HACULTAD REGIONAL ROSARIO

CÁTEDRA DE "Balances de Materia y Energía"



Práctica con simulador

MMXXIV

Aplicación del simulador dwsim

1) Calentadores-enfriadores

Una corriente de aire de 4 [kmol/hr] a una presión de 1 atm se calienta desde 30 °C. Para ello se le incorpora 4000 [Kcal/hr]. Si no hay caída de presión, calcular la temperatura de salida.

1- Iniciar caso nuevo: Haciendo click (D) o "File"/"New Steady state Simulation":

		۰.	And the spin of the second sec	
💮 🔤 Simulation Configurat	ion Wizard		Addate Corporate	
Introduction • Introduction • Compounds • Property Packages • Flash Algorithm • System of Units	Welcome to the simulation con Click "Next" to continue.	figuration wiz	ard.	
	Close Wizard and go to the s	Simulation Co	nfiguration Window	Next >

NEXT>

2- Elegir componentes: en este caso aire ("Air")

G 🔄 Simulation Configuration	n Wizard		ł	Anna anna anna anna anna anna anna anna		-		
Compounds Introduction Compounds Property Packages Flash Algorithm 	Select the compounds "Next" to continue. Search	that you wan	t to add to tł	e simulation.	Use the t	extbox to	search and select a co	ompound in the list. Click Added Air (ChemSep)
 System of Units 	Name	CAS #	Formula	Database	СР	FP 🔺	Add >	
	Argon	7440-37-1	Ar	ChemSep			< Remove	1
	Bromine	7726-95-6	BrBr	ChemSep			Clear List	
	Carbon tetrachloride	56-23-5	CCI4	ChemSep			Clear List	
	Carbon monoxide	630-08-0	CO	ChemSep			< View Data	
	Carbon dioxide	124-38-9	000	ChemSep			View Data >	1
	Carbon disulfide	75-15-0	SCS	ChemSep				
	Phosgene	75-44-5	COCI2	ChemSep			1	
	Trichloroacetyl chl	76-02-8	CCI3COCI	ChemSep			(ChEDL Thermo)	
	Hydrogen chloride	7647-01-0	HCI	ChemSep				
	Chlorine	7782-50-5	CI2	ChemSep				
	Hydrogen iodide	10034-85-2	HI	ChemSep			Import (Online)	
	Hydrogen	1333-74-0	H2	ChemSep				1
	Water	7732-18-5	нон	ChemSep			Import (JSON)	
	Hydrogen sulfide	7783-06-4	HSH	ChemSen		-		
	1							
								Next > Cancel

NEXT>

3- <u>Elegir paquete de propiedades fisicoquímicas:</u> en este caso Ley de Raoult ("Raoult's Law"). Presionar Add:

🚱 🔜 Simulation Configuratic	n Wîzard	termenter of term
Property Packages - Introduction - Compounds • Property Packages • Flash Algorithm • System of Units	Select and Add the Property Packages that you want to use in yo flowsheet objects. Click "Next" to continue. Available Property Packages Chao-Seader Grayson-Streed Raoult's Law Lee-Kesler-Plöcker Extended UNIQUAC (Aqueous Electrolytes) Black Oil PC-SAFT (with Association Support) Perturbed Hard-Sphere-Chain (PHSC) Peng-Robinson w/ Wong-Sandler Mixing Rules (PRWS) Statistical Associating Fluid Theory (SAFT) Valderrama-Patel-Teja EOS (VPT) CAPE-OPEN Click here to get help on selecting the best Thermodynamic Mo	ur simulation. The first on the list will be used by default by all Added Property Packages Name Type Raoult's Law With the second seco
	Click here to learn which methods and correlations are being us	ed by the packages to calculate fluid properties. Next > Cancel

NEXT>

4- Elegir algoritmo de flash: en este caso "Nested Loop (VLE)":

🚱 🔜 Simulation Configuratio	ı Wizard
Flash Algorithm Introduction Compounds Property Packages Flash Algorithm System of Units 	The Flash Algorithm is the component responsible for determining the thermodynamic phases at equilibrium, their amounts (and the amounts of the compounds on these phases) at the various simulated process conditions. Select a Default Flash Algorithm for your simulation. If your system can show instabilities in the liquid phase (immiscible compounds), select an algorithm to predict the equilibrium with two liquid phases (VLLE). To calculate equilibrium including a solid phase, select the corresponding algorithm. For complex systems, use one of the two Gibbs Minimization algorithms. Click "Next" to continue.
	Default Flash Algorithm Nested Loops (VLE) Inside-Out (VLE) Inside-Out (VLE) Inside-Out (VLE) Gibbs Minimization (VLE) Gibbs Minimization (VLE) Nested Loops (SVLE - Eutectic Systems) Nested Loops (SVLE - Solid Solution Systems) Nested Loops (VLE - Immiscible Liquids) Algorithm Description Default Flash Algorithm, based on the Rachford-Rice VLE equations. Click here to learn more about the flash algorithms implemented in DWSIM.
	Next > Cancel

NEXT>

5- Elegir sistema de unidades: en este caso "SI":

🚱 🔜 Simulation Configuratio	on Wizard	ł	Respire Talan Balance and the A	
System of Units Introduction Compounds Property Packages 	Select the desired System perform other operations Click "Finish" to exit the v	of Units for your simulatic in the simulation setup wi vizard and start simulating	m. You can change the units of existing sy: ndow anytime after finishing this wizard.	stems, include new systems and
 Flash Algorithm System of Units 	System of Units SI		•	
b system of onics	Property	Unit	Property	Unit
	Temperature	К	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
	Delta-T	К.	Delta-P	Pa
	Length/Head	m	Energy Flow	kW
	Time	s	Volume	m3
	Molar Volume	m3/kmol	Area	m2
	Diameter/Thickness	mm	Force	N
	Acceleration	m2/s	Heat Transfer Coefficient	W/[m2.K]
	Molar Conc.	mol/m3	Mass Conc.	kg/m3 👻
				Finish Cancel

FINISH

DWSIM	And and a second s			10	0 - 8
Eile Egit Insert Iools Ubli	es Optimication Scripts Besults Bugins Windows Yew Help				- 5
	9 4 9 11	1000000000	and them.	_	
Howsheet Material Streams	speadoet · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	Flowsheet	Objects		
	· multi Y / N / A / A / A / A / A / A / A / A / A	Filer Lat	Absorption Column Model for sporous simulation of absorption columns	£	Filter Solds Filter m
			Adiabatic Compressor Model for an adiabatic (sentropic) compressor	oFS	Rowsheet Model for use a flowsheet b
			Adiabatic Expander Model for an adabatic (sentropic) expander	Ľ	Gas-Liquid Ruid phase i
		2	CAPE-OPEN Unit Operation Model for utilization of a CAPE-OPEN Unit Operation in the flowsheet	-1	Gibbs Read Colculates ch for a Material
		Ø	Centrifugal Pump Centrifugal Pump model	ø	Heat Excha Rigorous Hea
		£	Compound Separator Model for a hypothetical compound separation process	٠	Heater Sinple heater
			Continous Stirred Tank Reactor CSTR model, supports Kinetic and HetCat reactions	⇒	Material S Contains info flowing at sp
			Controller Block Logical block for controlling a variable in the flowsheet	٥	Onfice Plat Sizes or eval
		-1	Conversion Reactor Supports reactions defined by amounts of reactant converted as a function of	P	Piping Seg Defines a pip drop calculat
		•	Cooler Simple cooler model		Plug-Row Plug-Row Re Knetic and P
		p c	Distillation Column Rigorous model for simulation of distillation columns	vo	Python Sci Python Scrip
		R	Energy Recycle Block Logical block for Energy Streams	1 .	Reboiled A Rigorous rebo
Information			Energy Stream		Recycle B
3 20/10/2017 09:20:45 To	To view detailed results of the calculations in real time, enable console redirection and select a debug mode. You must restart DWSIM for the changes to take effect		Energy flow from/to Unit Operations	R	Block for cor Streams
💡 2 20/10/2017/09/20.45 Tp	Use the quick connection tool on the toolber to quickly connect objects by pressing the CTRL key and dragging the cursor from the first to the second object.		Equilibrium Reactor		Refluxed A
2 20/10/2017 09:20:45 Tp	Press F5 on any area inside the flowsheet to start a full calculation.	- 5	Supports equilibrium constant defined	1	Rigorous Ref
0 20/10/2017 09:20:45 To	Hold SHIFT during DWSIM initialization to reset the settings to their default values.	-	reactoria		
		•	10		,
Simulation Settings + 🛅 Solver + 🖃	🐑 👻 🤪 [20/10/2017 09:20:45 a.m.] To view detailed results of the calculations in real time, enable console redirection and select a debug mode. You must restart DWSIM for the changes to tak	effect.			
a 🛆 🕋 👩			ES 🙆 🔒 🕶	- 40 ·	09:20 a.m.
🥐 🖙 🖃 💙					0/10/2017

6- personalizar el sistema de unidades:

a-" Edit"/ "Simulation settings"/" Systems of units"/" Create New"

b- Cambiar "Temperature" a [ºC], "Pressure" a [atm], "Mass Flow Rate" a [Kg/h], "Molar Flow Rate" a [Kmol/h] y "Energy Flow" a [Kcal/h]

c- Close

- d- Volver al Flowsheet (pestaña del mismo nombre)
- 7- Armado del caso:
- a- Insertar una "Material Strem" (clickear y arrastrar desde la barra de herramientas)

b- Hacer doble click y editar como se visualiza:

General Info		
Object	Aire frio	
Status	Calculated (20/10/20)	17 09:32:18 a.m.)
Linked to		
Connections		
Upstream		-
Downstream		
Input Data Compoun	ds Phase Properties	Annotations
Flash Spec	Temperature and Pre	ssure (TP) 🔹
Temperature	25	C •
Pressure	1	atm 👻
Mass Flow	115,84	kg/h 👻
Molar Flow	4	kmol/h 🔹
Volumetric Flow	0,027182269	m3/s 🔹
Specific Enthalpy	0	kJ/kg 🔻
Specific Entropy	0	kJ/[kg.K] 👻
Phase Mole Fraction	1	Vapor Liquid
		Solid
Composition		
Basis	Mole Fractions	•
Solvent		-
Compound		Amount N
Air		1 E
Total: 1		
Property Package Sett	ings	
	D 10 (1)	-
Property Package	Raoutt's Law (1)	· .

c- Verificar convergencia o presionar F5



- d- Insertar un "Heater". Hacer doble-click
- e- Conectar la corriente creada antes y crear nuevas, una de materia y otra de energía.

Heater: HEAT-001		
General Info		
Object	HEAT-001	
Status	Not Calculated	
Linked to		
Connections		
Inlet Stream	Aire frio	
Outlet Stream		
Energy Stream		

f- Cambiar nombres de las nuevas corrientes por "Aire caliente" a la material y "Calor" a la de energía.

g- Editar el Heater

"Pressure drop" en 0, "Efficiency" en 100%, "Calculation Type" en "Heat Added/Removed", "Heating/Cooling" en 4000 [Kcal/h]. Debería quedar como en la figura:

Heater: HEAT-001	џ х
General Info	
Object	HEAT-001
Status	Calculated (01/01/0001 12:00:00 a.m.)
Linked to	
Connections	
Inlet Stream	Aire Frio 🔻 ≶ 📝
Outlet Stream	Aire Caliente 🔹 🖌
Energy Stream	Calor 🔻 🗾
Calculation Parameters	
Calculation Type	Heat Added/Removed
Pressure Drop	0 kPa 🔻
Efficiency (0-100%)	100
Outlet Temperature	173,13602 C -
Temperature Change	143,13602 K
Outlet Vapor Fraction	0
Heating/Cooling	4000 kcal/h 💌
Property Package Setting]5
Property Package	Raoult's Law (1) 🔹
Flash Algorithm	Default 🔻
Notes	
	• • • BIU# E = =
X 🖻 🛍	

Resultado:

Aire Frio	Temperature	30	С				Aire Caliente	Temperature	173 13602	C
Aire Frio	Pressure	1	atm				Aire Caliente	Drangura	110,10002	atm
Aire Frio	Molar Flow	4	kmol/h				Aire Caliente	Molar Flow		kmol/
					~					
			Airo Erio			Aire Celier	to			
			Alle Filo		HEAT-001	Alle Caller	ne			
				\Rightarrow						
				Calor						
					Calor Energy	Flow 4000 kcal/h				

Resultado manual: 170,8 ºC

Para visualizar los datos en el flowsheet.

- a-"Insert"/ "Property Table"
- b- Editar haciendo doble click
- c- Elegir la corriente y propiedades de interes
- d- Hacerlo para las 3 corrientes.

2) Intercambiadores de calor

Una corriente de gas de 30 Kg/hr cuya composición es de 80 % de metano, 15 % de etano y 5 % de propano (base molar) y 1 atm de presión, se enfría con aire desde 100 °C hasta 40 °C en un intercambiador en contracorriente. Para ello se emplea una corriente de aire frío cuyo flujo es de 100 Kg/hr, 1 atm de presión y una temperatura de 20 °C.

- a) Calcular la temperatura de salida de la corriente de aire
- b) Calcular el valor de (UA) y el Δ Tln



Repetir lo hecho en el punto 1) pero con los componentes "Methane", "Ethane", "Propane", " Nitrogen" y "Oxigen" con 2 "Material Streams"

aterial Stream: GNe			. 4 x	Vaterial Stream: Ae 👳		******	» џ
General Info				General Info			_
Object	GNe			Object	Ae		
Status	Calculated (01/01/00	01 12:00:00 a.m.)		Status	Calculated (01/01/00	01 12:00:00 a.m.)	V
Linked to				Linked to			
Connections				Connections			
Upstream		•) 🔊 🗌	Upstream		•] 📝
Downstream	HE-002	•) 🖉	Downstream	HE-002	•] 📝
Input Data Compour	nds Phase Properties	Annotations		Input Data Compound	ds Phase Properties	Annotations	
Flash Spec	Temperature and Pre	essure (TP)	•	Flash Spec	Temperature and Pre	ssure (TP)	•
Temperature	100	С	-	Temperature	20	С	-
Pressure	1	atm	•	Pressure	1	atm	•
Mass Flow	30	kg/h	•	Mass Flow	100	kg/h	•
Molar Flow	1,5345465	kmol/h	•	Molar Flow	3,4661024	kmol/h	•
Volumetric Flow	0,013051319	m3/s	•	Volumetric Flow	0,023159127	m3/s	•
Specific Enthalpy	163,64889	kJ/kg	•	Specific Enthalpy	-5,0575592	kJ/kg	•
Specific Entropy	1,1339979	kJ/[kg.K]	•	Specific Entropy	0,10611742	kJ/[kg.K]	•
Phase Mole Fraction	1	Vapor	iquid	Phase Mole Fraction	1	🎯 Vapor 💿 l	biupi.
		Solid				Solid	
Composition				Composition			1
Basis	Mole Fractions	-		Basis	Mole Fractions	•	J
Solvent				Solvent		Ψ	
Compound		Amount	N	Compound		Amount	N
Methane		0,8	E	Methane		0	E
Ethane		0,15		Ethane		0	С
Propane		0,05		Propane		0	
Nitrogen		0	~	Nitrogen		0,79	
Oxygen		0		Oxygen		0,21	
				Total: 1			
Total: 1							

y un "Heat Exchanger" configurandolo como sigue:

"Calculation Type" a "Cold Fluid Outlet Temperature", "Flow Direction" a "Counter Current", caidas de presión 0 em ambos casos, "Hot Fluid Outlet temperature" a 40 [ºC], "Heat Exchange Area" a 1 [m²]



3) Torre de enfriamiento

Una corriente de aire de 1000 Kg/hr a 27 °C, 1 atm de presión con una humedad relativa del 40 % ingresa a una torre de enfriamiento de la que sale totalmente saturado y a una temperatura de 30 °C para enfriar una corriente de agua de enfriamiento cuya temperatura es de 50 °C. El sistema está en equilibrio.

- a) Calcular la humedad absoluta de la corriente de aire que sale.
- b) Calcular la cantidad de agua de enfriamiento que se evapora.
- c) Calcular la cantidad de agua que puede enfriarse.

Como lo hecho en los casos anteriores se inicia un nuevo caso con aire y agua como componentes.

Antes de armar el caso necesitamos saber la composición del aire húmedo. Esto se puede hacer a mano o dentro del simulador.

En el 2º caso se agrega una corriente material ("Agua")

"Flash Spec" a "Temperature and Vapor Fraction (TVF)

"Temperature" a 27 [ºC] (el aire que ingresa)

"Phase Mole Fraction" a "0,000" "Vapor"

Composición:

Aire: 0,000, Agua: 1,000

En estas condiciones la presión calculada será la de saturación del agua a 27 [ºC] y 1 [atm]

aterial Stream: Agua			× p	×
General Info			_	1
Object	Agua			
Status	Calculated (20/10)	/2017 06:54:10 p.m.) 🔤	2	
Linked to				
Connections				
Upstream			P	
Downstream		▼ [2	
nput Data Compound	ds Phase Propert	ies Annotations	_	
Flash Spec	Temperature and	Vapor Fraction (TV 🔻		
Temperature	27,000000	C -)	
Pressure	0,035259	atm 🔻		
Mass Flow	3.600,000000	kg/h 🔻		
Molar Flow	199,833472	kmol/h 👻		
Volumetric Flow	0,000938	m3/s 🔻		
Specific Enthalpy	-2.432,808261	kJ/kg 👻)	
Specific Entropy	-6,549059	kJ/[kg.K] 👻)	
Phase Mole Fraction	0,000000	💿 Vapor 💿 Liquid	1	1
.		Solid		
Composition	Mole Fractions	-		
Calvert	Mole Hactions	•		
Solvent		Ť		
		• · ·		
Compound		Amount N		
Air Water		Amount N 0,000000		



Con estos datos calcularemos la presión de vapor del agua, y las fracciones molares de agua y aire.

Para ello, yendo a la pestaña "Spreadsheet"

	Α	В
1		
2		
3		
4		
5		
6		
7		
8		
9		
10	Psat	0,035258
11	HR	40
12	Pv	0,014103
13	x agua	0,014103
14	x aire	0,985896

En la celda B10 se importa la presión de la corriente "Agua" (Pr de sat) en atm.

En la celda B11 irá la humedad relativa (40 %)

En la celda B12 la Presión de vapor como Psat*HR/100 o	"=B10*B11/100"
En la celda B13 la fracción molar del agua como Pv/P o	"=B12/1"
En la celda B14 la fracción molar de aire como 1-x _{AGUA} o	"=1-B13"

Estos dos ultimos datos son los que se usarán para la composición del aire de entrada. El resto de los datos se toman del problema, excepto el flujo de agua que al ser indeterminado se le asignará un número provisorio, ejemplo 1000 [Kg/hr].

Al armar el caso como se ilustra se nota que las temperaturas de salida de la torre de enfriamiento (asumida como de una etapa única) no corresponde con los 30 °C requeridos.

Esto se debe a que el flujo no es el correcto. En efecto vemos que si modificamos, las temperaturas también cambian.

Flujo de Agua caliente [Kg/h]	Temperatura de salida [ºC]
1000	33,810
900	33,093
800	32,293
700	31,393
600	30,368

Como se aprecia, de esta manera se puede llegar "a mano" la solución. No obstante, el simulador cuenta con una herramienta de ajuste que hace precisamente eso pero en forma automática, es el "Controller Block" o ajuste de control que se agrega y configura como se ilustra:

Controller Block: ADJ	008		џ	×		
General Info						
Object	ADJ-008		 Image: A start of the start of			
Linked Objects						
Manipulated Object	AC) Agua Caliente		•	•		
Property	Mass Flow 🔻					
Value	600,000000 kg/h					
Controlled Object	AE) Agua Fría		•	•		
Property	Temperature		•	•		
Value	30,367817 (+0,3678) C					
Set-Point (Controlled Tolerance (Maximum	Property) 3(Error) (Open Adjust Control Panel	0.000000 C				
Notes □ □ T ▼ 1 X № 10	• • • B I U	\$ E =				

De este modo (luego de seleccionar "Solve Globally" y presionado F5 el caso queda resuelto. Los datos se aprecian en la figura siguiente.

Cabe aclarar, que aprovechanmdo la misma spreadsheet se calculo la humedad absoluta del aire de salida y la cantidad de agua evaporada como diferencia entre el flujo masico de agua que entra y el que sale



4) Reactor de conversión

Sea la siguiente reacción:

$$CO_{(g)} + H_2O_{(g)} \rightarrow CO_{2(g)} + H_{2(g)}$$

a) Calcular el calor (en Kcal) a entregar o retirar a 1 mol de CO si los reactantes entran a 600 ºF y los productos salen a 600 ºF.

b) Si la reacción es adiabática e ingresa a 600 ºF ¿a qué temperatura sale?

El caso se arma del modo habitual incorporando como componentes "Carbon monoxide", "water", "Carbon dioxide" y "Hydrogen" y "Peng Robinson" como base (apto para gases).

La reacción se incorpora de la siguiente manera:

a) "Tools"/"Reactions Manager"/"+"/"Conversion"

b) completar el fomulario como se indica:

Edit Conversion Reaction				—					
Identification									
Name Reacción									
Description									
Components/Stoichiometry									
Name	Molar Weight	Include	BC	Stoich. Coeff.					
Carbon monoxide	28,01	V	V	-1					
Water	18,015	V		-1					
Carbon dioxide	44,0095	V		1					
Hydrogen	2,01588	V		1					
Stoichiometry OK Balance	Stoichiometry OK Balance Heat of Reaction (kJ/kmol_BC) (25 °C) -41166								
Equation CO + HOH> OCO + H2									
Conversion Reaction Parameters									
Base Comp Carbon monoxide			Phase Mi	xture 🔻					
Conversion [%, f(T)] = 100				T in K					
Use '.' as the decimal separator on the conversi	on expression.		Cancel	ОК					

Se arma el caso especificando la entrada como:

Intrada Calculated (20/10/201 RC-001 s Phase Properties Temperature and Pres	I7 07:46:11 p.m.) ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓			
Entrada Calculated (20/10/201 RC-001 s Phase Properties Temperature and Pres	I7 07:46:11 p.m.) ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓			
Calculated (20/10/201 RC-001 8 Phase Properties Temperature and Pres	17 07:46:11 p.m.) ▼ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓ ✓			
RC-001 s Phase Properties Temperature and Pres	Annotations			
RC-001 s Phase Properties Temperature and Pres	Annotations			
RC-001 s Phase Properties Temperature and Pres	Annotations			
RC-001 s Phase Properties Temperature and Pres	Annotations			
s Phase Properties Temperature and Pres	Annotations			
Temperature and Pres				
	ssure (TP) 🔹			
315,55556	C -			
1	atm 🔻			
0,046025	kg/h 👻			
2	mol/h 👻			
2,6819281E-05	m3/s 🔻			
405,14477	kJ/kg 👻			
1,2207864	kJ/[kg.K] 🔻			
1 💿 Vapor 🕥 Liquid				
	Solid			
Mole Fractions	•			
	*			
1	Amount N			
	0,5 E			
	0,5 C			
	0,046025 2 2,6819281E-05 405,14477 1,2207864 1			



Al armar el caso insertar un "Conversion Reactor", se lo conecta a la entrada creada y se le agreg
las dos salidas materiales y la corriente energética. Finalmente se lo configura como isotérmico:

Conversion Reactor: RC-	001 ·····
General Info	
Object	RC-001
Status	Calculated (20/10/2017 07:46:11 p.m.)
Linked to	
Connections	
Inlet Stream	Entrada 🔻 🌾
Outlet Stream 1	Salida 🔹 🗸
Outlet Stream 2	L 🔹 🛃
Energy Stream	Calor 🔻 🌾
Calculation Parameters Parameters	
Reaction Set	Default Set
Calculation Mode	Isothermic 🔹
Minimization Method	·
Outlet Temperature	25 C 👻
Pressure Drop	0 kPa 💌
Property Package Set	tings
Property Package	Peng-Robinson (PR) (1) 🔹
Flash Algorithm	Default 💌
Results General Reactions Co	nversions
Property	Value
Delta-T	
Heat Load	-9.3092714 kcal/h
Notes	
🔲 🖿 T 🕶 🖅 🖛	■ ▼ B I U # E = 3
X B 🗈	

El resultado es:

Entrada	Temperature	315,55556	C		Salida	Temperature	315,55556	С
Entrada	Pressure	1	atm		Salida	Pressure	1	atm
Entrada	Molar Flow	2	mol/h		Salida	Molar Flow	1,9999835	mol/h
Entrada	Molar Fraction (Mixture) / Carbon monoxide	0,5		\sim	Salida	Molar Fraction (Mixture) / Carbon dioxide	0,5	
Entrada	Molar Fraction (Mixture) / Water	0,5	(inci	Calida	Salida	Molar Fraction (Mixture) / Hydrogen	0,5	
			⇒—		Calor I	Energy Flow -9,3092714 kcal/h		
		Ca	lor	L				

Valor manual: 8,935 [Kcal/hr] que es el correspondiente a 1 mol de CO

Para el punto b se cambia la especificación del reactor como "Adiabatic" dando:

naua	Temperature	315,55556	С	Salida	a Temperature	794,33564	С
intrada	Pressure	1	atm	Salida	a Pressure	1	atm
ntrada	Molar Flow	2	mol/h	Salida	a Molar Flow	1,9999835	mol/h
ntrada	Molar Fraction (Mixture) / Carbon monoxide	0,5		Salida	Molar Fraction (Mixture) / Carbon dioxide	0,5	
Entrada	Molar Fraction (Mixture) / Water	0,5		Salida	a Molar Fraction (Mixture) / Hydrogen	0,5	
		Ca	ilor	Calor	Energy Flow 0 kosl/h		

Valor manual: 753 [ºC]

Los errores obtenidos en ambos casos son entendibles dado que en el cálculo manual se asumieron lineales las correlaciones para las capacidades caloríficas.

5) Operaciones de usuario con excel.

El simulador dwsim permite crear operaciones de usuario programables en lenguaje Phyton pero existe una opción más sencilla y rápida de implementar: planillas de cálculo.

En el ejemplo de psicrometría vimos que para cada corriente de aire húmedo hay que implementar de nuevo todas las ecuaciones. Veremos cómo hacerlo con una planilla de cálculo para una sóla corriente pero que puede escalarse para muchas casi sin esfuerzo adicional.

Sea por ejemplo ya hecho: una corriente de 1000 [kg/hr] de aire a 27 [ºC] y 40 % de h.

Se inicia un caso con aire y agua usando la ley de Raoult como paquete fisicoquímico. Se incorpora una corriente de aire seco de las siguientes características:

formation Connections					
General Info					
Object	Aire seco				
Status	Calculated (29/02/2024 10:00:14 a.m.)				
Linked to					
roperty Package Settings					
Property Package	Raoult's Law (1)	•			
nput Data Results Ann	otations Dynamics	Floating Tables			
Stream Conditions Comp	oound Amounts				
Flash Spec	emperature and Pressu	re (TP) 🔻			
Flash Spec T Temperature	emperature and Pressu 27	re (TP)			
Rash Spec T Temperature Pressure	emperature and Pressu 27 1	re (TP) C atm			
Flash Spec T Temperature Pressure Mass Flow	emperature and Pressu 27 1 1	re (TP) C atm kg/h			
Flash Spec T Temperature Pressure Mass Flow Molar Flow	emperature and Pressu 27 1 1 0.0345304	re (TP)			
Flash Spec T Temperature Pressure Mass Flow Molar Flow Volumetric Flow Notar Flow	emperature and Pressu 27) 1 0.0345304 0.000236228	re (TP)			
Flash Spec T Temperature Pressure Mass Flow Molar Flow Volumetric Flow Specific Enthalpy	emperature and Pressu 27 1 0.0345304 0.000236228 0.478411	re (TP)			
Pash Spec T Temperature Pressure Mass Row Molar Row Volumetric Row Specific Enthalpy Specific Enthalpy Specific Entrapy	emperature and Pressu 27 1 0.0345304 0.000236228 0.478411 0.00669569	re (TP)			
Plash Spec T Temperature Pressure Mass Flow Molar Flow Volumetric Flow Specific Enthalpy Specific Enthalpy Specific Enthalpy Volumetric Flow Specific Enthalpy	emperature and Pressu 27 1 0.0345304 0.000236228 0.478411 0.00669569 ion 1	re (TP)			

Alle seco (IVI	ateriai Strean	y			······ + ×				
Information	Connections]							
General In	fo								
Object	Object Status		Aire seco Calculated (29/02/2024 10:00:14 a.m.)						
Status									
Linked to									
Property Pac	Property Package Settings								
Property Pa	Property Package Raoult's Law (1)								
Input Data	Input Data Results Annotations Dynamics Floating Tables								
Stream Cor	nditions Com	pound Amo	ounts						
Basis	Mole Fractio	ons			•				
Solvent									
Compou	ind	Amount			Total: 1				
Water				0	Normalize				
Air				1	Equalize				
					Clear				
					Accest Changes				
					Acceptionanges				

Y una de agua en su punto de saturación:

romation	Connections		
General In	fo		
Object		Allx	
Status		Calculated (29/02/202	4 10:04:57 a.m.) 🛛 🔽
Linked to			
operty Pa	ckage Settings	3	
roperty Pa	ickage	Raoult's Law (1)	-
put Data	Results Ann	notations Dynamics	Floating Tables
Stream Co	nditions Com	pound Amounts	
Flash Spe	ec [Cemperature and Vapor	Fraction (TVF) 🔹
Temperat	ure	25	C •
Property into			
riessure		0.031321	atm 🔻
Mass Flor	~	0.031321	atm 👻 kg/h 👻
Mass Flor Molar Flor	w I	0.031321	atm kg/h kmol/h
Mass Flor Molar Flor Volumetri	w w c Flow	0.031321 1 0.0555084 0.0120434	atm kg/h kmol/h m3/s
Mass Flor Molar Flor Volumetri Specific F	w c Flow	0.031321 1 0.0555084 0.0120434 0 0	atm
Mass Flor Molar Flor Volumetri Specific I Specific I	w C Flow C Flore C Flo	0.031321 1 0.0555084 0.0120434 0 1 1 59838	atm • kg/h • kmol/h • m3/s • kcal/kg • kJ/[kg,K] •
Mass Flor Molar Flor Volumetri Specific I Specific I Vapor Ph	w C Flow C Flore C Fl	0.031321 0.0555084 0.0120434 0 1.59838 Non 1	atm • kg/h • kmol/h • m3/s • kcal/kg • kd/[kg,K] •
Mass Flor Molar Flor Volumetri Specific I Specific I Vapor Ph	w c Flow C Enthalpy C Entropy C ase Mole Frac	0.031321 0.0555084 0.0120434 0 1.59838 tion 1	atm • kg/h • kmol/h • m3/s • kcal/kg • kd/[kg,K] •

Aux (Material S	tream) 👓			p
Information C	onnections			
General Info				
Object		Aux		
Status		Calculated (29/	02/2024 1	0:04:57 a.m.) 🔽
Linked to				
Property Packa	age Settings	-		
Property Pack	age	Raoult's Law (1)	•
Input Data R	esults Ann	otations Dyna	amics Floa	ating Tables
Stream Condi	tions Com	pound Amounts		
Basis	Mole Fractio	ns		-
Solvent				v
Compound	ł	Amount		Total: 1
Water			1	Normalize
Air			0	Equaliza
				Equalize
				Clear
				Accept Changes

Mediante un bloque de especificación transferir el valor de temperatura de la corriente de aire seco a la aux:

⊨>	-·-· S ·-·-	
Aire seco	SPEC-01	Aux

SPEC-01 (Specificat	tion Block) 🛛 🕂 🗙
General Info	
Object	SPEC-01
Linked Objects	
Source Object	Aire seco 👻
Source Property	Temperature
Source Value	27 C
Target Object	aux1 💌
Target Property	Temperature
Target Value	27 C
Dependency Expre	ssion
Y = f(X) = X	
Y = 27 C	
Y = Target Variable	e, X = Source Variable
Notes	
🗉 🗋 T 🔹	Æ ▾ ■ ▾ B I U # E ≡ ∃
X B 🗈	

Entonces, en caso de cambiar la temperatura del aire también lo hará la del agua con lo que el cálculo de la presión de saturación también se actualizará.

De la paleta de operaciones de usuario se agrega una hoja de cálculo:



Se conecta las dos entradas anteriores y una de salida nueva.



En File Path hay 3 botones, uno para buscar una planilla (el formato es muy específico como se verá después), otro para editarla y el tercero para crean una planilla nueva.

EXL-01 (Spreadsheet)		p	×
General Info			
Object	EXL-01		
Status	Not Calculated	~	
Linked to			
Connections			
Inlet Stream 1	Aire seco 🔹	<u>ه</u>	
Inlet Stream 2		<u>ه</u>	
Inlet Stream 3		چ	
Inlet Stream 4	•	<u>ک</u>	
Outlet Stream 1	Aire húmedo 💌	<u>ه</u>	
Outlet Stream 2		<u>چ</u>	
Outlet Stream 3		<u>چ</u>	
Outlet Stream 4		<u>ه</u>	
Inlet Energy Stream	· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	چ 🛃	
Spreadsheet			
File Path		20)
Variables			
Input Output			
Variable	Value Units		

La hoja de cálculo contiene 3 hojas, una de entrada, otra de salida y una terceraa para los cálculos:

En la primer hoja (Input) agregamos dos parámetros HR (humedad relativa) y el flujo total deseado como se indica:

-2	A	В	С	D	E	F	G	Н	1	J	
1	Input stream	ns to Unit	t								
2	Do not modify structu	re or name of t	his sheet!								
3											
4	Conditions	Stream 1	Stream 2	Stream 3	Stream 4		Parameter	Value	Unit	Annotation	
5	Name	Aire seco	aux1	0 			HR	40	%	Humedad relativa	
6	Temperature [K]	300.15	300.15				Flujo Total	1000	kg/hr	Flujo total	
7	Pressure [Pa]	101325	3572.58068	1	j.		10		10		
8	Enthalpy [KJ/Kg]	2.00300887	-2432.76686)						
9											
10											
11	Components	[mol/s]	[mol/s]	[mol/s]	[mol/s]						
12	Water	0	55.5084351	1							
13	Air	0.00959177	0								
14											
45											

En la hoja Calculations se escribe el modelo:

	A	В	С	D	E	F	
1							
2	Humedad relativa	=Input!H5					
3	P sat	=Input!C7					
4	PT	=Output!B7					
5	PV	=B2*B3/100					
6	HA	=B5/(B4-B3)		19 (p. 8.) (
7				PM			
8	Water	=B6*B9	=B8/SUMA(B8:B9)	18.015	=B8	=B8*\$B\$14/3.6	
9	Air	1	=1-C8	28.96	=B9	=B9*\$B\$14/3.6	
10		=SUMA(B8:B9)		=SUMAPRODUCTO(C8:C9,D8:D9)		=SUMA(F8:F9)	
11							
12	Total salida	=B10					
13	Toata deseado	=Input!H6/D10					
14		=B13/B12					
15							

	A	В	С	D	E	F	
1							
2	Humedad relativa	40					
3	P sat	3572.580683					
4	PT	101325					
5	PV	1429.032273					
6	HA	0.014618894					
7	1.1			PM			
8	Water	0.014618894	0.014408261	18.015	0.014618894	0.138957465	
9	Air	1	0.985591739	28.96	1	9.505333531	
10		1.014618894		28.802		9.644290996	
11							
12	Total salida	1.014618894					
13	Toata deseado	34.71944758					
14		34.21920071					

Por último en la hoja de salida (Output) se toman los valores de flujo por componente de la columna F de los cálculos:

4	A	В	С	D	E	F	G	Н	1	J
2	Do not modify structure or name of this sheet!									
3										
4	Conditions	Stream 1	Stream 2	Stream 3	Stream 4		Parameter	Value	Unit	Annotation
5	Name	Aire humedo								
6	Temperature [K]	=Input!B6		=Input!D6	=Input!E6					
7	Pressure [Pa]	=Input!B7	=Input!C7	=Input!D7	=Input!E7					
8										
9										
10										
11	Components	[mol/s]	[mol/s]	[mol/s]	[mol/s]					
12	Water	=Calculations!F8								
13	Air	=Calculations!F9								
14										

1	A	В	С	D	E	F	G	Н	1	J	
2	Do not modify structure or name of this sheet!	1									
3	and the second se										
4	Conditions	Stream 1	Stream 2	Stream 3	Stream 4		Parameter	Value	Unit	Annotation	
5	Name	Aire humedo							-		
6	Temperature [K]	300.15		0	0						
7	Pressure [Pa]	101325	3572.580683	0	0						
8	and the second										
9											
10											
11	Components	[mol/s]	[mol/s]	[mol/s]	[mol/s]						
12	Water	0.138957465			-						
13	Air	9.505333531									
14											
15											

La planilla se cierra y guarda, para ejecutar la simulación se presiona F5. Del objeto spreadsheet se setean los valores deseados, HR=40 y flujo total =1000:

Aire seco				1					Aire humedo	
Aire seco	Temperature	27	c						Aire húmedo	Temperature
Aire seco	Pressure	1	atm	-					Aire húmedo	Pressure
Aire seco	Mass Flow	1	ka/h						Aire húmedo	Mass Flow
Aire seco	Molar Flow	0.0345304	kmol/h	⇒	_			\rightarrow	Aire húmedo	Molar Flow
					SPR			In house a	Aire húmedo	Molar Fraction (Mixture) / Water
				AllEseco (S) (m)-	EXL-0	1	-	arenumeuo	Aire húmedo	Molar Fraction (Mixture) / Air
Au	×			SPEC-01 Aux					Aire húmedo	Mass Flow (Mixture) / Air
	v Temperatur	e 2	7 C		0	-		-		
Au	~ remperator									
Au	x Pressure	0.0352586	atm		Op use					
Au	x Pressure	0.0352586	atm		EXL-01	In_HR	40	1		

Para ejemplificar la practicidad haremos lo mismo para una corriente de 300 [kg/hr] de aire seco de 40 [ºC] para llevarlo a 60 % de humedad relativa. Repetimos los pasos anteriores para una nueva corriente de aire seco y otra auxiliar.



Prof. Titular.: Ph.D. Néstor Hugo Rodríguez Aux 1°: Ing. Mabel Andrea Dupuy 27 C 1 atm 1000 kg/h 34.7194 kmol/h

0.0144083

0.985592

990.988

EVI 02 (Spreadsheet)		<u>е п.</u>
General Info		· * ·
Object	EXL-02	
Status	Calculated (29/02/2024 10:43:36 a.m.)	
Linked to		
Connections		
Inlet Stream 1	Aire seco2 🔹	
Inlet Stream 2	Aux2 🔻	
Inlet Stream 3	· · · · ·	
Inlet Stream 4		
Outlet Stream 1	Aire humedo 2 💌 🗾	
Outlet Stream 2		
Outlet Stream 3		
Outlet Stream 4		
Inlat Energy Stream		
mer Energy Stream	· · · · ·	
Spreadsheet		
File Path M:\grado\d	wsim\prueba-modelo.xlsx 💫 🗾	
Variables		
Input Output		
Variable	Value Units	
HR	60 %	
Flujo Total	500 kg/hr	

Se agrega otra operación de usuario y se vincula a la misma spreadsheet:

Se ajusta los datos (HR=60 y flujo=300). Al presionar F5 se actualiza el cálculo:



Aire humedo			
Aire húmedo	Temperature	27	C
Aire húmedo	Pressure	1	atm
Aire húmedo	Mass Flow	1000	kg/h
Aire húmedo	Molar Flow	34.7194	km ol/h
Aire húmedo	Molar Fraction (Mixture) / Water	0.0144083	
Aire húmedo	Molar Fraction (Mixture) / Air	0.985592	
Aire húmedo	Mass Flow (Mixture) / Air	990.988	kg/h

Aire humedo 2				
Aire humedo 2	Temperature	40	с	
Aire humedo 2	Pressure	1	atm	
Aire humedo 2	Mass Flow	300	kg/h	
Aire humedo 2	Molar Flow	10.5388	kmol/h	
Aire humedo 2	Molar Fraction (Mixture) / Water	0.0451142		
Aire humedo 2	Molar Fraction (Mixture) / Air	0.954886		
Aire humedo 2	Mass Flow (Mixture) / Air	291.435	kg/h	