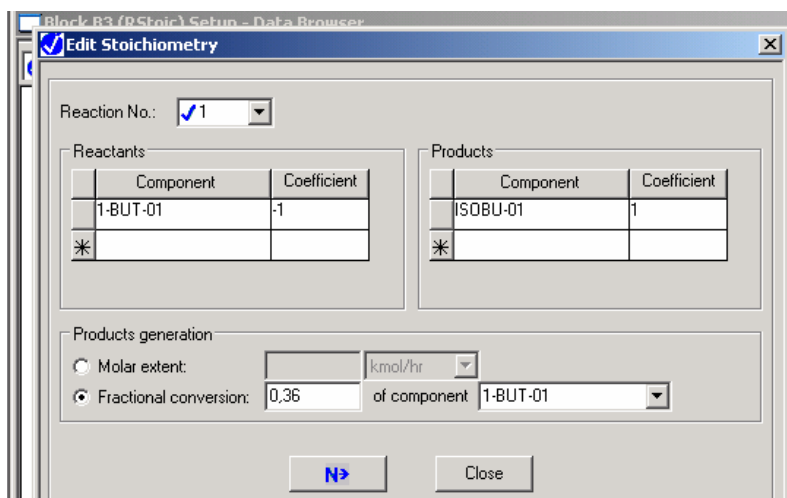
Posteriormente indicamos las condiciones en el reactor (400°C y 2 bar).



Luego hay que ir especificando cada una de las reacciones que tienen lugar, pulsando el botón New de la siguiente pantalla:



Para cada reacción debemos indicar los productos y los reactivos, el coeficiente estequiométrico y la conversión:



Block B3 (PStoic) Setup - Data Browser

Edit Stoichiometry

Reaction No.: 2

Reactants	
Component	Coefficient
1-BUT-01	-4
*	

Products	
Component	Coefficient
PROPY-01	1
2-MET-01	1
1-OCT-01	1

Products generation

Molar extent: kmol/hr
 Fractional conversion: of component

Block B3 (PStoic) Setup - Data Browser

Edit Stoichiometry

Reaction No.: 3

Reactants	
Component	Coefficient
CIS-2-01	-1
*	

Products	
Component	Coefficient
ISDBU-01	1
*	

Products generation

Molar extent: kmol/hr
 Fractional conversion: of component

Block B3 (PStoic) Setup - Data Browser

Edit Stoichiometry

Reaction No.: 4

Reactants	
Component	Coefficient
CIS-2-01	-4
▶	

Products	
Component	Coefficient
PROPY-01	1
2-MET-01	1
1-OCT-01	1

Products generation

Molar extent: kmol/hr
 Fractional conversion: of component

Negative stoichiometric coefficient for selected reactant component

Block B3 (RStoic) Setup - Data Browser

Edit Stoichiometry

Reaction No.: 5

Reactants		Products	
Component	Coefficient	Component	Coefficient
TRANS-01	-1	ISOBU-01	1
*		*	

Products generation

Molar extent: kmol/hr
 Fractional conversion: 0,36 of component TRANS-01

N> Close

Select to specify fractional conversion for reaction.

Block B3 (RStoic) Setup - Data Browser

Edit Stoichiometry

Reaction No.: 6

Reactants		Products	
Component	Coefficient	Component	Coefficient
TRANS-01	-4	PROPY-01	1
*		2-MET-01	1
		1-OCT-01	1

Products generation

Molar extent: kmol/hr
 Fractional conversion: 0,04 of component TRANS-01

N> Close

Select to specify fractional conversion for reaction.

Caso 11 b.apw - Aspen Plus 2004.1 - aspenONE - [Block B3 (RStoic) Setup - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

Setup

METCBAR

Specifications Reactions Combustion Heat of Reaction Selectivity PSD Component Attr. Utility

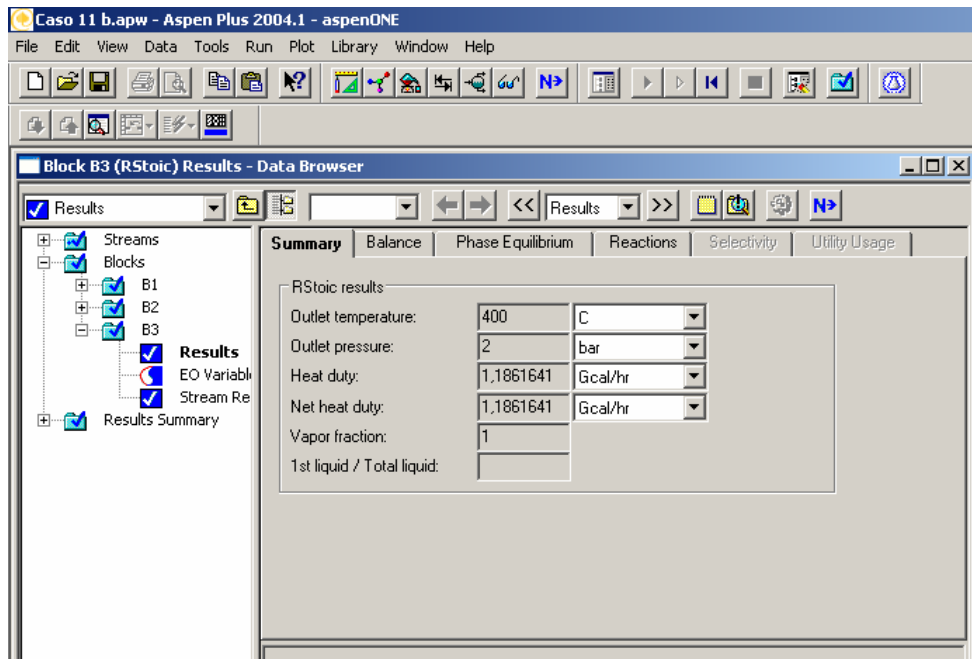
Reactions

Rxn No.	Specification type	Stoichiometry
1	Frac. conversion	1-BUT-01 -> ISOBU-01
2	Frac. conversion	1-BUT-01 -> PROPY-01 + 2-MET-01 + 1-OCT-01
3	Frac. conversion	CIS-2-01 -> ISOBU-01
4	Frac. conversion	CIS-2-01 -> PROPY-01 + 2-MET-01 + 1-OCT-01
5	Frac. conversion	TRANS-01 -> ISOBU-01
6	Frac. conversion	TRANS-01 -> PROPY-01 + 2-MET-01 + 1-OCT-01

New... Edit Delete Copy Paste

Reactions occur in series

Heat and Material Balance Table								
Stream ID		FEED	FEEDA	FEEDB	FEEDC	FEEDD	PRODUCA	PRODUCEB
Temperature	C	20,0	20,0	20,0	20,0	20,0	400,0	400,0
Pressure	bar	2,000	2,000	2,000	2,000	2,000	2,000	2,000
Vapor Frac		1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
Mole Flow	kmol/hr	100,000	100,000	100,000	100,000	100,000	100,000	99,617
Mass Flow	kg/hr	5729,991	5729,991	5729,991	5729,991	5729,991	5729,991	5729,991
Volume Flow	cum/hr	1148,198	1148,198	1148,198	1148,198	1148,198	2787,878	2777,001
Enthalpy	MMkca/hr	-1,851	-1,851	-1,851	-1,851	-1,851	-0,725	-0,664
Mass Flow	kg/hr							
N-BUT-01		3437,995	3437,995	3437,995	3437,995	3437,995	3437,995	3437,995
1-BUT-01		1145,998	1145,998	1145,998	1145,998	1145,998		687,599
CIS-2-01		429,749	429,749	429,749	429,749	429,749		257,850
TRANS-01		572,999	572,999	572,999	572,999	572,999		343,799
ISOBU-01		143,250	143,250	143,250	143,250	143,250	2291,996	916,799
PROPY-01								16,116
2-MET-01								26,859
1-OCT-01								42,975
Mass Frac								
N-BUT-01		0,600	0,600	0,600	0,600	0,600	0,600	0,600
1-BUT-01		0,200	0,200	0,200	0,200	0,200		0,120
CIS-2-01		0,075	0,075	0,075	0,075	0,075		0,045
TRANS-01		0,100	0,100	0,100	0,100	0,100		0,060
ISOBU-01		0,025	0,025	0,025	0,025	0,025	0,400	0,160
PROPY-01								0,003
2-MET-01								0,005
1-OCT-01								0,007



Caso 11 b.apw - Aspen Plus 2004.1 - aspenONE
 File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

Block B3 (RStoic) Results - Data Browser

Results Summary

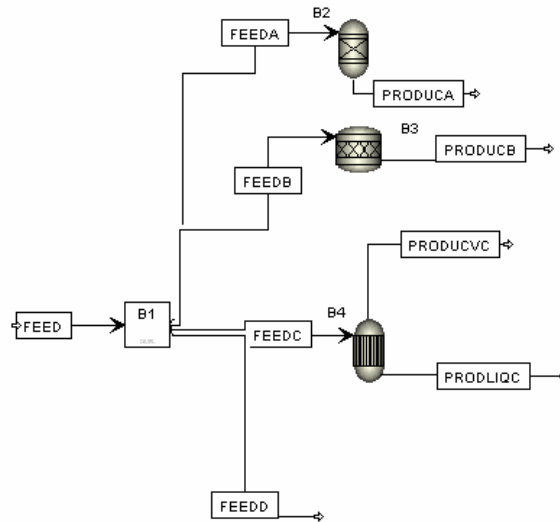
Summary Balance Phase Equilibrium Reactions Selectivity Utility Usage

RStoic results:

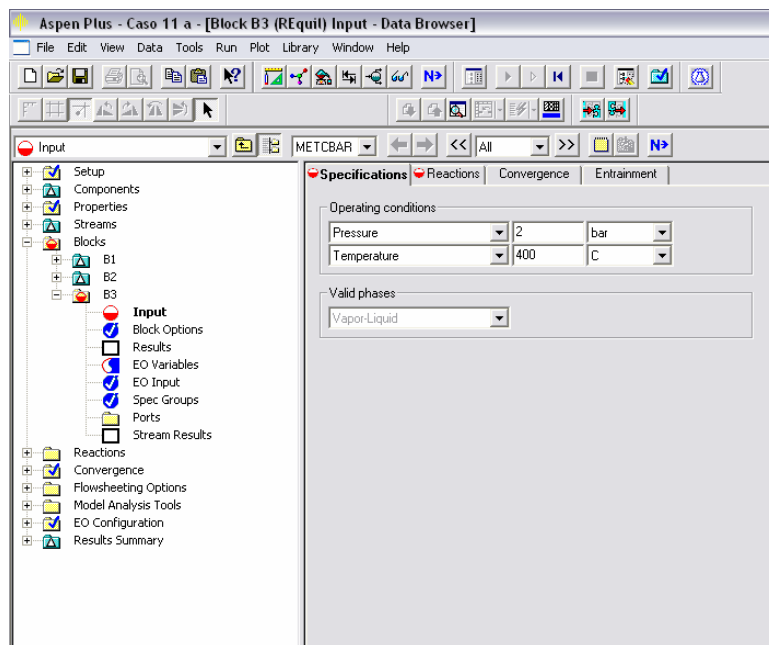
Outlet temperature:	400	C
Outlet pressure:	2	bar
Heat duty:	1,1861641	Gcal/hr
Net heat duty:	1,1861641	Gcal/hr
Vapor fraction:	1	
1st liquid / Total liquid:		

CASO C:

En primer lugar colocamos el reactor REquil. En este caso es necesario dos corrientes de salida, una representa la fase gas y otra la fase líquida. Es necesario definir estas dos corrientes aunque puede ser (como ocurre en esta simulación) que sólo se forme una fase (en este caso vapor).



Posteriormente se indican las condiciones en el reactor (2 bar y 400 °C).



Posteriormente indicamos las reacciones, de la misma forma que en el reactor RStoic. El único parámetro que hay que añadir es la temperatura de aproximación al equilibrio. Si consideramos el equilibrio, esta temperatura es de 0°C.

Block B4 (PEquil) Input - Data Browser

Edit Stoichiometry

Reaction No.: 1

Reactants		
Component	Coefficient	Solid
1-BUT-01	-1	No
*		

Products		
Component	Coefficient	Solid
ISOBU-01	1	No
*		

Products generation:

Molar extent: [] kmol/hr
 Temperature approach: 0 C
 Extent estimate: [] kmol/hr

N> Close

Block B4 (PEquil) Input - Data Browser

Edit Stoichiometry

Reaction No.: 2

Reactants		
Component	Coefficient	Solid
1-BUT-01	-4	No
*		

Products		
Component	Coefficient	Solid
PROPY-01	1	No
2-MET-01	1	No
1-OCT-01	1	No

Products generation:

Molar extent: [] kmol/hr
 Temperature approach: 0 C
 Extent estimate: [] kmol/hr

N> Close

Determine products by specifying temperature approach to equilibrium.

Block B4 (PEquil) Input - Data Browser

Edit Stoichiometry

Reaction No.: 3

Reactants		
Component	Coefficient	Solid
CIS-2-01	-1	No
*		

Products		
Component	Coefficient	Solid
ISOBU-01	1	No
*		

Products generation:

Molar extent: [] kmol/hr
 Temperature approach: 0 C
 Extent estimate: [] kmol/hr

N> Close

Determine products by specifying temperature approach to equilibrium.

Edit Stoichiometry

Reaction No.: 4

Reactants			
Component	Coefficient	Solid	
CIS-2-01	-4	No	
*			

Products			
Component	Coefficient	Solid	
PROPY-01	1	No	
2-MET-01	1	No	
1-OCT-01	1	No	

Products generation

Molar extent: kmol/hr
 Temperature approach: C
 Extent estimate: kmol/hr

Edit Stoichiometry

Reaction No.: 5

Reactants			
Component	Coefficient	Solid	
TRANS-01	-1	No	
*			

Products			
Component	Coefficient	Solid	
ISOBU-01	1	No	
*			

Products generation

Molar extent: kmol/hr
 Temperature approach: C
 Extent estimate: kmol/hr

Edit Stoichiometry

Reaction No.: 6

Reactants			
Component	Coefficient	Solid	
TRANS-01	-4	No	

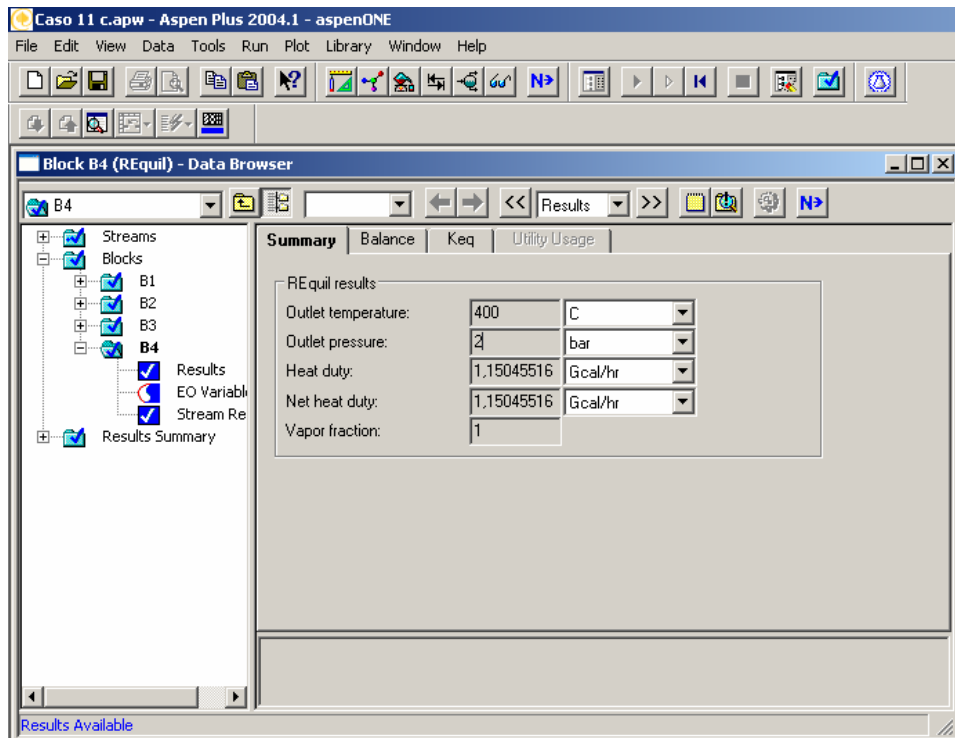
Products			
Component	Coefficient	Solid	
PROPY-01	1	No	
2-MET-01	1	No	
1-OCT-01	1	No	

Products generation

Molar extent: kmol/hr
 Temperature approach: C
 Extent estimate: kmol/hr

Los resultados obtenidos son:

Heat and Material Balance Table										
Stream ID		FEED	FEEDA	FEEDB	FEEDC	FEEDD	PRODLIQ	PRODUCA	PRODUCB	PRODUCVC
Temperature	C	20,0	20,0	20,0	20,0	20,0		400,0	400,0	400,0
Pressure	bar	2,000	2,000	2,000	2,000	2,000	2,000	2,000	2,000	2,000
Vapor Frac		1,000	1,000	1,000	1,000	1,000		1,000	1,000	1,000
Mole Flow	kmol/hr	100,000	100,000	100,000	100,000	100,000	0,000	100,000	99,617	98,375
Mass Flow	kg/hr	5729,991	5729,991	5729,991	5729,991	5729,991	0,000	5729,991	5729,991	5729,998
Volume Flow	cum/hr	1148,198	1148,198	1148,198	1148,198	1148,198	0,000	2787,878	2777,001	2742,057
Enthalpy	MMkcal/hr	-1,851	-1,851	-1,851	-1,851	-1,851		-0,725	-0,664	-0,700
Mass Flow	kg/hr									
N-BUT-01		3437,995	3437,995	3437,995	3437,995	3437,995		3437,995	3437,995	3437,995
1-BUT-01		1145,998	1145,998	1145,998	1145,998	1145,998			687,599	258,432
CIS-2-01		429,749	429,749	429,749	429,749	429,749			257,850	336,991
TRANS-01		572,999	572,999	572,999	572,999	572,999			343,799	439,383
ISOBU-01		143,250	143,250	143,250	143,250	143,250		2291,996	916,799	892,402
PROPY-01									16,116	68,401
2-MET-01									26,859	113,998
1-OCT-01									42,975	182,396
Mass Frac										
N-BUT-01		0,600	0,600	0,600	0,600	0,600		0,600	0,600	0,600
1-BUT-01		0,200	0,200	0,200	0,200	0,200			0,120	0,045
CIS-2-01		0,075	0,075	0,075	0,075	0,075			0,045	0,059
TRANS-01		0,100	0,100	0,100	0,100	0,100			0,060	0,077
ISOBU-01		0,025	0,025	0,025	0,025	0,025		0,400	0,160	0,156
PROPY-01									0,003	0,012
2-MET-01									0,005	0,020
1-OCT-01									0,007	0,032



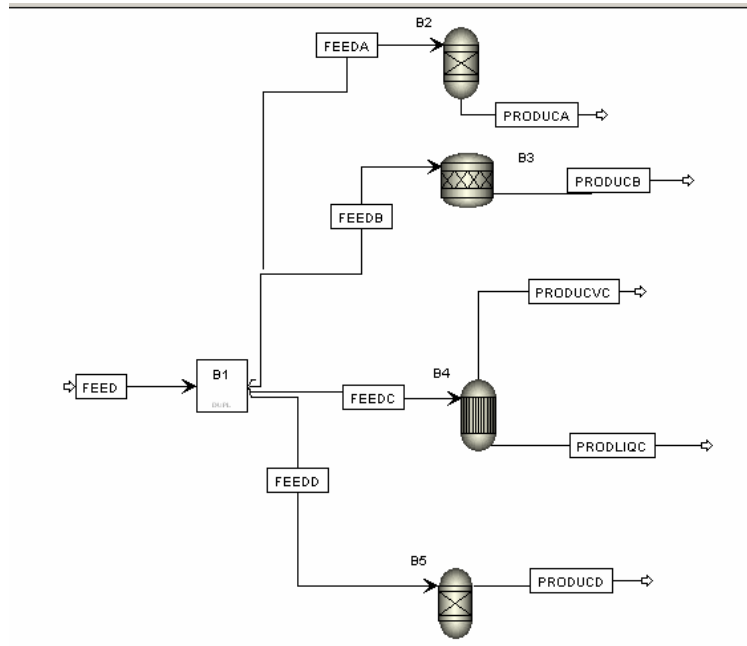
The screenshot shows the Aspen Plus 2004.1 interface. The main window is titled "Block B4 (REquil) - Data Browser". On the left, there is a tree view showing the process structure: Streams, Blocks (B1, B2, B3, B4), Results, EO Variable, Stream Re, and Results Summary. The "Results" folder is expanded, showing the "Summary" tab. The "Summary" tab displays the following REquil results:

Outlet temperature:	400	C
Outlet pressure:	2	bar
Heat duty:	1,15045516	Gcal/hr
Net heat duty:	1,15045516	Gcal/hr
Vapor fraction:	1	

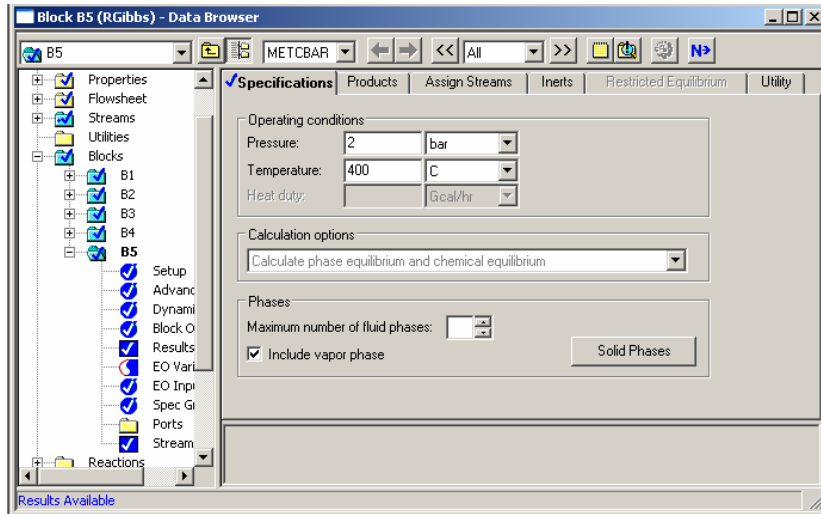
At the bottom of the window, a status bar indicates "Results Available".

CASO D:

En primer lugar colocamos el reactor RGibbs.

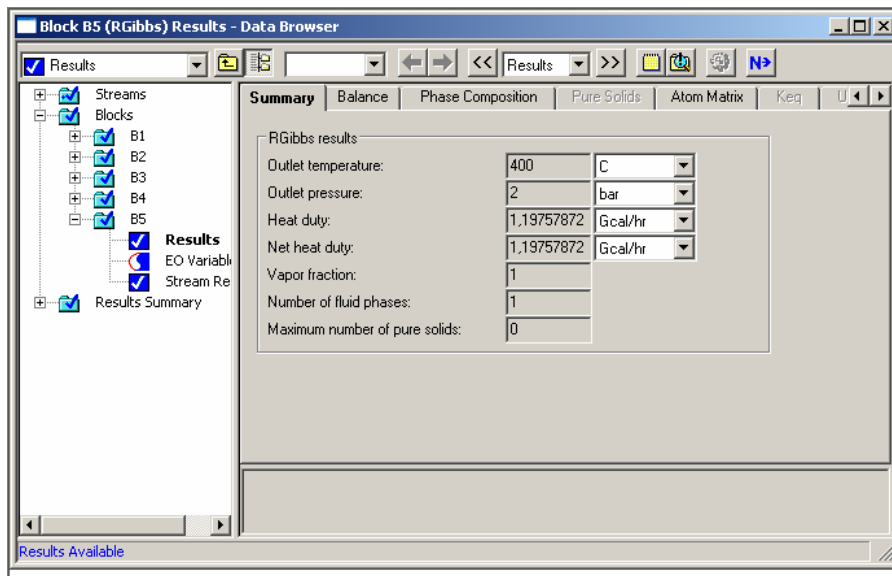


Posteriormente se indican las condiciones en el reactor (2 bar y 400 °C).



Posteriormente no es necesario indicar las reacciones, ya que el reactor Gibbs calculará la mínima energía de Gibbs del sistema. Lo que sí que indicaremos son los productos que se obtienen en las reacciones. En caso de no indicarlo, el modelo de Gibbs considera todos los elementos que intervienen en la reacción como posibles productos.

Heat and Material Balance Table											
Stream ID		FEED	FEEDA	FEEDB	FEEDC	FEEDD	PRODLIQC	PRODUCA	PRODUCB	PROUDC	PROUDVC
Temperature	C	20,0	20,0	20,0	20,0	20,0		400,0	400,0	400,0	400,0
Pressure	bar	2,000	2,000	2,000	2,000	2,000	2,000	2,000	2,000	2,000	2,000
Vapor Frac		1,000	1,000	1,000	1,000	1,000		1,000	1,000	1,000	1,000
Mole Flow	kmol/hr	100,000	100,000	100,000	100,000	100,000	0,000	100,000	99,617	100,910	98,375
Mass Flow	kg/hr	5729,991	5729,991	5729,991	5729,991	5729,991	0,000	5729,991	5729,991	5729,991	5729,998
Volume Flow	cum/hr	1148,198	1148,198	1148,198	1148,198	1148,198	0,000	2787,878	2777,001	2813,341	2742,057
Enthalpy	MMkcal/hr	-1,851	-1,851	-1,851	-1,851	-1,851		-0,725	-0,664	-0,653	-0,700
Mass Flow	kg/hr										
N-BUT-01		3437,995	3437,995	3437,995	3437,995	3437,995		3437,995	3437,995	3437,995	3437,995
1-BUT-01		1145,998	1145,998	1145,998	1145,998	1145,998			687,599	164,580	258,432
CIS-2-01		429,749	429,749	429,749	429,749	429,749			257,850	214,607	336,991
TRANS-01		572,999	572,999	572,999	572,999	572,999			343,799	279,815	439,383
ISOBU-01		143,250	143,250	143,250	143,250	143,250		2291,996	916,799	568,317	892,402
PROPY-01									16,116	495,478	68,401
2-MET-01									26,859	568,391	113,998
1-OCT-01									42,975	0,810	182,396
Mass Frac											
N-BUT-01		0,600	0,600	0,600	0,600	0,600		0,600	0,600	0,600	0,600
1-BUT-01		0,200	0,200	0,200	0,200	0,200			0,120	0,029	0,045
CIS-2-01		0,075	0,075	0,075	0,075	0,075			0,045	0,037	0,059
TRANS-01		0,100	0,100	0,100	0,100	0,100			0,060	0,049	0,077
ISOBU-01		0,025	0,025	0,025	0,025	0,025		0,400	0,160	0,099	0,156
PROPY-01									0,003	0,086	0,012
2-MET-01									0,005	0,099	0,020
1-OCT-01									0,007	141 PPM	0,032



CONCLUSIONES:

La cantidad de calor necesaria en el reactor RYield: 0,048536566 MMKcal/h.

Las condiciones de equilibrio en el reactor REquil son:

Componente	Fracción másica
n-butano	0,600
1-buteno	0,045
Cis-2-buteno	0,059
Trans-2-buteno	0,077
isobuteno	0,156
Propileno	0,012
2-Metil-2-Buteno	0,020
1-Octeno	0,03

Las condiciones de equilibrio en el reactor R-Gibbs son:

Componente	Fracción másica
n-butano	0,600
1-buteno	0,029
Cis-2-buteno	0,037
Trans-2-buteno	0,049
isobuteno	0,099
Propileno	0,086
2-Metil-2-Buteno	0,099
1-Octeno	141 ppm

Caso 12

OBJETIVO

El objetivo de este caso es el análisis de la reacción de cloración de propileno en dos reactores, uno de tipo CSTR y otro de flujo pistón. Se suponen en ambos casos una corriente con la siguiente composición: 0,308 Kmol/h de propileno y 0,077 Kmol/h de cloro alimentados a 200 °C y 2 bar de presión.

a) Considerar el reactor CSTR, adiabático en equilibrio, y con un volumen de 15 litros.

b) Reactor tubular con las siguientes dimensiones:

Longitud: 7,62 m

Diámetro: 50,8 mm

Refrigerante a temperatura constante de 200°C y $U=5\text{Btu/h}\cdot\text{ft}^2\cdot\text{R}$

Cinética de reacción (primer orden respecto a los reactantes)

$K=20000$; $E_a=10000\text{cal/mol}$

Reacción en fase vapor.

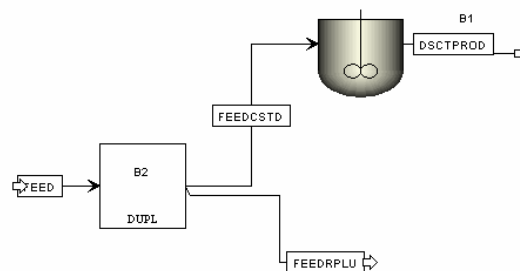
c) Si en el reactor tubular empleamos un fluido refrigerante en contracorriente que entra a 200°C ¿cambiarían los resultados?

PROCEDIMIENTO:

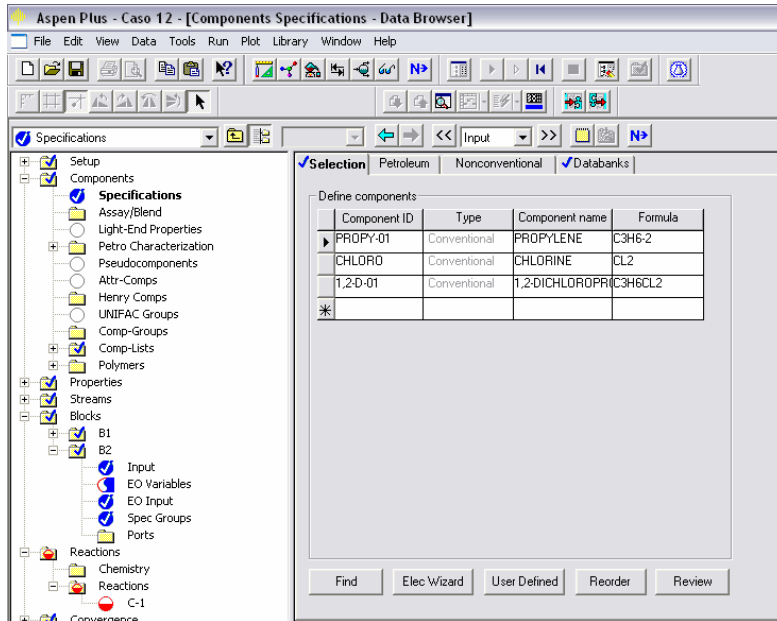
CASO A:

En primer lugar consideraremos la utilización de un duplicador, para facilitar la simulación con los dos tipos de reactores.

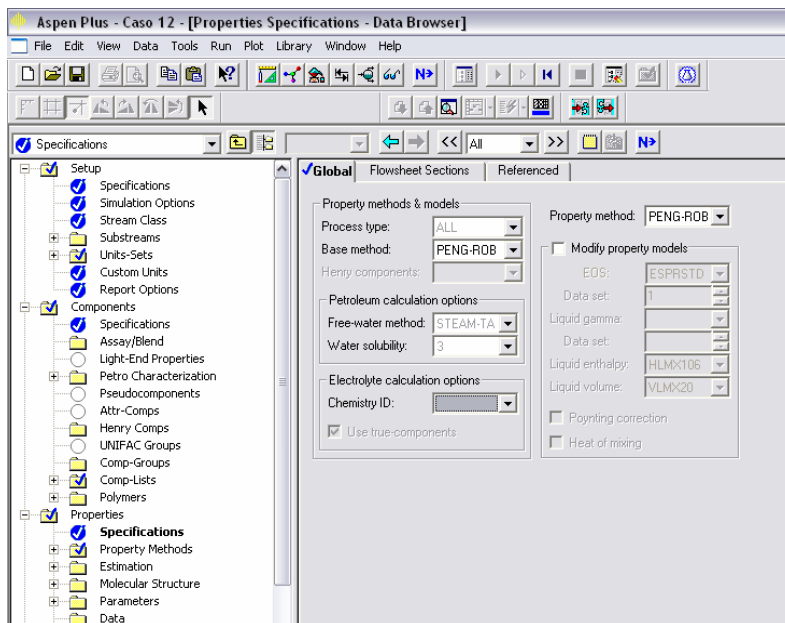
Para la simulación con el Reactor de mezcla completa, utilizamos el reactor CSTR, obteniéndose el siguiente diagrama de flujo:



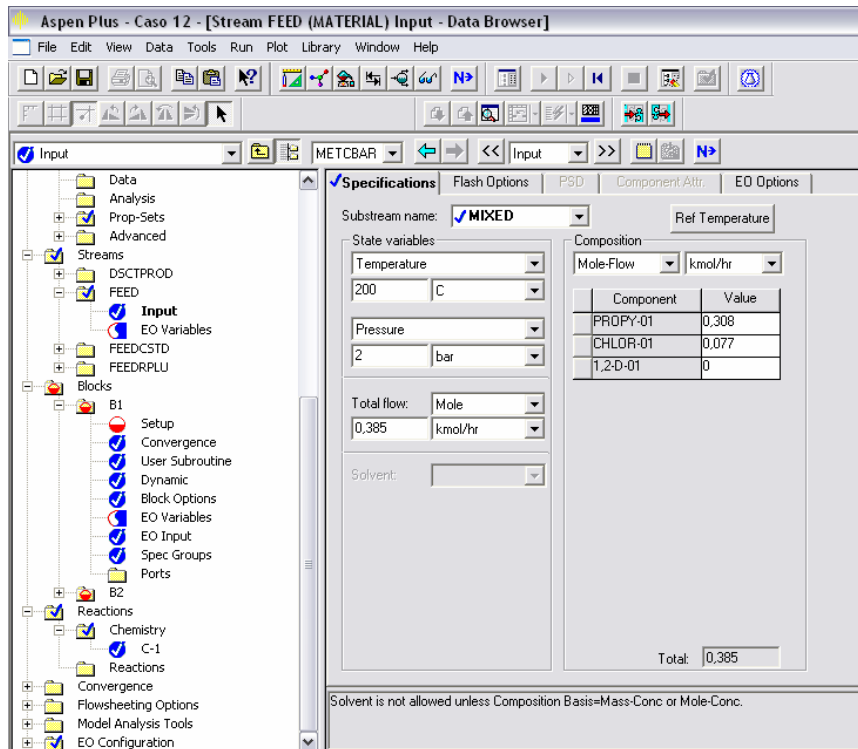
Posteriormente indicamos los componentes que participan en la reacción.



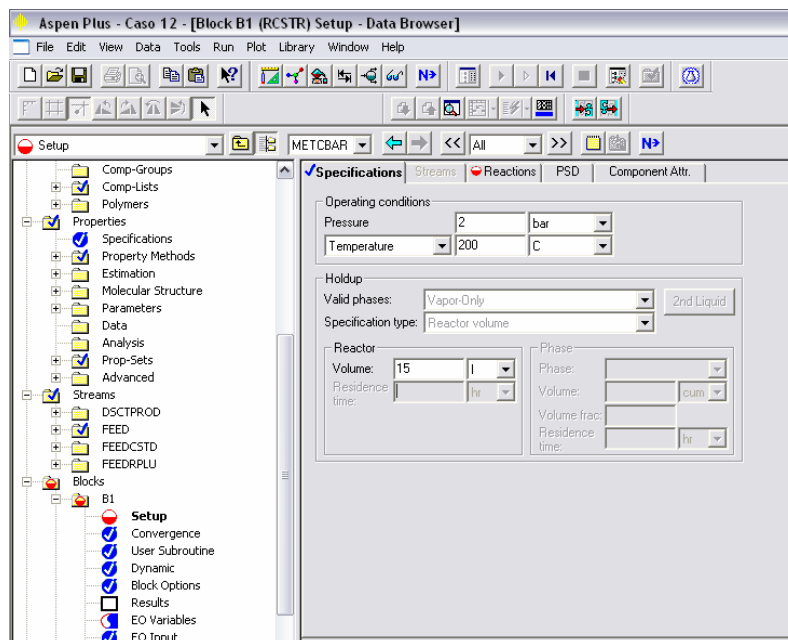
Posteriormente indicamos el modelo utilizado en la simulación (Peng-Robinson).



Luego indicamos las condiciones de la corriente de entrada: 200°C , 2 bar y la composición indicada en el enunciado.

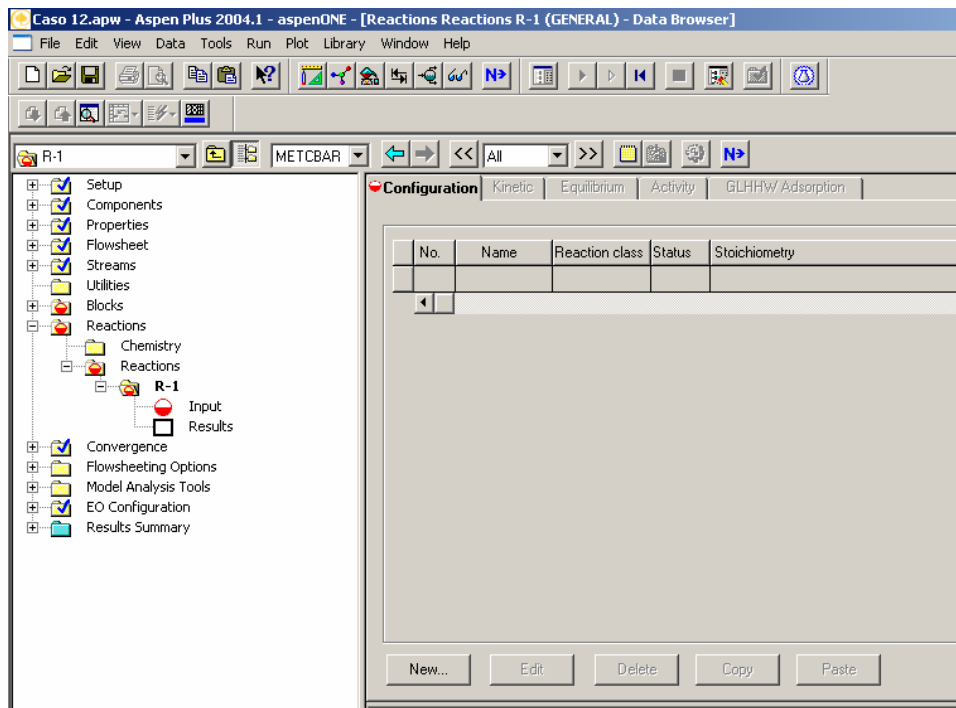
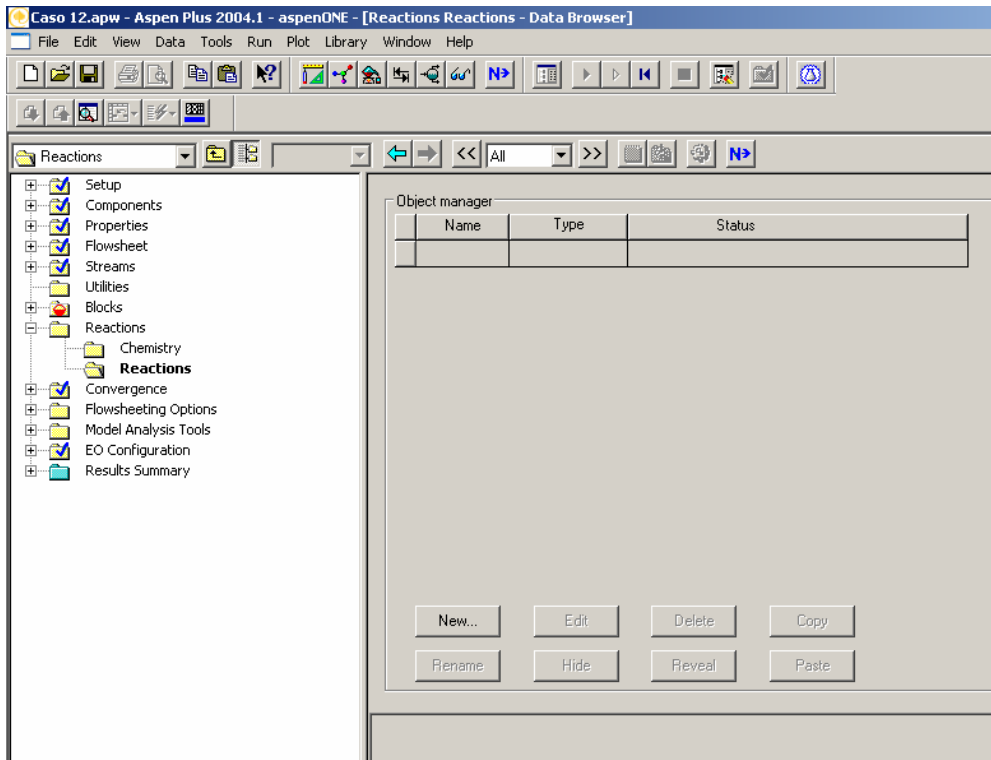


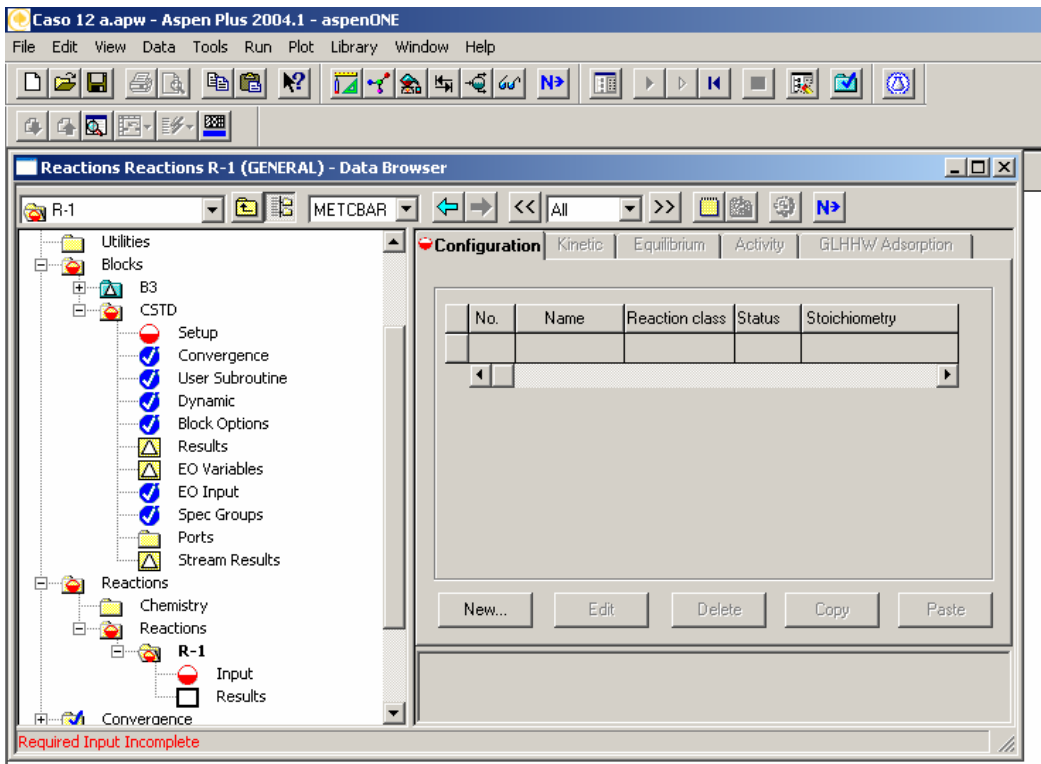
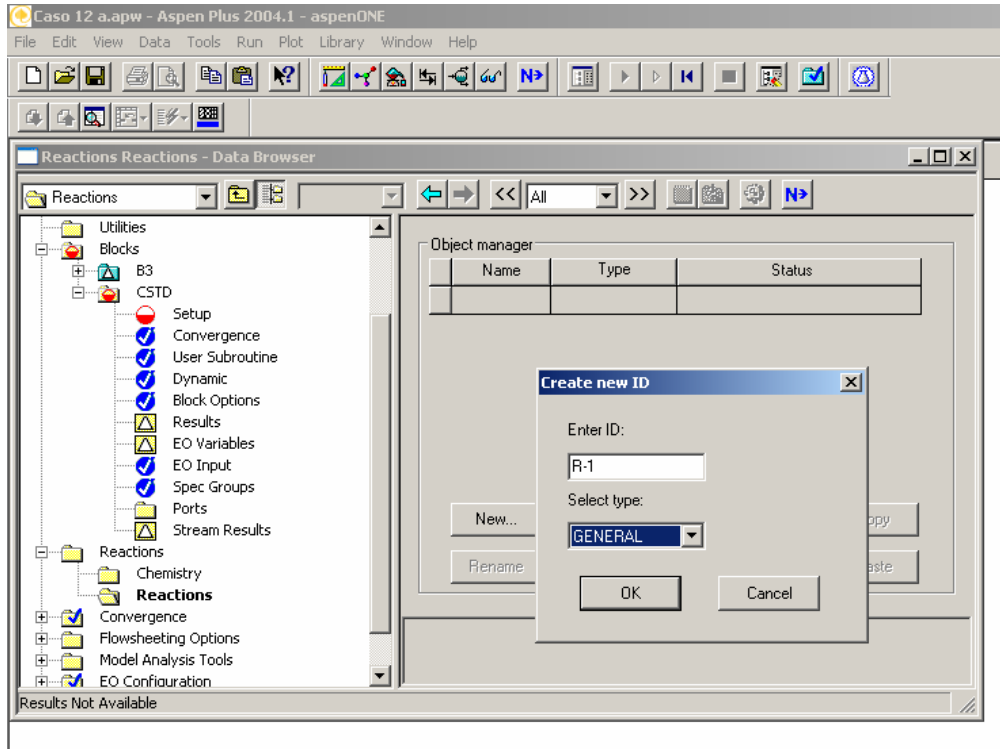
Luego indicamos las condiciones de presión y temperatura del reactor (consideramos las mismas que las de la corriente de entrada) y el volumen del reactor (15 L).

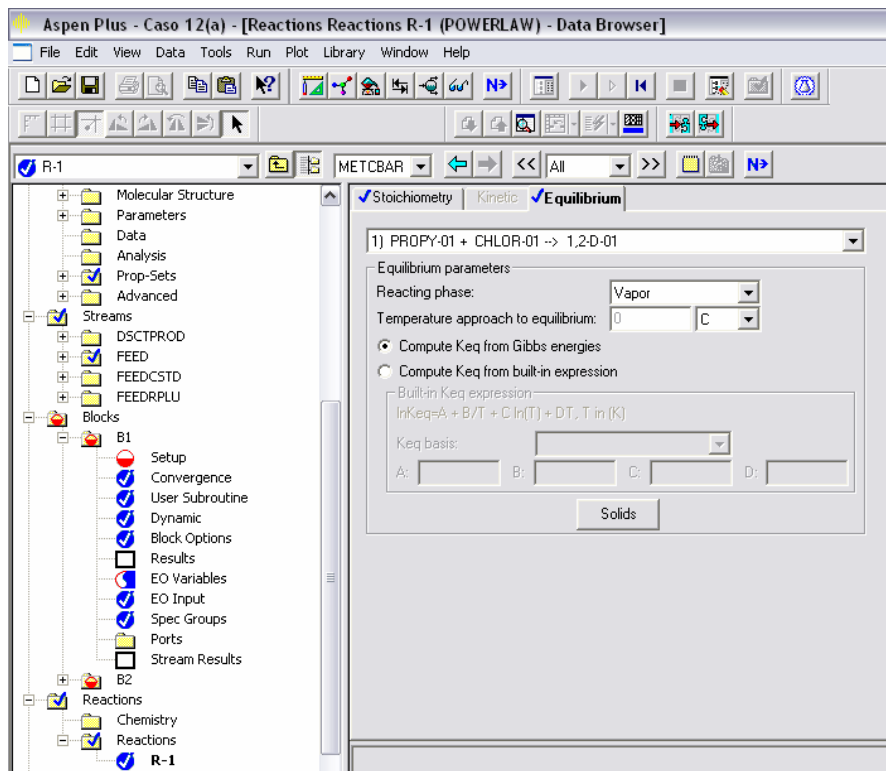
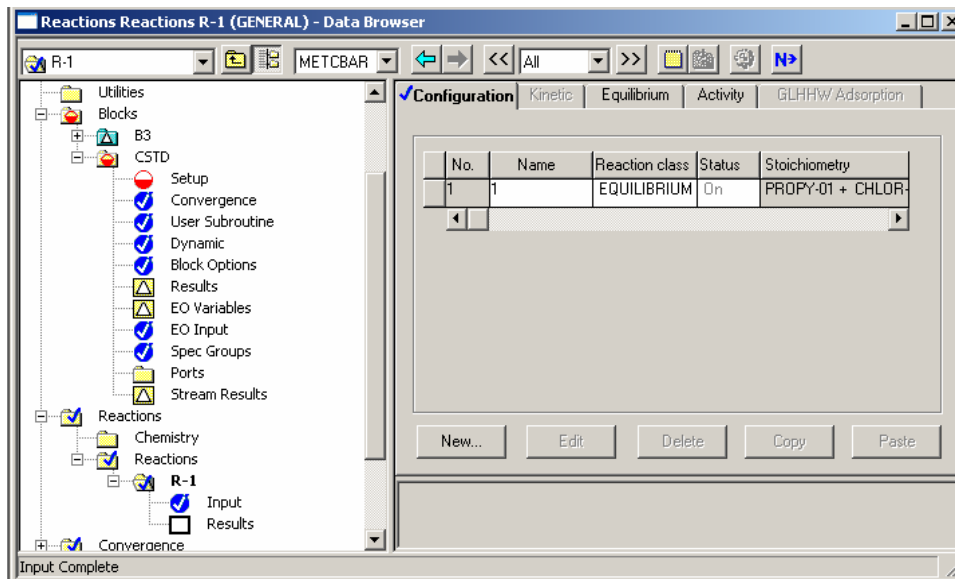
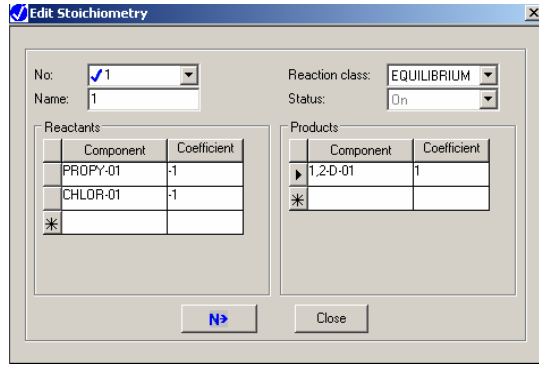


Posteriormente en la carpeta Reactions en la subcarpeta Reactions indicamos la reacción que tiene lugar y la estequiometría, pero no es necesario indicar los órdenes de reacción, ya que se trata de una reacción de equilibrio. Lo que sí es importante es indicar la fase en la que se produce la reacción. En este caso, la fase es vapor, pero en

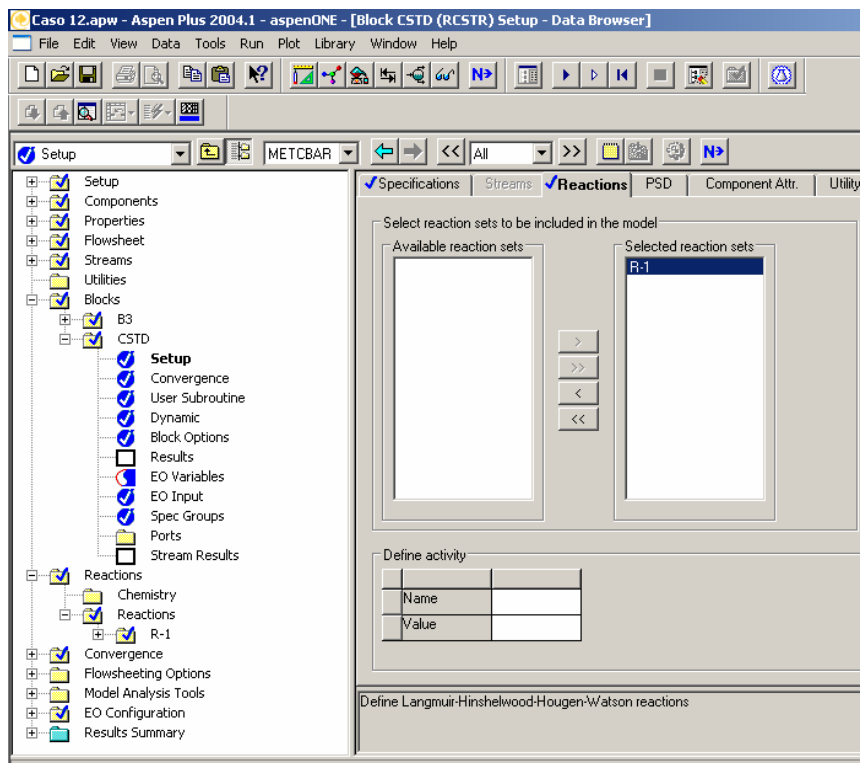
caso de no conocer la fase podemos indicar una, y si vemos que no ha habido reacción (las composiciones de entrada son igual a las de salida) cambiamos la fase.





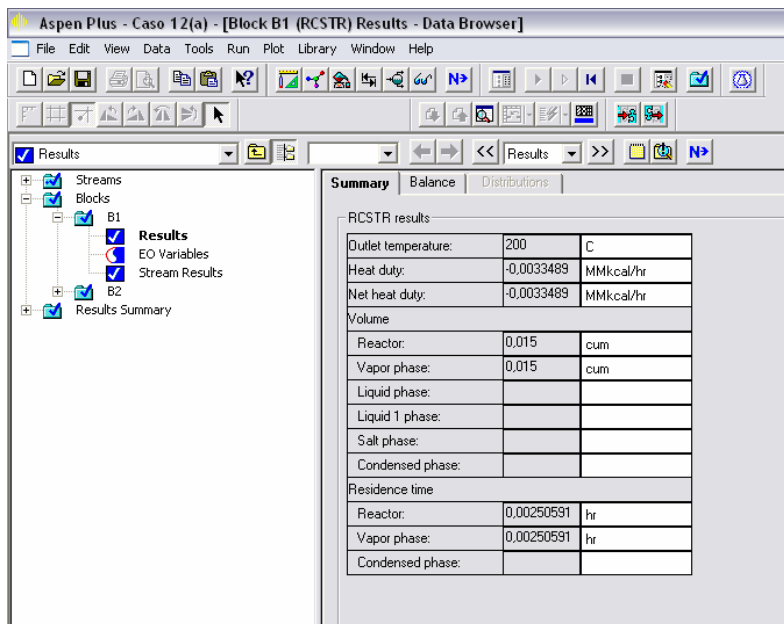


Una vez definida la reacción, y a podemos incluirla en el set de reacción del reactor CSTR.



Los resultados obtenidos son:

caso 12			
Stream ID		FEEDCSTD	DDSCTPROD
Temperature	C	200,0	200,0
Pressure	bar	2,000	2,000
Vapor Frac		1,000	1,000
Mole Flow	kmol/hr	0,385	0,308
Mass Flow	kg/hr	18,421	18,421
Volume Flow	cum/hr	7,518	5,986
Enthalpy	MMkcal/hr	0,003	-0,001
Mole Flow	kmol/hr		
PROPY-01		0,308	0,231
CHLOR-01		0,077	trace
1,2-D-01			0,077
Mole Frac			
PROPY-01		0,800	0,750
CHLOR-01		0,200	trace
1,2-D-01			0,250



Aspen Plus - Caso 12(a) - [Block B1 (RCSTR) Results - Data Browser]

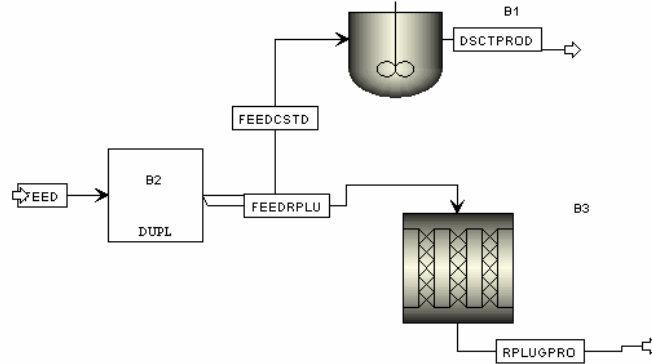
Summary | Balance | Distributions

RCSTR results:

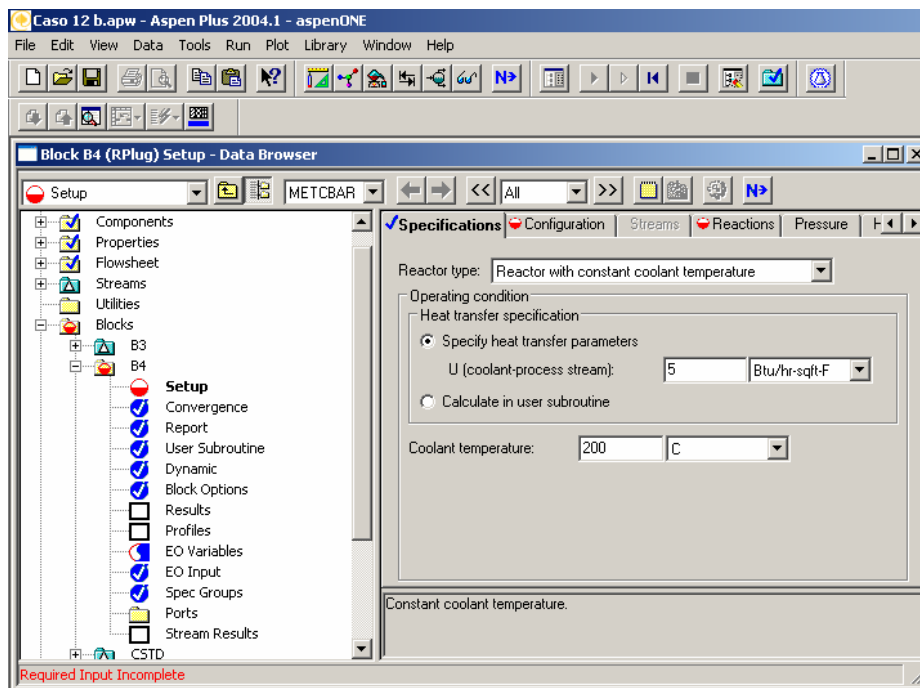
Outlet temperature:	200	C
Heat duty:	-0,0033489	MMkcal/hr
Net heat duty:	-0,0033489	MMkcal/hr
Volume		
Reactor:	0,015	cum
Vapor phase:	0,015	cum
Liquid phase:		
Liquid 1 phase:		
Salt phase:		
Condensed phase:		
Residence time		
Reactor:	0,00250591	hr
Vapor phase:	0,00250591	hr
Condensed phase:		

CASO B:

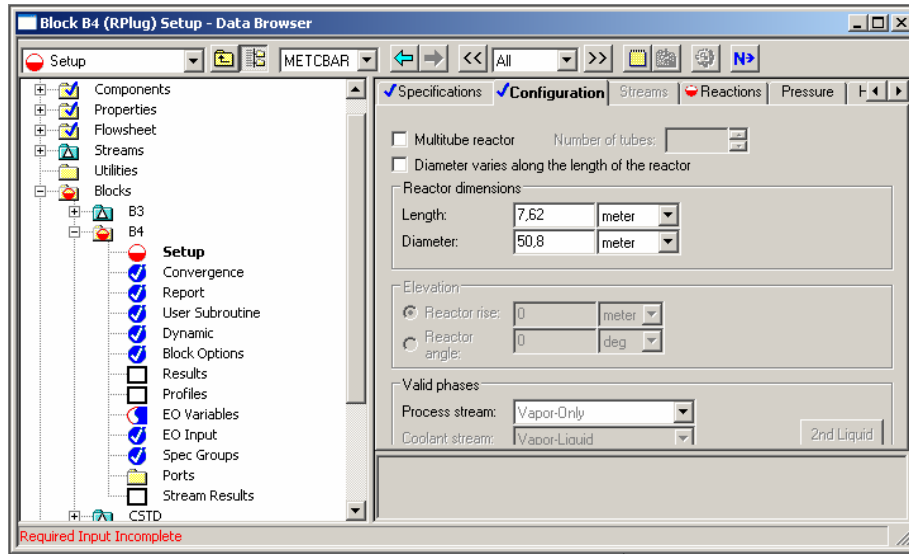
En primer lugar conectamos el reactor tubular con las corrientes de entrada y salida correspondientes:



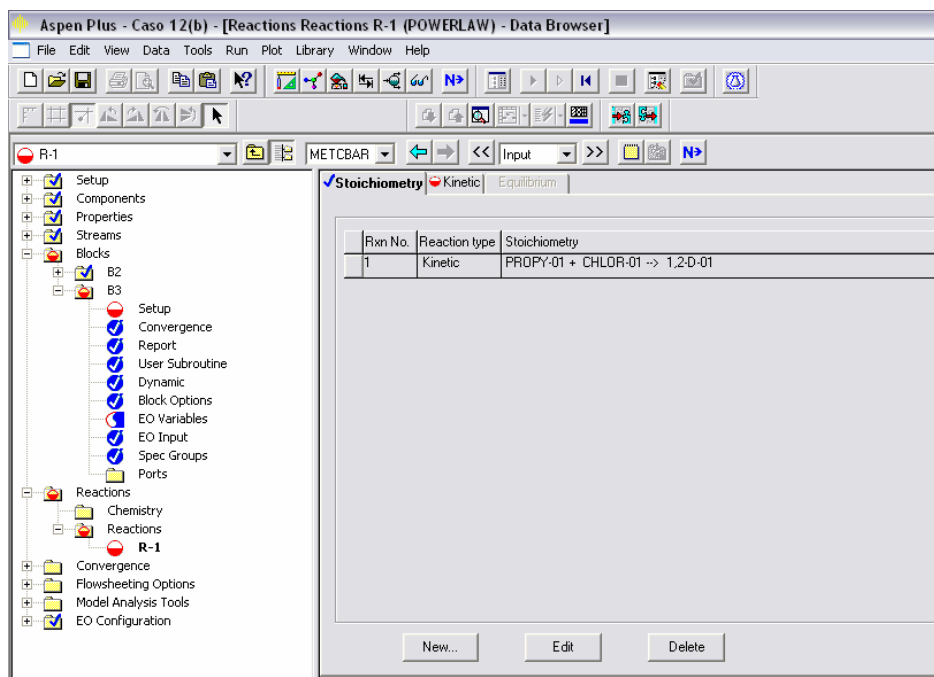
Posteriormente indicamos que se trata de un reactor con refrigerante a temperatura constante de 200°C y $U=5\text{Btu/h}\cdot\text{ft}^2\cdot\text{R}$

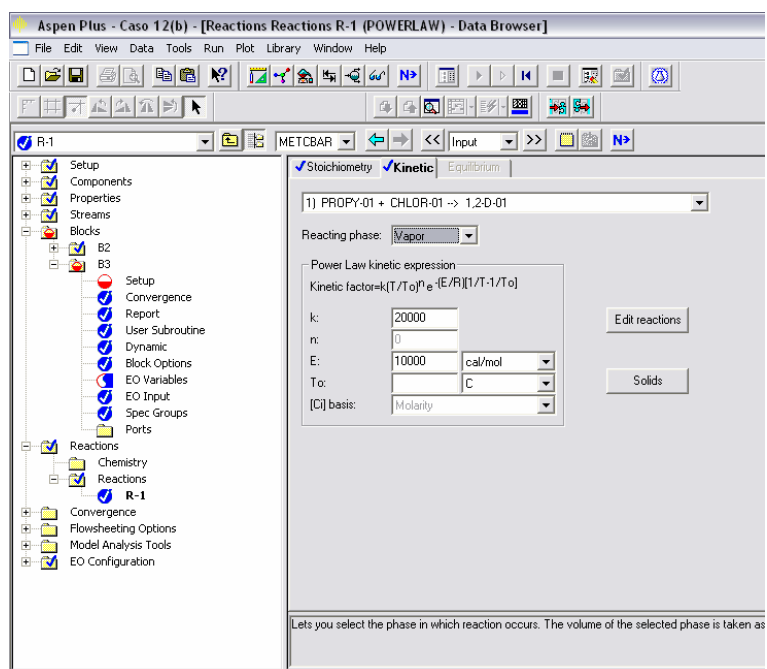
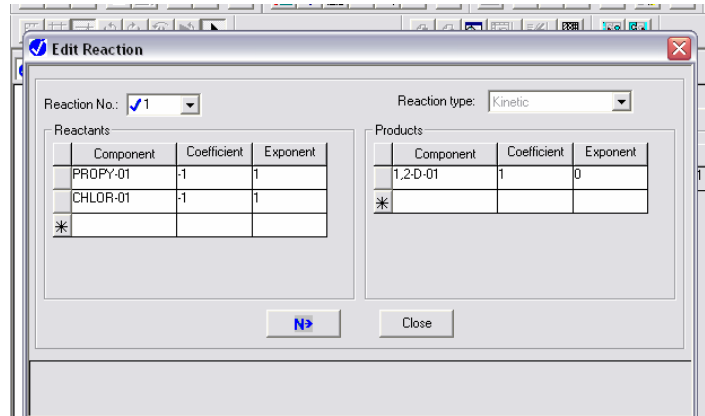


Posteriormente indicamos las dimensiones del reactor:

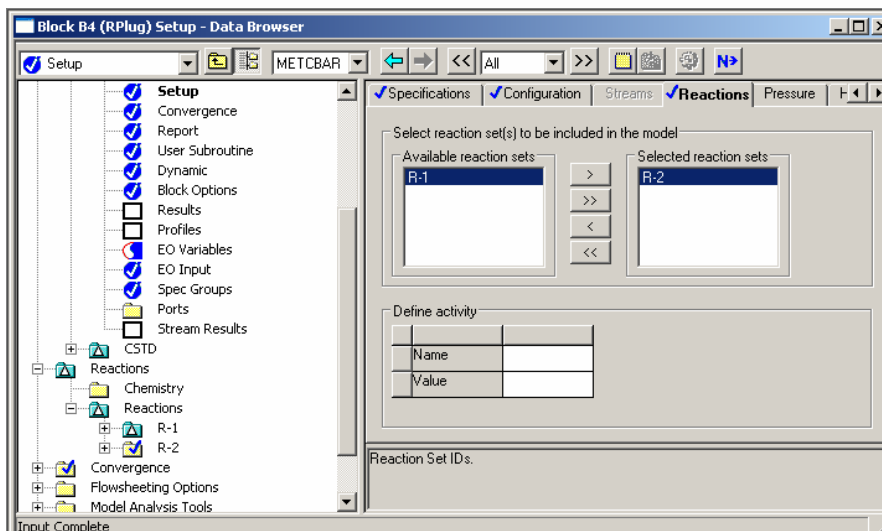


Posteriormente indicamos la reacción que tiene lugar. En este caso la reacción es cinética, y ahí que indicar la cinética de la reacción (antes sólo indicábamos los coeficientes estequiométricos, pero ahora hay que indicar el orden de reacción: 1 para los reactivos y 0 para los productos). También hay que especificar el valor de la constante cinética y de la energía de activación.



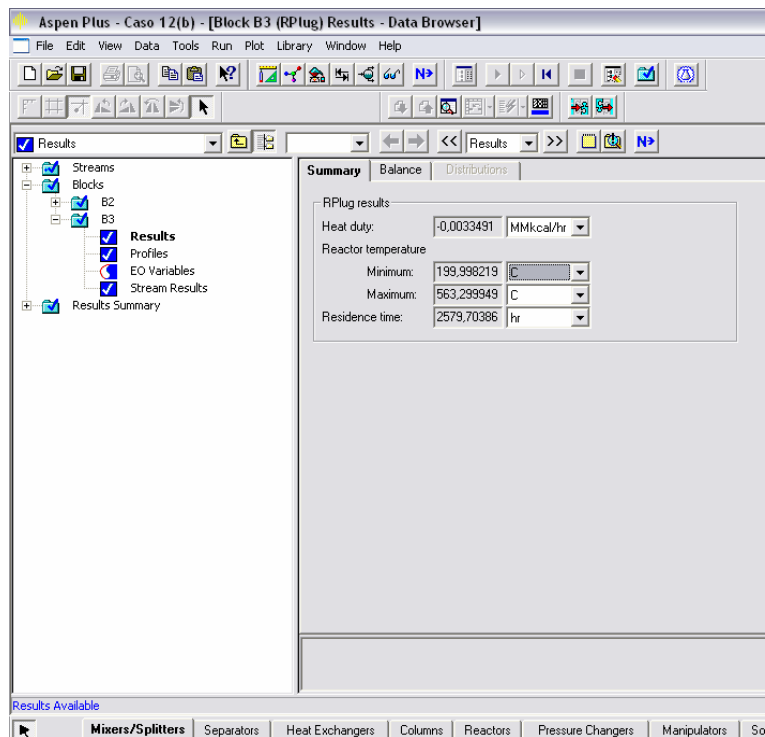


Definida la reacción ya podemos indicar que esta es la que se produce en el reactor.



Los resultados obtenidos son:

caso 12			
Stream ID		FEEDRPLUR	URPLUGPRO
Temperature	C	200,0	200,0
Pressure	bar	2,000	2,000
Vapor Frac		1,000	1,000
Mole Flow	kmo/hr	0,385	0,308
Mass Flow	kg/hr	18,421	18,421
Volume Flow	cum/hr	7,518	5,986
Enthalpy	MMkcal/hr	0,003	-0,001
Mole Flow	kmo/hr		
PROPY-01		0,308	0,231
CHLOR-01		0,077	
1,2-D-01			0,077
Mole Frac			
PROPY-01		0,800	0,750
CHLOR-01		0,200	
1,2-D-01			0,250



Aspen Plus - Caso 12(b) - [Block B3 (RPlug) Results - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

Results Summary

Summary Balance Distributions

RPlug results

Heat duty: -0.0033491 MMkcal/hr

Reactor temperature

Minimum: 199.998219 C

Maximum: 563.299949 C

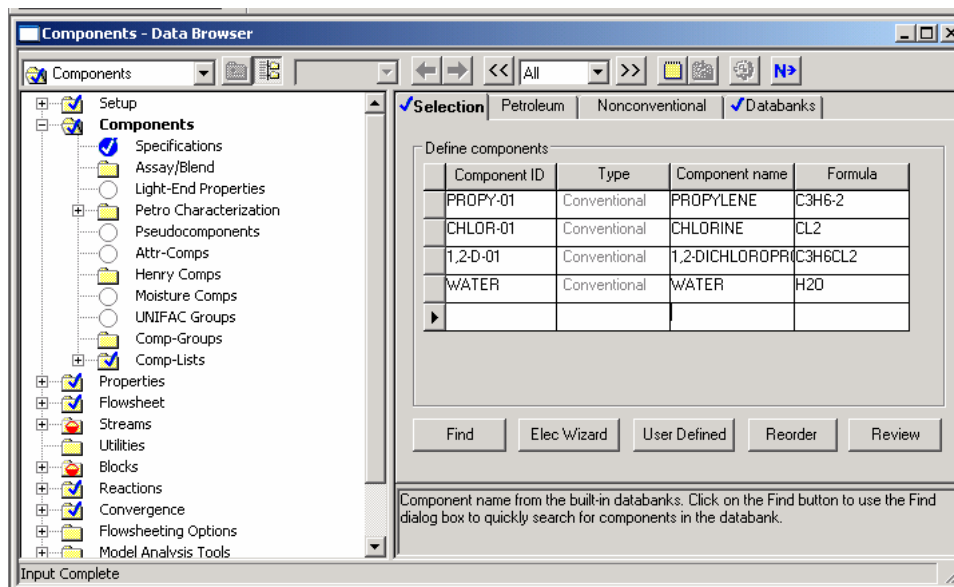
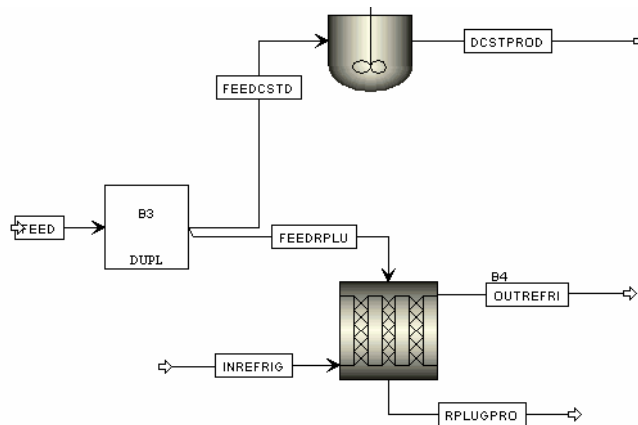
Residence time: 2579.70386 hr

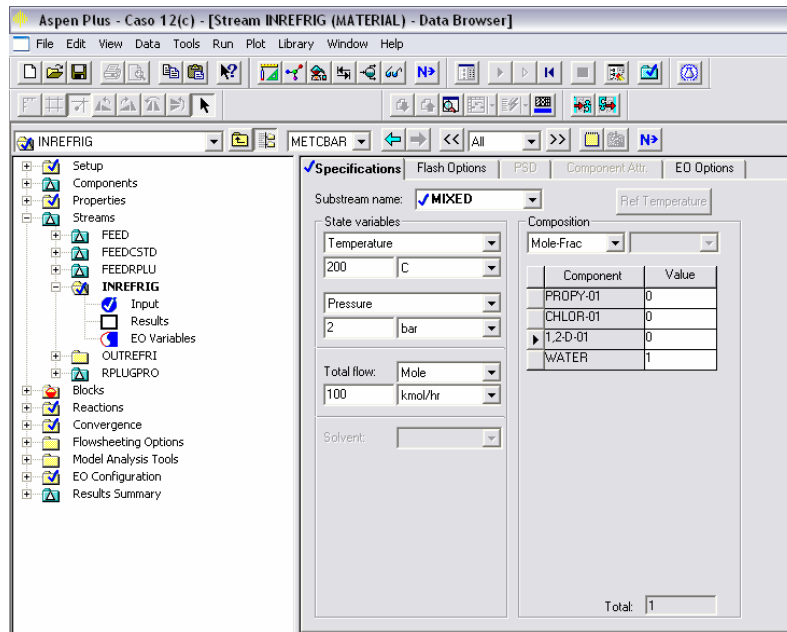
Results Available

Mixers/Splitters Separators Heat Exchangers Columns Reactors Pressure Changers Manipulators So

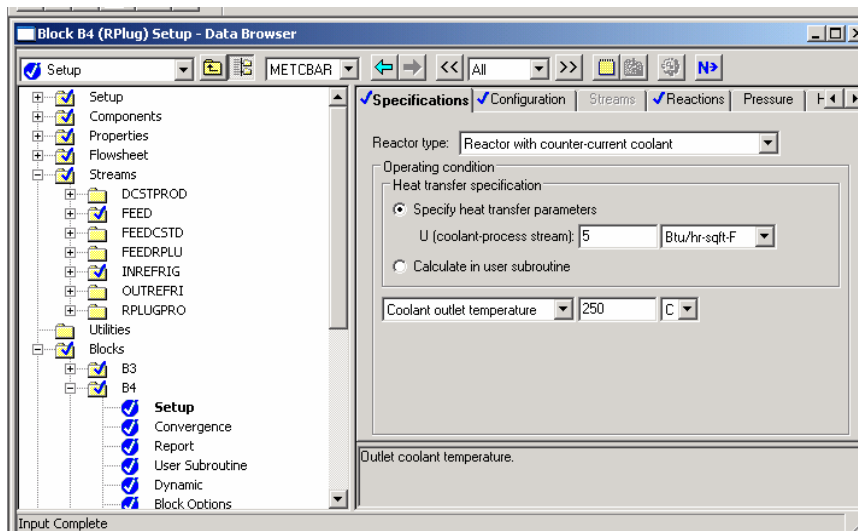
CASO C:

A continuación consideramos la utilización de un fluido refrigerante alimentado en contracorriente a una temperatura de 200°C. Para ellos tenemos que añadir dos nuevas corrientes (entrada y salida del refrigerante al reactor) y definir el fluido que utilizaremos como refrigerante. En nuestro caso consideraremos agua, por lo que debemos de añadir el componente en la base de datos de la simulación. De la corriente de entrada de refrigerante indicamos la composición (100% agua), la temperatura de entrada (200°C por el enunciado del problema) y un caudal que supondremos de 100 Kmol/h.



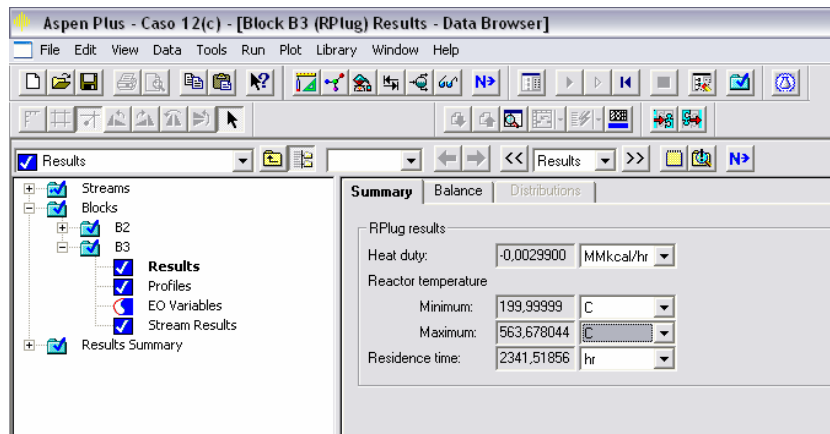


Posteriormente en el reactor tenemos que indicar que utilizamos un refrigerante en contracorriente (Reactor with counter-current coolant) y la temperatura de salida del refrigerante (en principio a considerar una temperatura superior a la de entrada: por ejemplo 250°C).



Los resultados obtenidos son:

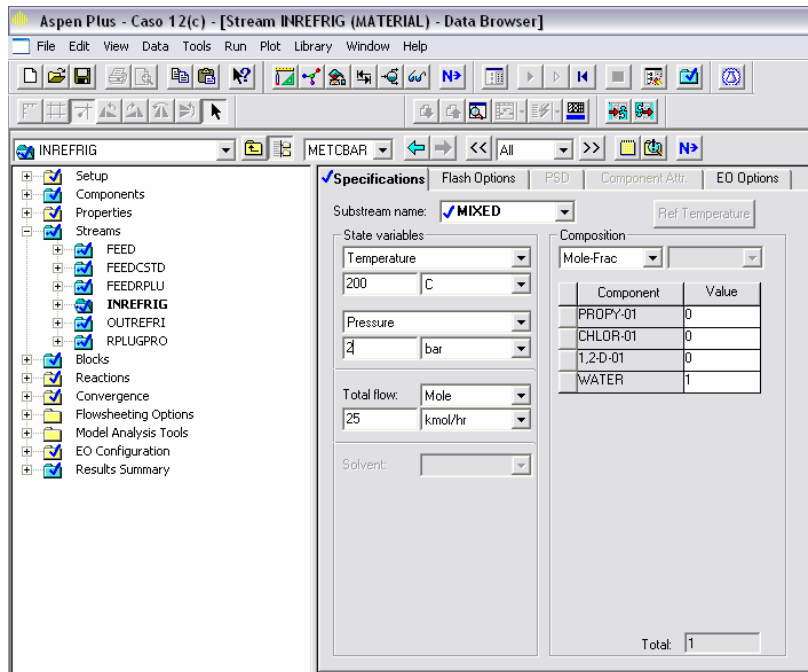
caso 12					
Stream ID		FEEDRPLU	INREFRIG	RPLUGPRO	OUTREFRI
Temperature	C	200,0	246,5	246,5	250,0
Pressure	bar	2,000	2,000	2,000	2,000
Vapor Frac		1,000	1,000	1,000	1,000
Mole Flow	kmo l/hr	0,385	100,000	0,308	100,000
Mass Flow	kg/hr	18,421	1801,528	18,423	1801,528
Volume Flow	cum/hr	7,518	2145,564	6,595	2160,327
Enthalpy	MMkcal/hr	0,003	-5,596	> -0,001	-5,593
Mole Flow	kmo l/hr				
PROPY-01		0,308		0,231	
CHLOR-01		0,077			
1,2-D-01				0,077	
WATER			100,000		100,000
Mole Frac					
PROPY-01		0,800		0,750	
CHLOR-01		0,200			
1,2-D-01				0,250	
WATER			1,000		1,000



Como se observa la temperatura de entrada del fluido es 246,5°C, superior a los 200°C. Para conseguir ajustar la temperatura podemos disminuir el caudal de refrigerante utilizado o cambiar la temperatura del refrigerante a la salida. Disminuyendo el caudal a la mitad y bajando la temperatura de salida hasta 230°C, se obtienen los siguientes resultados:

caso 12					
Stream ID		FEEDRPLU	INREFRIG	RPLUGPRO	OUTREFR
Temperature	C	200,0	222,5	222,5	230,0
Pressure	bar	2,000	2,000	2,000	2,000
Vapor Frac		1,000	1,000	1,000	1,000
Mole Flow	kmol/hr	0,385	50,000	0,308	50,000
Mass Flow	kg/hr	18,421	900,764	18,421	900,764
Volume Flow	cum/hr	7,518	1022,214	6,281	1038,020
Enthalpy	MMkcal/hr	0,003	-2,808	-0,001	-2,805
Mole Flow	kmol/hr				
PROPY-01		0,308		0,231	
CHLOR-01		0,077			
1,2-D-01				0,077	
WATER			50,000		50,000
Mole Frac					
PROPY-01		0,800		0,750	
CHLOR-01		0,200			
1,2-D-01				0,250	
WATER			1,000		1,000

Como se sigue sin alcanzar el resultado, seguimos tanteando hasta encontrar el valor adecuado de caudal y temperatura de salida del refrigerante:



Aspen Plus - Caso 12(c) - [Stream INREFRIG (MATERIAL) - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

INREFRIG METCBAR

Specifications Flash Options PSD Component Attr. EO Options

Substream name: MIXED Ref Temperature

State variables

Temperature: 200 C

Pressure: 2 bar

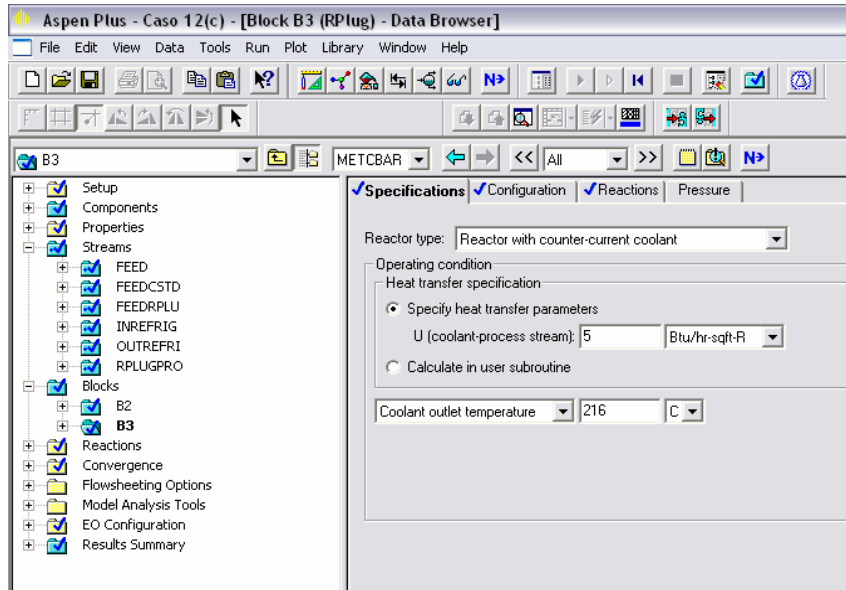
Total flow: Mole 25 kmol/hr

Solvent:

Composition

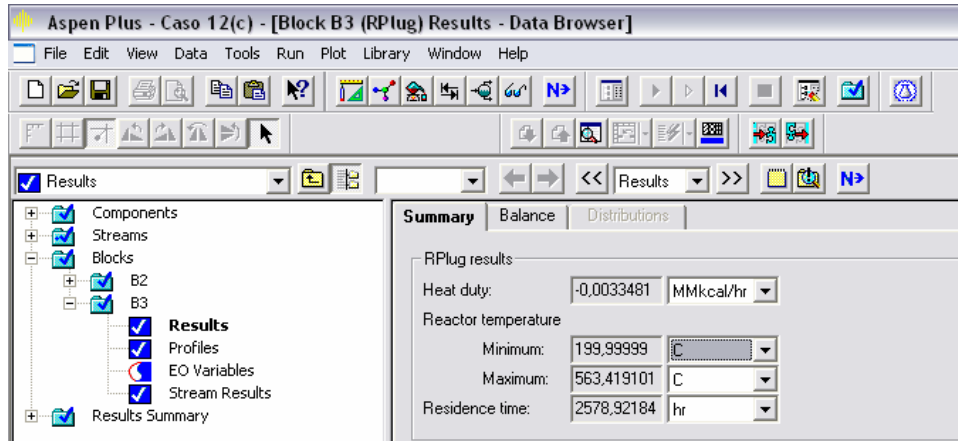
Component	Value
PROPY-01	0
CHLOR-01	0
1,2-D-01	0
WATER	1

Total: 1



Los resultados obtenidos son:

caso 12					
Stream ID		FEEDRPLU	INREFRIG	RPLUGPRO	OUTREFR
Temperature	C	200,0	200,1	200,1	216,0
Pressure	bar	2,000	2,000	2,000	2,000
Vapor Frac		1,000	1,000	1,000	1,000
Mole Flow	kmol/hr	0,385	25,000	0,308	25,000
Mass Flow	kg/hr	18,421	450,382	18,421	450,382
Volume Flow	cum/hr	7,518	487,489	5,988	504,243
Enthalpy	MMkcal/hr	0,003	-1,409	-0,001	-1,405
Mole Flow	kmol/hr				
PROPY-01		0,308		0,231	
CHLOR-01		0,077			
1,2-D-01				0,077	
WATER			25,000		25,000
Mole Frac					
PROPY-01		0,800		0,750	
CHLOR-01		0,200			
1,2-D-01				0,250	
WATER			1,000		1,000



CONCLUSIONES:

En la siguiente tabla se han recogido los datos de equilibrio considerados en cada uno de los casos:

Tipo Reactor	Propileno (fracción molar)	Cloro (fracción molar)	1,2-Dicloropropano (fracción molar)
CSTR	0,750	Trazas	0,250
Tubular isoterma	0,750	-	0,250
Tubular refrigerante	0.750	-	0.250

Como se observa en todos los casos considerados se alcanza el equilibrio. La diferencia en cada uno de los casos es la cantidad de calor a retirar (la reacción es exotérmica) y el tiempo de residencia:

Tipo Reactor	Q (MMcal/h)	Tiem. Residencia(h)
CSTR	-0,0033489	0,0025
Tubular isoterma	-0,0033491	2579
Tubular refrigerante	-0,0033481	2578

Podemos concluir, que con respecto al tiempo de residencia necesario y el calor necesario retirar, el reactor que más interesa es el de mezcla perfecta (CSTR). El único inconveniente que presenta este reactor es que en el equilibrio se tienen trazas de cloro, que impurifican el producto obtenido. Si la aplicación final, permite la existencia de trazas de cloro habrá problema en utilizar este tipo de reactor.

Caso 13

OBJETIVO

Un proceso obtiene gas de síntesis (mezclas CO/H₂ con pequeñas cantidades de CO₂) mediante la gasificación de una fracción de petróleo a alta temperatura. La carga se precalienta hasta unos 500°C, y se alimenta al reactor mediante cantidades variables de aire y vapor de agua, ambos también precalentados a la misma temperatura. Se considera que todas las reacciones se encuentran en equilibrio y que el reactor opera a una presión de 10 bar. La caracterización de la carga es la siguiente:

Specific Gravity=0,8628

Curva de destilación D-86:

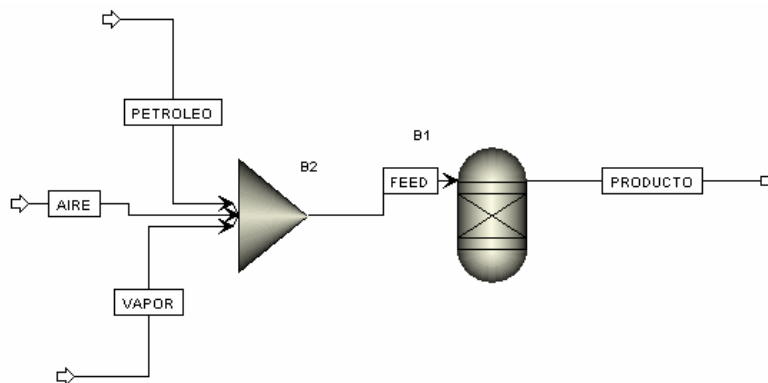
Destilado	(% vol.)	0	5	10	20	30	50	70	80	90	95	100
Temp	(°C)	248	277	289	302	311	328	342	352	361	371	379

a°) Determinar los caudales de agua y aire que serán necesarios para alcanzar una conversión superior al 99% peso de la carga y obtener un gas de síntesis con una relación molar CO/H₂=2

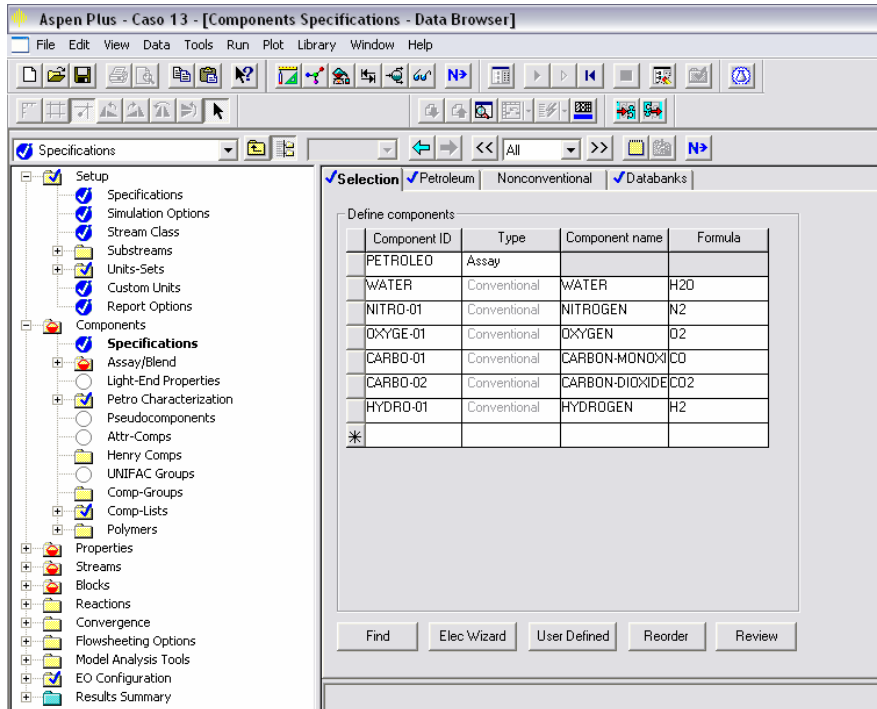
b°) ¿Cómo se modificarían los resultados anteriores si se emplea oxígeno puro en vez de aire en el gasificador?

PROCEDIMIENTO A:

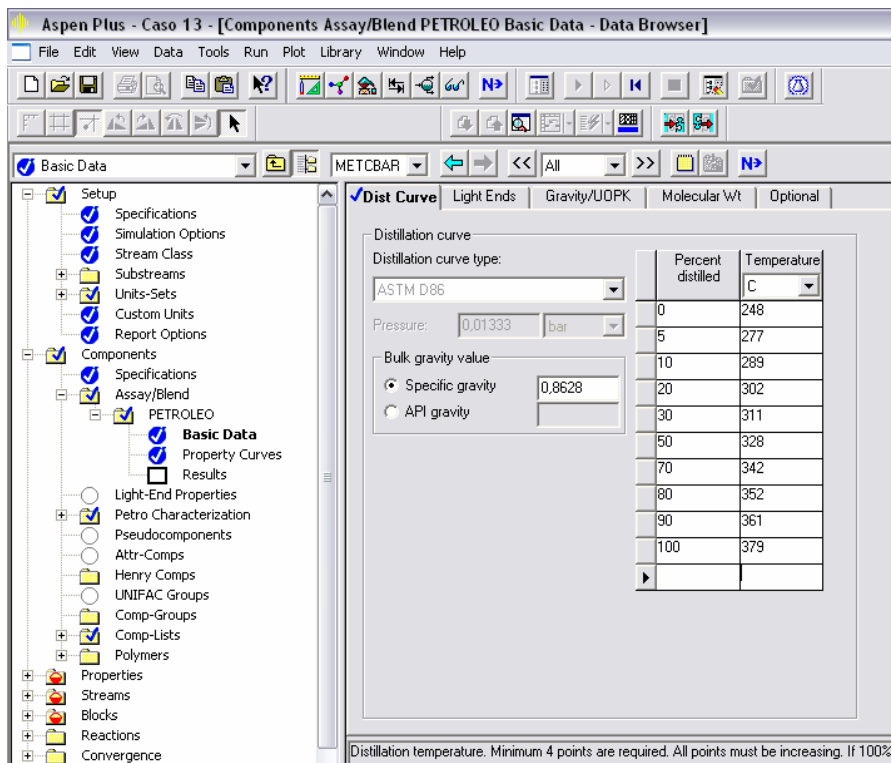
En primer lugar se dibujará el diagrama de flujo del proceso. Se ha considerado la utilización de un mezclador para alimentar al reactor la mezcla de fracción de petróleo, vapor de agua y aire. El reactor utilizado es un reactor de Gibbs, puesto que no se conoce las cinéticas de las reacciones.



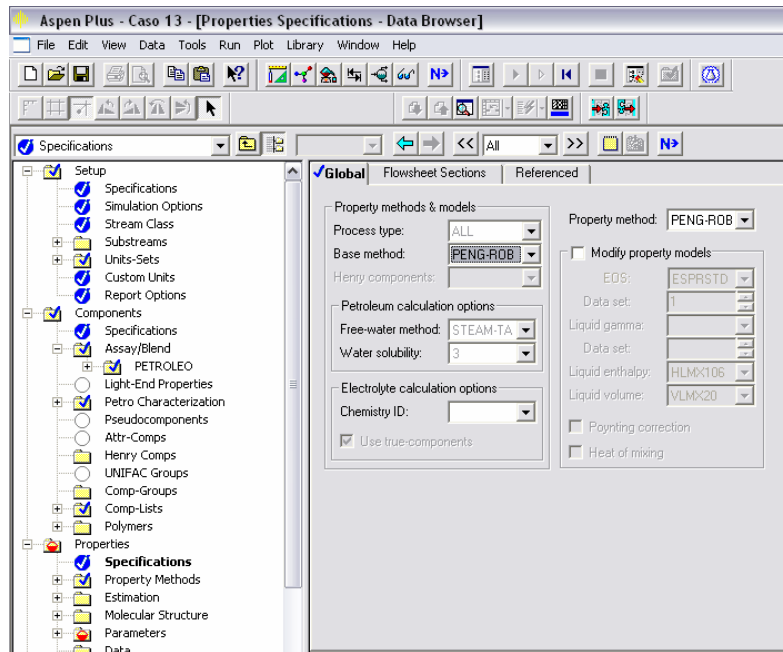
En primer lugar seleccionamos los componentes que intervienen en la simulación (Nafta, agua, nitrógeno, oxígeno, CO, H₂ y CO₂)



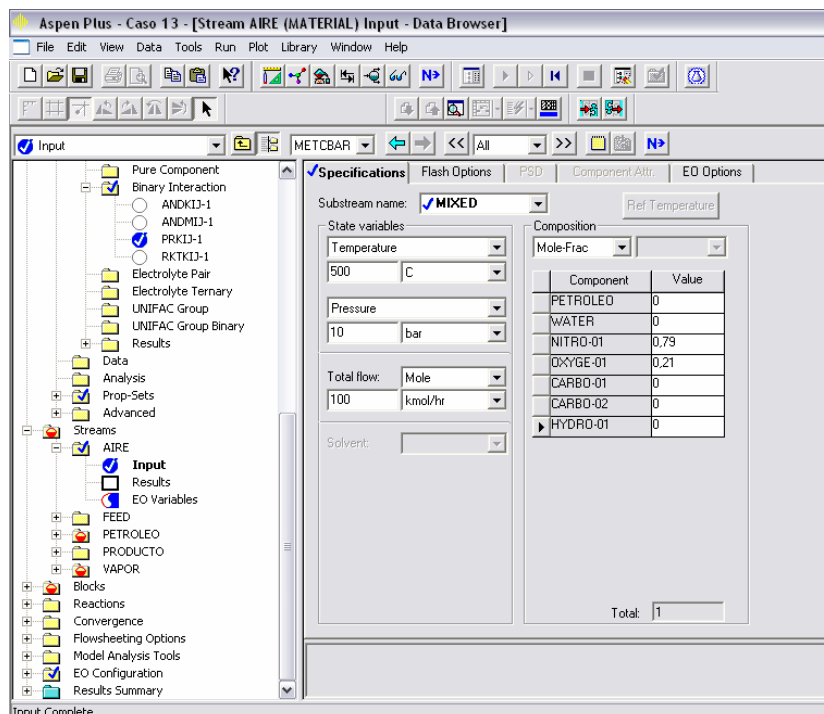
Posteriormente indicamos la curva de destilación D-86 del petróleo:

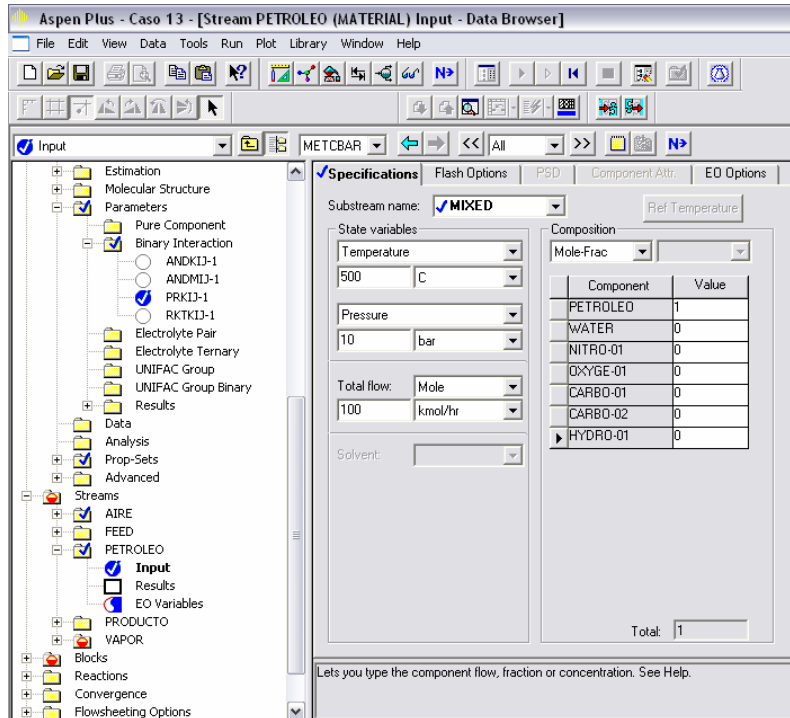


Posteriormente indicamos la base de cálculo (al tratarse de hidrocarburos: Peng-Robinson).



Posteriormente indicamos las condiciones de la corriente de aire ($T=500^{\circ}\text{C}$, presión=10 bar y 21% oxígeno, 79% Nitrógeno), vapor de agua ($T=500^{\circ}\text{C}$, presión=10 bar y 100% agua) y Petróleo ($T=500^{\circ}\text{C}$, presión=10 bar y 100% petróleo). Se considerará inicialmente un caudal de cada una de las corrientes de 100 Kmol/h. Este caudal que se ajustará posteriormente con un diseño de especificaciones al caudal necesario para conseguir las especificaciones requeridas.





Aspen Plus - Caso 13 - [Stream PETROLEO (MATERIAL) Input - Data Browser]

Substream name: MIXED

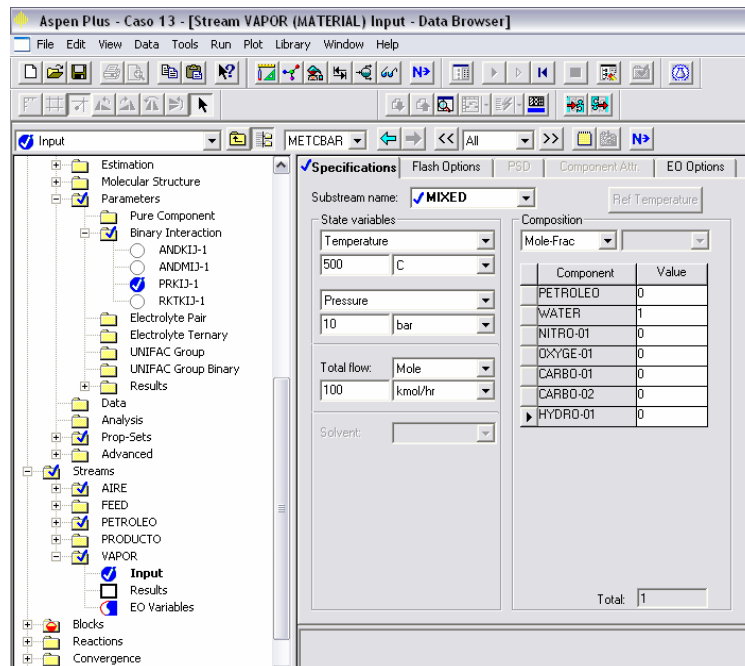
State variables:

- Temperature: 500 C
- Pressure: 10 bar
- Total flow: 100 kmol/hr

Composition:

Component	Value
PETROLEO	1
WATER	0
NITRO-01	0
OXYGE-01	0
CARBO-01	0
CARBO-02	0
HYDRO-01	0

Total: 1



Aspen Plus - Caso 13 - [Stream VAPOR (MATERIAL) Input - Data Browser]

Substream name: MIXED

State variables:

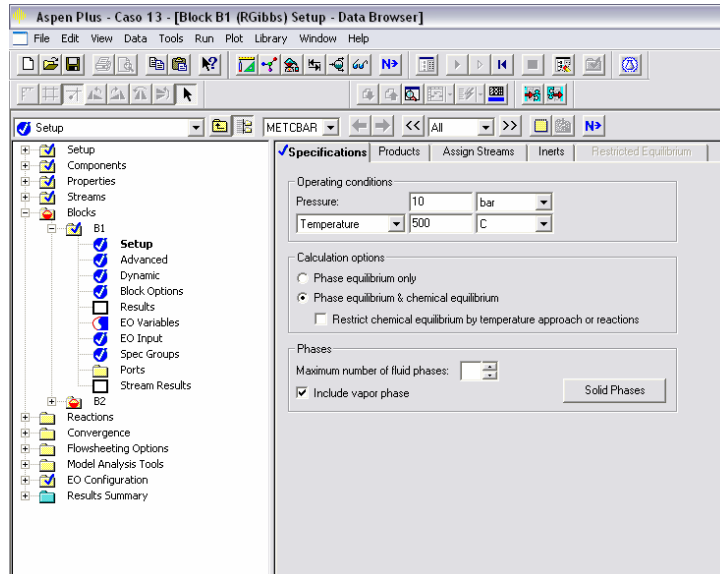
- Temperature: 500 C
- Pressure: 10 bar
- Total flow: 100 kmol/hr

Composition:

Component	Value
PETROLEO	0
WATER	1
NITRO-01	0
OXYGE-01	0
CARBO-01	0
CARBO-02	0
HYDRO-01	0

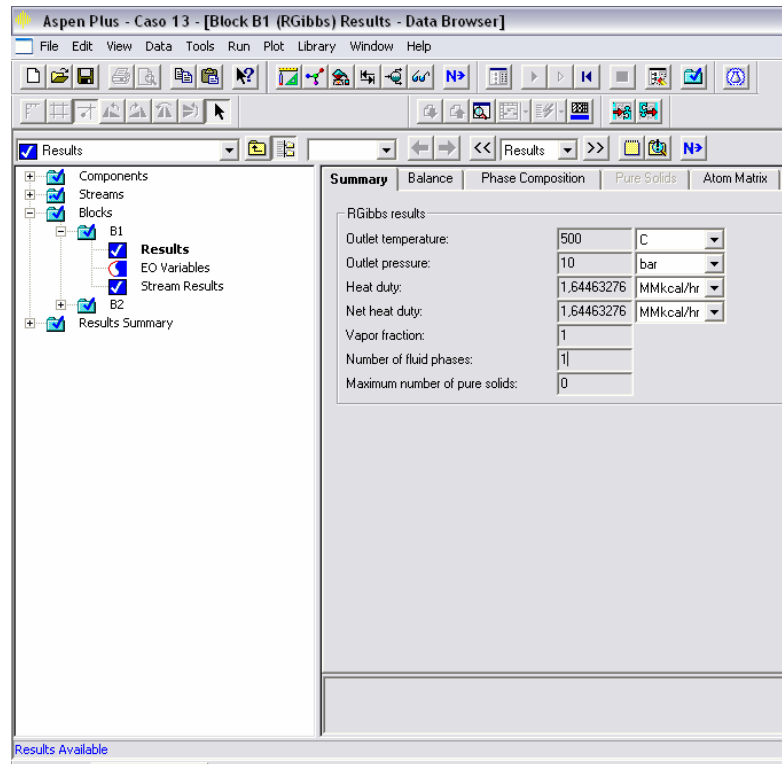
Total: 1

Posteriormente indicamos las condiciones del reactor (500 °C y 10bar de presión).

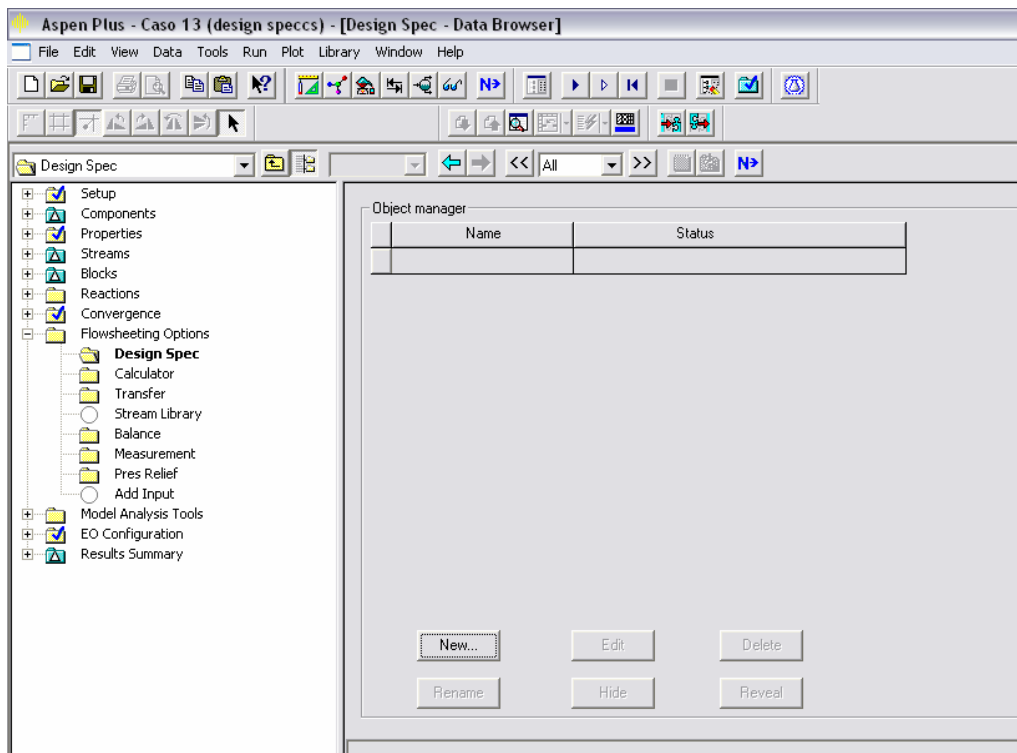


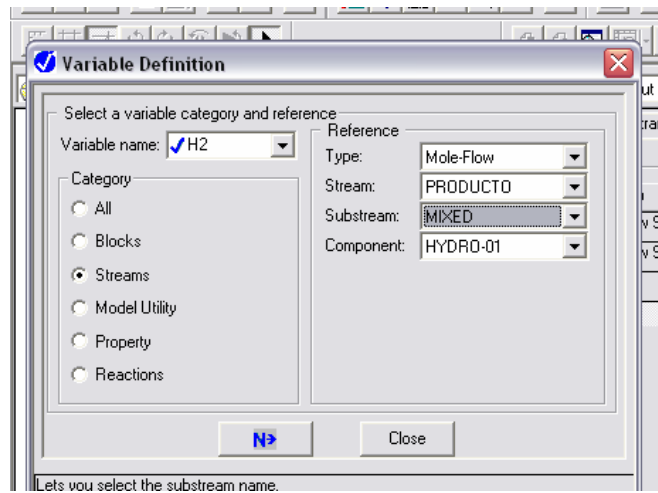
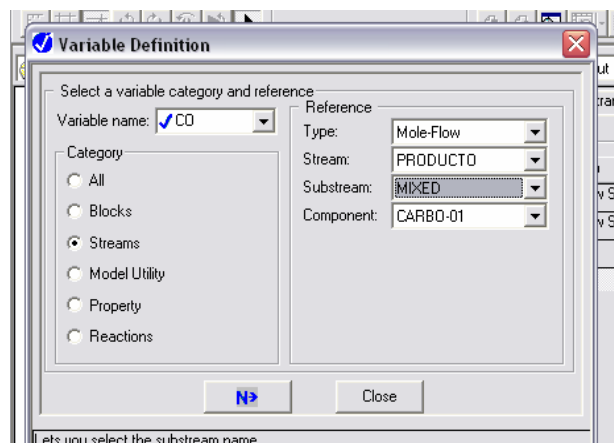
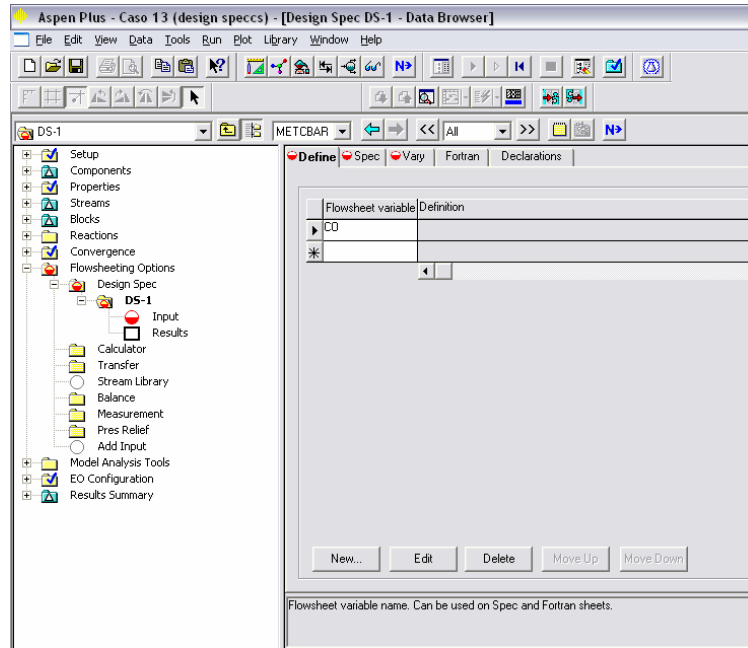
Los resultados obtenidos con estas condiciones preliminares son:

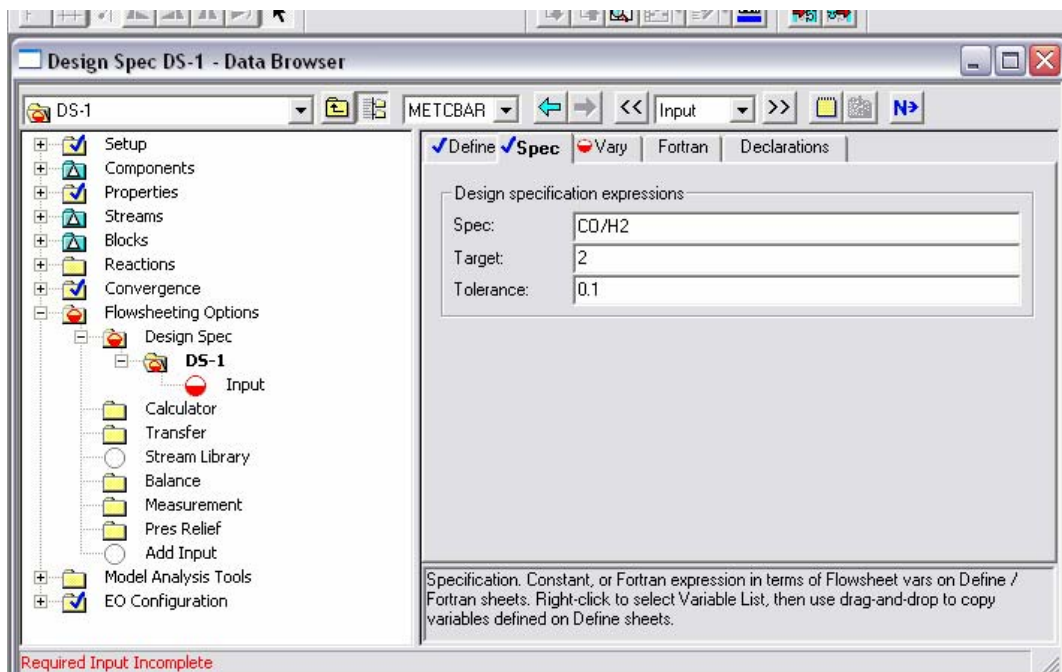
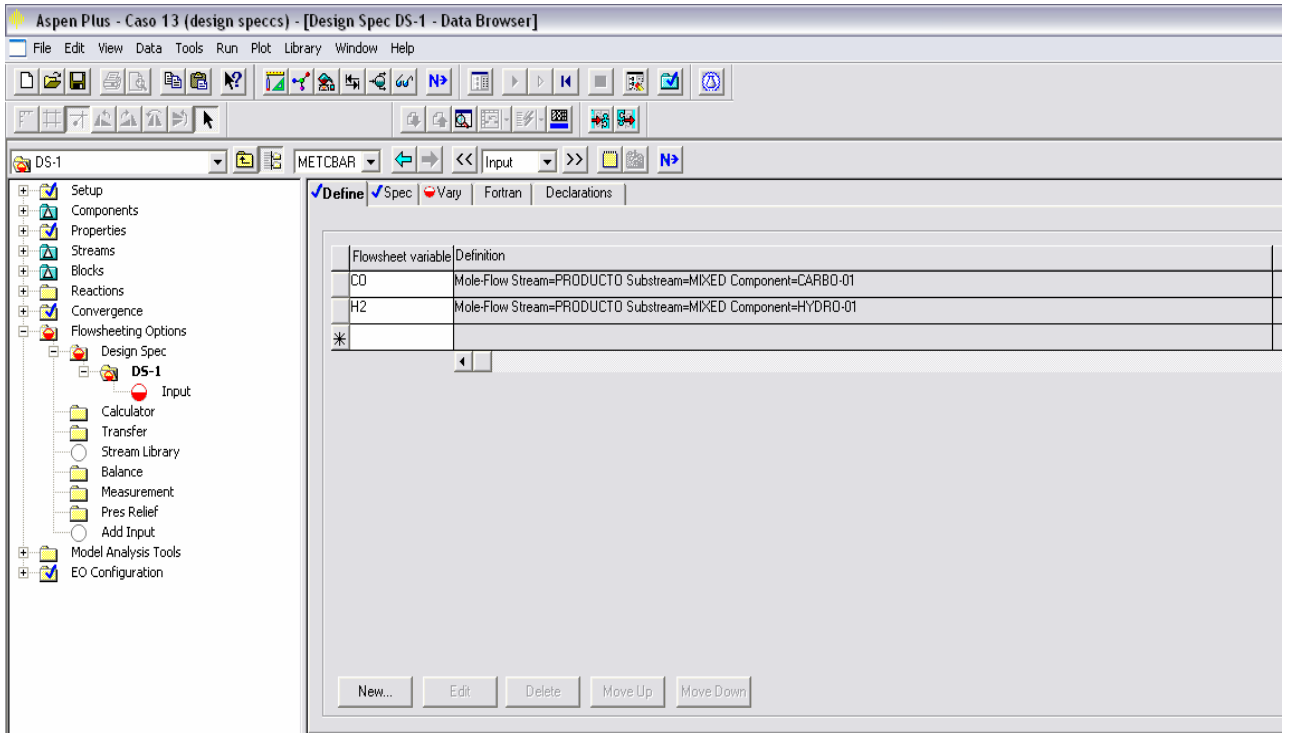
Caso 13						
Stream ID		AIRE	FEED	PETROLEO	PRODUCTO	VAPOR
Temperature	C	500,0	493,6	500,0	500,0	500,0
Pressure	bar	10,000	10,000	10,000	10,000	10,000
Vapor Frac		1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
Mole Flow	kmol/hr	100,000	300,000	100,000	458,527	100,000
Mass Flow	kg/hr	2885,040	31420,794	26734,226	31420,794	1801,528
Volume Flow	cum/hr	644,808	1847,530	435,410	2934,676	636,854
Enthalpy	MMkcal/hr	0,343	-8,694	-3,661	-7,050	-5,376
Mole Flow	kmol/hr					
WATER			100,000		13,533	100,000
NITRO-01		79,000	79,000		79,000	
OXYGE-01		21,000	21,000		trace	
CARBO-01					63,463	
CARBO-02					32,502	
HYDRO-01					133,326	
PC215C			0,839	0,839	39,369	
PC225C			2,005	2,005	42,695	
PC239C			2,299	2,299	23,090	
PC254C			2,909	2,909	12,880	
PC267C			5,086	5,086	8,082	
PC281C			6,692	6,692	10,357	
PC295C			9,655	9,655	0,139	
PC309C			10,519	10,519	0,054	
PC323C			10,637	10,637	0,021	
PC337C			12,151	12,151	0,009	
PC350C			12,434	12,434	0,004	
PC364C			10,059	10,059	0,001	
PC377C			8,514	8,514	0,001	
PC392C			5,783	5,783	< 0,001	
PC399C			0,418	0,418	< 0,001	

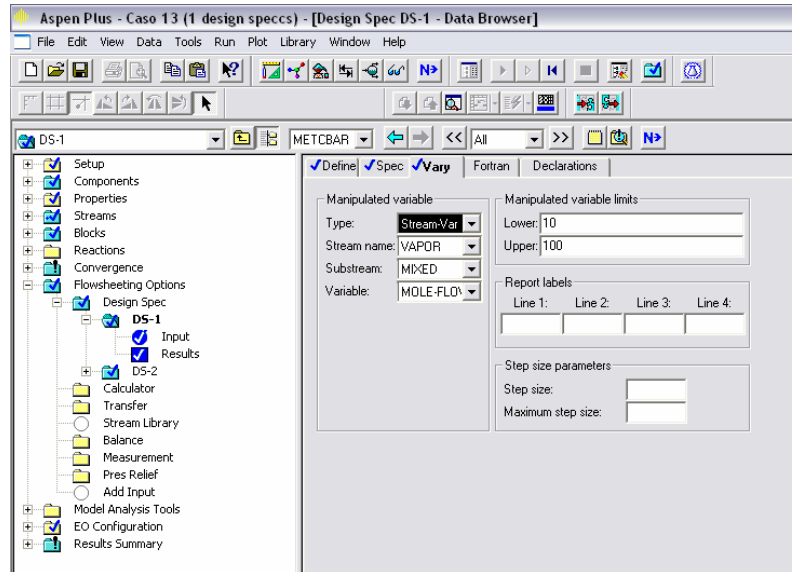


Para ajustar que la conversión sea superior al 99% en peso de la carga y que la relación CO/H_2 se realizarán los dos diseños de especificaciones indicados a continuación:

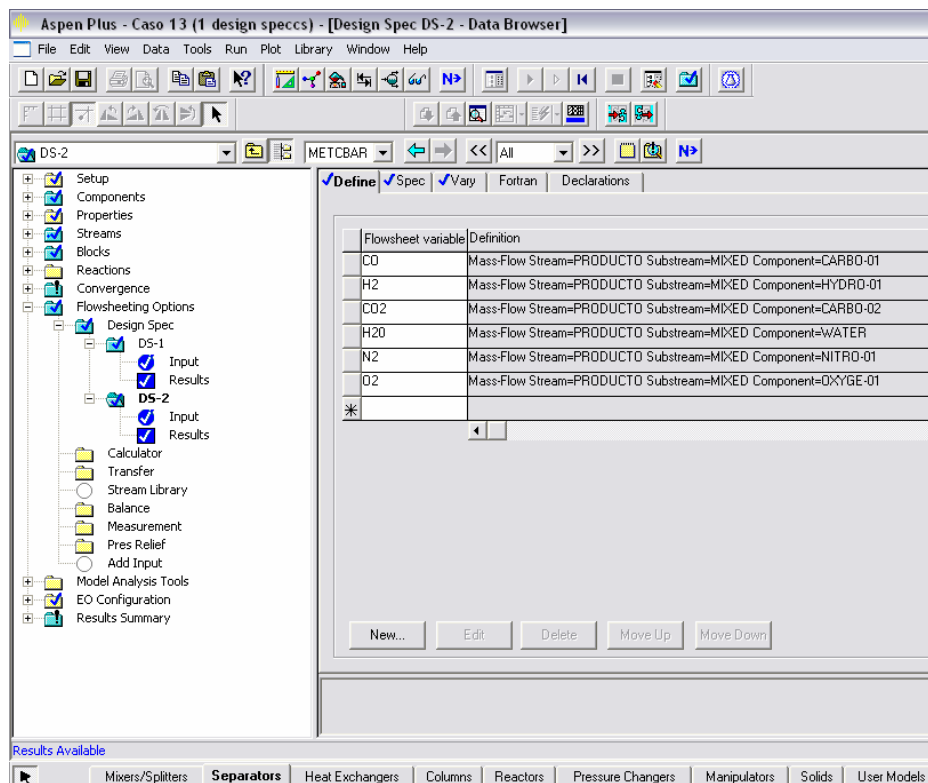


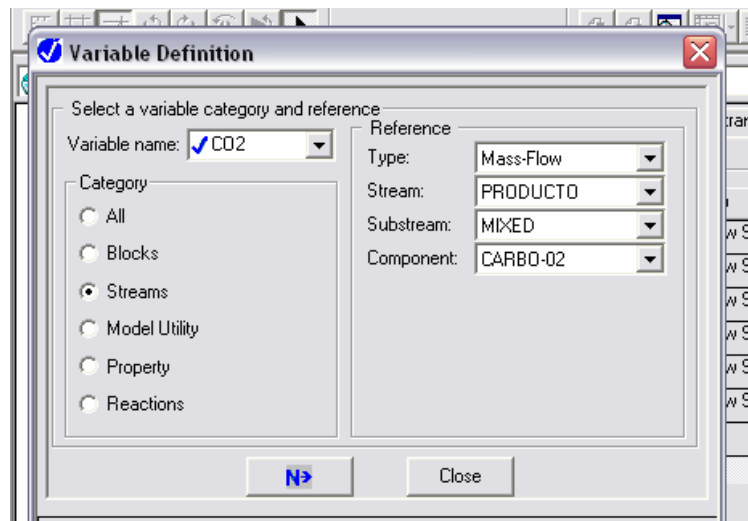
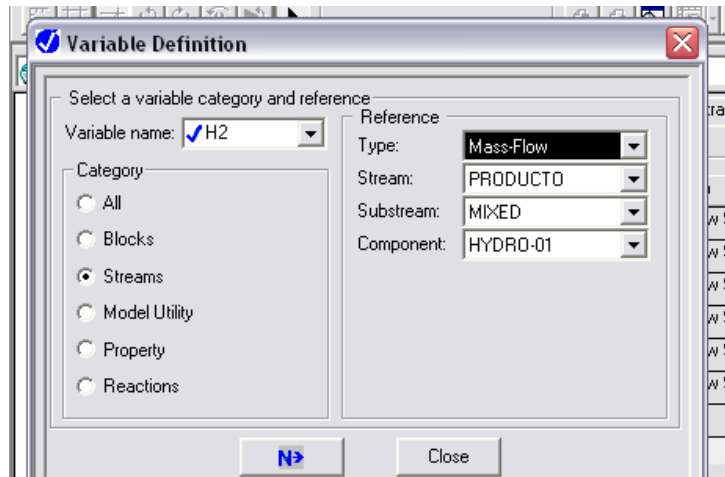
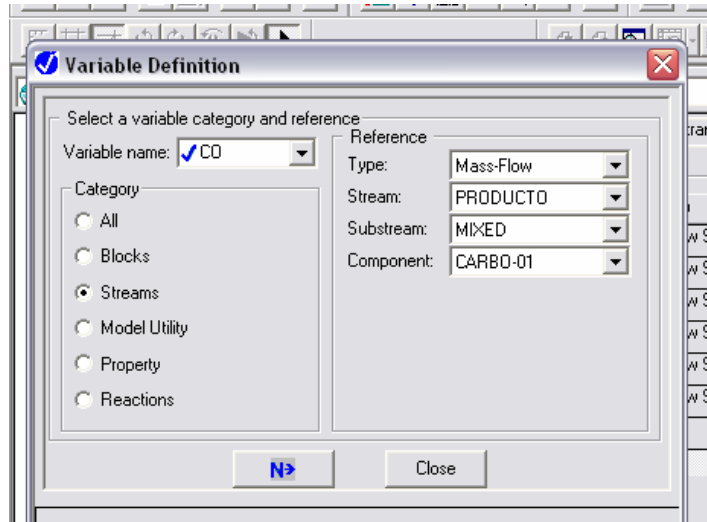


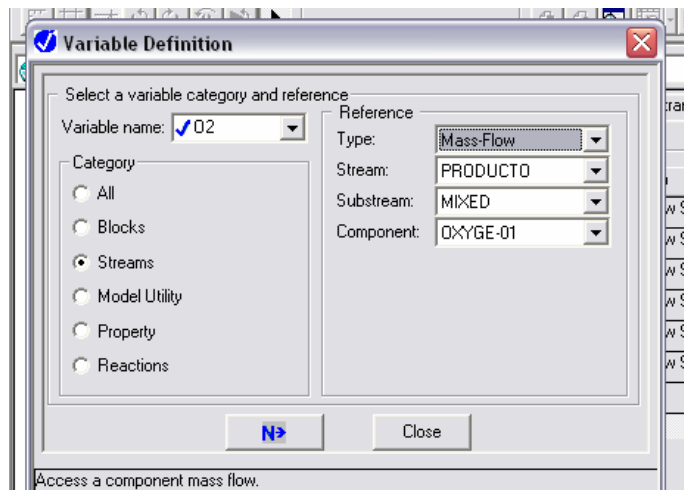
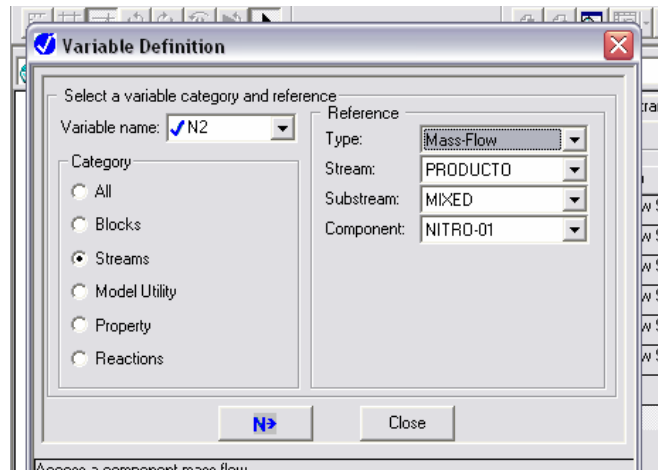
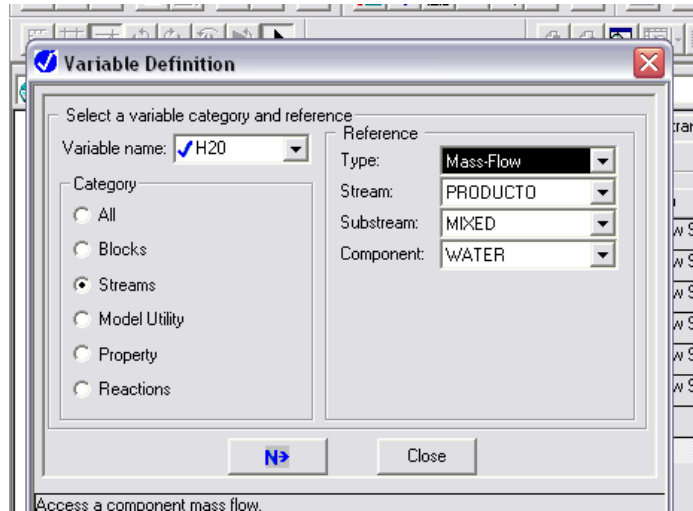


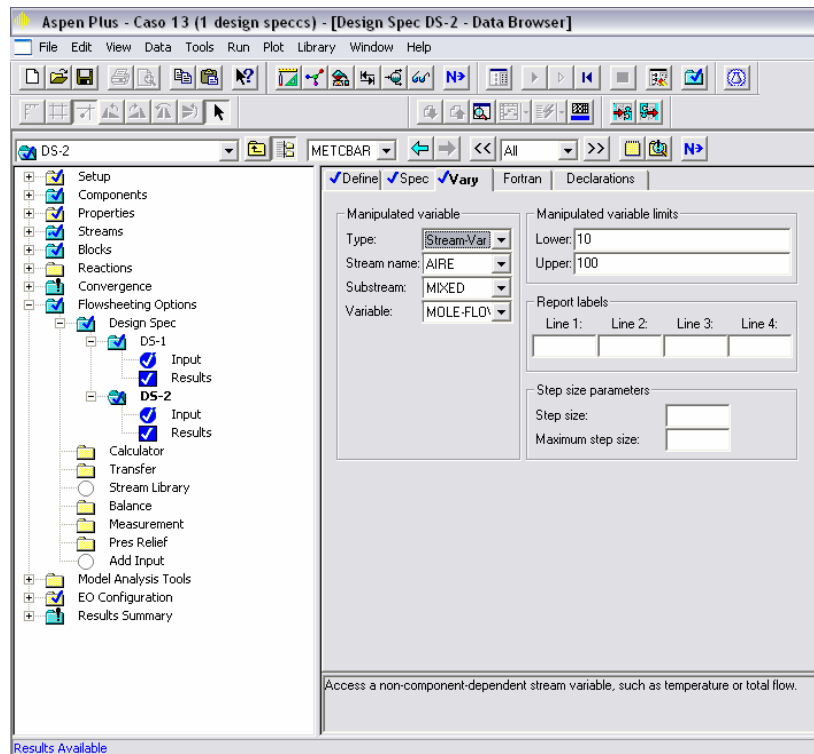
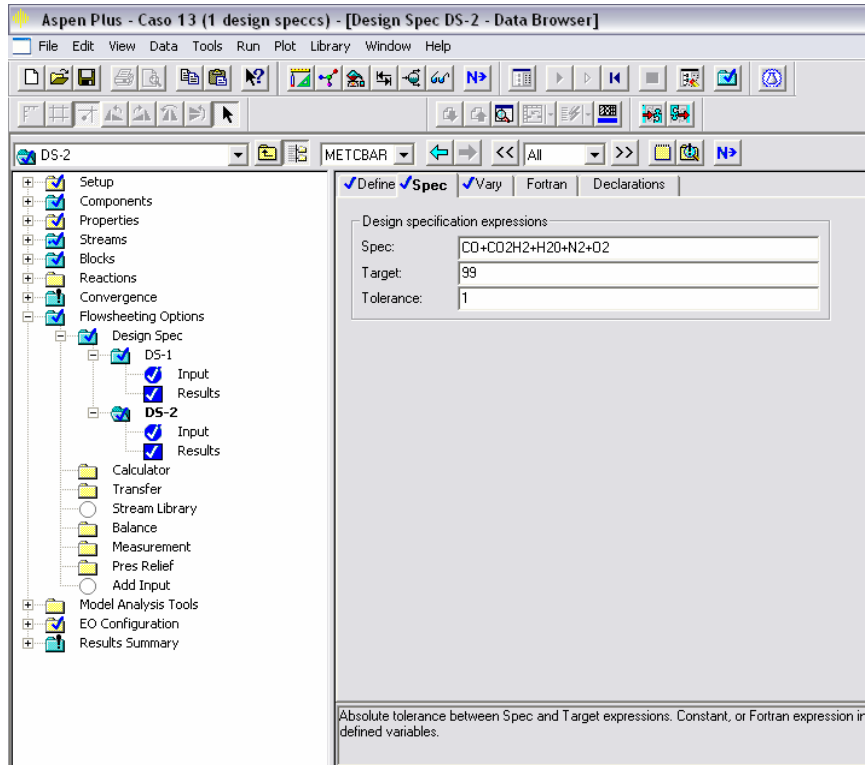


Para realizar la especificación de conversión, consideraremos que la suma de todos los productos, que no son petróleo, sea igual a 99 (ya que la carga inicial es de 100). Se procede de la siguiente manera:









Los resultados obtenidos son:

Aspen Plus - Caso 13 (1 design speccs) - [Block B1 (RGibbs) Results - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

Results

Components
Streams
Blocks
B1
Results
EO Variables
Stream Results
B2
Convergence
Flowsheeting Options
Results Summary

Summary Balance Phase Composition Pure Solids Atom Matrix Keq

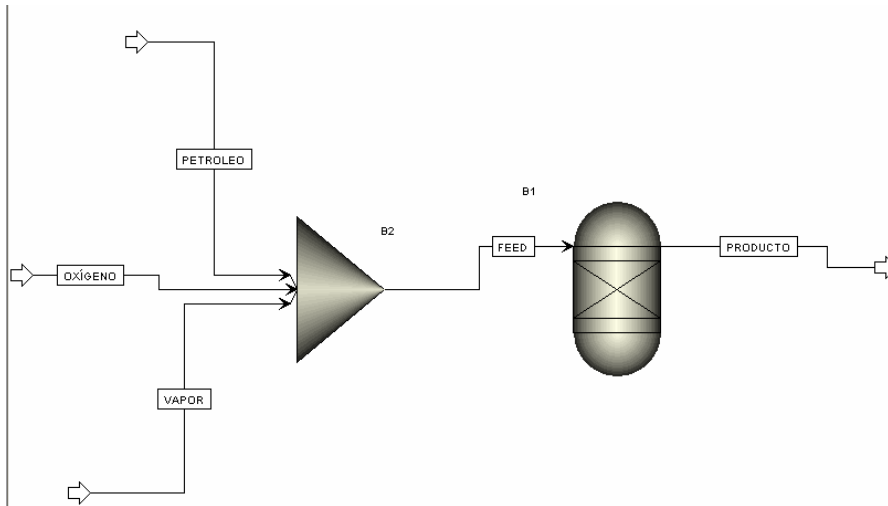
RGibbs results

Outlet temperature:	500	C
Outlet pressure:	10	bar
Heat duty:	1,30213699	MMkcal/hr
Net heat duty:	1,30213699	MMkcal/hr
Vapor fraction:	1	
Number of fluid phases:	1	
Maximum number of pure solids:	0	

Caso 13						
Stream ID		AIRE	FEED	PETROLEO	PRODUCTO	VAPOR
Temperature	C	500,0	496,9	500,0	500,0	500,0
Pressure	bar	10,000	10,000	10,000	10,000	10,000
Vapor Frac		1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
Mole Flow	kmol/hr	10,000	130,989	100,000	180,775	20,989
Mass Flow	kg/hr	288,504	27400,851	26734,226	27400,851	378,121
Volume Flow	cum/hr	64,481	693,408	435,410	1074,797	133,669
Enthalpy	MMkcal/hr	0,034	-4,755	-3,661	-3,453	-1,128
Mole Flow	kmol/hr					
WATER			20,989		0,208	20,989
NITRO-01		7,900	7,900		7,900	
OXYGE-01		2,100	2,100		trace	
CARBO-01					20,999	
CARBO-02					1,991	
HYDRO-01					10,746	
PC215C			0,839	0,839	19,290	
PC225C			2,005	2,005	58,043	
PC239C			2,299	2,299	22,822	
PC254C			2,909	2,909	10,064	
PC267C			5,086	5,086	5,150	
PC281C			6,692	6,692	22,873	
PC295C			9,655	9,655	0,412	
PC309C			10,519	10,519	0,151	
PC323C			10,637	10,637	0,062	
PC337C			12,151	12,151	0,033	
PC350C			12,434	12,434	0,017	
PC364C			10,059	10,059	0,006	
PC377C			8,514	8,514	0,003	
PC392C			5,783	5,783	0,001	
PC399C			0,418	0,418	0,001	
Mole Frac						
WATER			0,160		0,001	1,000
NITRO-01		0,790	0,060		0,044	
OXYGE-01		0,210	0,016		trace	
CARBO-01					0,116	
CARBO-02					0,011	
HYDRO-01					0,059	
PC215C			0,006	0,008	0,107	
PC225C			0,015	0,020	0,321	
PC239C			0,018	0,023	0,126	
PC254C			0,022	0,029	0,056	
PC267C			0,039	0,051	0,028	
PC281C			0,051	0,067	0,127	
PC295C			0,074	0,097	0,002	
PC309C			0,080	0,105	837 PPM	
PC323C			0,081	0,106	346 PPM	
PC337C			0,093	0,122	181 PPM	
PC350C			0,095	0,124	95 PPM	
PC364C			0,077	0,101	36 PPM	
PC377C			0,065	0,085	18 PPM	
PC392C			0,044	0,058	6 PPM	
PC399C			0,003	0,004	5 PPM	

PROCEDIMIENTO B:

Si en lugar de aire utilizamos oxígeno puro debemos de eliminar el compuesto nitrógeno de la simulación, y cambiar la corriente aire por oxígeno. Además en el Desing Spec, ya no tenemos que indicar el nitrógeno.



Aspen Plus - Caso 13 (b) - [Components Specifications - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

Specifications

Selection
 Petroleum
 Nonconventional
 Databanks

Define components

Component ID	Type	Component name	Formula
PETROLEO	Assay		
WATER	Conventional	WATER	H2O
OXYGE-01	Conventional	OXYGEN	O2
CARBO-01	Conventional	CARBON-MONOXI	CO
CARBO-02	Conventional	CARBON-DIOXIDE	CO2
HYDRO-01	Conventional	HYDROGEN	H2
*			

Find Elec Wizard User Defined Reorder Review

Aspen Plus - Caso 13 (b) - [Stream OXÍGENO (MATERIAL) - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

OXÍGENO METCBAR

Specifications Flash Options PSD Component Attr. EO Options

Substream name: **MIXED** Ref Temperature

State variables

Temperature: 500 C

Pressure: 10 bar

Total flow: Mole
100 kmol/hr

Solvent:

Composition

Component	Value
PETROLEO	0
WATER	0
OXÍGENO-01	1
CARBO-01	0
CARBO-02	0
HYDRO-01	0

Total: 1

Aspen Plus - Caso 13 (b) - [Design Spec DS-2 - Data Browser]

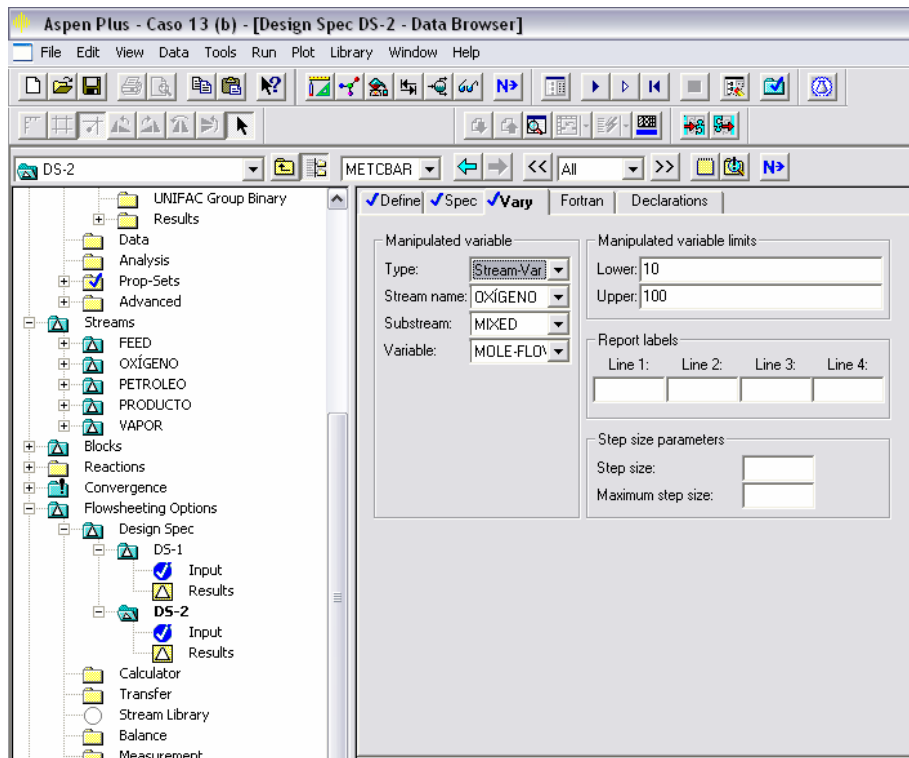
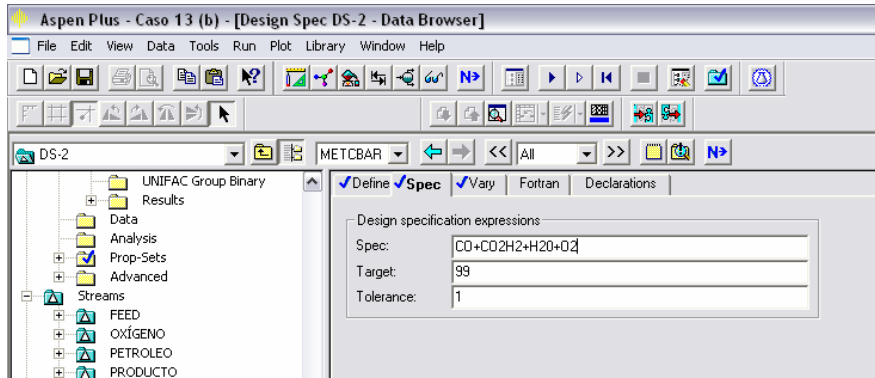
File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

DS-2 METCBAR

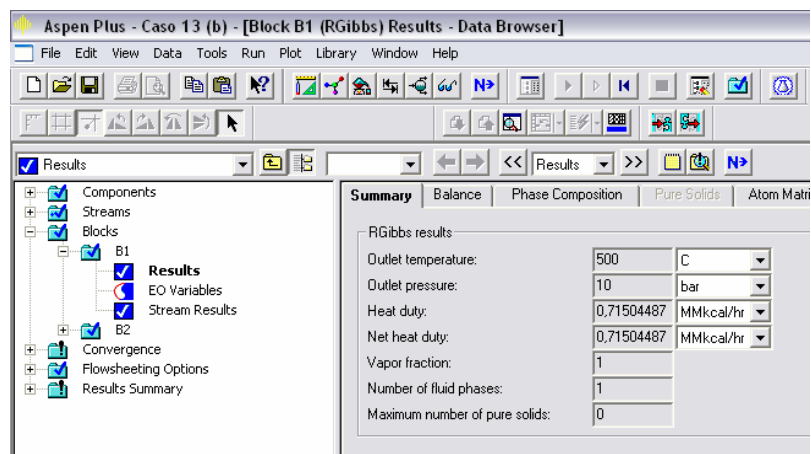
Define Spec Vary Fortran Declarations

Flowsheet variable	Definition
CO	Mass-Flow Stream=PRODUCTO Substream=MIXED Component=CARBO-01
H2	Mass-Flow Stream=PRODUCTO Substream=MIXED Component=HYDRO-01
CO2	Mass-Flow Stream=PRODUCTO Substream=MIXED Component=CARBO-02
H2O	Mass-Flow Stream=PRODUCTO Substream=MIXED Component=WATER
O2	Mass-Flow Stream=PRODUCTO Substream=MIXED Component=OXÍGENO-01
*	

New... Edit Delete Move Up Move Down



Los resultados obtenidos son:



Caso 13						
Stream ID		FEED	OXIGENO	PETROLEO	PRODUCTO	VAPOR
Temperature	C	497,1	500,0	500,0	500,0	500,0
Pressure	bar	10,000	10,000	10,000	10,000	10,000
Vapor Frac		1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
Mole Flow	kmol/hr	127,347	10,000	100,000	185,622	17,347
Mass Flow	kg/hr	27366,719	319,988	26734,226	27366,719	312,506
Volume Flow	cum/hr	665,909	64,422	435,410	1110,039	110,473
Enthalpy	MMkcal/hr	-4,558	0,036	-3,661	-3,843	-0,933
Mole Flow	kmol/hr					
WATER		17,347			0,451	17,347
OXYGE-01		10,000	10,000		trace	
CARBO-01					28,086	
CARBO-02					4,405	
HYDRO-01					14,079	
PC215C		0,839		0,839	21,622	
PC225C		2,005		2,005	55,699	
PC239C		2,299		2,299	23,213	
PC254C		2,909		2,909	10,713	
PC267C		5,086		5,086	5,710	
PC281C		6,692		6,692	21,033	
PC295C		9,655		9,655	0,365	
PC309C		10,519		10,519	0,137	
PC323C		10,637		10,637	0,056	
PC337C		12,151		12,151	0,029	
PC350C		12,434		12,434	0,015	
PC364C		10,059		10,059	0,006	
PC377C		8,514		8,514	0,003	
PC392C		5,783		5,783	0,001	
PC399C		0,418		0,418	0,001	
Mole Frac						
WATER		0,136			0,002	1,000
OXYGE-01		0,079	1,000		trace	
CARBO-01					0,151	
CARBO-02					0,024	
HYDRO-01					0,076	
PC215C		0,007		0,008	0,116	
PC225C		0,016		0,020	0,300	
PC239C		0,018		0,023	0,125	
PC254C		0,023		0,029	0,058	
PC267C		0,040		0,051	0,031	
PC281C		0,053		0,067	0,113	
PC295C		0,076		0,097	0,002	
PC309C		0,083		0,105	736 PPM	
PC323C		0,084		0,106	303 PPM	
PC337C		0,095		0,122	157 PPM	
PC350C		0,098		0,124	82 PPM	
PC364C		0,079		0,101	30 PPM	
PC377C		0,067		0,085	15 PPM	
PC392C		0,045		0,058	5 PPM	
PC399C		0,003		0,004	4 PPM	

CONCLUSIONES:

Los caudales de agua y/o aire necesarios para obtener un gas de síntesis con una relación $\text{CO}/\text{H}_2=2$ y una conversión del 99% de la carga inicial se muestran en la siguiente tabla.

Caso	Agua (Kmol/h)	Aire/Oxígeno (Kmol/h)
Aire	20,989	10
Oxígeno puro	17,374	10

Como podemos observar al utilizar oxígeno puro se disminuye la cantidad de vapor de agua necesaria para producir la reacción.