DSOySP

Introducción a DWSIM

Profesor: Dr. Nicolás J. Scenna
JTP: Dr. Néstor H. Rodríguez
Aux. 1ra: Dr. Juan I. Manassaldi

DWSIM Wiki

- DWSIM is an open-source CAPE-OPEN compliant chemical process simulator for Windows and Linux.
- DWSIM is built on top of the Microsoft .NET and Mono Platforms and features a Graphical User Interface (GUI), advanced thermodynamics calculations, reactions support and petroleum characterization / hypothetical component generation tools.
- DWSIM is able to simulate steady-state, vapor–liquid, vapor–liquid-liquid, solid–liquid and aqueous electrolyte equilibrium processes.

DWSIM Wiki

- Thermodynamic models:
  - PC-SAFT, FPROPS
  - CoolProp
  - Peng–Robinson
  - Peng–Robinson-Stryjek-Vera (PRSV2)
  - Soave–Redlich–Kwong
  - Lee-Kesler
  - Lee-Kesler-Plöcker
  - UNIFAC(-LL)
  - Modified UNIFAC (Dortmund)
  - Modified UNIFAC (NIST)
  - UNIQUAC
  - NRTL
  - COSMO-SAC
  - Chao-Seader
  - Grayson-Streed
  - Extended UNIQUAC
  - Raoult's Law
  - IAPWS-IF97 Steam Tables
  - IAPWS-08 Seawater
  - Black-Oil
  - Sour Water

DWSIM Wiki

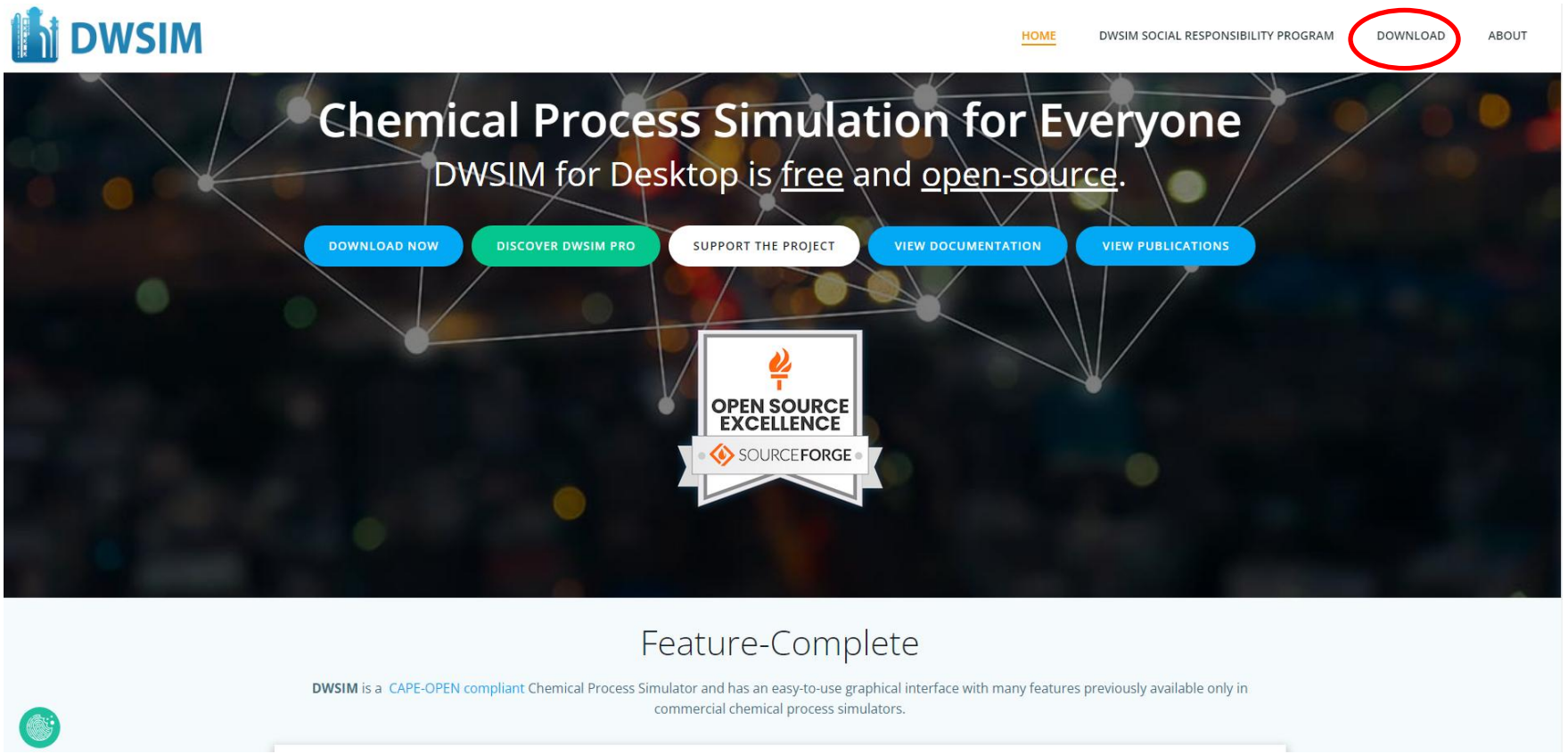
- Unit operations:
  - Mixer
  - Splitter
  - Separator
  - Pump
  - Compressor
  - Expander
  - Heater
  - Cooler
  - Valve
  - Pipe Segment
  - Shortcut Column
  - Heat Exchanger
  - Reactors
  - Component Separator
  - Orifice Plate
  - Distillation/Absorption Columns
  - Solids Separator
  - Cake Filter

DWSIM Wiki

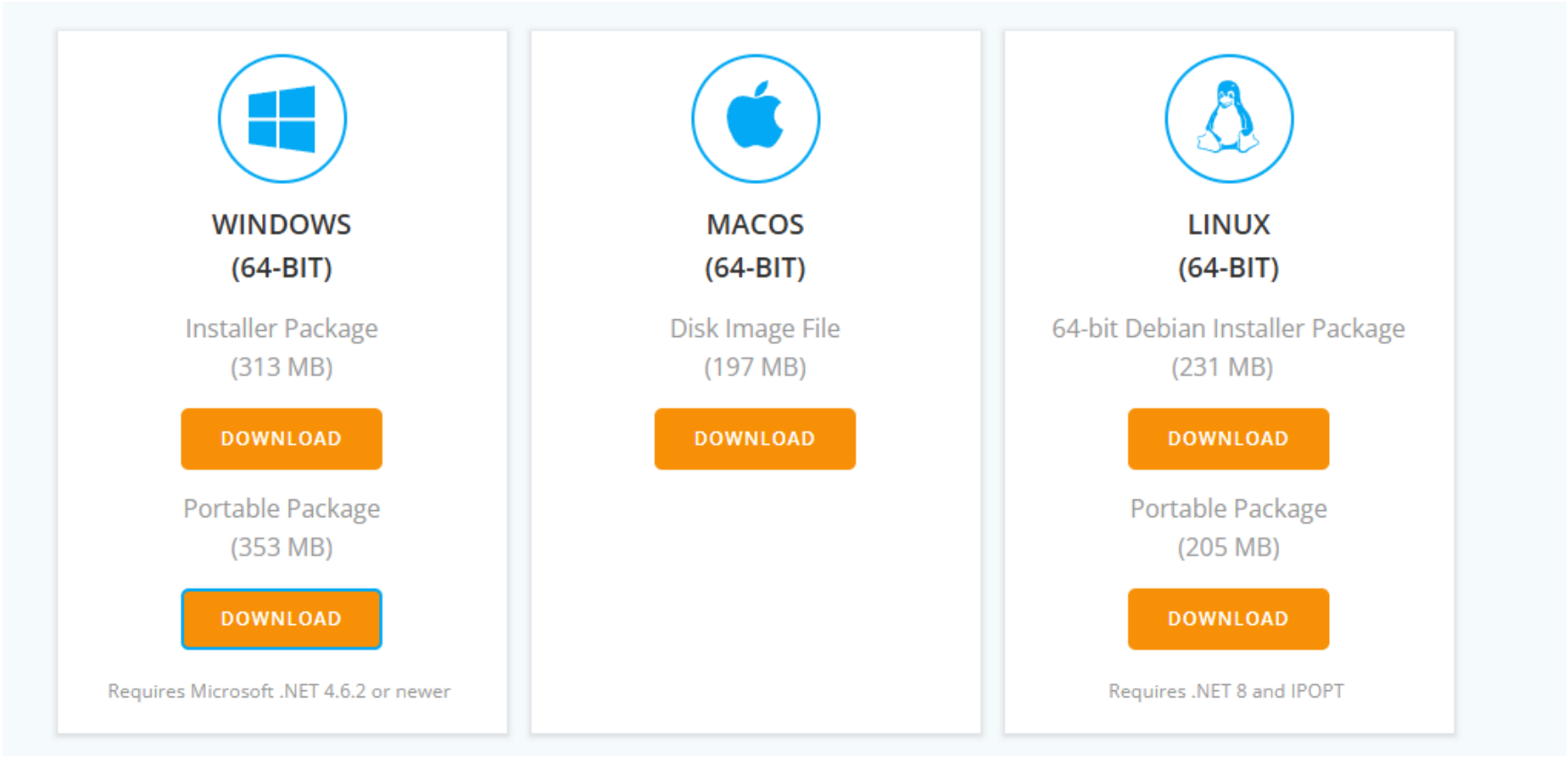
- Utilities:
  - Binary Data Regression
  - Phase Envelope
  - Natural Gas Hydrates
  - Pure Component Properties
  - True Critical Point
  - PSV Sizing
  - Vessel Sizing
  - Spreadsheet and Petroleum Cold Flow Properties
- Tools:
  - Hypothetical Component Generator
  - Bulk C7+/Distillation Curves Petroleum Characterization
  - Petroleum Assay Manager
  - Reactions Manager and Compound Creator;
  - Process Analysis and Optimization:
  - Sensitivity Analysis Utility
  - Multivariate Optimizer with bound constraints;
- Extras:
  - Support for Runtime Scripts
  - Plugins and CAPE-OPEN Flowsheet Monitoring Objects.

Descarga e Instalación

https://dwsim.org/



Descarga e Instalación



Descarga e Instalación

Support DWSIM open-source development

Support the DWSIM open-source development with a single, one-time donation or with a monthly subscription!

By becoming a patron, you will support me (Daniel Wagner) directly and shape the future development of DWSIM while getting access to exclusive goodies, depending on your subscription tier. You can also say thank you with a one-time donation by getting me a coffee or, if you're from Brazil, you can do me a Pix transfer and I'll buy the coffee myself. 😊👍

One-Time Donation

Buy me a coffee ♥ 160

Pix (Brasil)

pix

Chave Pix:

0f0c6cf5-2489-4d03-b7a8-3a5fd22498a2

4.99 USD/month

This gets your name on DWSIM's Splash Screen.

MORE INFORMATION

9.99 USD/month

This gets your name on DWSIM's Splash Screen and access to private WhatsApp and Discord groups.

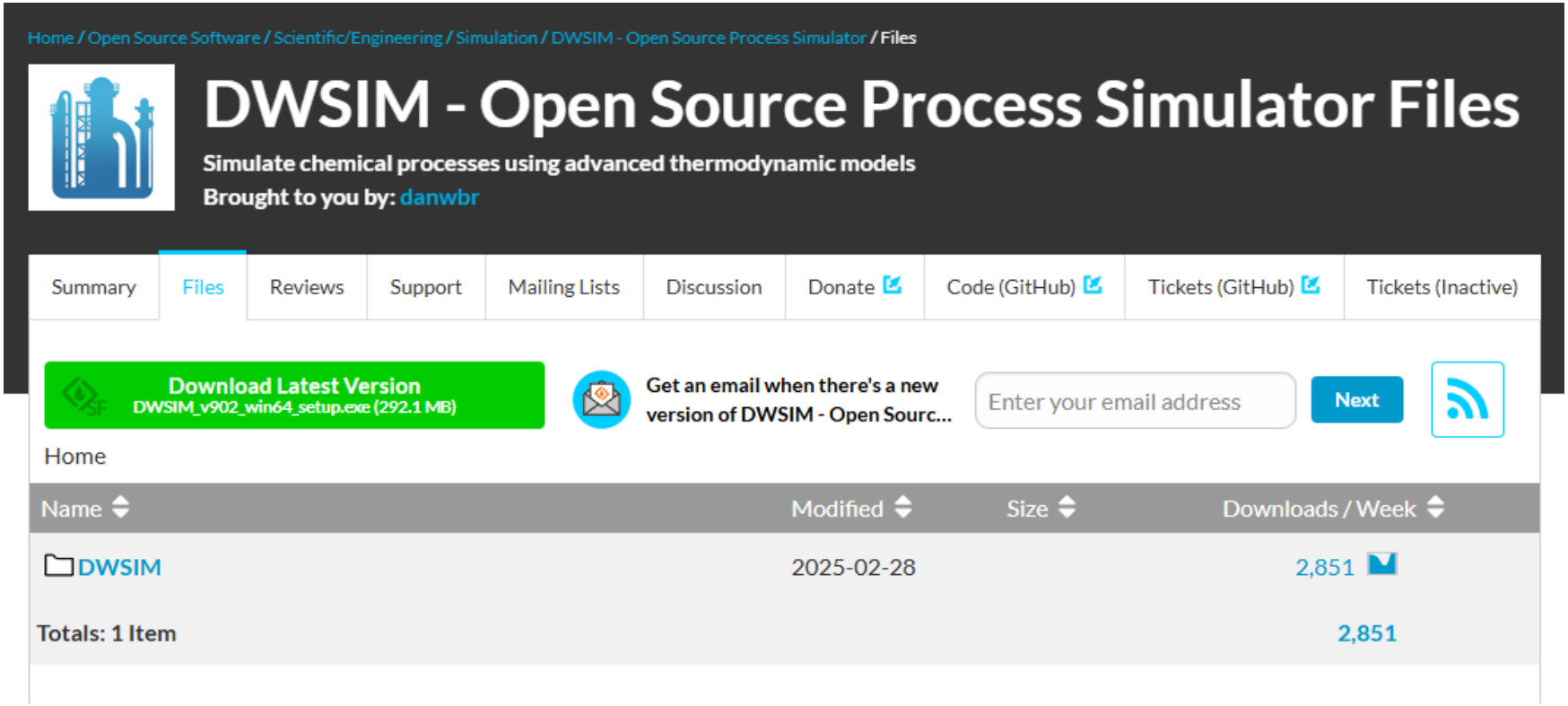
MORE INFORMATION

29.99 USD/month

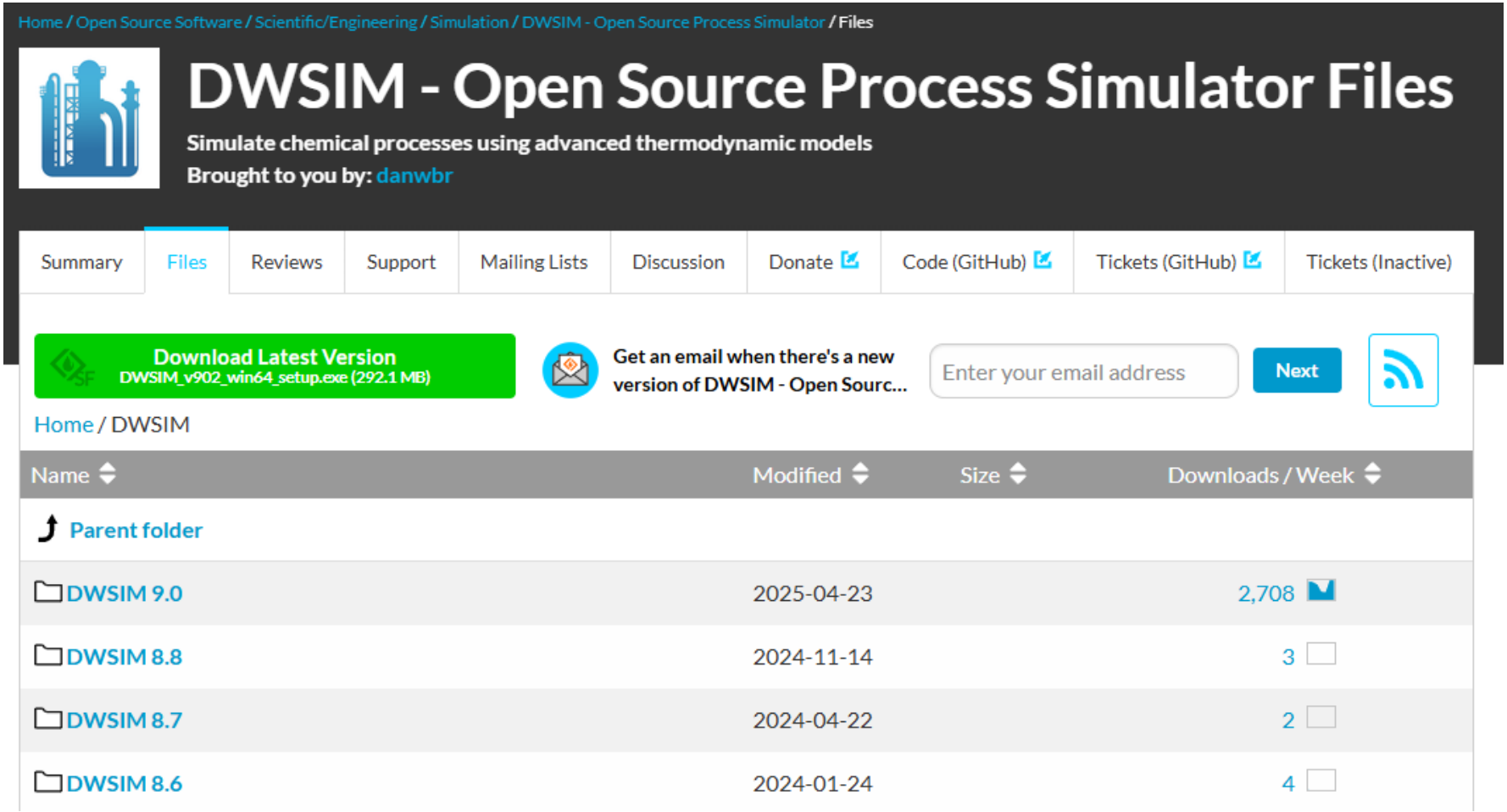
This gets you extra DWSIM components (Property Packages, Unit Ops and Plugins), your name on DWSIM's Splash Screen, access to private WhatsApp and Discord groups and other goodies.

MORE INFORMATION

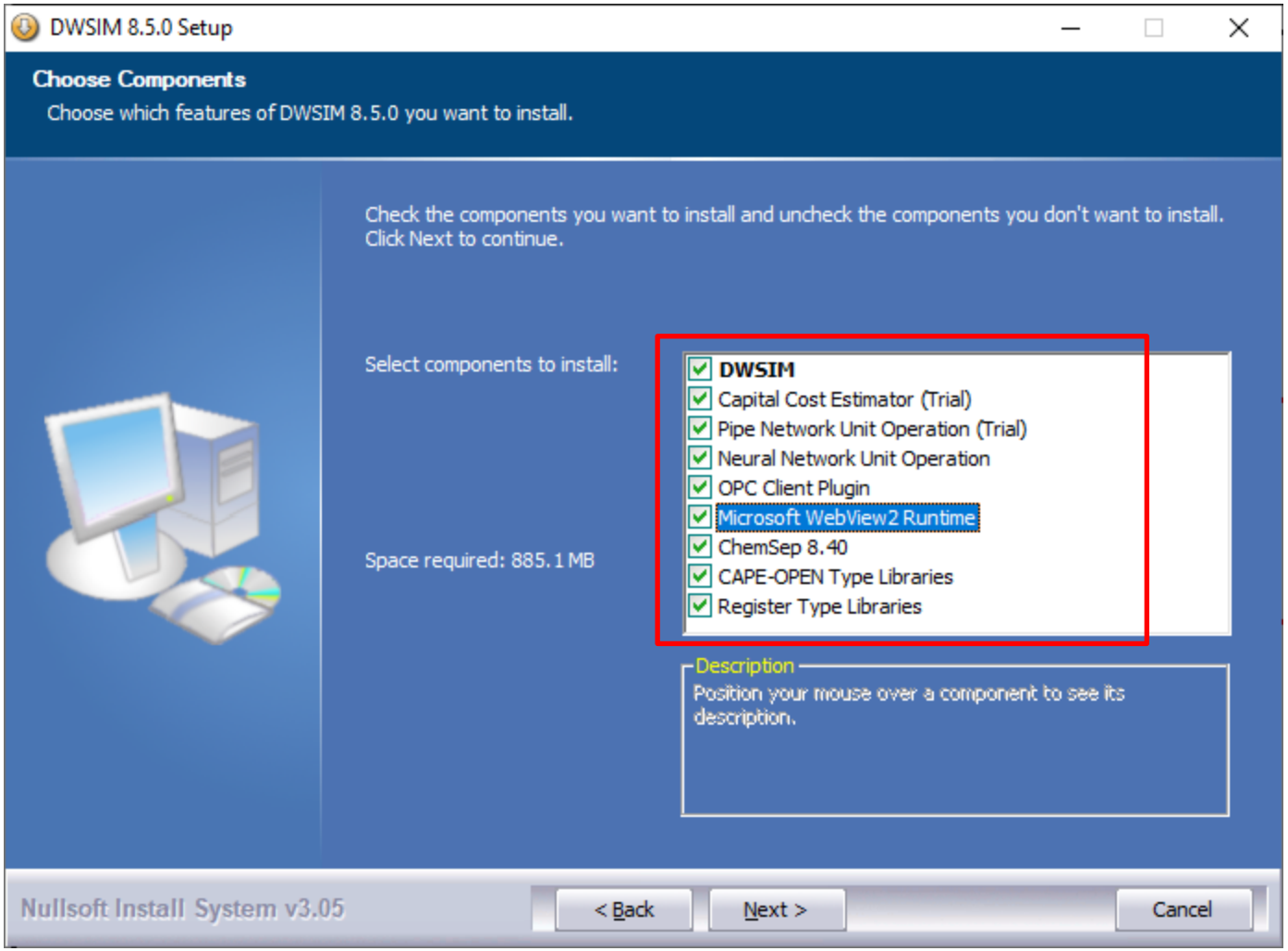
Descarga e Instalación



Descarga e Instalación

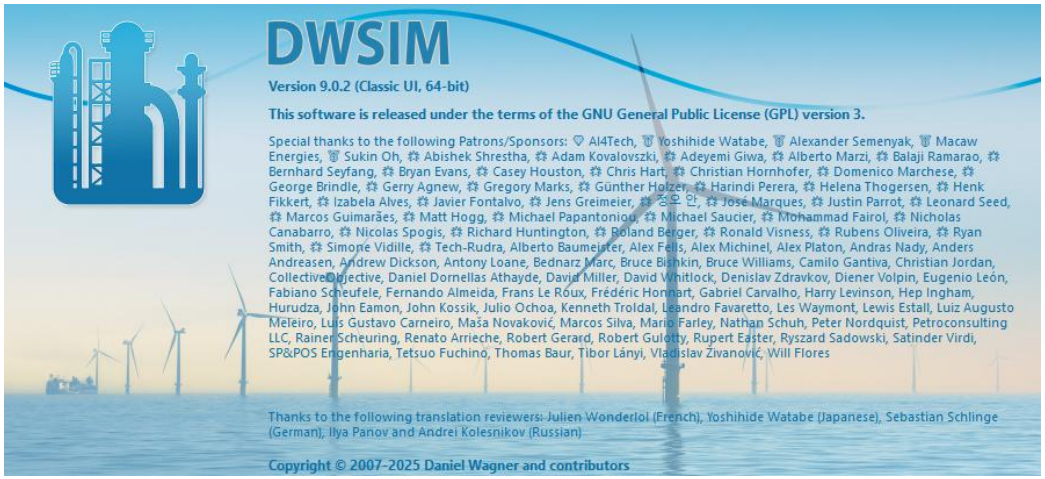


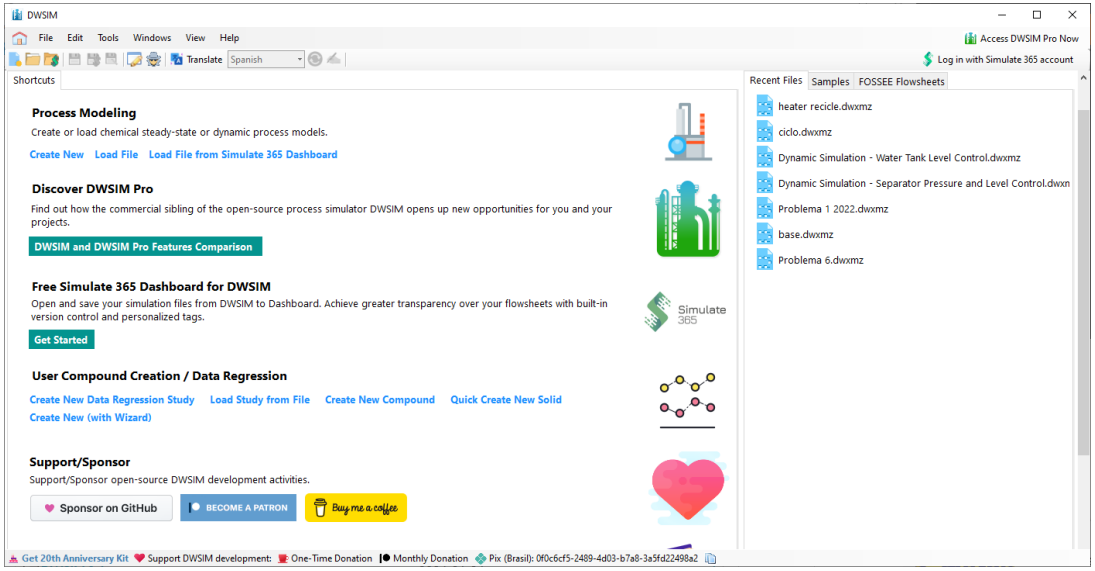
Instalación del software



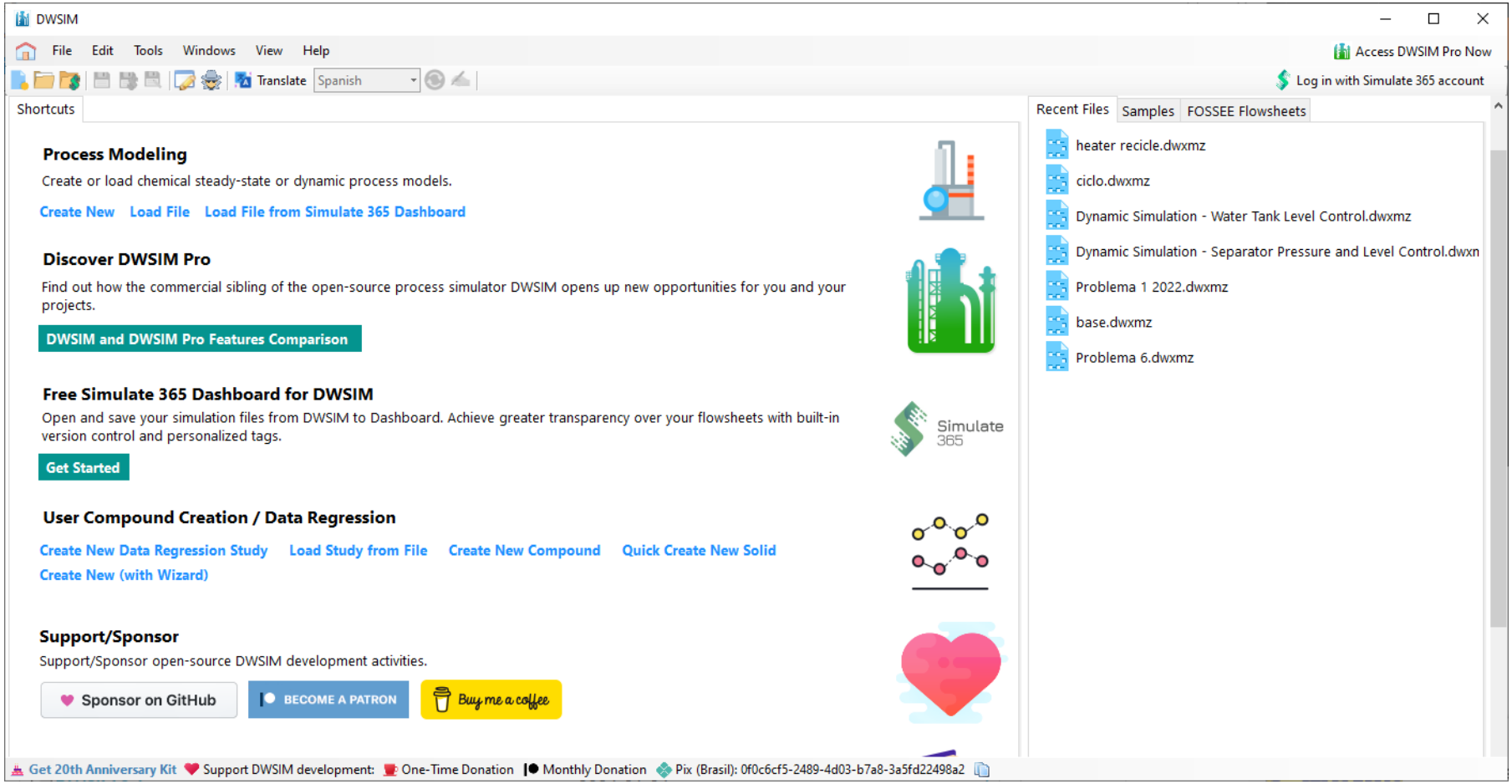
Tildar todas las opciones

Inicio del software

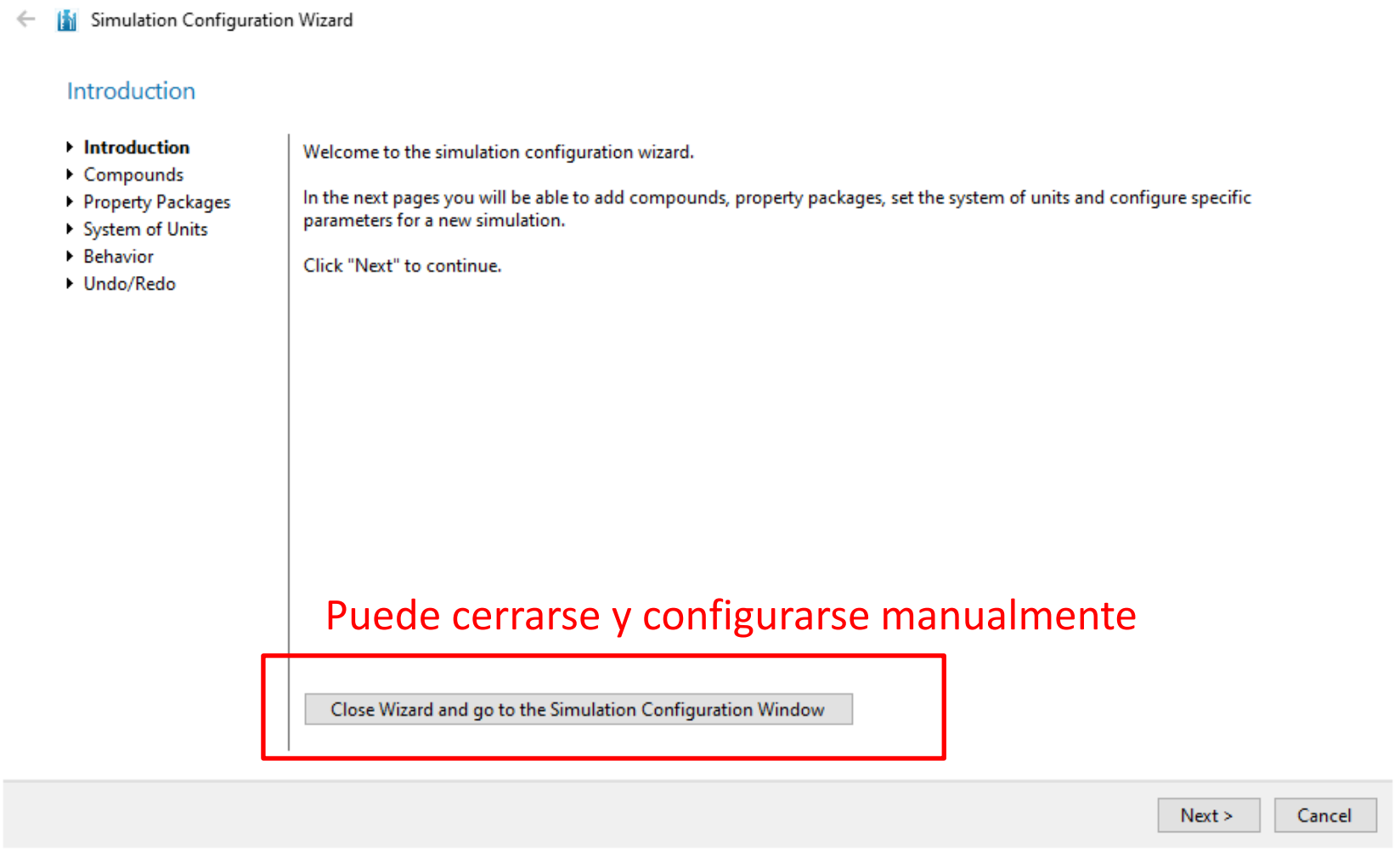




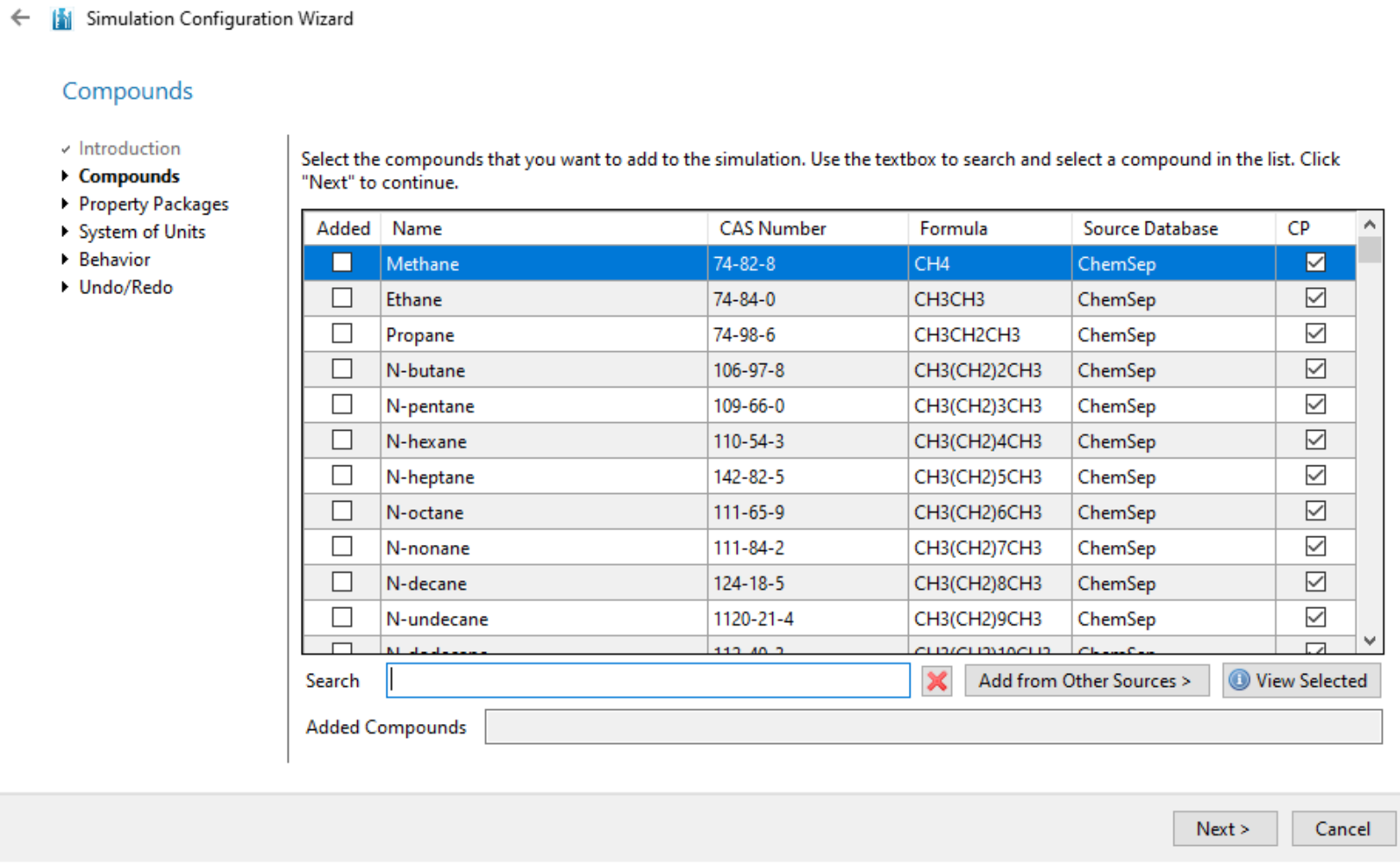
Ventana de bienvenida



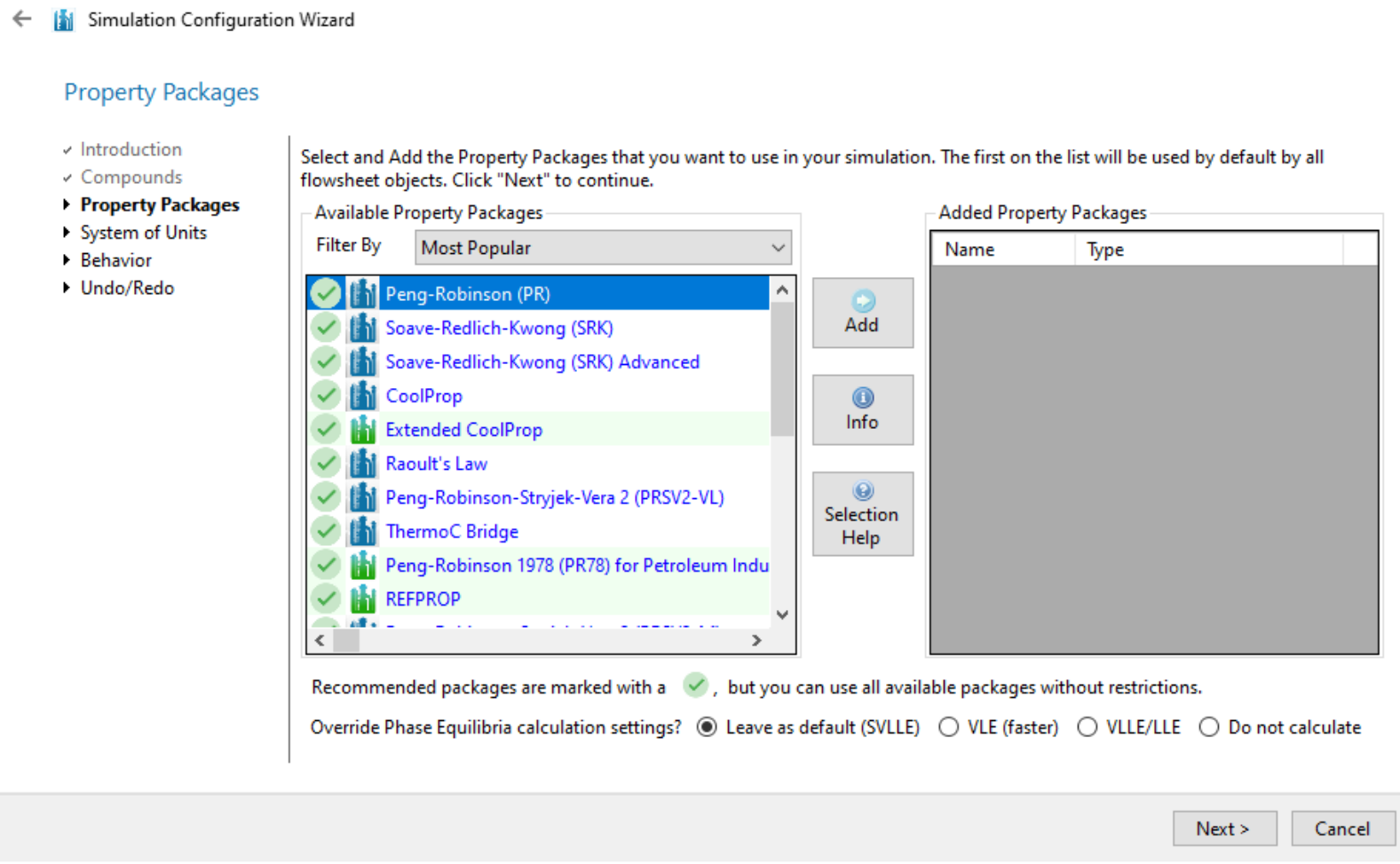
Asistente de configuración



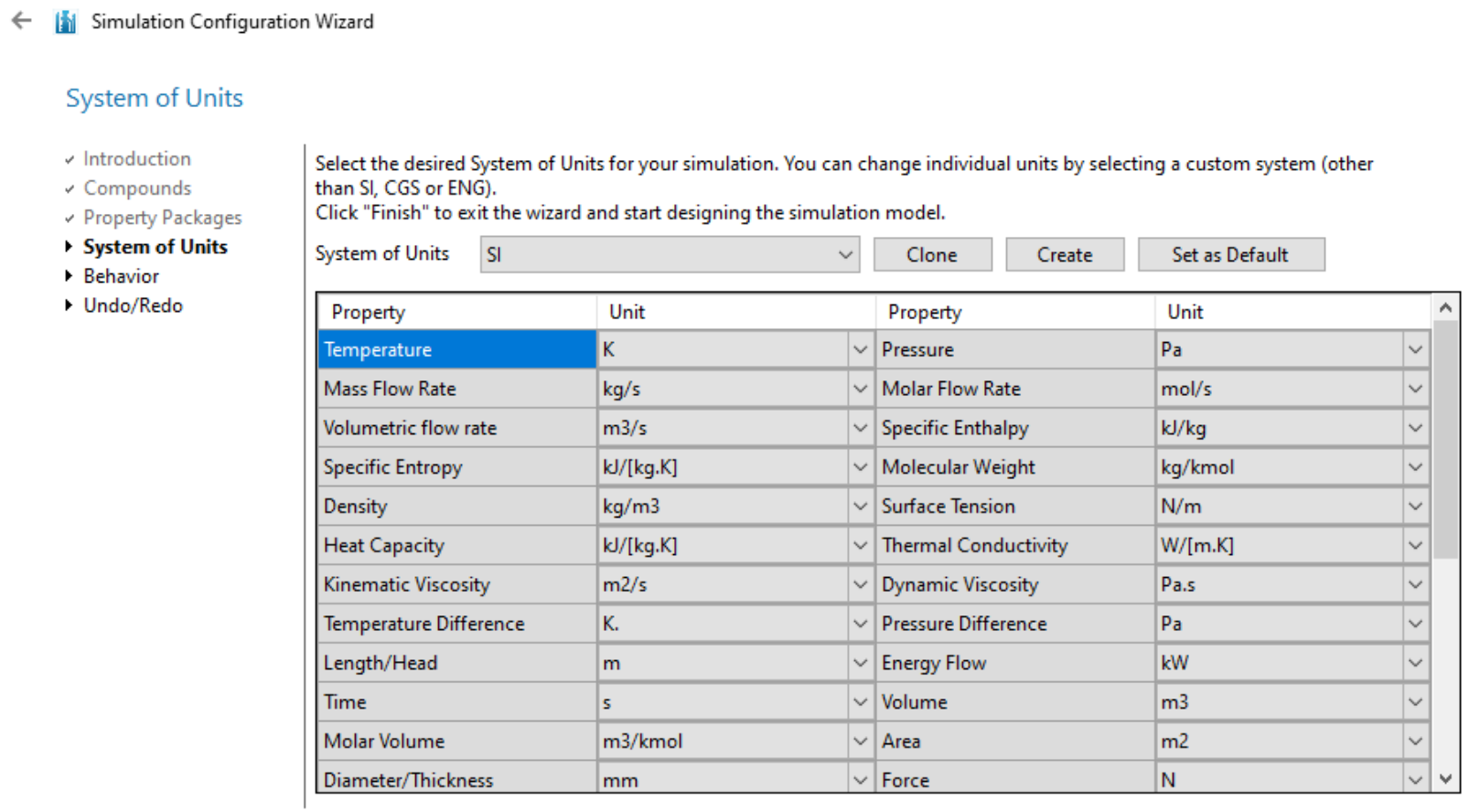
Selección de compuestos



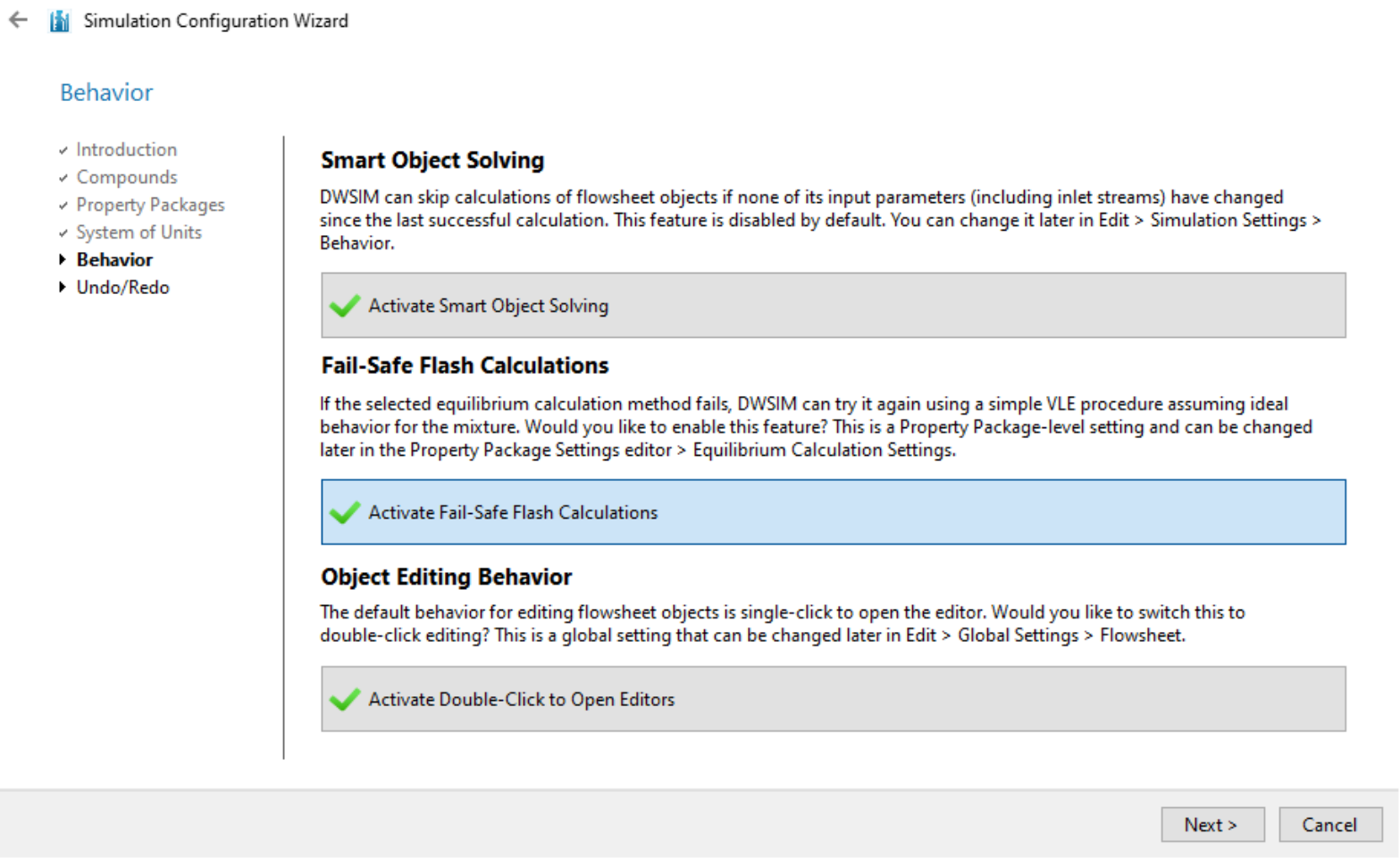
Selección de paquetes de propiedades fisicoquímicas



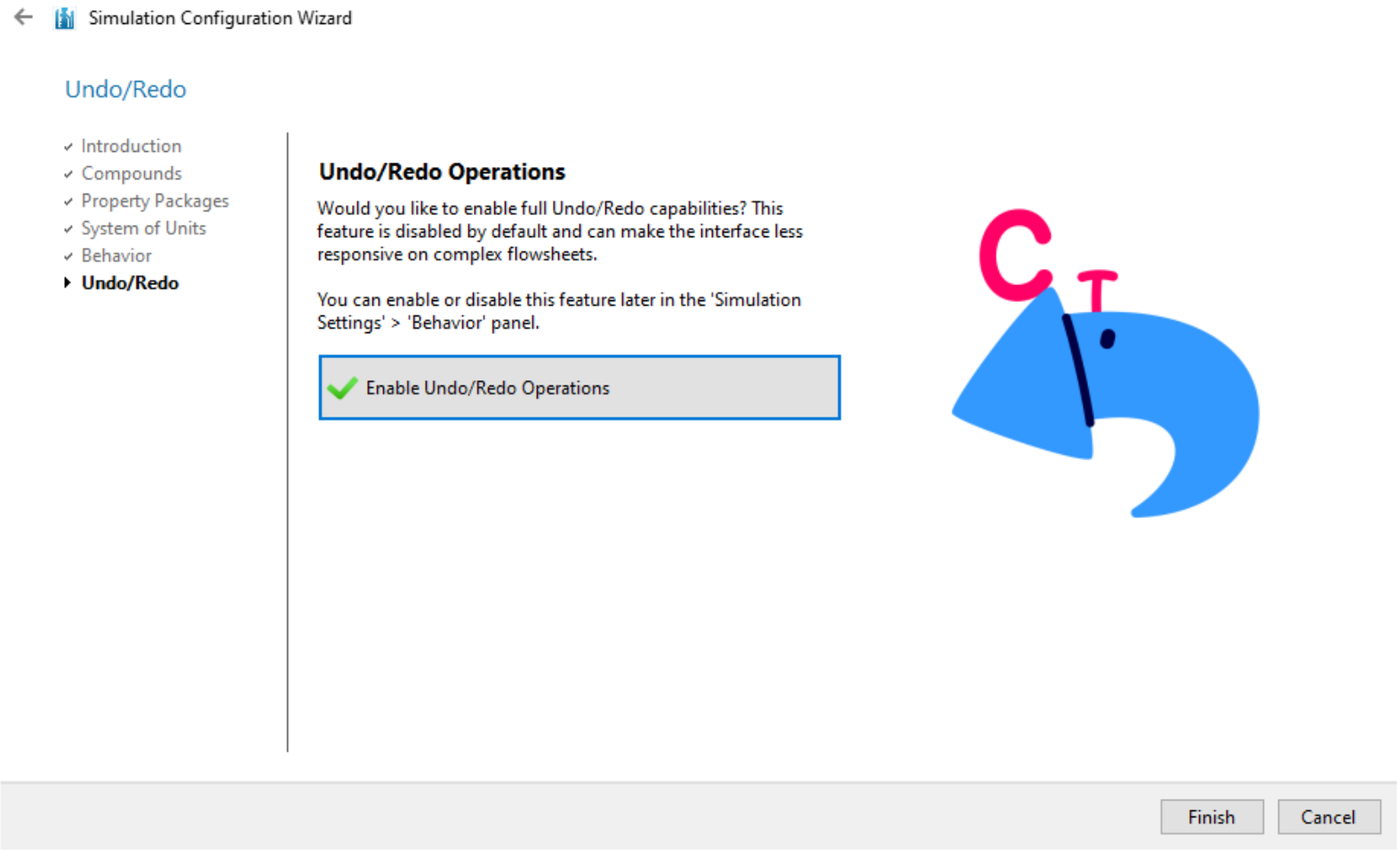
Selección de unidades



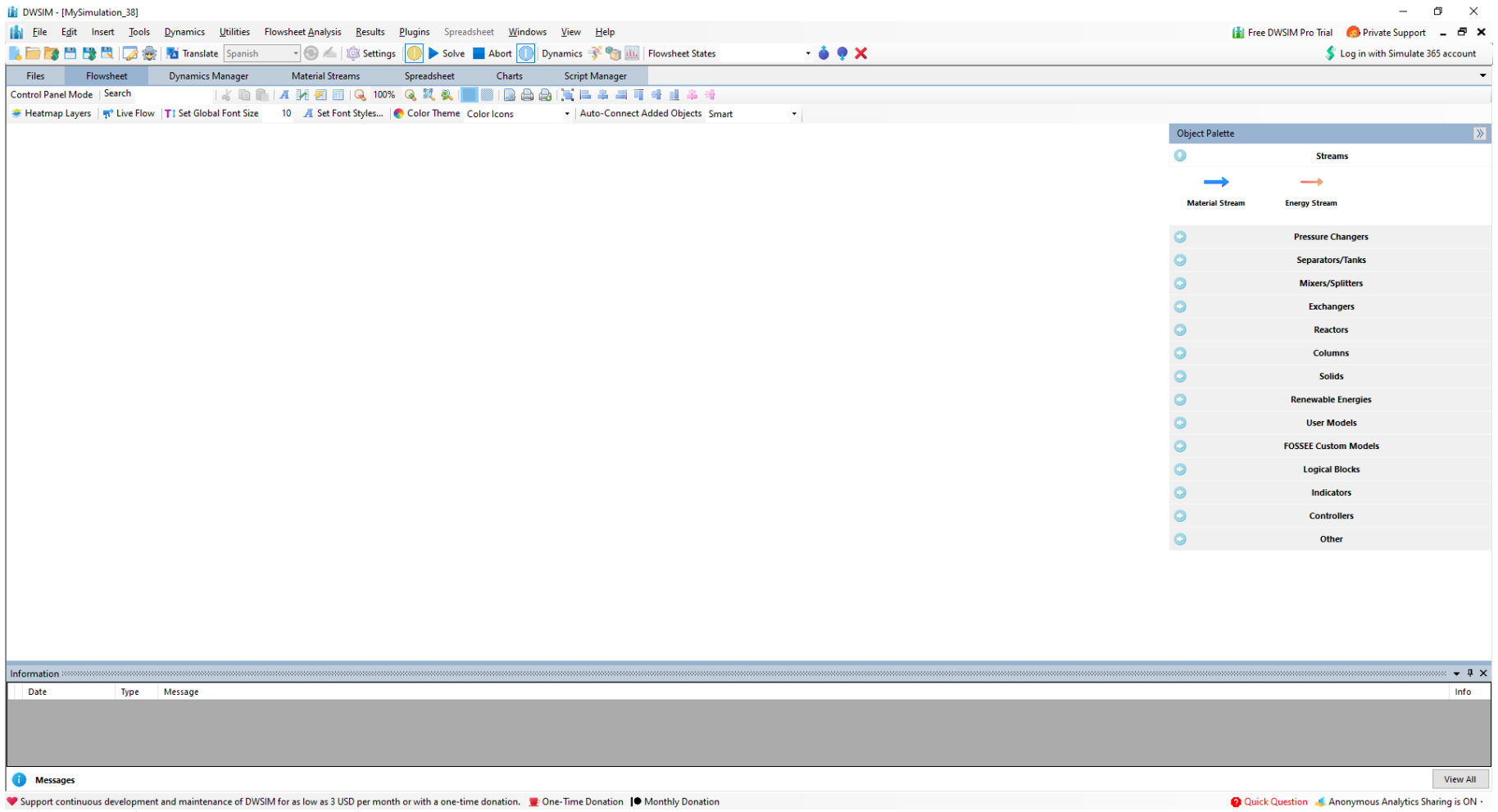
Opciones del software



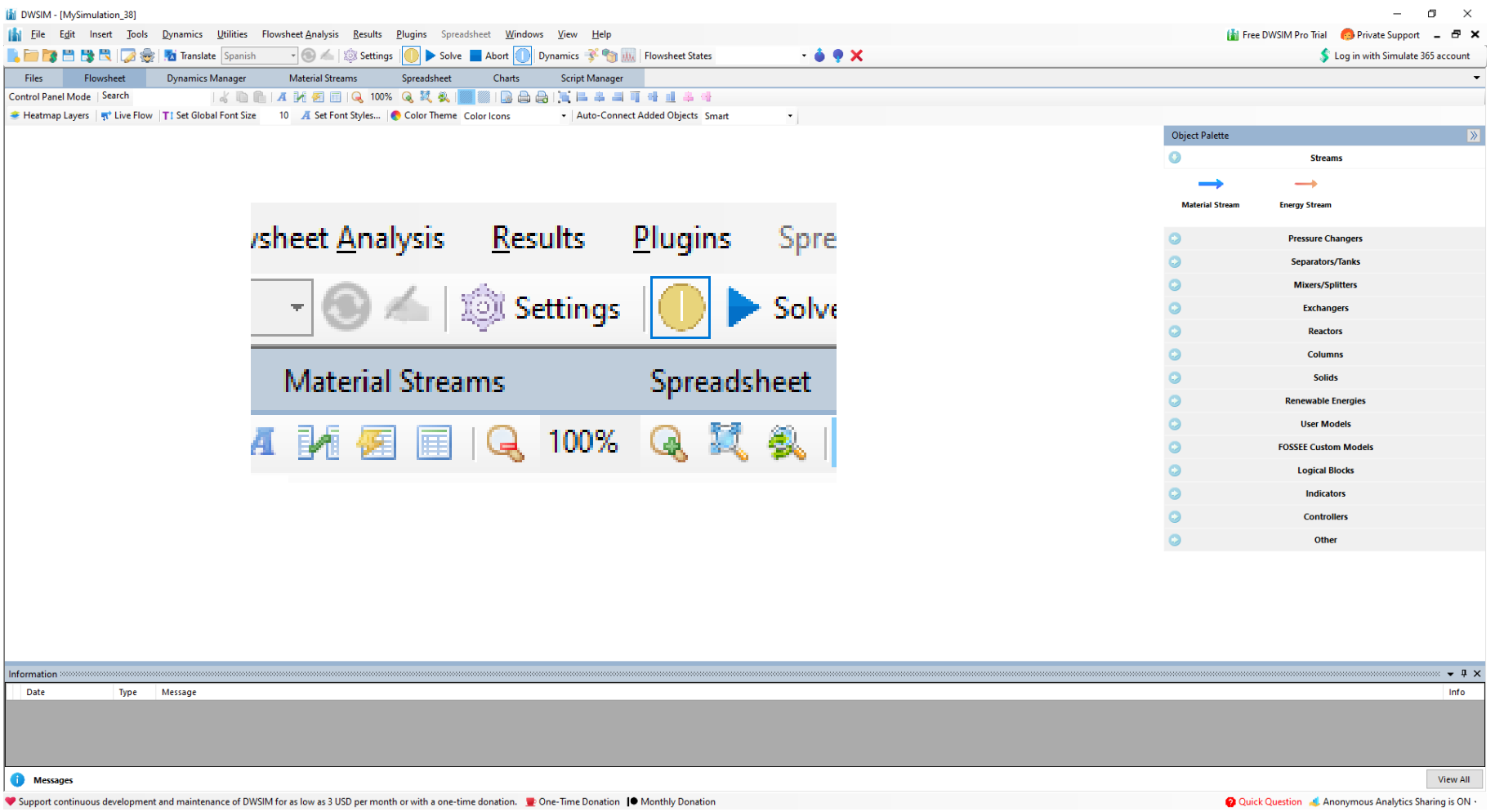
Opciones del software



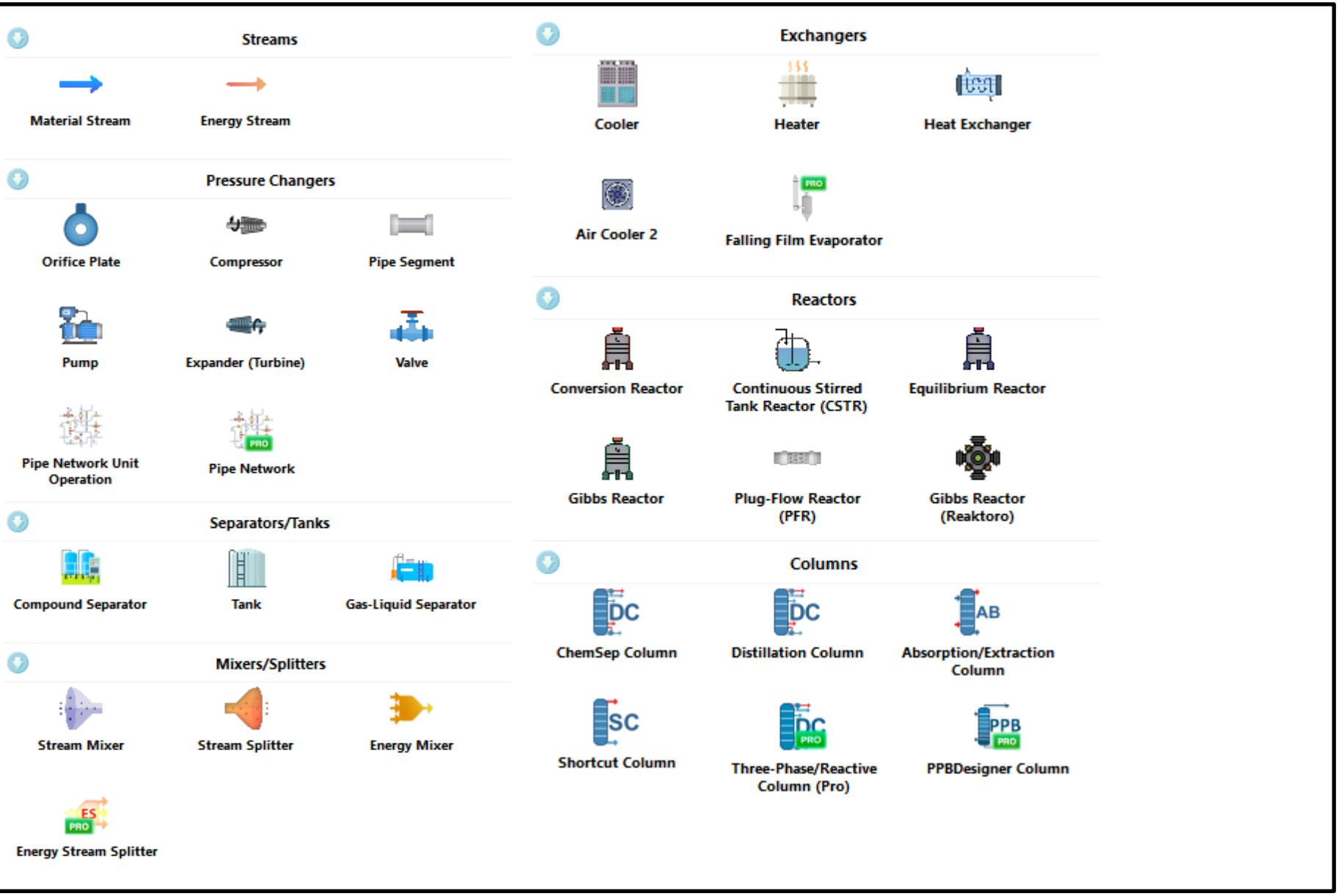
Entorno del software



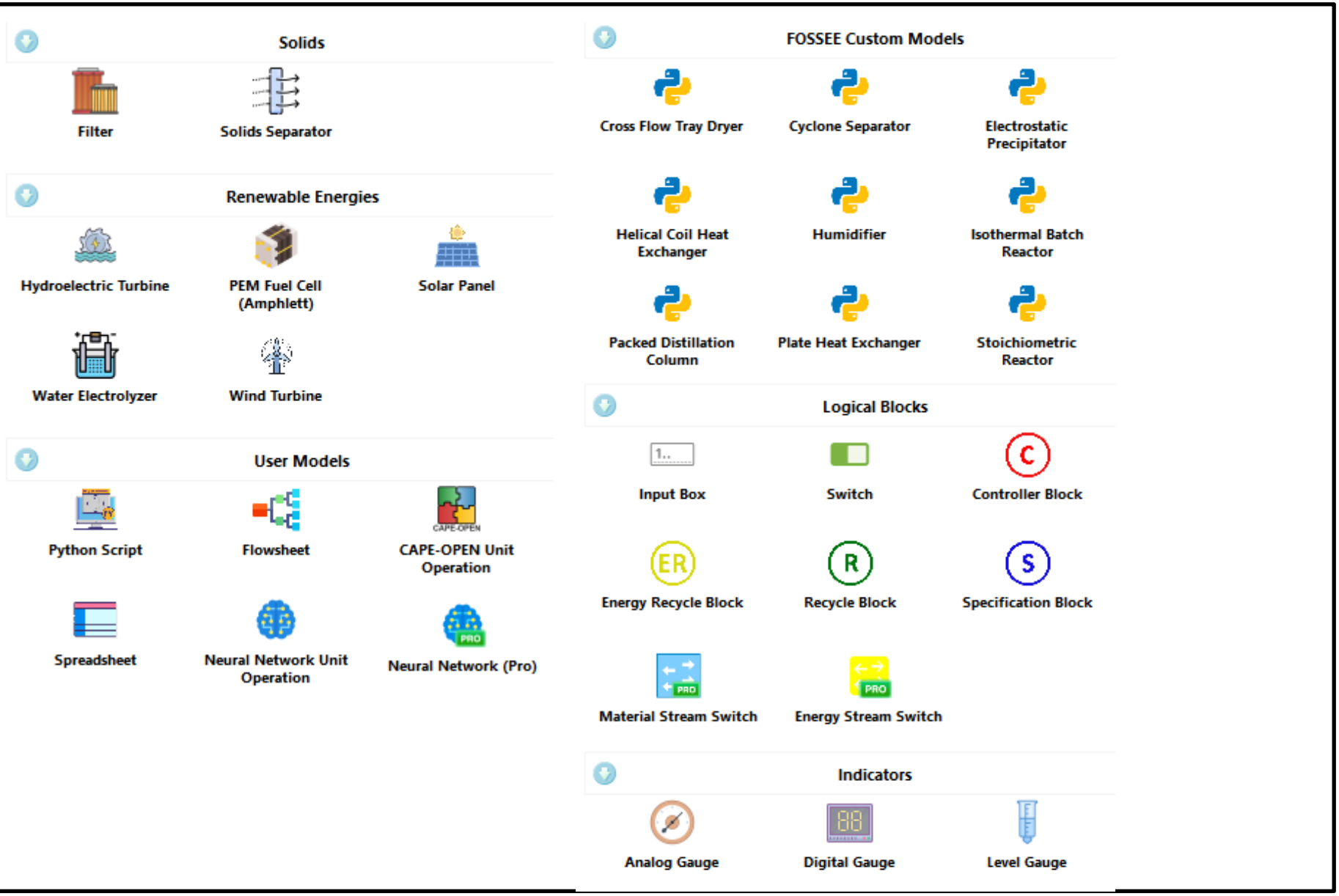
Entorno del software



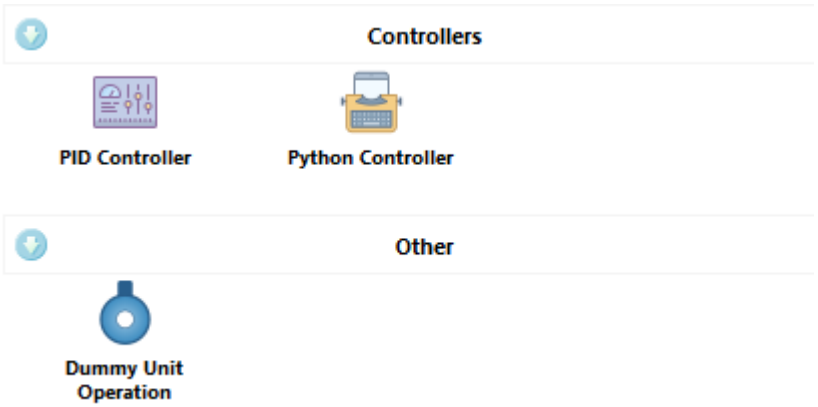
Listado de objetos disponibles para agregar al flowsheet



Listado de objetos disponibles para agregar al flowsheet



Listado de objetos disponibles para agregar al flowsheet



Material Stream

- Es uno de los módulos de cálculo más importantes ya que se utiliza para representar el ingreso y egreso de materia a un proceso, así como también la interconexión de equipos dentro del mismo.
- Para poder ejecutarse requiere la siguiente información (inputs):
  - Composición global de la mezcla (base molar, másica o volumétrica).
  - Dos propiedades intensivas (por ejemplo, Presión y Temperatura).
  - Una magnitud de flujo de materia (base molar, másica o volumétrica).

Material Stream. Secuencia de resolución

Secuencia de cálculo realizada por el módulo Material Stream:

1. Realiza la estimación del estado de agregación de la mezcla, identificando la presencia de fase liquida, vapor o mezcla de ambas (FLASH problem).
2. Calcula de manera individual las propiedades de la/s fase/s.
3. Calcula las propiedades globales de la corriente (si existe una única fase las propiedades son idénticas a las del paso 2).

Material Stream. Información de salida (outputs)

Se calculan las siguientes propiedades:

1. Distribución de los componentes entre las fases.
2. Propiedades de cada fase (entalpía, entropía, peso molecular, densidad, etc).
3. Calcula las propiedades globales de la corriente (entalpía, entropía, peso molecular, densidad, etc).

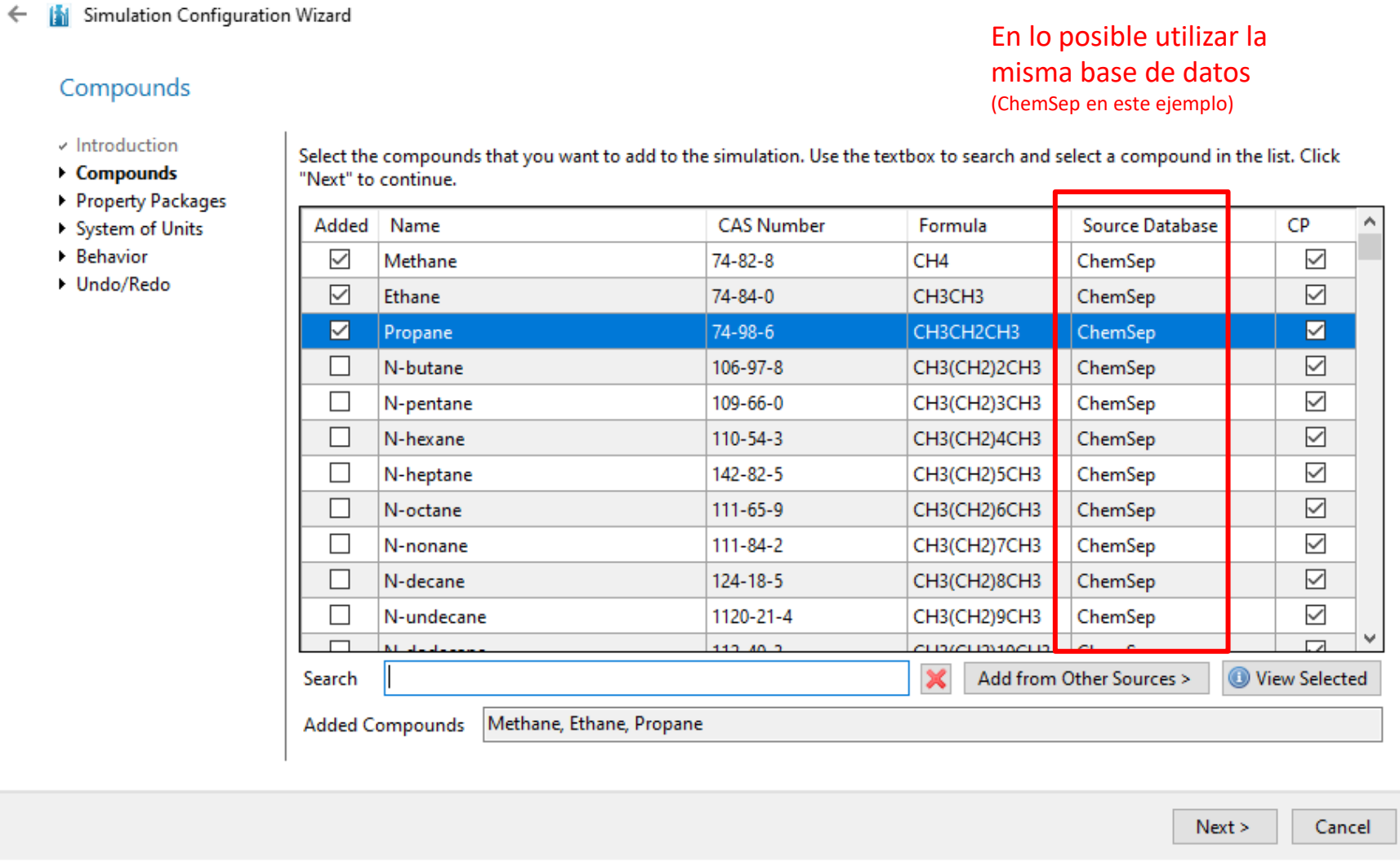
Ejercicio de aprendizaje propuesto

Dada de la corriente de gas cuyo Flujo es de 100 kg/h, y de composición:

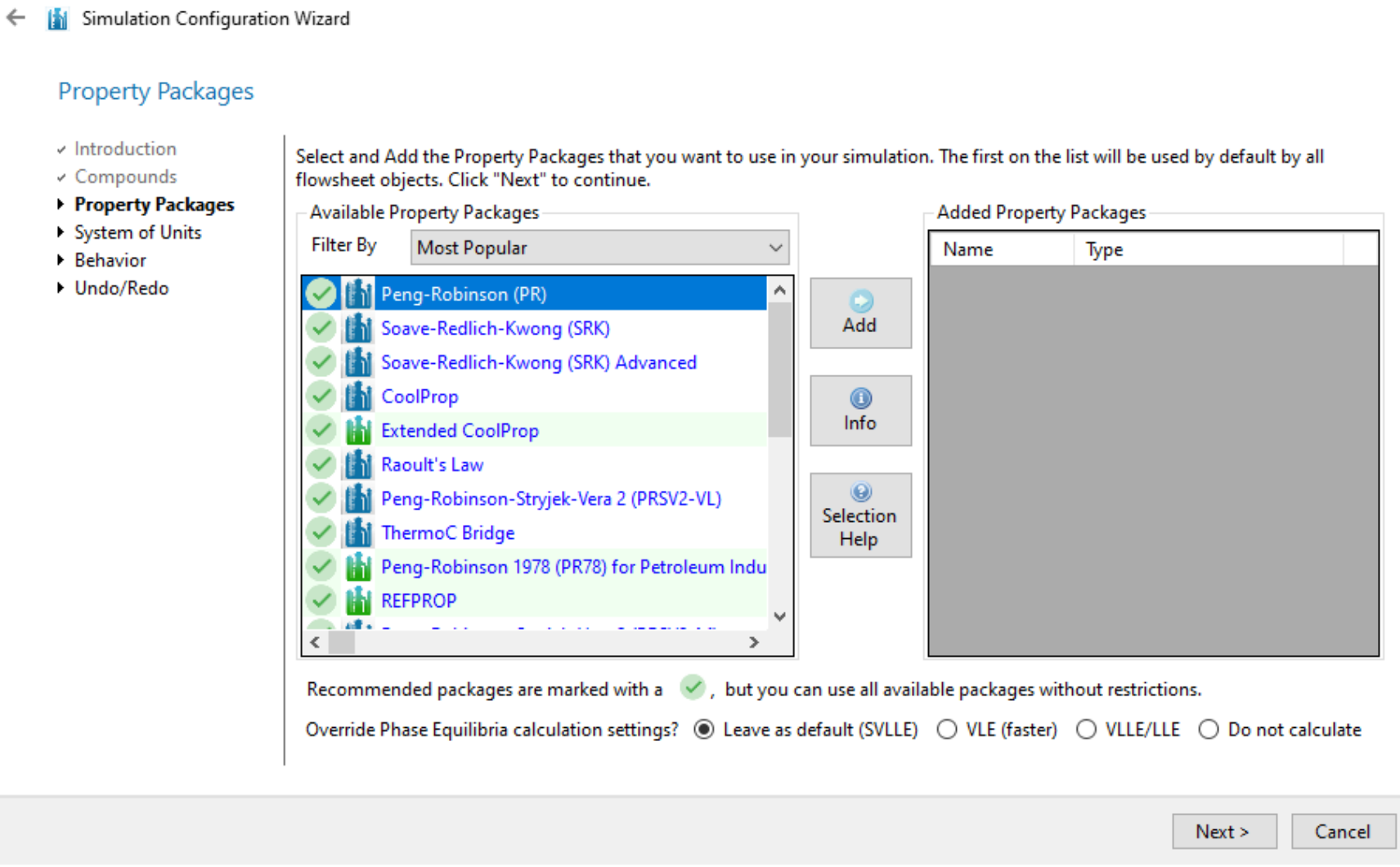
C1	C2	C3
0.6	0.2	0.2

- Utilizar el paquete termodinámico Peng-Robinson.
- Ajuste una presión de **7500 kPa** y una temperatura de **10º C**. ¿Cuál es la fracción de vapor?
- Realice el cálculo de **punto de rocío** a esta corriente. Fije una presión de **7500 kPa**. ¿Cual es la temperatura de rocío?

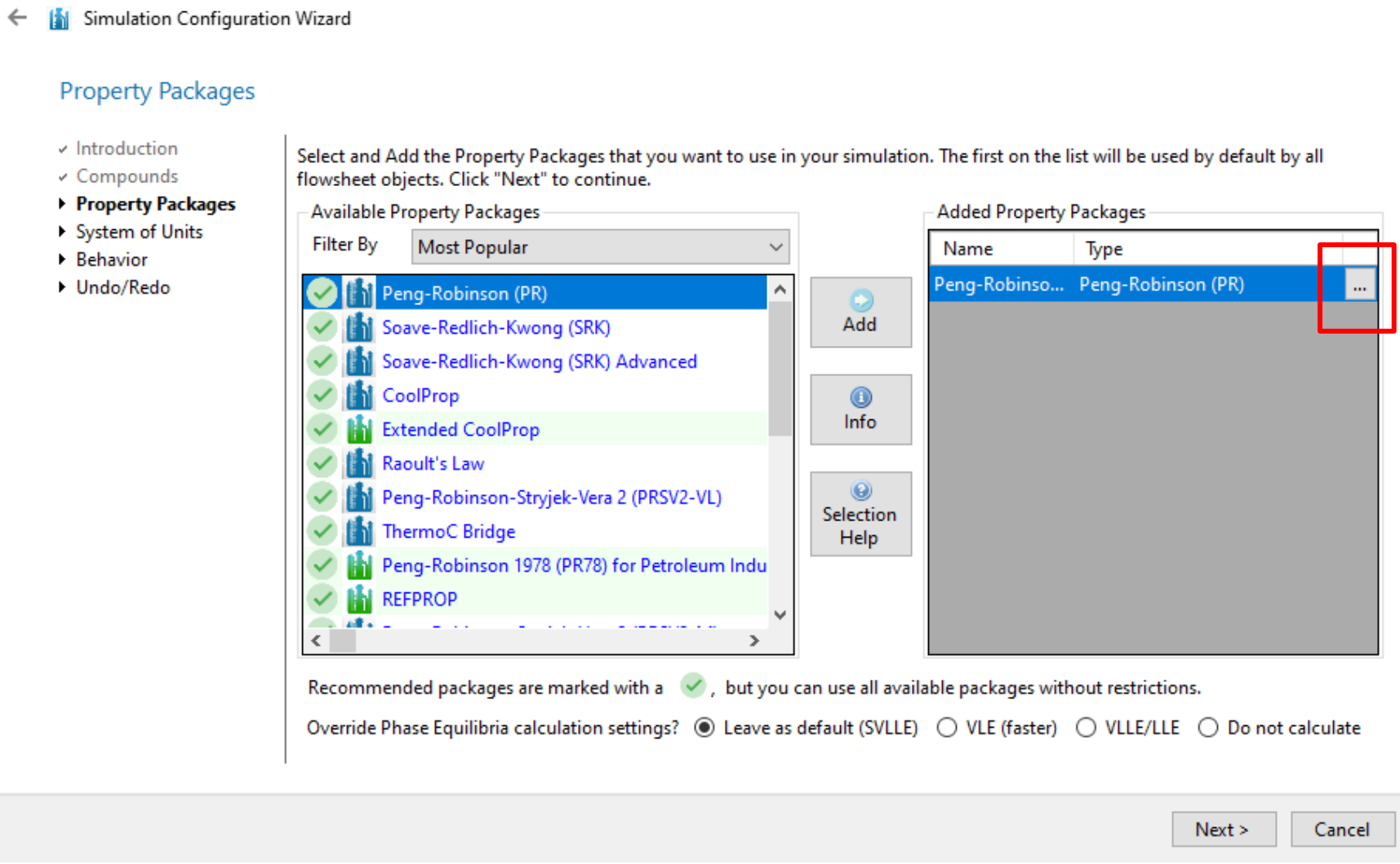
Selección de los compuesto intervinientes



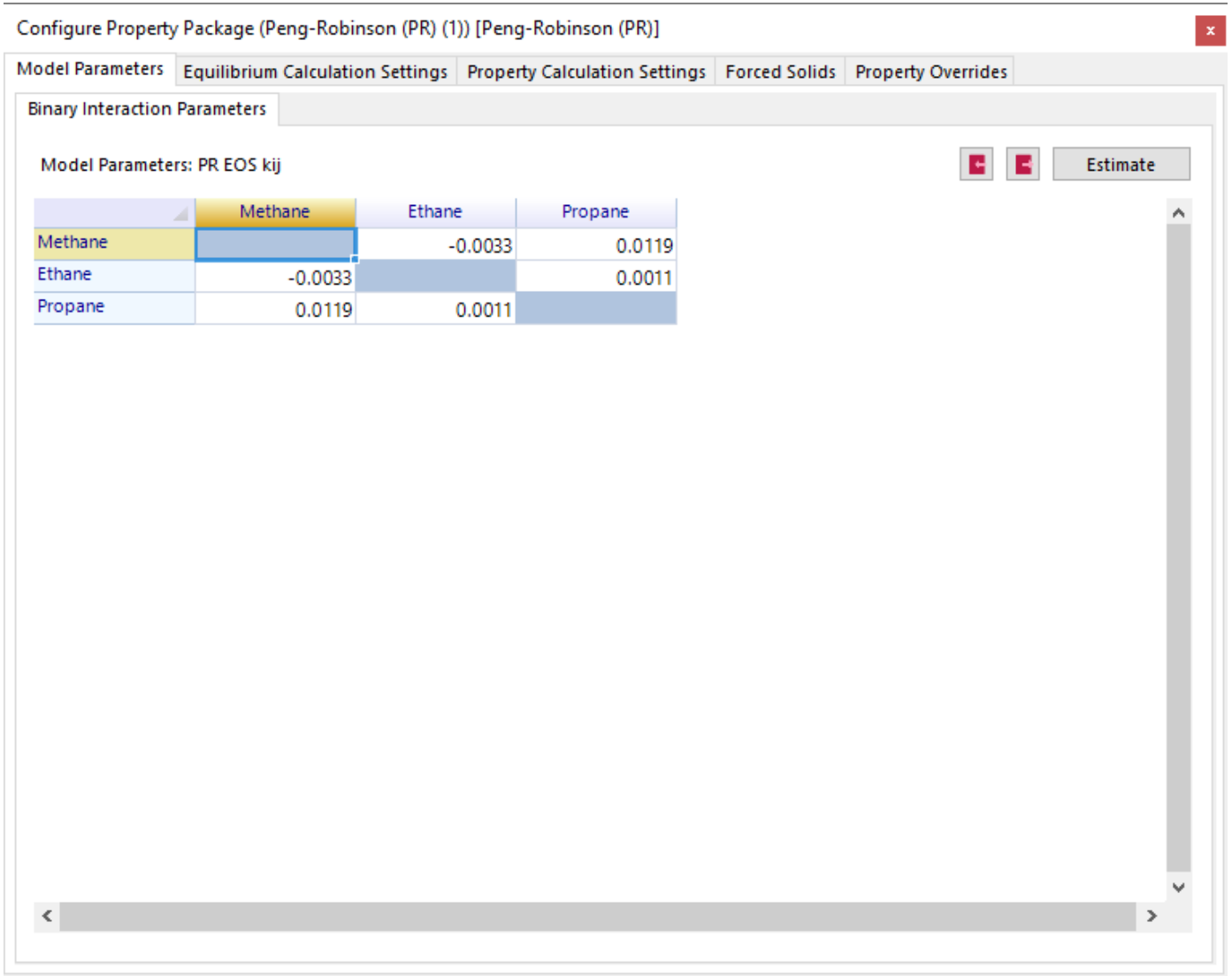
Selección del paquete fisicoquímico



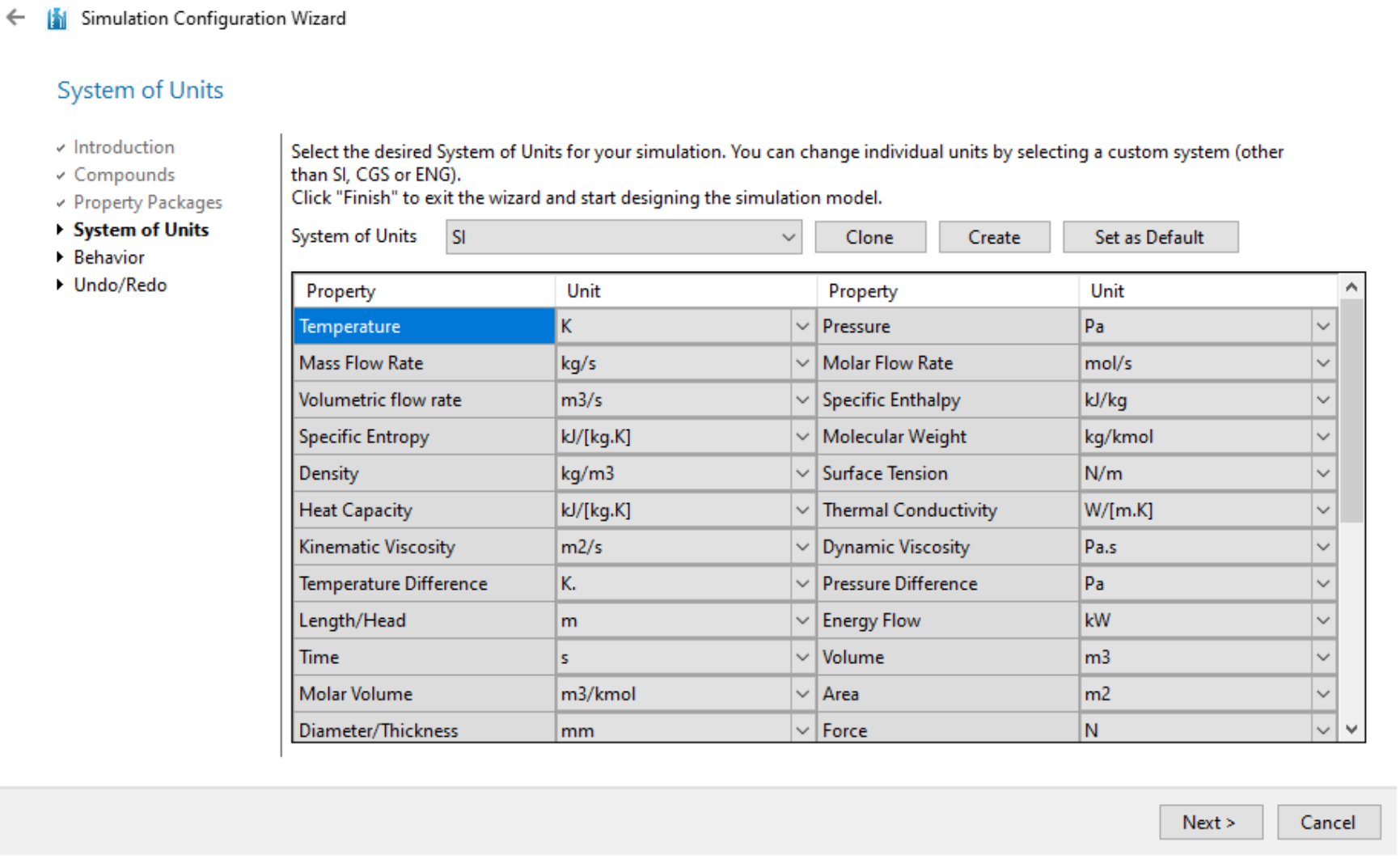
Selección del paquete fisicoquímico



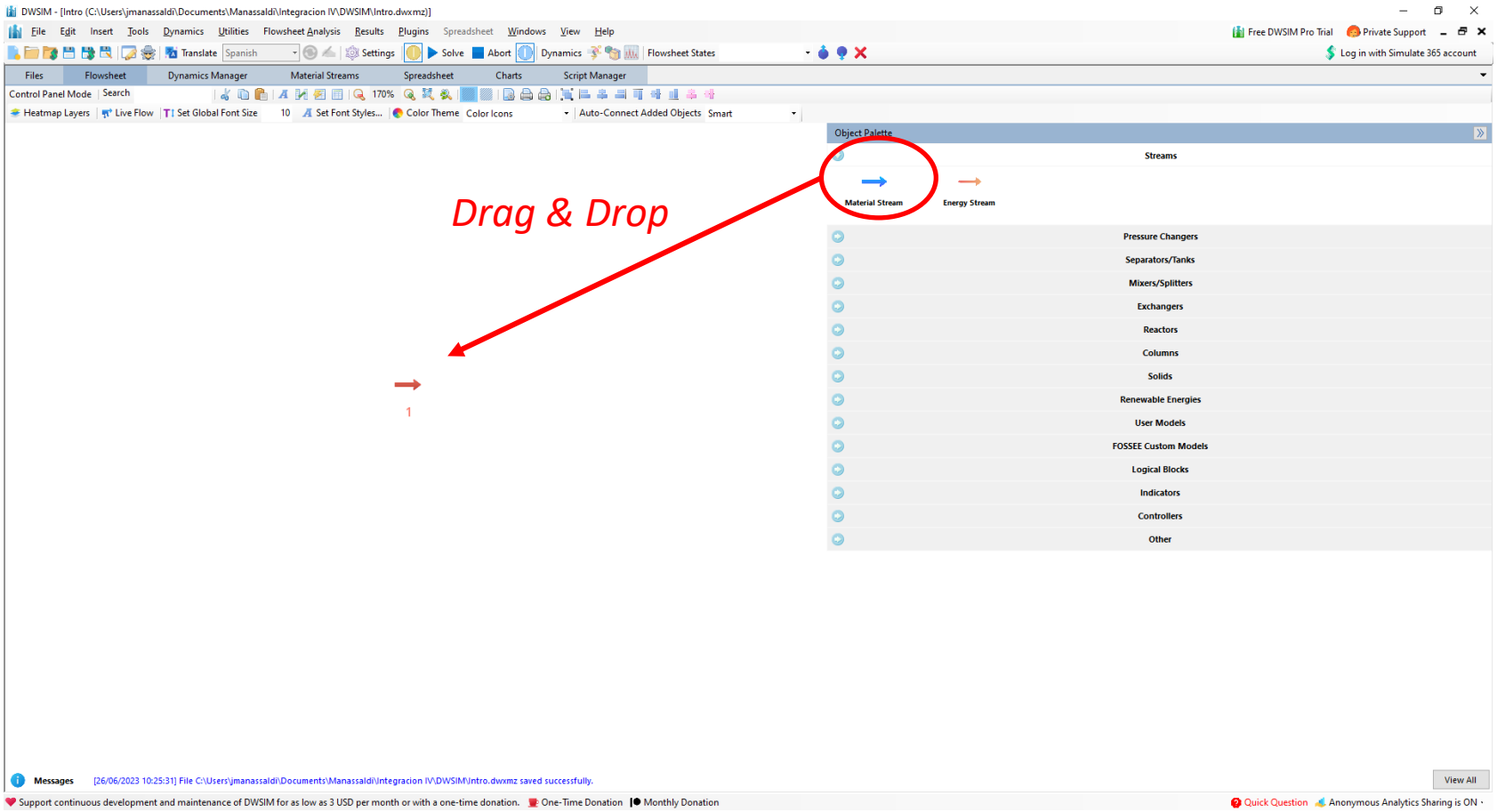
Selección del paquete fisicoquímico



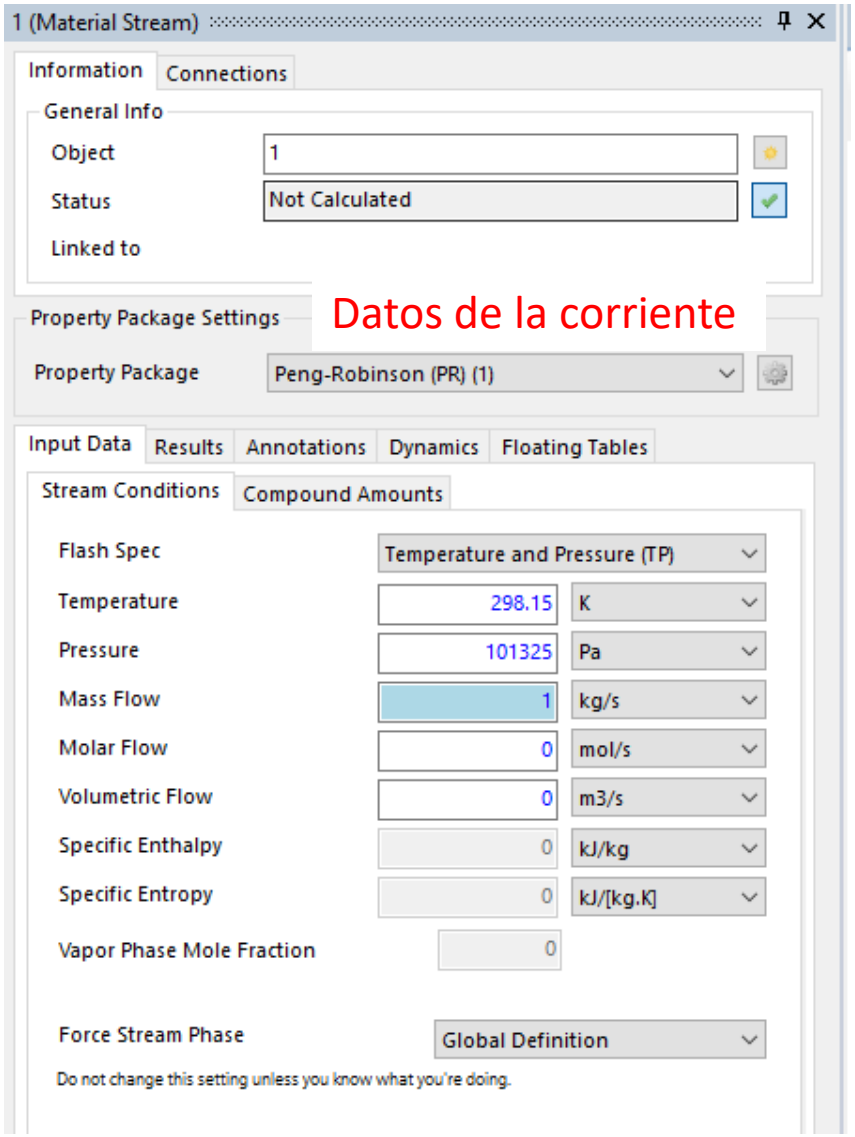
Unidades


Simulation Configuration Wizard
System of Units
Introduction
Compounds
Property Packages
System of Units
Behavior
Undo/Redo
Select the desired System of Units for your simulation. You can change individual units by selecting a custom system (other than SI, CGS or ENG).
Click "Finish" to exit the wizard and start designing the simulation model.
System of Units
SI
Clone
Create
Set as Default
Property
Unit
Property
Unit
Temperature
K
Pressure
Pa
Mass Flow Rate
kg/s
Molar Flow Rate
mol/s
Volumetric flow rate
m3/s
Specific Enthalpy
kJ/kg
Specific Entropy
kJ/[kg.K]
Molecular Weight
kg/kmol
Density
kg/m3
Surface Tension
N/m
Heat Capacity
kJ/[kg.K]
Thermal Conductivity
W/[m.K]
Kinematic Viscosity
m2/s
Dynamic Viscosity
Pa.s
Temperature Difference
K.
Pressure Difference
Pa
Length/Head
m
Energy Flow
kW
Time
s
Volume
m3
Molar Volume
m3/kmol
Area
m2
Diameter/Thickness
mm
Force
N
Next >
Cancel

Comienzo de la simulación



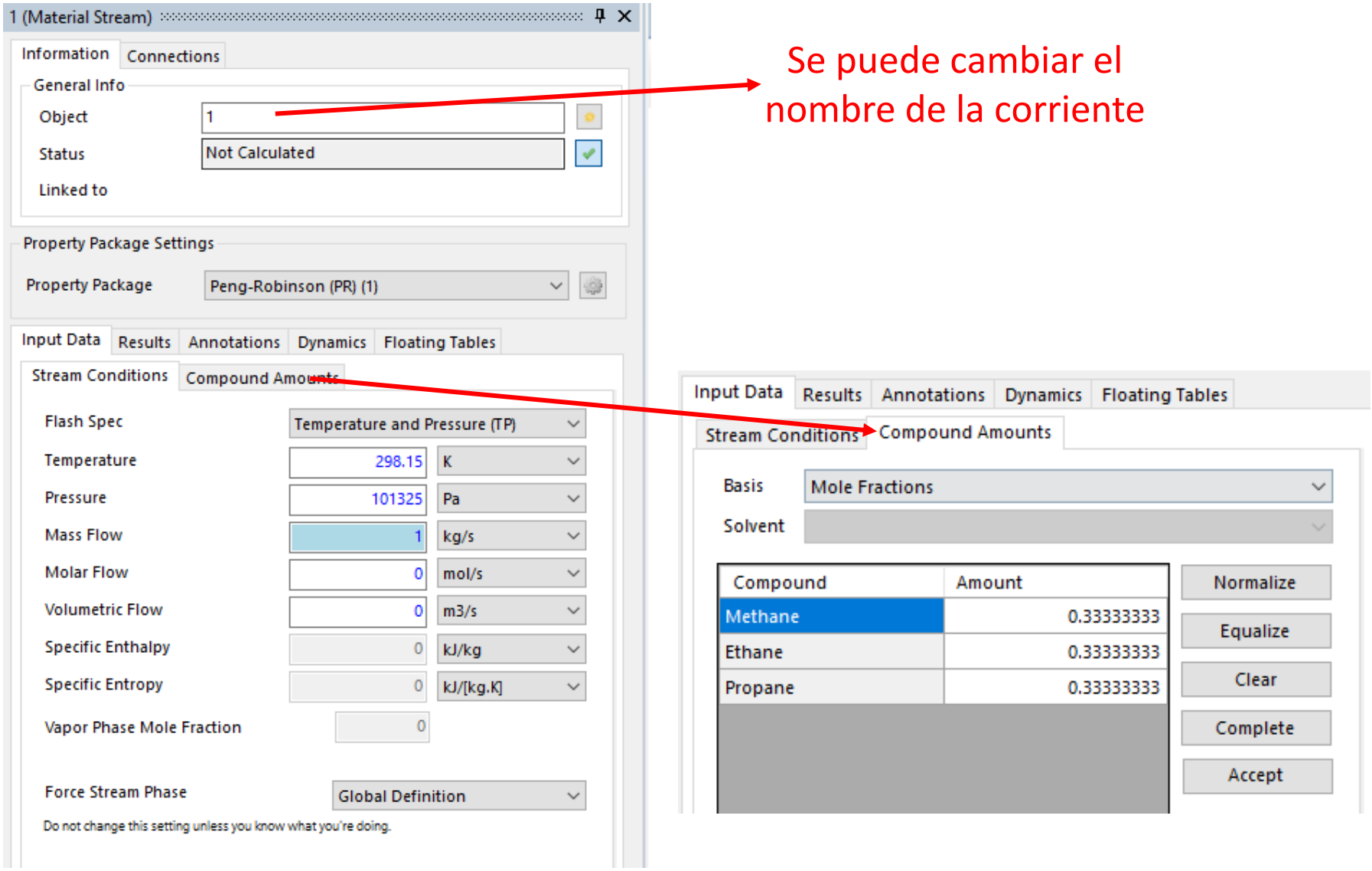
Modulo “Material Stream” (corriente de materia)



Datos de la corriente

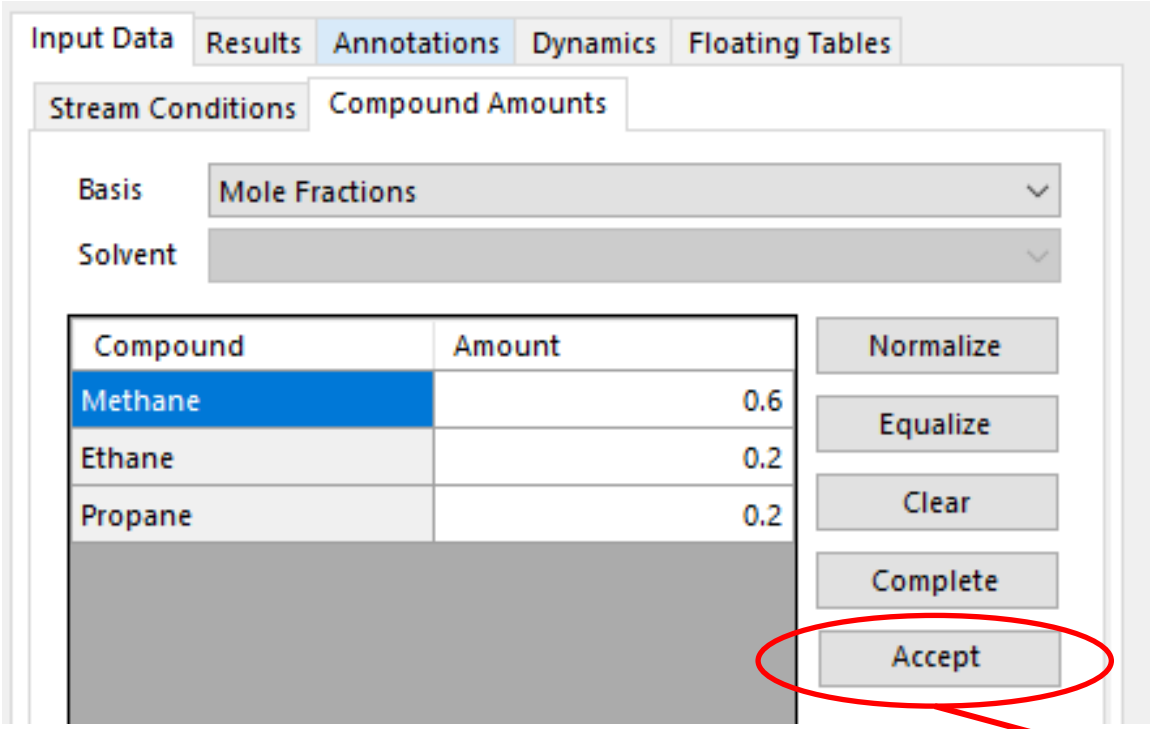
Al agregar una corriente sus datos se completan con valores por defecto

Propiedades de las corrientes de materia



Propiedades de las corrientes de materia

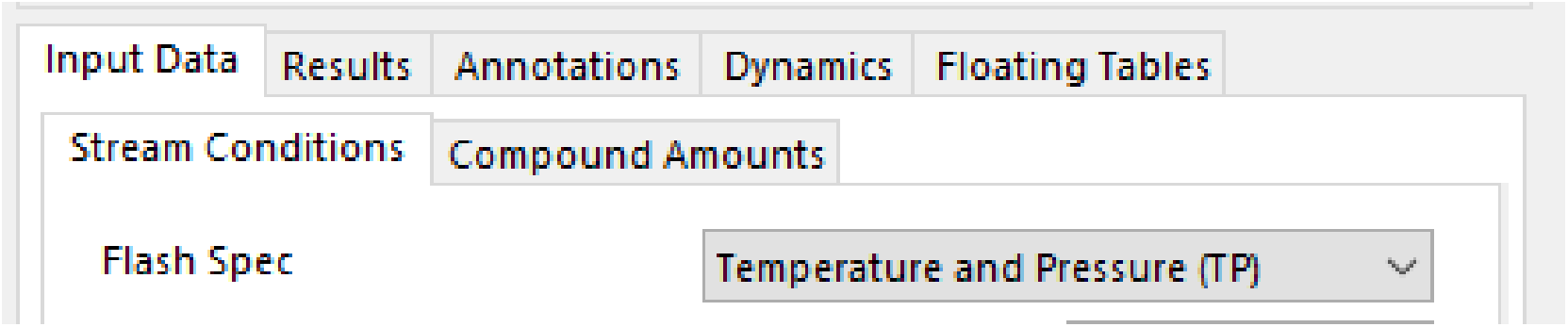
Es conveniente comenzar definiendo la composición de la corriente.
Por defecto es una mezcla equimolar de todos los compuestos.



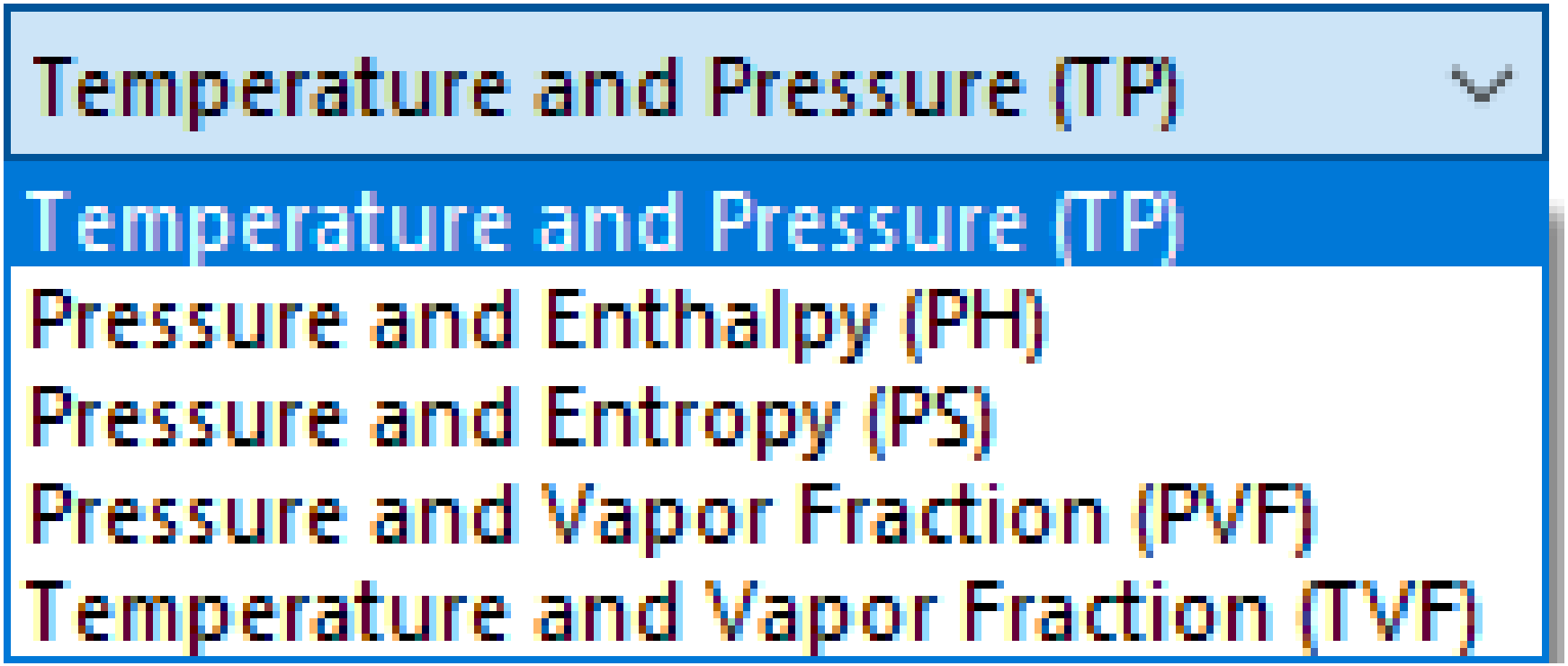
Se ingresa la composición y se acepan los cambios

Propiedades de las corrientes de materia

FLASH Spec
(Especificaciones para el calculo del flash)

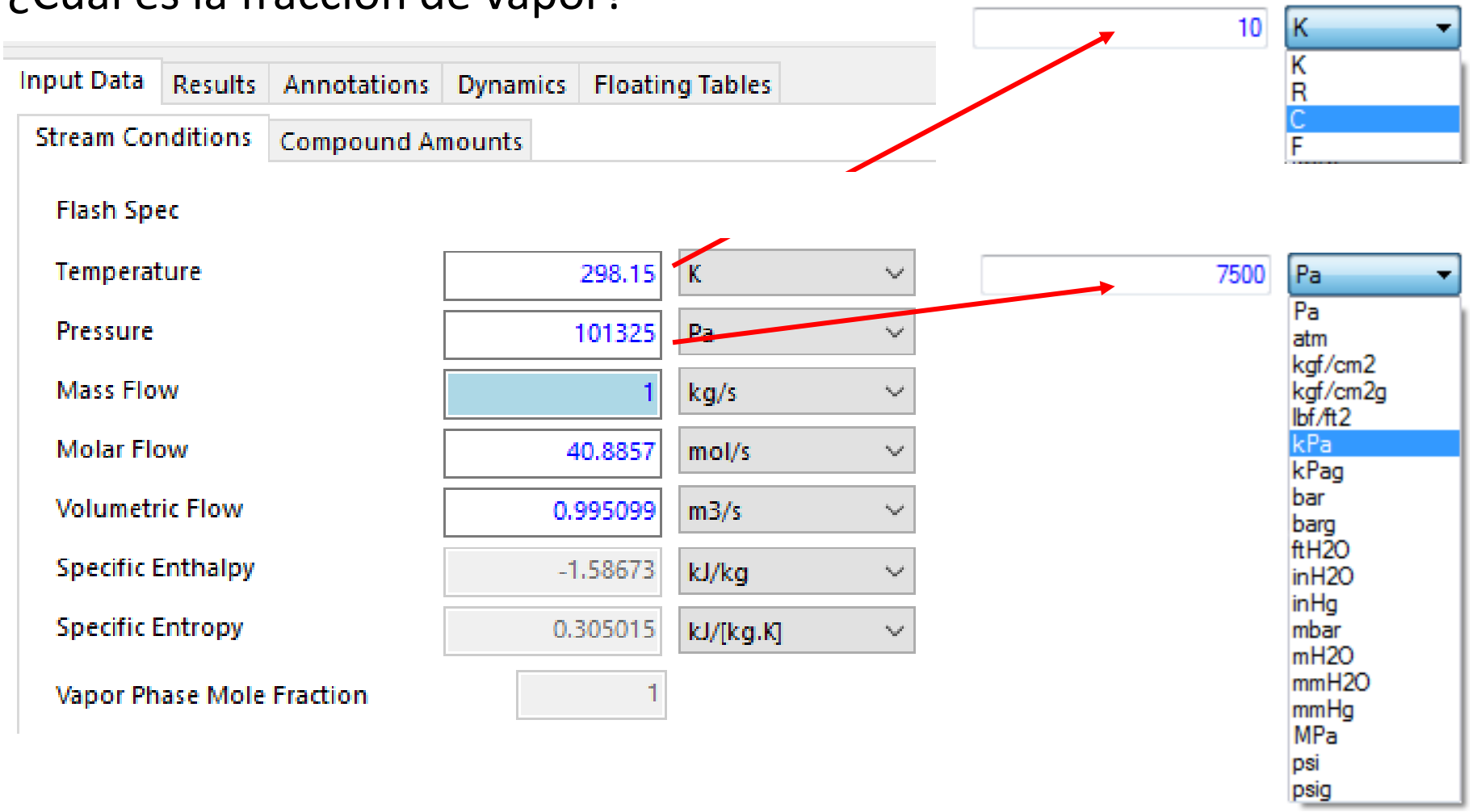


FLASH Spec
(Especificaciones para el calculo del flash)



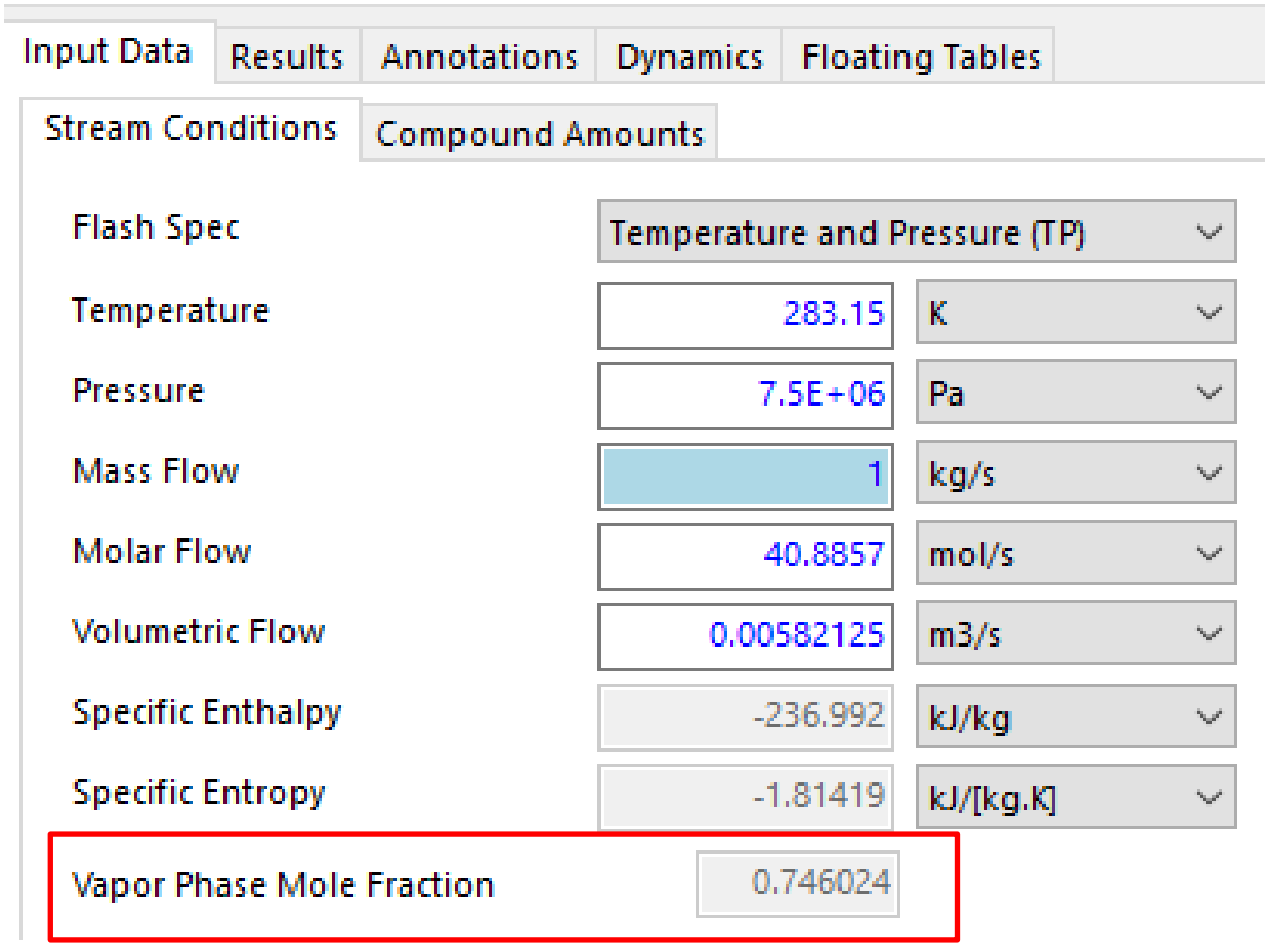
Resolución del ejercicio propuesto

Ajuste una presión de **7500 kPa** y una temperatura de **10º C**
¿Cuál es la fracción de vapor?



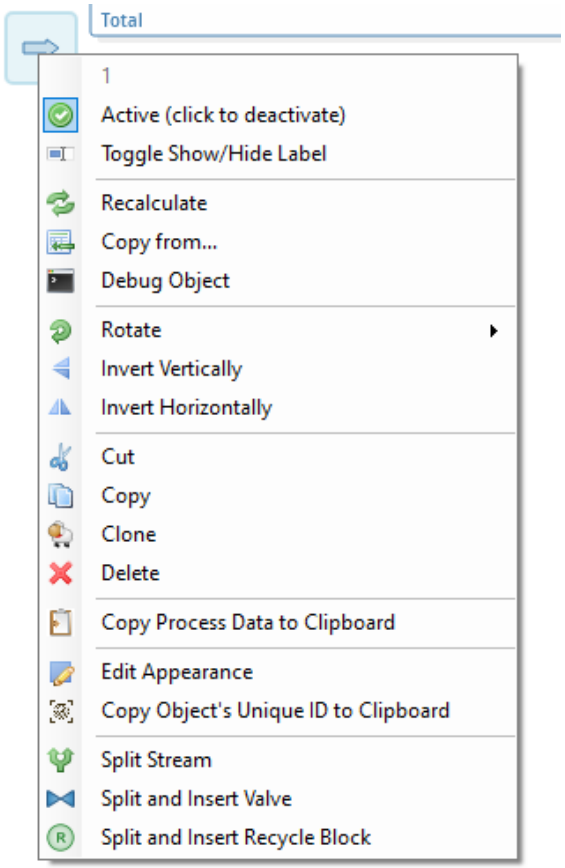
Resolución del ejercicio propuesto

Ajuste una presión de **7500 kPa** y una temperatura de **10º C**
¿Cuál es la fracción de vapor?



Resolución del ejercicio propuesto

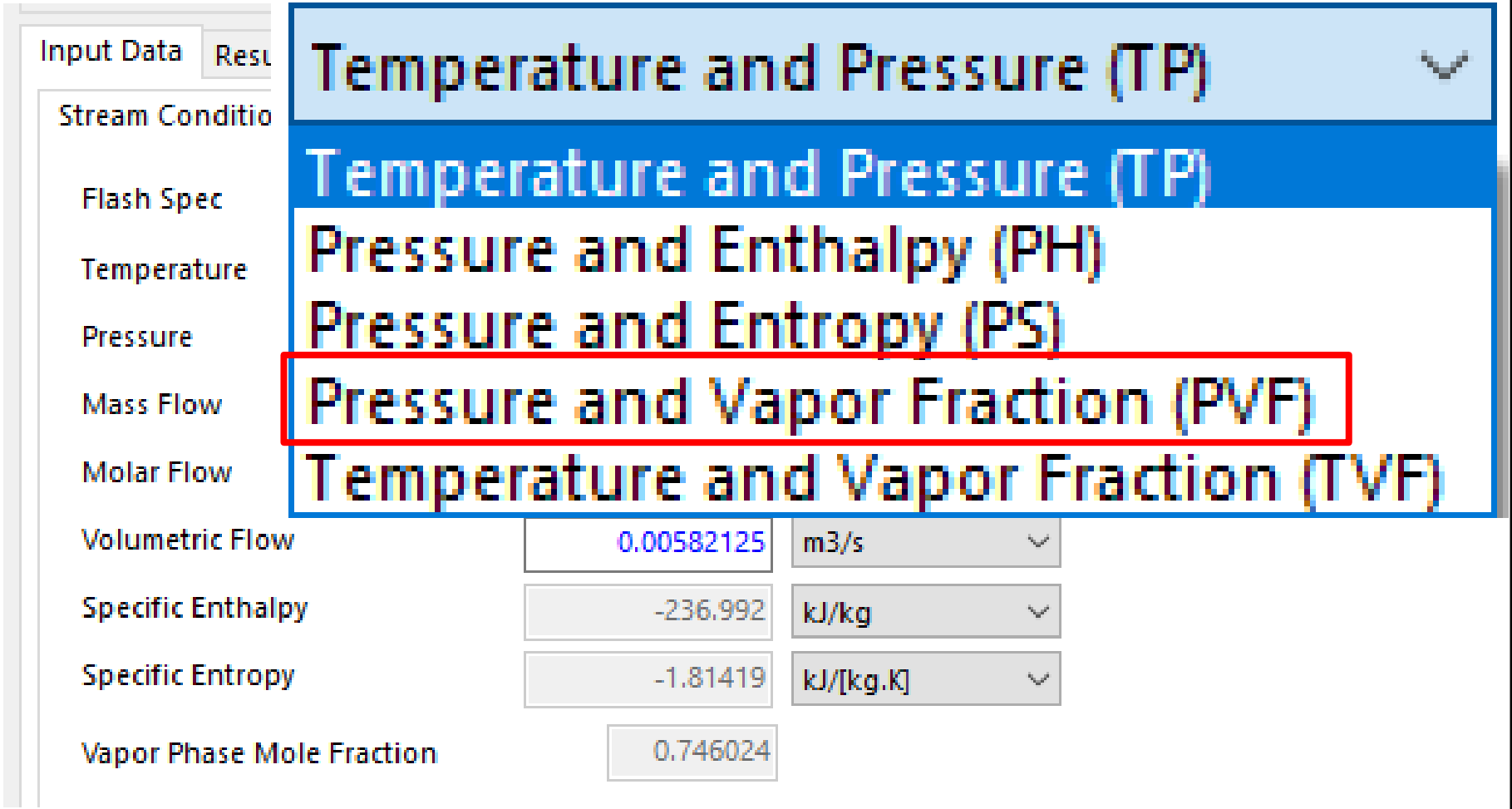
Clonamos la corriente para no volver a definir la composición



Renombramos las corrientes

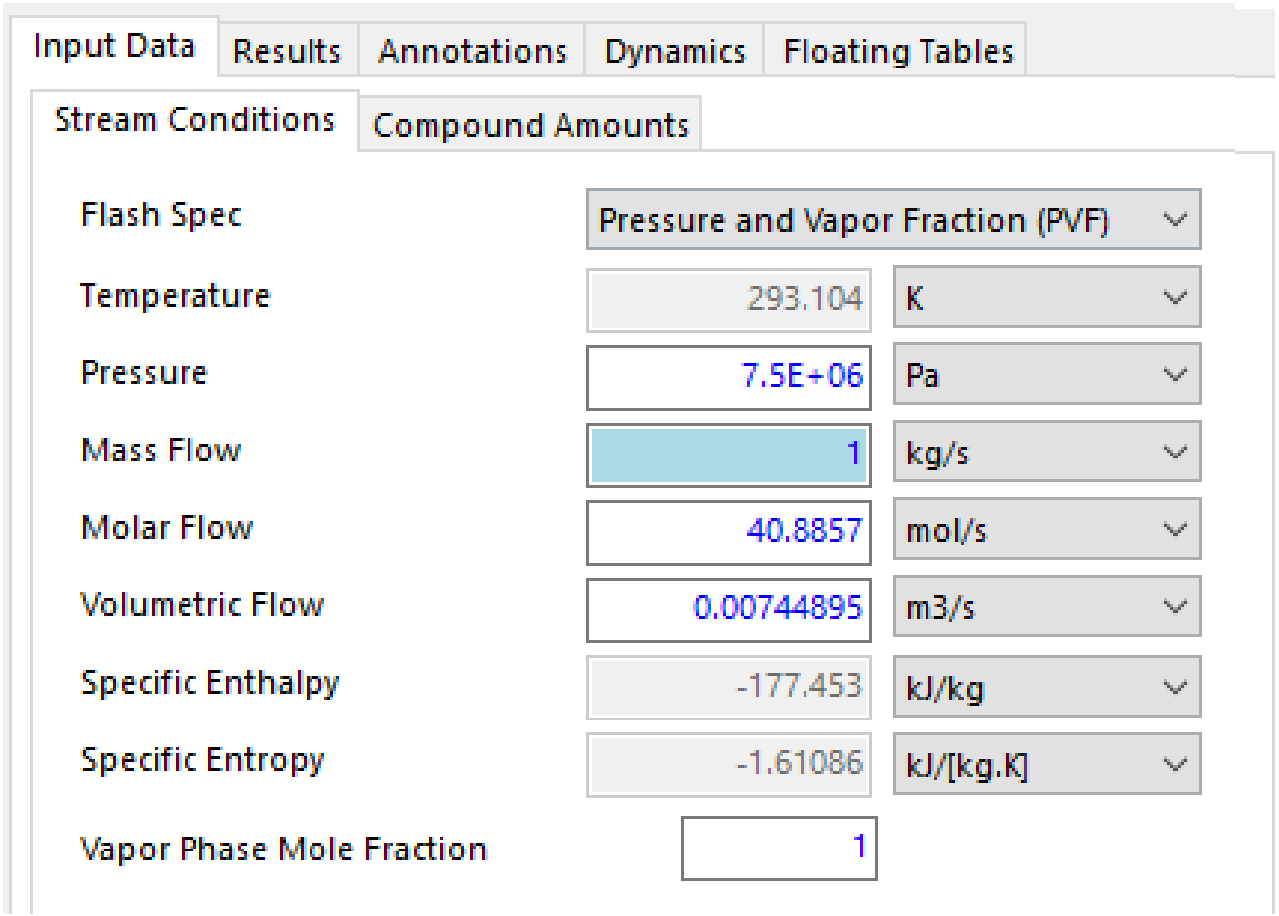
Resolución del ejercicio propuesto

Realice el cálculo de punto de rocío a esta corriente. Fije una presión de 7500 kPa ¿Cual es la temperatura de rocío?



Resolución del ejercicio propuesto

Realice el cálculo de punto de rocío a esta corriente. Fije una presión de 7500 kPa ¿Cual es la temperatura de rocío?



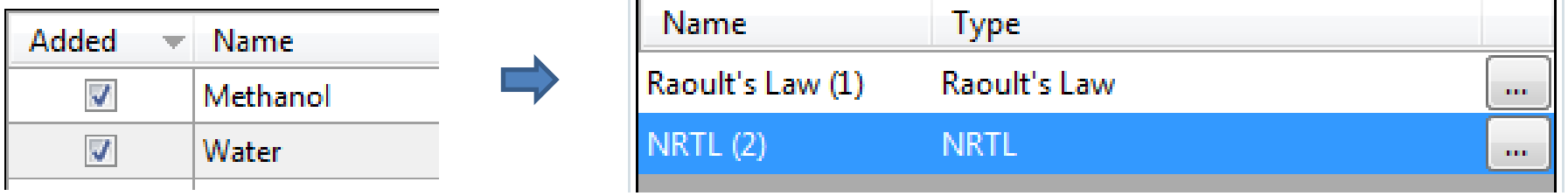
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Pasos:

1. Crear un nuevo caso de simulación definiendo los compuestos intervinientes y los paquetes termodinámicos que se desean comparar.
2. En el flowsheet crear una nueva corriente de materia.

Ejemplo:

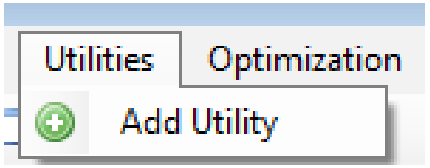
Metanol (1) y Agua(2) usando NRTL y Ley de Raoult.

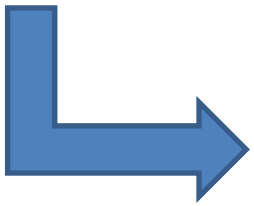


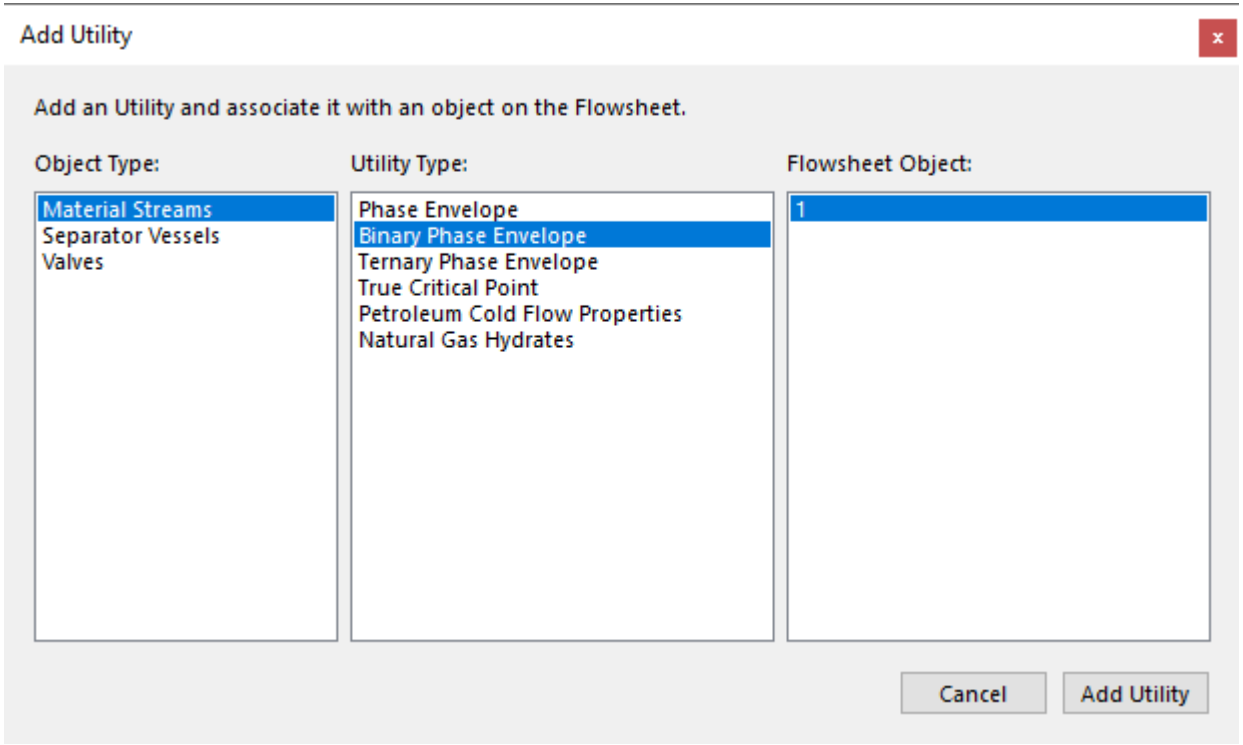
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

3. Seleccionar la corriente de materia creada y agregar una “utility”.
4. Seleccionar las siguientes opciones:

   Material Stream > Binary Phase Envelope > MSTR-000 (nombre de la corriente creada)

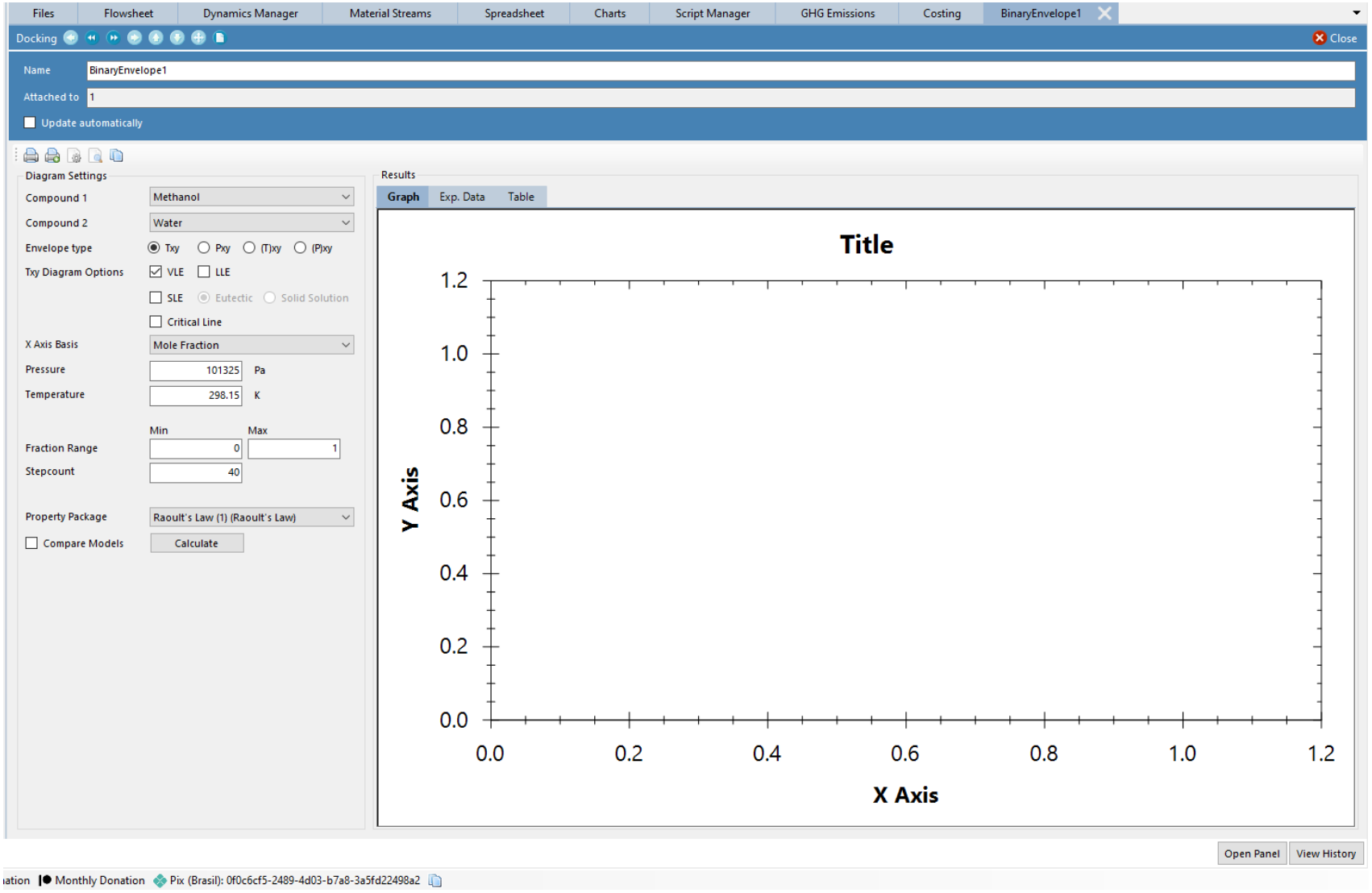






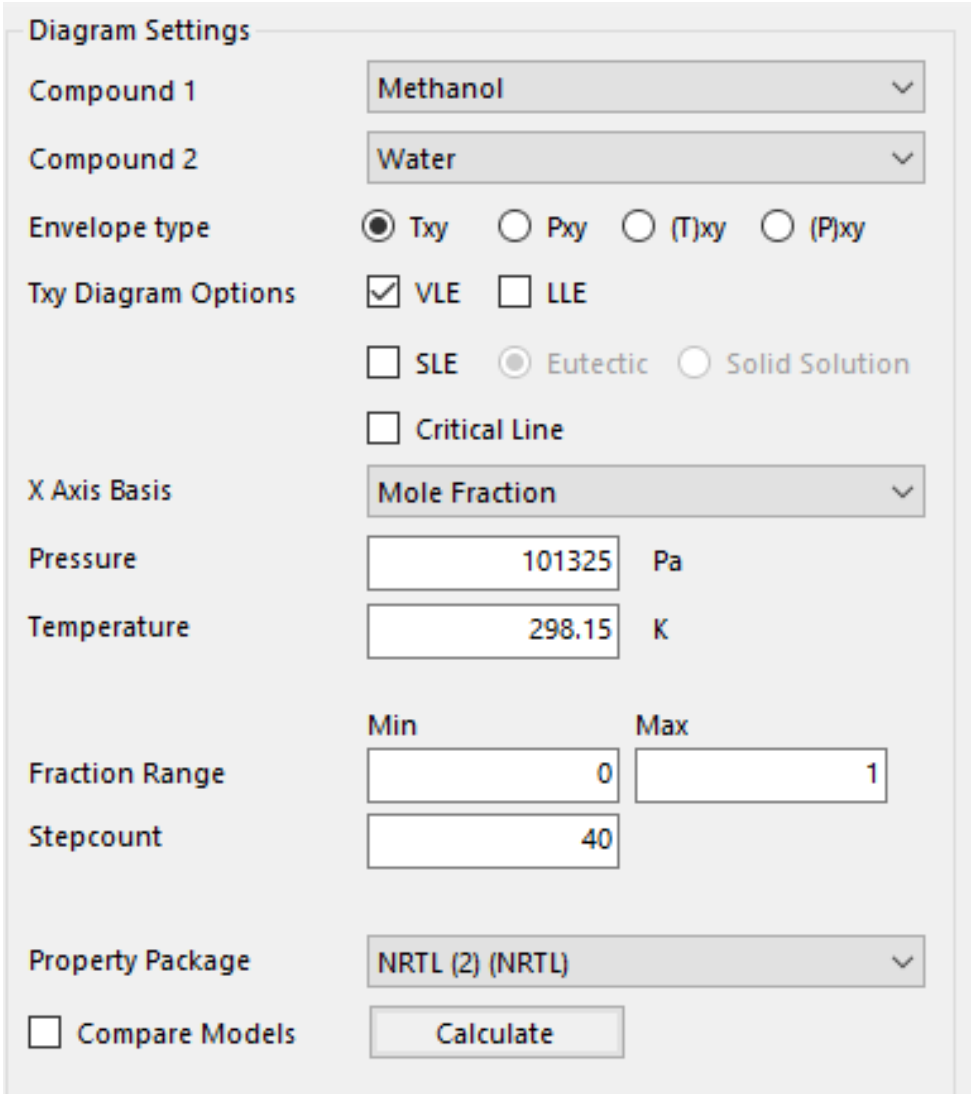
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

5. En la ventana principal se deben seleccionar las opciones del diagrama



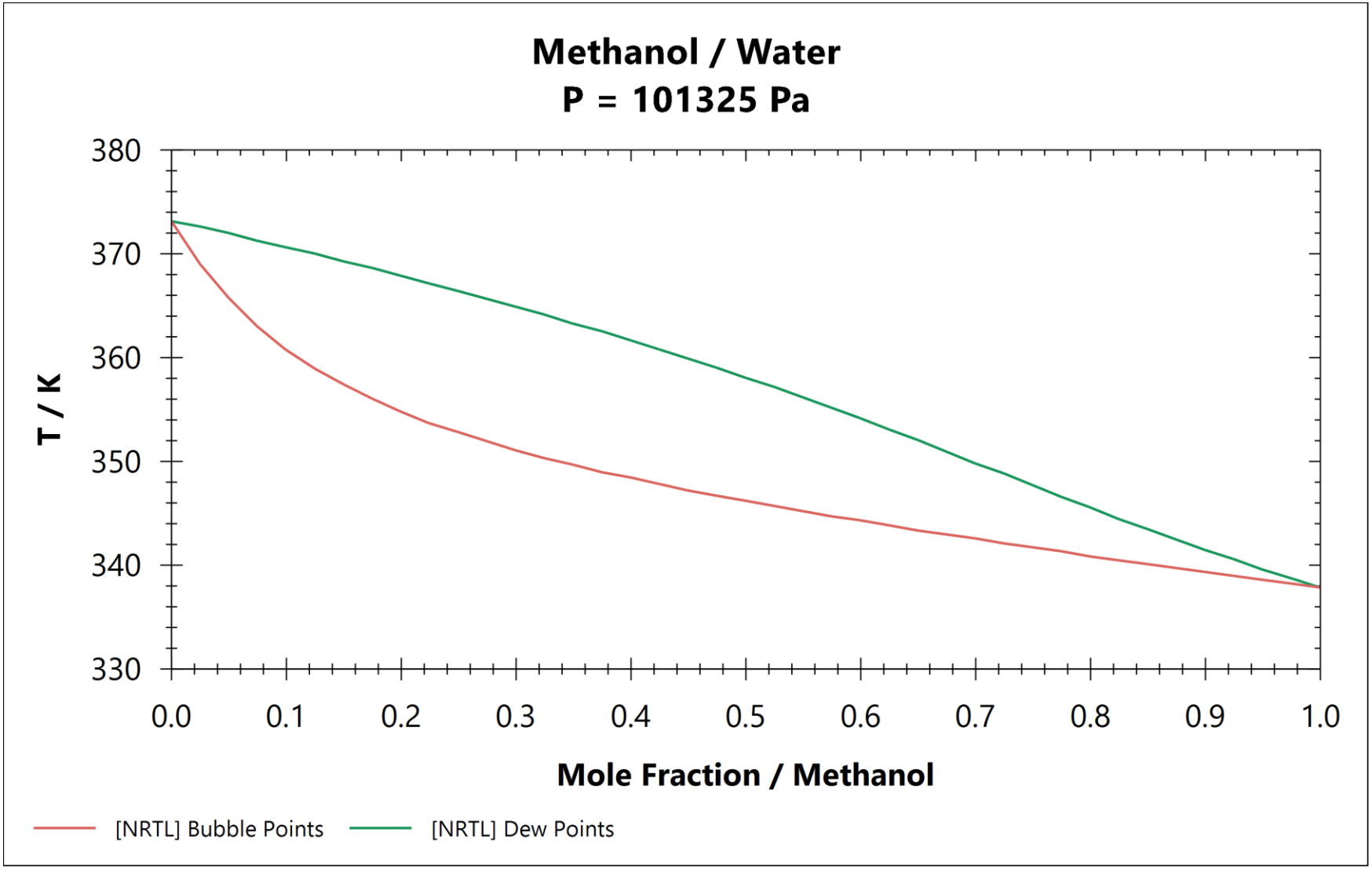
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagrama *T* vs *x/y* a 1 atm utilizando NRTL



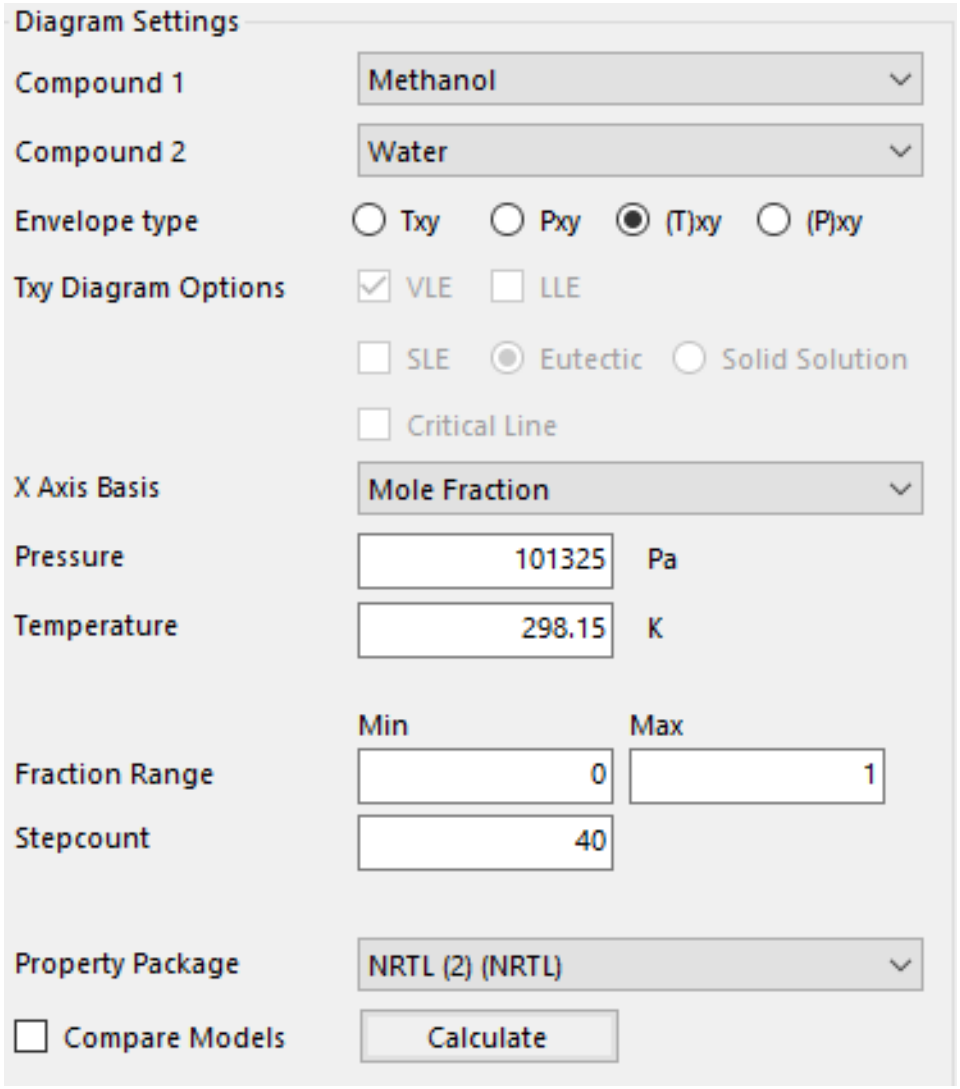
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagrama *T* vs *x/y* a 1 atm utilizando NRTL



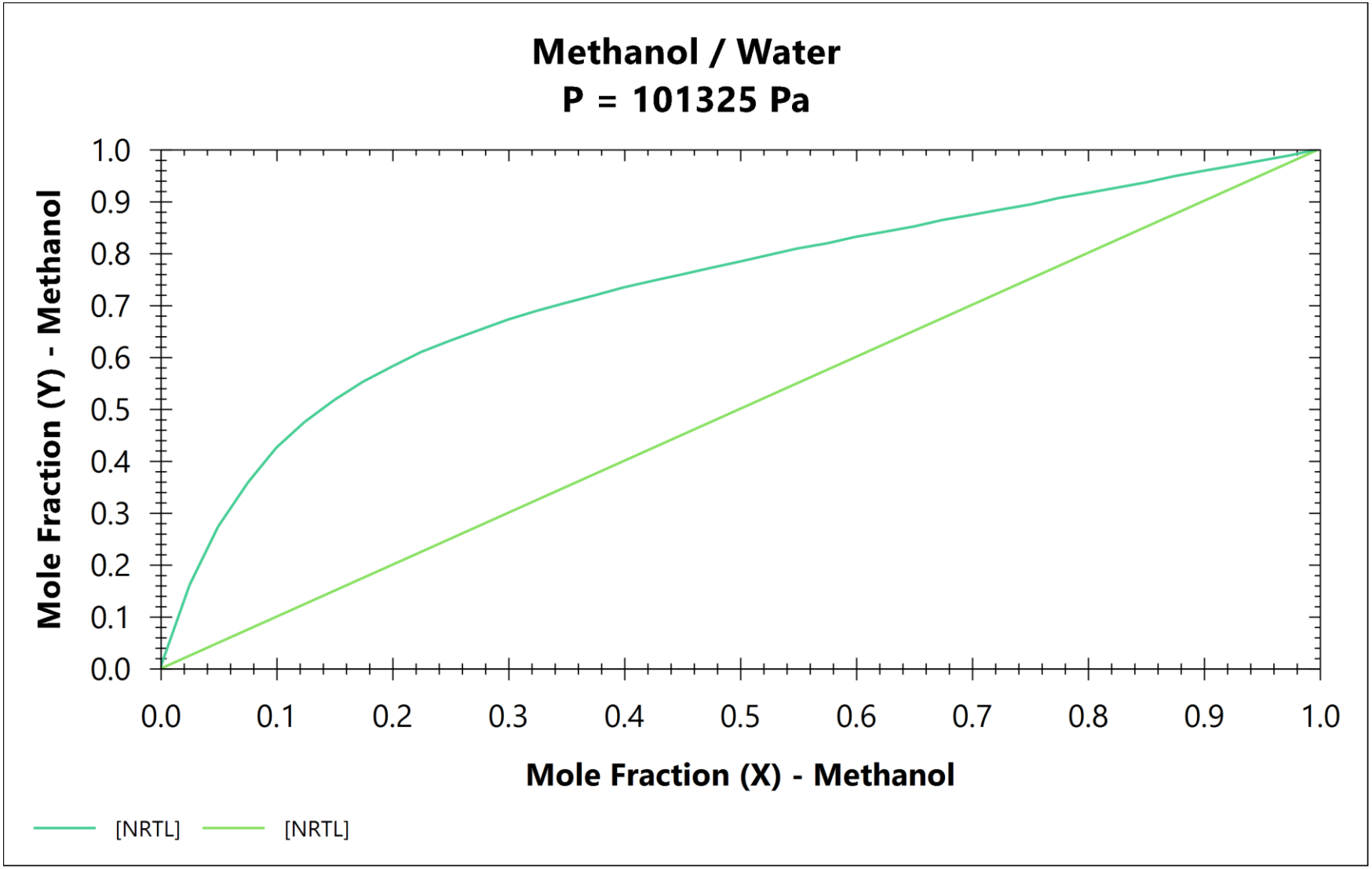
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagrama *y* vs *x* a 1 atm utilizando NRTL



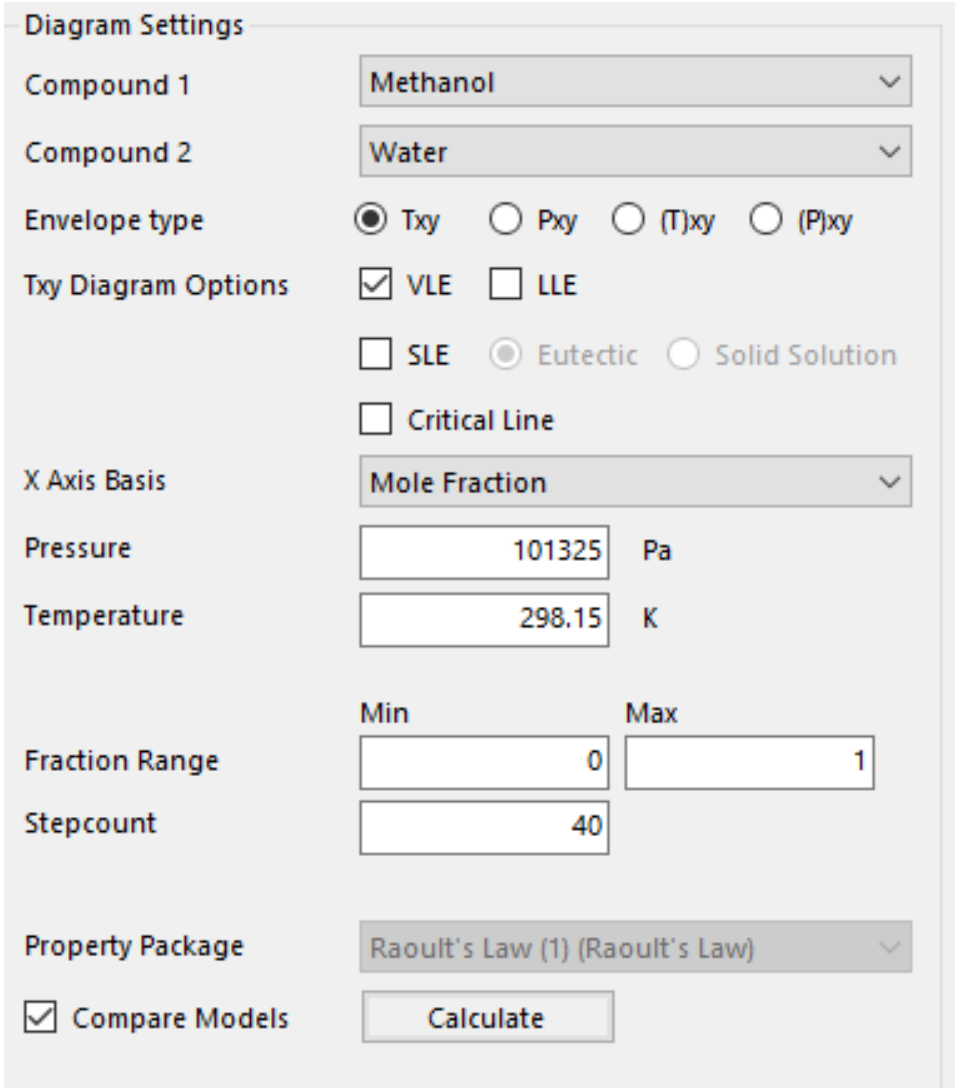
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagrama *y* vs *x* a 1 atm utilizando NRTL



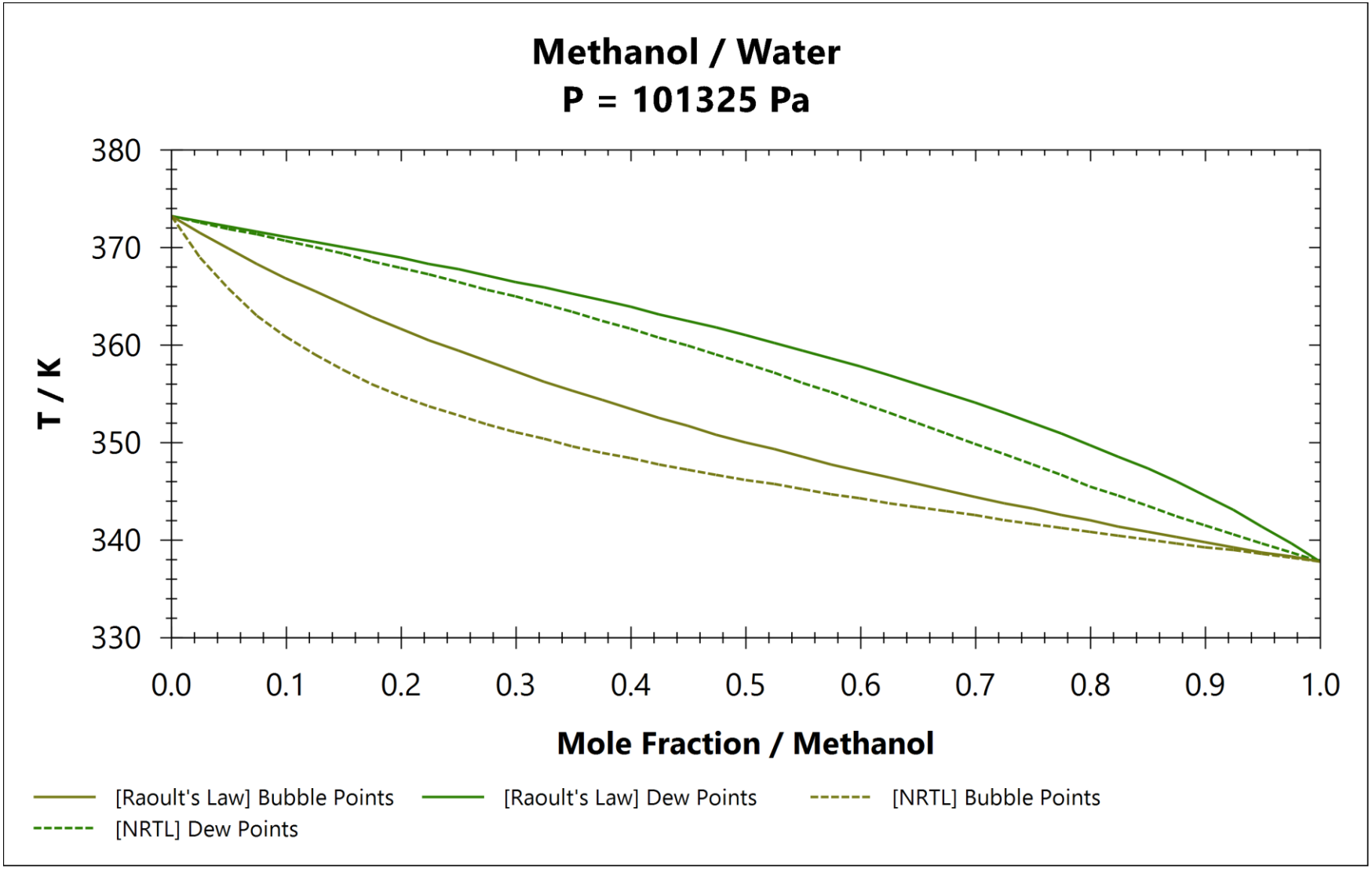
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagramas *T* vs *x/y* a 1 atm comparando los modelos fisicoquímicos.



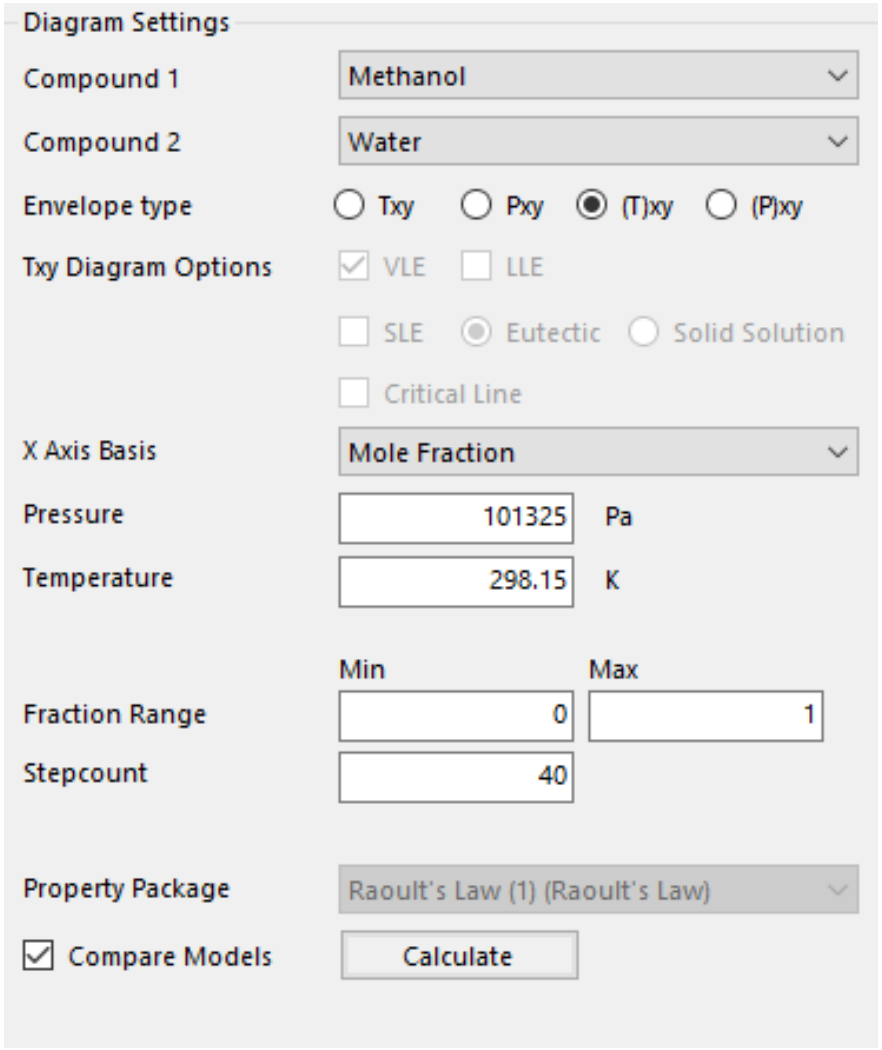
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagramas *T* vs *x/y* a 1 atm comparando los modelos fisicoquímicos.



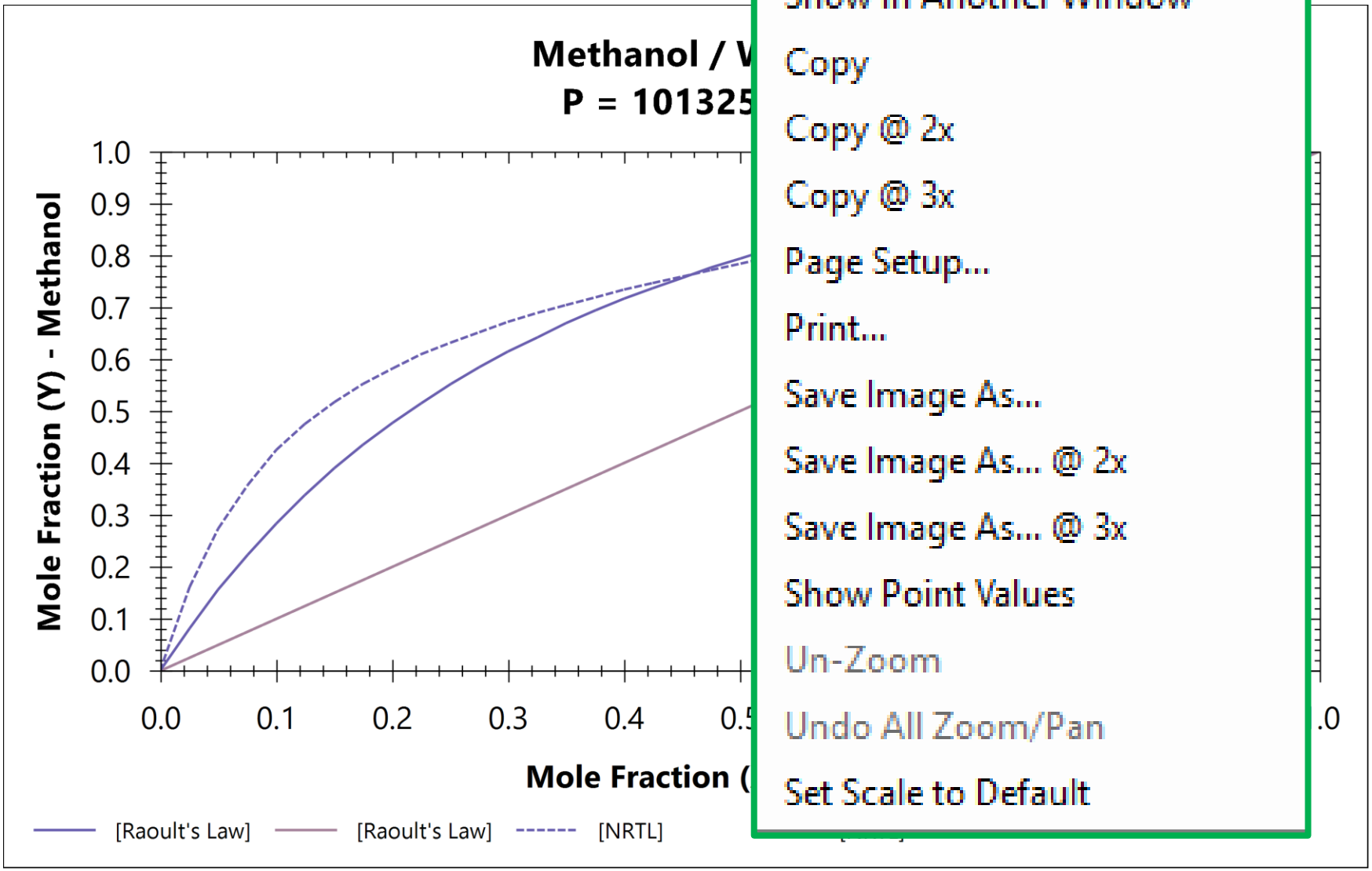
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagramas *y* vs *x* a 1 atm comparando los modelos fisicoquímicos.



Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagramas *y* vs *x* a 1 atm comparando los



Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Inclusión de datos experimentales

Results

Graph | **Exp. Data** | Table

	x1 (Molar Fraction)	y1 (Molar Fraction)	T (K)	P (Pa)
☐				

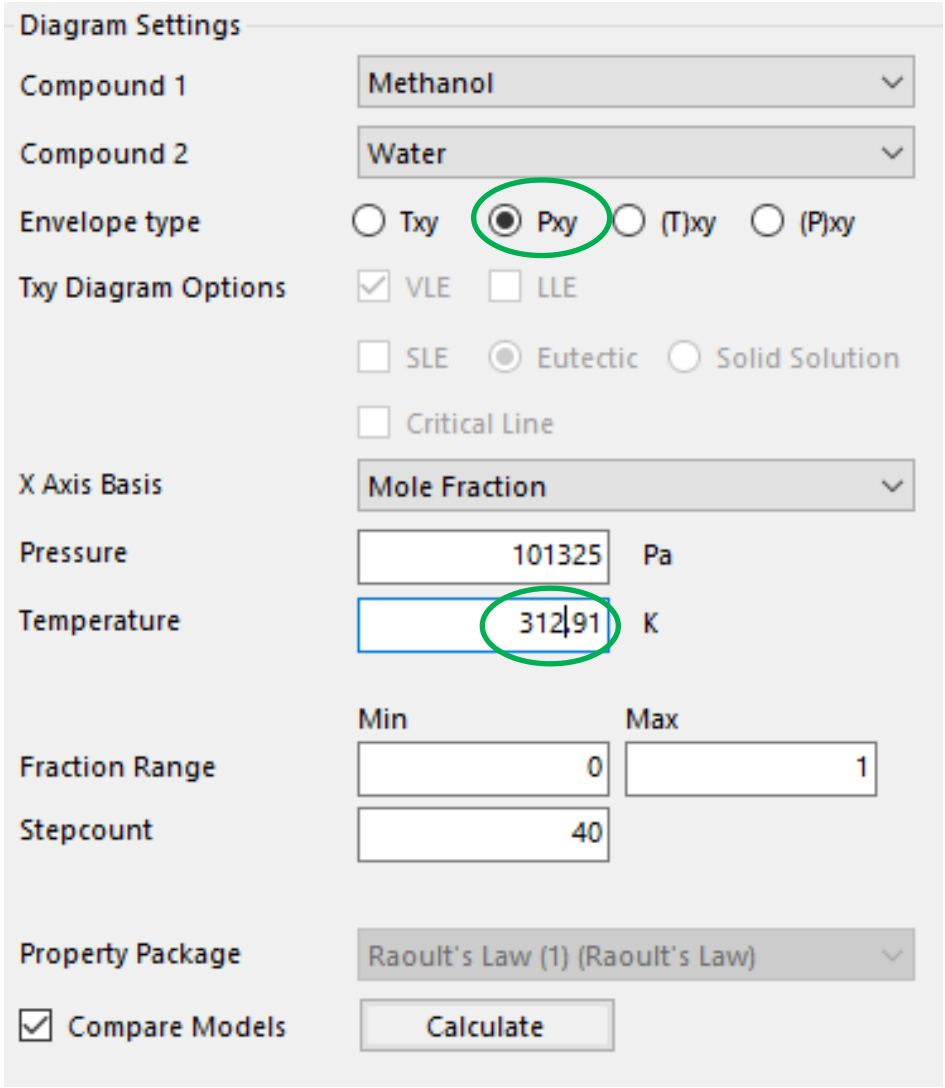
Results

Graph | **Exp. Data** | Table

	x1 (Molar Fraction)	y1 (Molar Fraction)	T (K)	P (Pa)
☑	0.04780	0.25590	312.91	9079
☑	0.09250	0.45620	312.91	11412
☑	0.13350	0.6214	312.91	13012
☑	0.3065	0.76120	312.91	19025
☐				

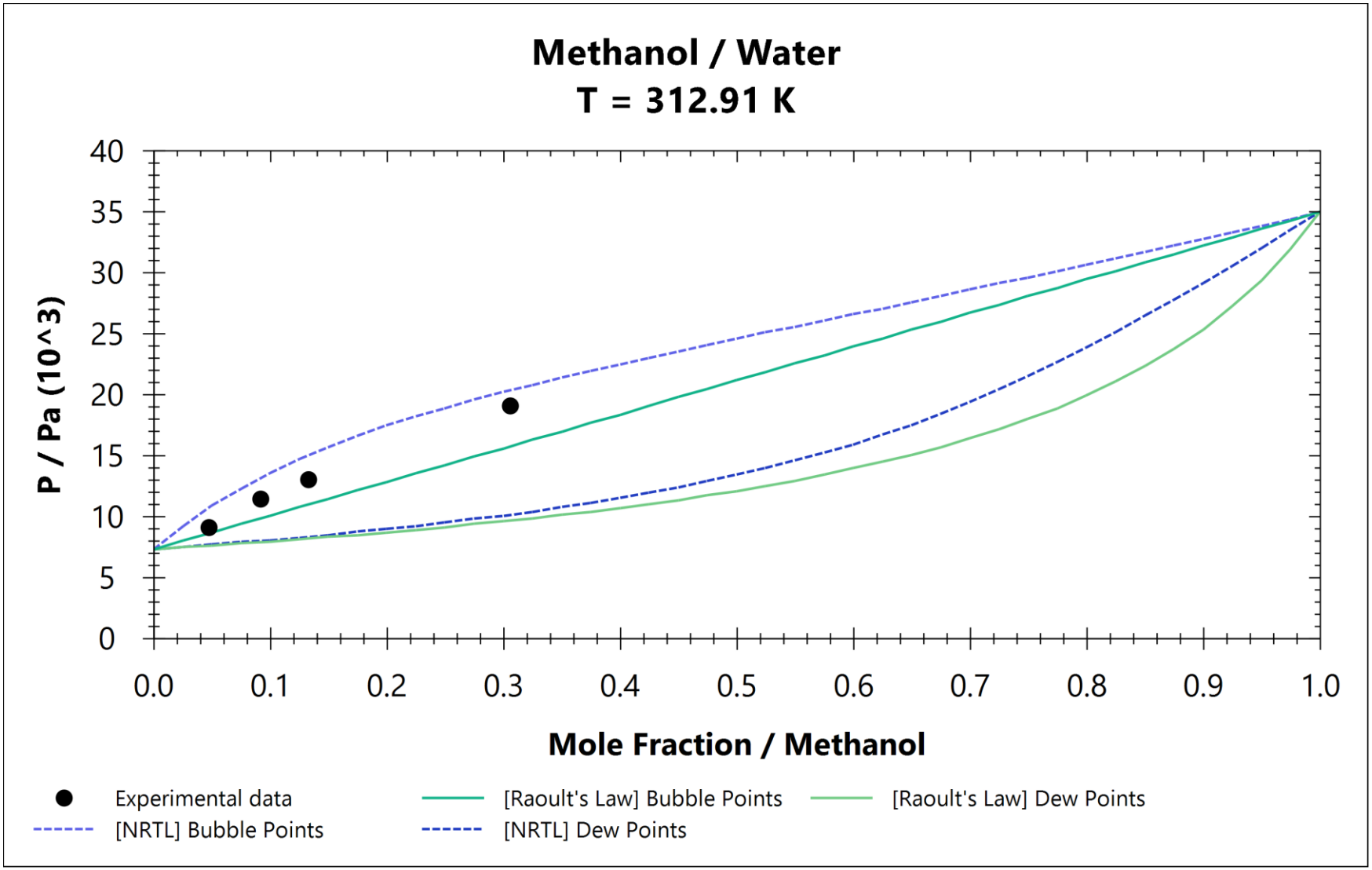
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Inclusión de datos experimentales



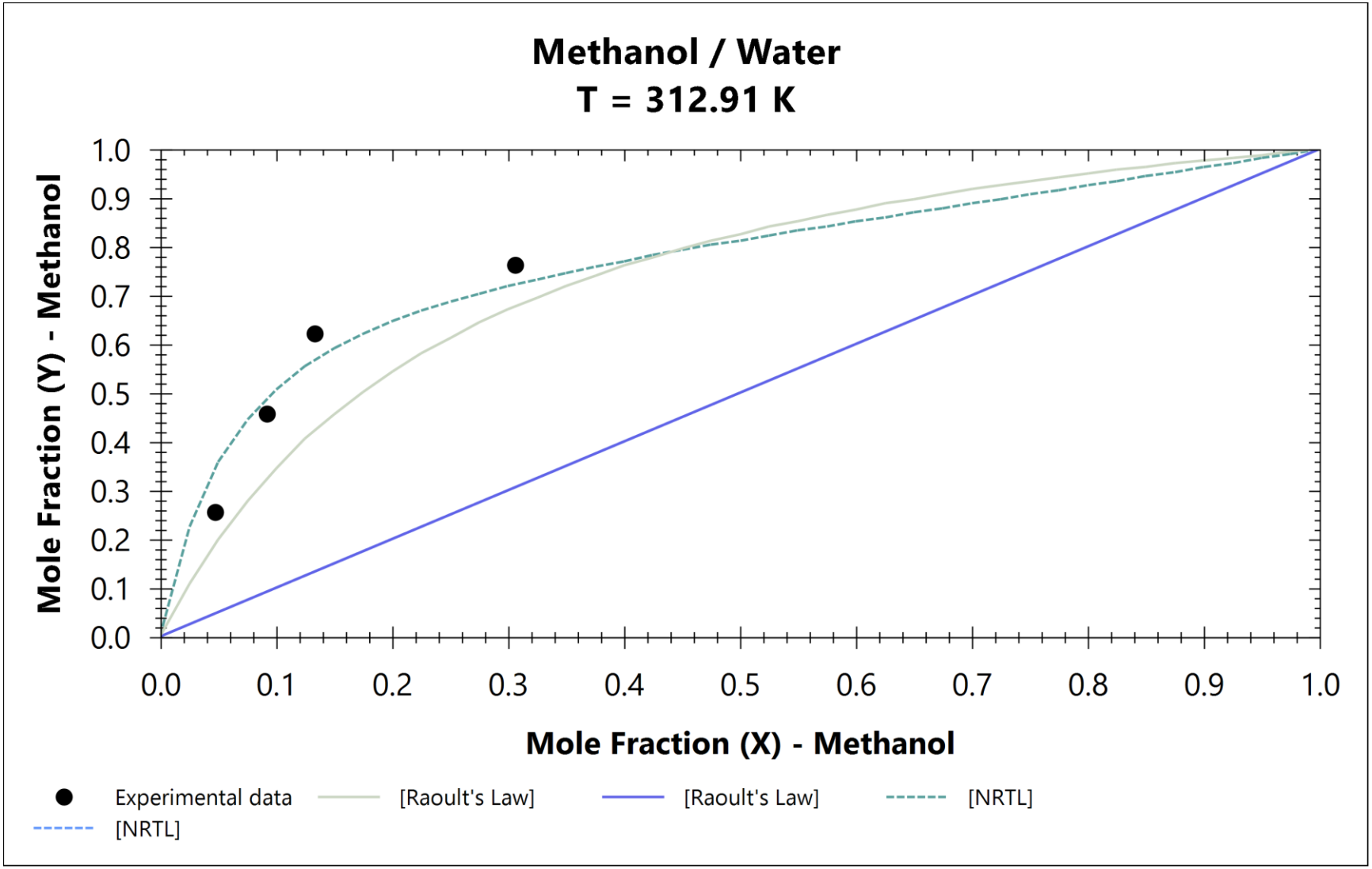
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagramas *P* vs *x/y* a 312.91 K comparando NRTL, RL y datos experimentales



Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagramas *y* vs *x* a 312.91 K comparando NRTL, RL y datos experimentales



Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagramas *y* vs *x* a 312.91 K comparando NRTL, RL y datos experimentales