

Integración IV

Módulos de DWSIM (II)

Torres de destilación

Shortcut, Rigurosa y ChemSep

2020

Profesor: Dr. Nicolás J. Scenna

JTP: Dr. Néstor H. Rodríguez

Aux. 1ra: Dr. Juan I. Manassaldi

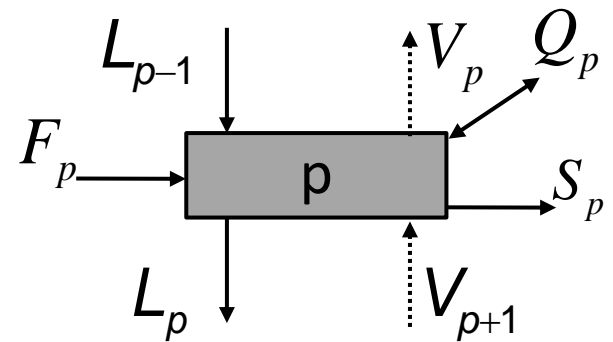
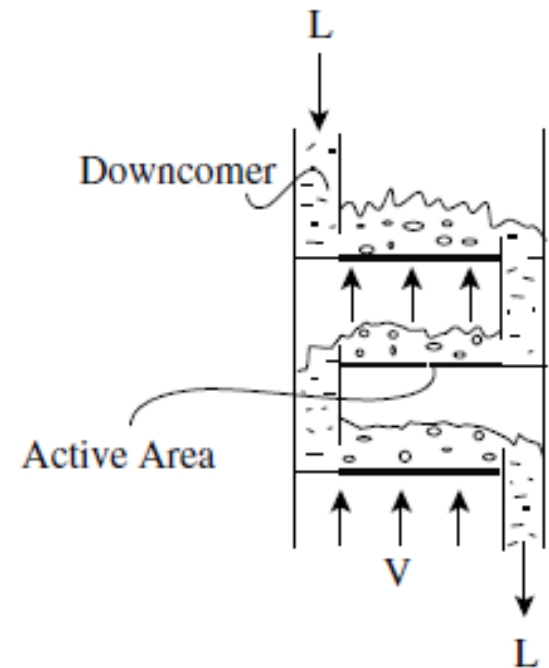
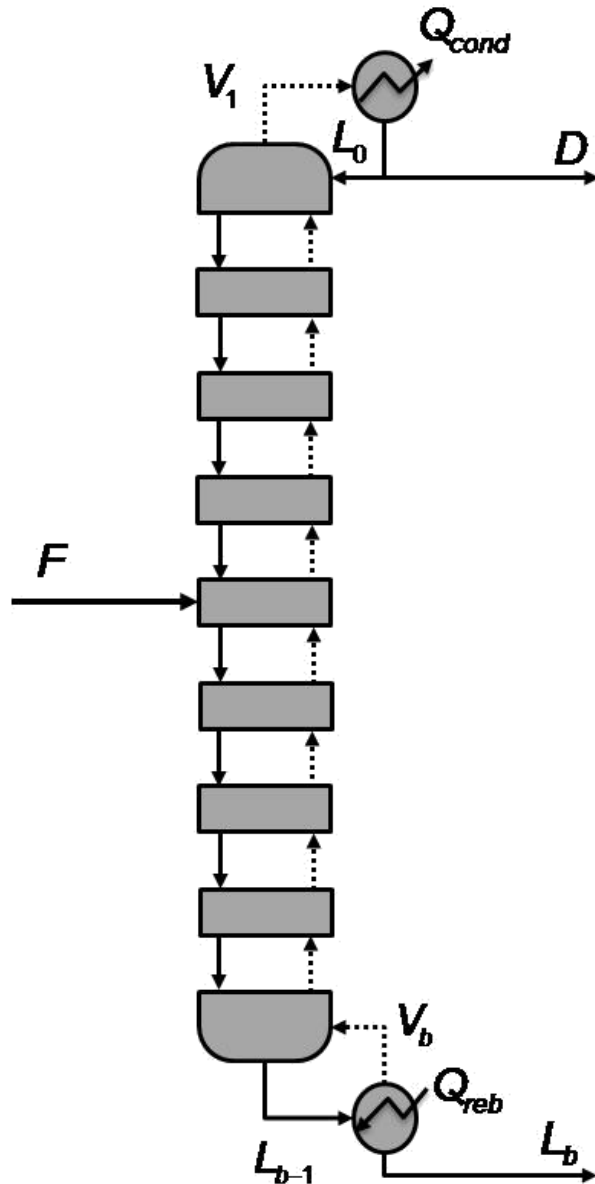
Integración IV

Modelado matemático de un columna de
destilación simple

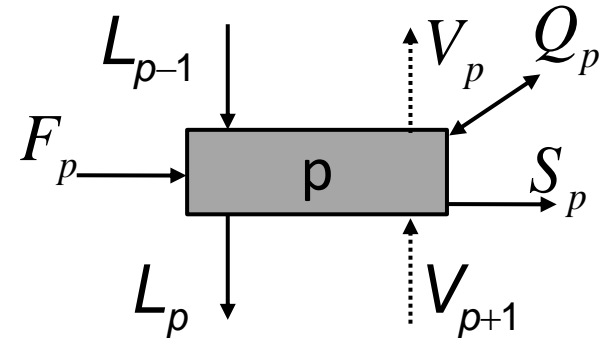
2020

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

Columna de Destilación simple (con condensador total)



Etapa ideal de equilibrio



Balances de Materia y Energía

$$F_p x_f^i + L_{p-1} x_{p-1}^i + V_{p+1} y_{p+1}^i = V_p y_p^i + (L_p + S_p) x_p^i \quad ; \forall i$$

$$F_p h_f + L_{p-1} h_{p-1} + V_{p+1} H_{p+1} + Q_p^{in} = V_p H_p + (L_p + S_p) h_p + Q_p^{out}$$

$$\sum_i x_p^i = 1$$

$$\sum_i y_p^i = 1$$

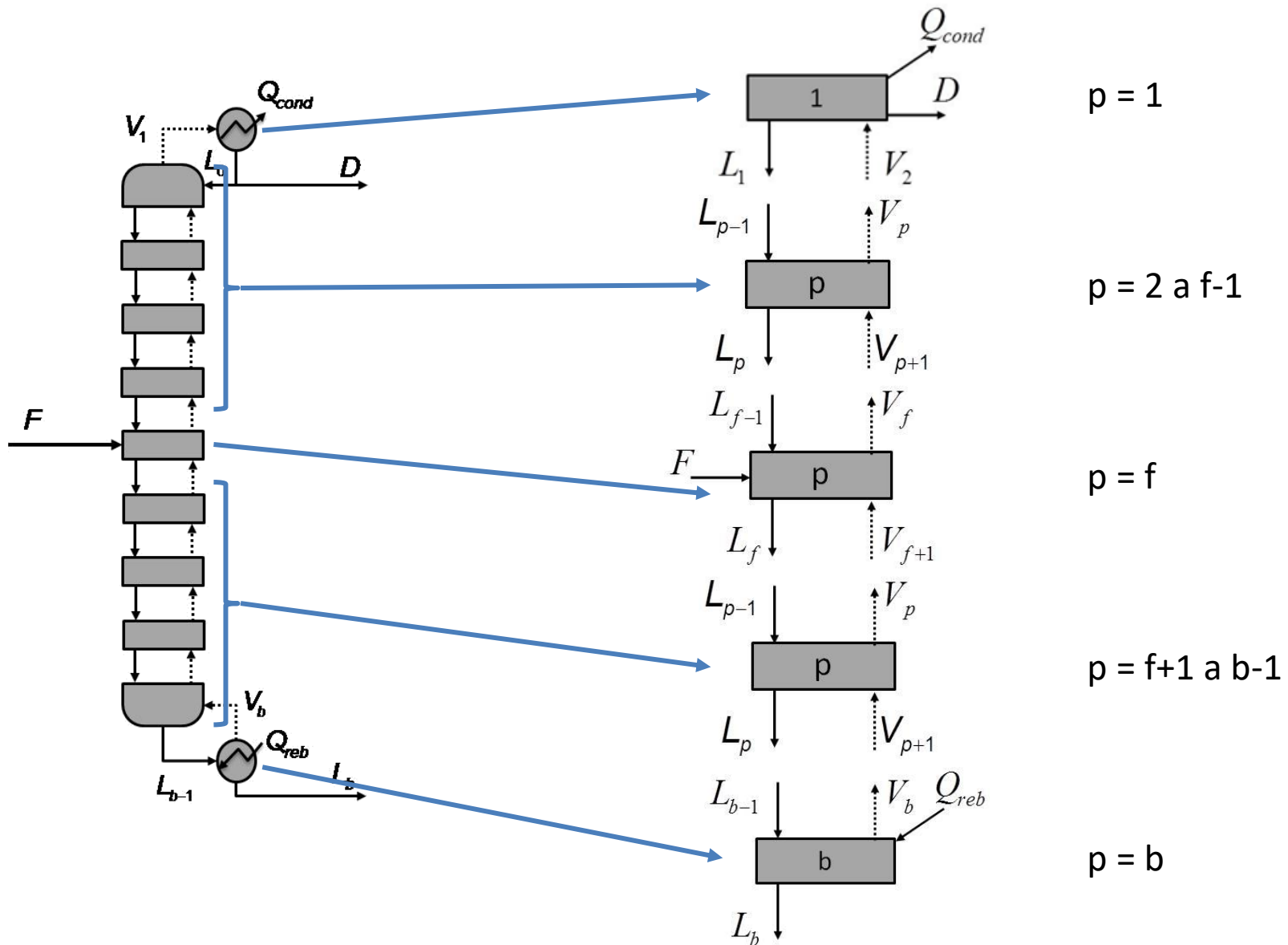
Modelo fisicoquímico

$$h_p = f(x_p, T_p, P_p) \quad H_p = f(y_p, T_p, P_p)$$

$$y_p^i = K_p^i x_p^i \quad \forall i \quad K_p^i = f(x_p, y_p, T_p, P_p) \quad \forall i$$

MESH
equations

Columna de destilación a partir etapas de equilibrio



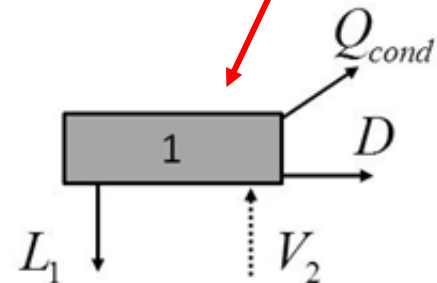
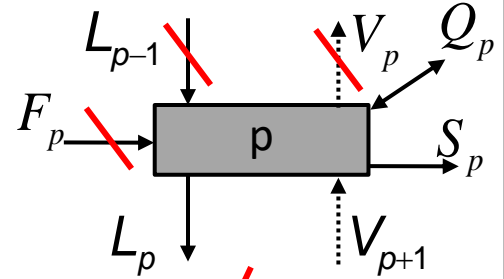
Condensador

$$\cancel{F_p} x_f^i + \cancel{L_{p-1}} x_{p-1}^i + V_{p+1} y_{p+1}^i = \cancel{V_p} y_p^i + (L_p + S_p) x_p^i ; \forall i$$

$$\cancel{F_p} h_f + \cancel{L_{p-1}} h_{p-1} + V_{p+1} H_{p+1} + \cancel{Q_p^{in}} = \cancel{V_p} H_p + (L_p + S_p) h_p + Q_p^{out}$$

$$V_2 y_2^i = (L_1 + D) x_1^i ; \forall i$$

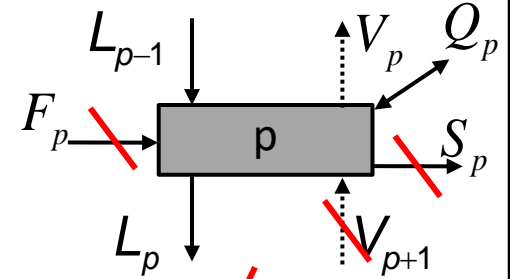
$$V_2 H_2 = (L_1 + D) h_1 + Q_{cond}$$



Rehervidor

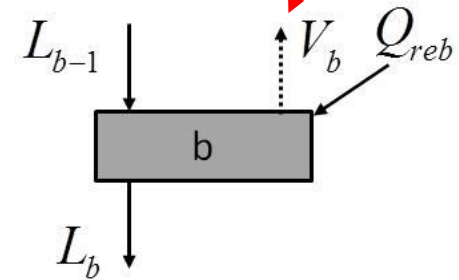
$$\cancel{F_p} x_f^i + L_{p-1} x_{p-1}^i + \cancel{V_{p+1}} y_{p+1}^i = V_p y_p^i + (L_p + \cancel{S_p}) x_p^i ; \forall i$$

$$\cancel{F_p} h_f + L_{p-1} h_{p-1} + \cancel{V_{p+1}} H_{p+1} + Q_p^{in} = V_p H_p + (L_p + \cancel{S_p}) h_p + \cancel{Q_p^{out}}$$



$$L_{b-1} x_{b-1}^i = V_b y_b^i + L_b x_b^i ; \forall i$$

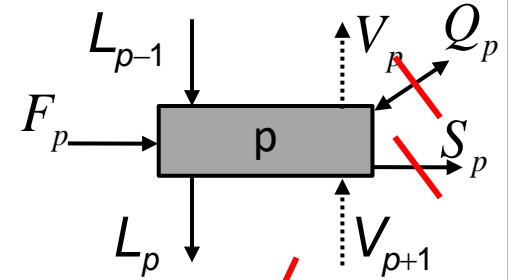
$$L_{b-1} h_{b-1} + Q_{reb} = V_b H_b + L_b h_b$$



Plato de Alimentación

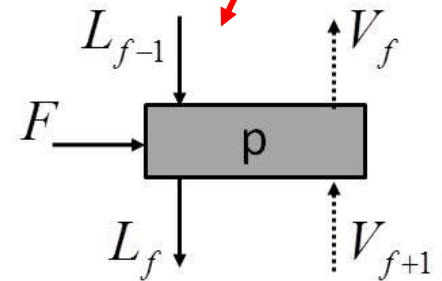
$$F_p x_f^i + L_{p-1} x_{p-1}^i + V_{p+1} y_{p+1}^i = V_p y_p^i + (L_p + \cancel{S_p}) x_p^i ; \forall i$$

$$F_p h_f + L_{p-1} h_{p-1} + V_{p+1} H_{p+1} + \cancel{Q_p^{in}} = V_p H_p + (L_p + \cancel{S_p}) h_p + \cancel{Q_p^{out}}$$



$$F x_{feed}^i + L_{f-1} x_{f-1}^i + V_{f+1} y_{f+1}^i = V_f y_f^i + L_f x_f^i ; \forall i$$

$$F h_{feed} + L_{f-1} h_{f-1} + V_{f+1} H_{f+1} = V_f H_f + L_f h_f$$



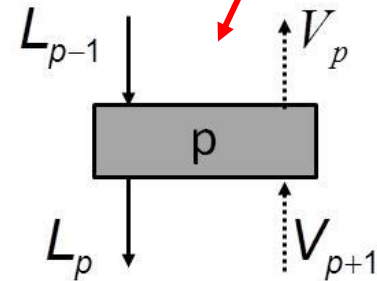
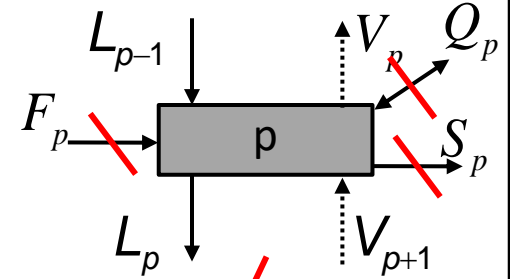
Platos intermedios

$$\cancel{F_p} x_f^i + L_{p-1} x_{p-1}^i + V_{p+1} y_{p+1}^i = V_p y_p^i + (L_p + \cancel{S_p}) x_p^i ; \forall i$$

$$\cancel{F_p} h_f + L_{p-1} h_{p-1} + V_{p+1} H_{p+1} + \cancel{Q_p^{in}} = V_p H_p + (L_p + \cancel{S_p}) h_p + \cancel{Q_p^{out}}$$

$$L_{p-1} x_{p-1}^i + V_{p+1} y_{p+1}^i = V_p y_p^i + L_p x_p^i ; \forall i$$

$$L_{p-1} h_{p-1} + V_{p+1} H_{p+1} = V_p H_p + L_p h_p$$



Modelo final para b etapas y n componentes

$$V_2 y_2^i = (L_1 + D) x_1^i \quad \forall i$$

$$V_2 H_2 = (L_1 + D) h_1 + Q_{cond}$$

$$L_{b-1} x_{b-1}^i = V_b y_b^i + L_b x_b^i \quad \forall i$$

$$L_{b-1} h_{b-1} + Q_{reb} = V_b H_b + L_b h_b$$

$$F x_{feed}^i + L_{f-1} x_{f-1}^i + V_{f+1} y_{f+1}^i = V_f y_f^i + L_f x_f^i \quad \forall i$$

$$F h_{feed} + L_{f-1} h_{f-1} + V_{f+1} H_{f+1} = V_f H_f + L_f h_f$$

$$\left. \begin{aligned} L_{p-1} x_{p-1}^i + V_{p+1} y_{p+1}^i &= V_p y_p^i + L_p x_p^i \quad \forall i \\ L_{p-1} h_{p-1} + V_{p+1} H_{p+1} &= V_p H_p + L_p h_p \end{aligned} \right\} \begin{aligned} 2 \leq p \leq f-1 \\ f+1 \leq p \leq b-1 \end{aligned}$$

$$\sum_i x_p^i = 1 \quad \forall p$$

$$\sum_i y_p^i = 1 \quad \forall p$$

$$h_p = f(x_p, T_p, P_p) \quad \forall p$$

$$H_p = f(y_p, T_p, P_p) \quad \forall p$$

$$y_p^i = K_p^i x_p^i \quad \forall i; \forall p$$

$$K_p^i = f(x_p, y_p, T_p, P_p) \quad \forall i; \forall p$$

Número de variables: $6 \times b + 3 \times b \times n + 2$

L_p	V_p	x_p^i	y_p^i	Q_{reb}	Q_{cond}	h_p	H_p	D	K_p^i	T_p	P_p
b	$b-1$	$b \times n$	$b \times n$	1	1	b	b	1	$b \times n$	b	b

Modelo final para b etapas y n componentes

$$V_2 y_2^i = (L_1 + D) x_1^i \quad \forall i$$

$$V_2 H_2 = (L_1 + D) h_1 + Q_{cond}$$

$$L_{b-1} x_{b-1}^i = V_b y_b^i + L_b x_b^i \quad \forall i$$

$$L_{b-1} h_{b-1} + Q_{reb} = V_b H_b + L_b h_b$$

$$F x_{feed}^i + L_{f-1} x_{f-1}^i + V_{f+1} y_{f+1}^i = V_f y_f^i + L_f x_f^i \quad \forall i$$

$$F h_{feed} + L_{f-1} h_{f-1} + V_{f+1} H_{f+1} = V_f H_f + L_f h_f$$

$$L_{p-1} x_{p-1}^i + V_{p+1} y_{p+1}^i = V_p y_p^i + L_p x_p^i \quad \forall i \quad \left. \begin{array}{l} 2 \leq p \leq f-1 \\ f+1 \leq p \leq b-1 \end{array} \right\}$$

$$L_{p-1} h_{p-1} + V_{p+1} H_{p+1} = V_p H_p + L_p h_p$$

$$\sum_i x_p^i = 1 \quad \forall p$$

$$\sum_i y_p^i = 1 \quad \forall p$$

$$h_p = f(x_p, T_p, P_p) \quad \forall p$$

$$H_p = f(y_p, T_p, P_p) \quad \forall p$$

$$y_p^i = K_p^i x_p^i \quad \forall i; \forall p$$

$$K_p^i = f(x_p, y_p, T_p, P_p) \quad \forall i; \forall p$$

Número de ecuaciones: $b \times n + b + 4 \times b + 2 \times b \times n$

$$= 5 \times b + 3 \times b \times n$$

Modelo final para b etapas y n componentes

$$V_2 y_2^i = (L_1 + D) x_1^i \quad \forall i$$

$$V_2 H_2 = (L_1 + D) h_1 + Q_{cond}$$

$$L_{b-1} x_{b-1}^i = V_b y_b^i + L_b x_b^i \quad \forall i$$

$$L_{b-1} h_{b-1} + Q_{reb} = V_b H_b + L_b h_b$$

$$F x_{feed}^i + L_{f-1} x_{f-1}^i + V_{f+1} y_{f+1}^i = V_f y_f^i + L_f x_f^i \quad \forall i$$

$$F h_{feed} + L_{f-1} h_{f-1} + V_{f+1} H_{f+1} = V_f H_f + L_f h_f$$

$$\left. \begin{aligned} L_{p-1} x_{p-1}^i + V_{p+1} y_{p+1}^i &= V_p y_p^i + L_p x_p^i \quad \forall i \\ L_{p-1} h_{p-1} + V_{p+1} H_{p+1} &= V_p H_p + L_p h_p \end{aligned} \right\} \begin{aligned} 2 \leq p \leq f-1 \\ f+1 \leq p \leq b-1 \end{aligned}$$

$$\sum_i x_p^i = 1 \quad \forall p$$

$$\sum_i y_p^i = 1 \quad \forall p$$

$$h_p = f(x_p, T_p, P_p) \quad \forall p$$

$$H_p = f(y_p, T_p, P_p) \quad \forall p$$

$$y_p^i = K_p^i x_p^i \quad \forall i; \forall p$$

$$K_p^i = f(x_p, y_p, T_p, P_p) \quad \forall i; \forall p$$

$$\left. \begin{aligned} \text{Número de variables: } & 6 \times b + 3 \times b \times n + 2 \\ \text{Número de ecuaciones: } & 5 \times b + 3 \times b \times n \end{aligned} \right\} \begin{aligned} & \text{Grados de libertad} \\ & b + 2 \end{aligned}$$

Modelo final para b etapas e i componentes

$$V_2 y_2^i = (L_1 + D) x_1^i \quad \forall i$$

$$V_2 H_2 = (L_1 + D) h_1 + Q_{cond}$$

$$L_{b-1} x_{b-1}^i = V_b y_b^i + L_b x_b^i \quad \forall i$$

$$L_{b-1} h_{b-1} + Q_{reb} = V_b H_b + L_b h_b$$

$$F x_{feed}^i + L_{f-1} x_{f-1}^i + V_{f+1} y_{f+1}^i = V_f y_f^i + L_f x_f^i \quad \forall i$$

$$F h_{feed} + L_{f-1} h_{f-1} + V_{f+1} H_{f+1} = V_f H_f + L_f h_f$$

$$\left. \begin{aligned} L_{p-1} x_{p-1}^i + V_{p+1} y_{p+1}^i &= V_p y_p^i + L_p x_p^i \quad \forall i \\ L_{p-1} h_{p-1} + V_{p+1} H_{p+1} &= V_p H_p + L_p h_p \end{aligned} \right\} \begin{aligned} 2 \leq p \leq f-1 \\ f+1 \leq p \leq b-1 \end{aligned}$$

$$\sum_i x_p^i = 1 \quad \forall p$$

$$\sum_i y_p^i = 1 \quad \forall p$$

$$h_p = f(x_p, T_p, P_p) \quad \forall p$$

$$H_p = f(y_p, T_p, P_p) \quad \forall p$$

$$y_p^i = K_p^i x_p^i \quad \forall i; \forall p$$

$$K_p^i = f(x_p, y_p, T_p, P_p) \quad \forall i; \forall p$$

Grados de libertad

$$\cancel{b} + 2$$

Perfil de presiones conocido

Grados de libertad

2

Modelo final para b etapas e i componentes

$$V_2 y_2^i = (L_1 + L_1/RR) x_1^i \quad \forall i$$

$$V_2 H_2 = (L_1 + L_1/RR) h_1 + Q_{cond}$$

$$L_{b-1} x_{b-1}^i = V_b y_b^i + L_b x_b^i \quad \forall i$$

$$L_{b-1} h_{b-1} + Q_{reb} = V_b H_b + L_b h_b$$

$$F x_{feed}^i + L_{f-1} x_{f-1}^i + V_{f+1} y_{f+1}^i = V_f y_f^i + L_f x_f^i \quad \forall i$$

$$F h_{feed} + L_{f-1} h_{f-1} + V_{f+1} H_{f+1} = V_f H_f + L_f h_f$$

$$\left. \begin{aligned} L_{p-1} x_{p-1}^i + V_{p+1} y_{p+1}^i &= V_p y_p^i + L_p x_p^i \quad \forall i \\ L_{p-1} h_{p-1} + V_{p+1} H_{p+1} &= V_p H_p + L_p h_p \end{aligned} \right\} \begin{aligned} 2 \leq p \leq f-1 \\ f+1 \leq p \leq b-1 \end{aligned}$$

$$\sum_i x_p^i = 1 \quad \forall p$$

$$\sum_i y_p^i = 1 \quad \forall p$$

$$h_p = f(x_p, T_p, P_p) \quad \forall p$$

$$H_p = f(y_p, T_p, P_p) \quad \forall p$$

$$y_p^i = K_p^i x_p^i \quad \forall i; \forall p$$

$$K_p^i = f(x_p, y_p, T_p, P_p) \quad \forall i; \forall p$$

Grados de libertad

2

$$RR = L_1/D \implies D = L_1/RR$$

L_b y RR

Variables habituales para cerrar los grados de libertad (column spec)

Modelo final para 10 etapas y mezcla binaria (b=10 y n=2)

$$V_2 y_2^i = (L_1 + L_1/RR) x_1^i \quad \forall i$$

$$V_2 H_2 = (L_1 + L_1/RR) h_1 + Q_{cond}$$

$$L_{b-1} x_{b-1}^i = V_b y_b^i + L_b x_b^i \quad \forall i$$

$$L_{b-1} h_{b-1} + Q_{reb} = V_b H_b + L_b h_b$$

$$F x_{feed}^i + L_{f-1} x_{f-1}^i + V_{f+1} y_{f+1}^i = V_f y_f^i + L_f x_f^i \quad \forall i$$

$$F h_{feed} + L_{f-1} h_{f-1} + V_{f+1} H_{f+1} = V_f H_f + L_f h_f$$

$$\left. \begin{aligned} L_{p-1} x_{p-1}^i + V_{p+1} y_{p+1}^i &= V_p y_p^i + L_p x_p^i \quad \forall i \\ L_{p-1} h_{p-1} + V_{p+1} H_{p+1} &= V_p H_p + L_p h_p \end{aligned} \right\} \begin{aligned} 2 \leq p \leq f-1 \\ f+1 \leq p \leq b-1 \end{aligned}$$

$$\sum_i x_p^i = 1 \quad \forall p$$

$$\sum_i y_p^i = 1 \quad \forall p$$

$$h_p = f(x_p, T_p, P_p) \quad \forall p$$

$$H_p = f(y_p, T_p, P_p) \quad \forall p$$

$$y_p^i = K_p^i x_p^i \quad \forall i; \forall p$$

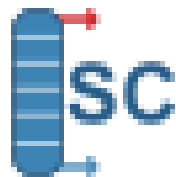
$$K_p^i = f(x_p, y_p, T_p, P_p) \quad \forall i; \forall p$$

Número de ecuaciones: $5 \times b + 3 \times b \times n \Rightarrow 5 \times 10 + 3 \times 10 \times 2$

Se debe resolver un sistema de
110 ecuaciones y 110 incógnitas



Integración IV



Shortcut Column

Model for quick sizing of distillation columns

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

Shortcut Column - Introducción

La columna debe tener una entrada, dos salidas (tope y fondo), un condensador (total o parcial) y un rehervidor.

Se basa en el método de Fenske-Underwood-Gilliland y los resultados que arroja son:

- Reflujo mínimo
- Carga calórica y temperaturas del condensador y rehervidor para un reflujo dado.
- Lugar óptimo de alimentación para un reflujo dado
- Mínimo numero de etapas de equilibrio



Shortcut Column

Model for quick sizing of distillation columns

Shortcut Column



Shortcut Column

Model for quick sizing of distillation columns

Shortcut Column: SC column

General Info

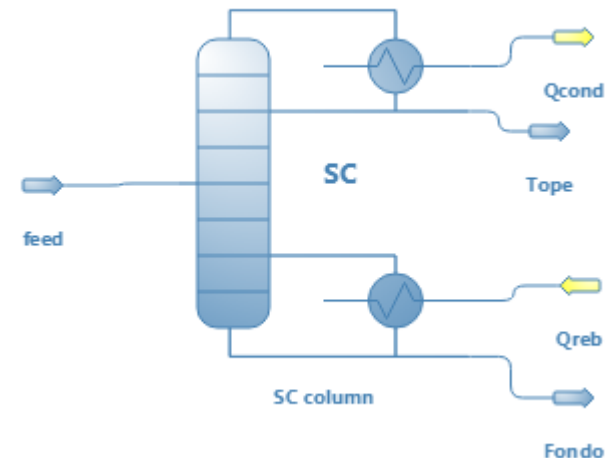
Object: SC column

Status: Calculated (05/09/2017 05:03:21)

Linked to:

Connections

	Conexiones
Feed Stream	feed
Distillate Stream	Tope
Bottoms Stream	Fondo
Condenser Duty	Qcond
Reboiler Duty	Qreb



Se deben conectar una corriente de entrada, dos de salida y dos corrientes energéticas (entrada y salida)

Detalle de las conexiones

Parámetros de calculo (Shortcut Column)

Clave liviano

Clave pesado

Fracción molar del LK en el fondo

Fracción molar del HK en el tope

Relación de reflujo

Tipo de condensador

Presión en el condensador

Presión en el rehervidor

Calculation Parameters	
Light Key Compound (LK)	<div>Benzene ▼</div>
Heavy Key Compound (HK)	<div>Toluene ▼</div>
LK Mole Fraction in Bottoms	<div>0.01</div>
HK Mole Fraction in Distillate	<div>0.01</div>
Reflux Ratio	<div>1.5</div>
Condenser Type	<div><input checked="" type="radio"/> Total <input type="radio"/> Partial</div>
Condenser Pressure	<div>1 atm ▼</div>
Reboiler Pressure	<div>1 atm ▼</div>

Resultados utilizando FUG (Shortcut Column)

Relación mínima de reflujo

Mínimo numero de etapas

Etapas para la relación de reflujo actual

Ubicación de la alimentación

Flujo molar de líquido (agotamiento)

Flujo molar de líquido (rectificación)

Flujo molar de vapor (agotamiento)

Flujo molar de vapor (rectificación)

Calor que se extrae en el condensador

Calor que se ingresa en el rehervidor

Results		
Property	Value	Units
Minimum Reflux Ratio	1.2862344	
Minimum Number of Stages	10.027657	
Actual Number of Stages	24.287707	
Optimal Feed Stage	12.143854	
Stripping Liquid	20.557399	mol/s
Rectify Liquid	8.8103139	mol/s
Stripping Vapor	14.683857	mol/s
Rectify Vapor	14.683857	mol/s
Condenser Duty	452.53007	kW
Reboiler Duty	461.42878	kW

Ejemplo de aplicación (Shortcut model)

Se desea separar una corriente de 10 mol/s de una mezcla equimolar de N-hexano y N-heptano a 1 atm en condiciones de liquido saturado.

- La destilación se realiza en condiciones atmosféricas.
- La pureza de cada producto se desea de 0.99 en fracción molar.
- Se propone una relación de reflujo de 1.5 veces la mínima.
- La simulación de un proceso de destilación esta fuertemente condicionada con el paquete fisicoquímico que se utiliza para el calculo de las condiciones de equilibrio.
- DWSIM permite comparar los modelo teóricos disponibles con datos experimentales.
- De no ser satisfactoria la predicción también cuenta con herramientas de regresión para ajustar los modelos de equilibrio a datos experimentales.

Armado del Caso de estudio

Connections

Feed Stream	Feed		
Distillate Stream	Topo		
Bottoms Stream	Fondo		
Condenser Duty	Qc		
Reboiler Duty	Qr		

Calculation Parameters

Light Key Compound (LK)	N-hexane
Heavy Key Compound (HK)	N-heptane
LK Mole Fraction in Bottoms	0.01
HK Mole Fraction in Distillate	0.01
Reflux Ratio	1.93
Condenser Type	<input checked="" type="radio"/> Total <input type="radio"/> Partial
Condenser Pressure	101325 Pa
Reboiler Pressure	101325 Pa

x1.5

Results

Property	Value	Units
Minimum Reflux Ratio	1.2857969	
Minimum Number of Stages	10.025458	
Actual Number of Stages	18.416831	
Optimal Feed Stage	9.2084153	
Stripping Liquid	19.65	mol/s
Rectify Liquid	9.65	mol/s
Stripping Vapor	14.65	mol/s
Rectify Vapor	14.65	mol/s
Condenser Duty	421.57439	kW
Reboiler Duty	431.43021	kW

Integración IV



Distillation Column

Rigorous model for simulation of distillation columns

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

Distillation Column - Introducción

- Es una operación unitaria que representa a las torres de fraccionamiento.
- Los componentes de una mezcla se separan a través de sucesivas etapas de equilibrio.
- El modulo se considera riguroso debido a los modelos termodinámicos utilizados en la solución de los balances de masa y energía a lo largo de la columna.
- Soporta varios flujos de alimentación
- Soporta varias salidas laterales
- Soporta corrientes de energía que representan intercambiadores de calor en cada etapa
- Requiere definición de presión y eficiencia por etapa



Distillation Column

Rigorous model for simulation of distillation columns

Distillation Column



Distillation Column

Rigorous model for simulation of distillation columns

Distillation Column: DC-006

General Info

Object

DC-006

Status

Calculated (06/09/2017 0)

Linked to

Column Spec

Column Specs

General

Condenser

Reboiler

Absorber Operating Mode

Number of Stages

18

Solver

Wang-Henke (Bi)

Solving Scheme

Direct Rigorous

Maximum Number of Iterations

100

Convergence Tolerance

1E-05

Property Package

Raoult's La

Flash Algorithm

Default

Column Configuration

Column Configuration

Connections

Stages

Initial Estimates

BP Solver

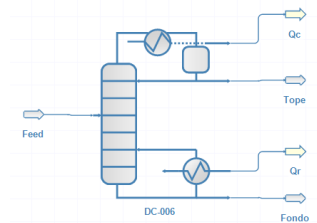
Feeds

#	To Stage	Stream
1	Stage8	Feed

Products

Location	Stream
Condenser	Tope
Reboiler	Fondo

Heat Loads / Exchangers



Distillation Column (Column Specs > General)

Column Specs

General Condenser Reboiler

Absorber Operating Mode

Number of Stages

Solver

Solving Scheme

Maximum Number of Iterations

Convergence Tolerance

Property Package

Flash Algorithm

Número de etapas de equilibrio
(incluidas el condensador y rehervidor)

Algoritmo y esquema de resolución

Distillation Column (Column Specs > Condenser)

Column Specs

General Condenser Reboiler

Condenser Type Total

Condenser Pressure 101325 Pa

Condenser Pressure Drop 0 Pa

Specification **Reflux Ratio**

Compound

1.93

Vapor Product Flow Rate 0 mol/s

Tipo de condensador

Total
Total
Partial
Full Reflux

Presión y caída de presión en el condensador

Reflux Ratio

Heat Load
Product Molar Flow
Compound Molar flow in Product Stream
Product Mass Flow
Compound Mass Flow in Product Stream
Compound Fraction in Product Stream
Compound Recovery
Reflux Ratio
Temperature

Variable y valor de la especificación para el condensador

Variables de especificación.
Su disponibilidad depende del algoritmo seleccionado.

Distillation Column (Column Specs > Reboiler)

Column Specs

General Condenser Reboiler

Reboiler Pressure 101325 Pa

Specification

Compound

Product Molar Flow

5 mol/s

Presión en el rehervidor

Product Molar Flow

Heat Load

Product Molar Flow

Compound Molar flow in Product Stream

Product Mass Flow

Compound Mass Flow in Product Stream

Compound Fraction in Product Stream

Compound Recovery

Boil-Up Ratio

Temperature

Variables de especificación.
Su disponibilidad depende del
algoritmo seleccionado.

Variable y valor de la especificación para el rehervidor

Distillation Column (Column Configuration > Connections)

Entradas

Column Configuration

Connections Stages Initial Estimates BP Solver

Feeds

#	To Stage	Stream
1	Stage8	Feed

Products

Location	Stream
Condenser	Tope
Reboiler	Fondo

Salidas de tope y fondo

Corrientes de energía

Heat Loads / Exchangers

Location	Stream
Condenser	Qc
Reboiler	Qr

Side Draws

#	From Stage	Stream	Type	Flow Rate (mol/s)
---	------------	--------	------	-------------------

Salidas desde etapas intermedias



Permite agregar corrientes



Permite eliminar corrientes

Distillation Column (Column Configuration > Stages)



Cuando se agregan etapas se debe completar el perfil de presiones.

Permite definir un perfil lineal de presiones.

Se puede definir la presión en el condensador y en el rehervidor e interpolar las intermedias

Column Configuration

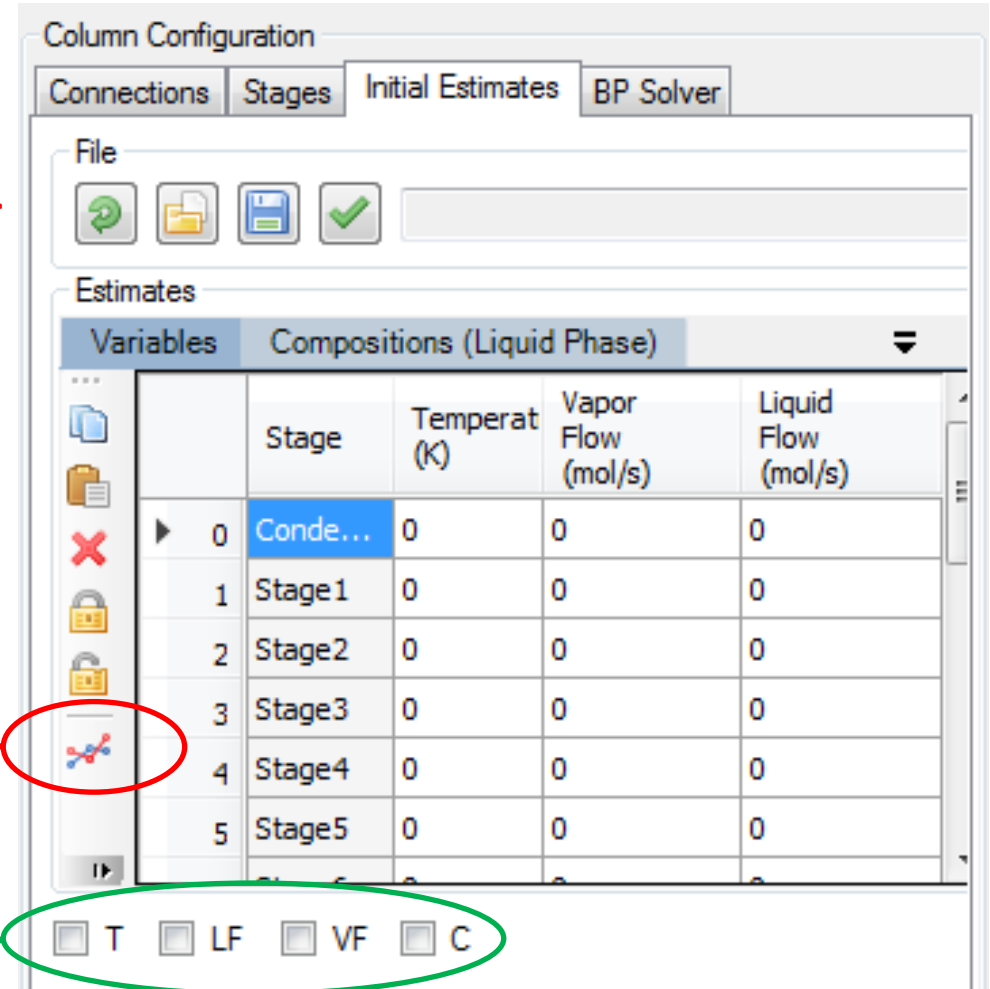
Connections Stages Initial Estimates BP Solver

Stage	Name	Pressure (Pa)	Efficiency
0	Condenser	101325	1
1	Stage1	101325	1
2	Stage2	101325	1
3	Stage3	101325	1
4	Stage4	101325	1
5	Stage5	101325	1
6	Stage6	101325	1
7	Stage7	101325	1
8	Stage8	101325	1
9	Stage9	101325	1
10	Stage10	101325	1
11	Stage_11	101325	1
12	Stage_12	101325	1
13	Stage_13	101325	1
14	Stage_14	101325	1

Distillation Column (Column Configuration > Initial Estimate)

Se puede introducir una estimación inicial de algunas variables para mejorar el valor de arranque

Se pueden definir valores extremos interpolar los intermedios



Activa la inicialización de variables

Distillation Column (Column Configuration > BP Solver)

Column Configuration

Connections

Stages

Initial Estimates

BP Solver

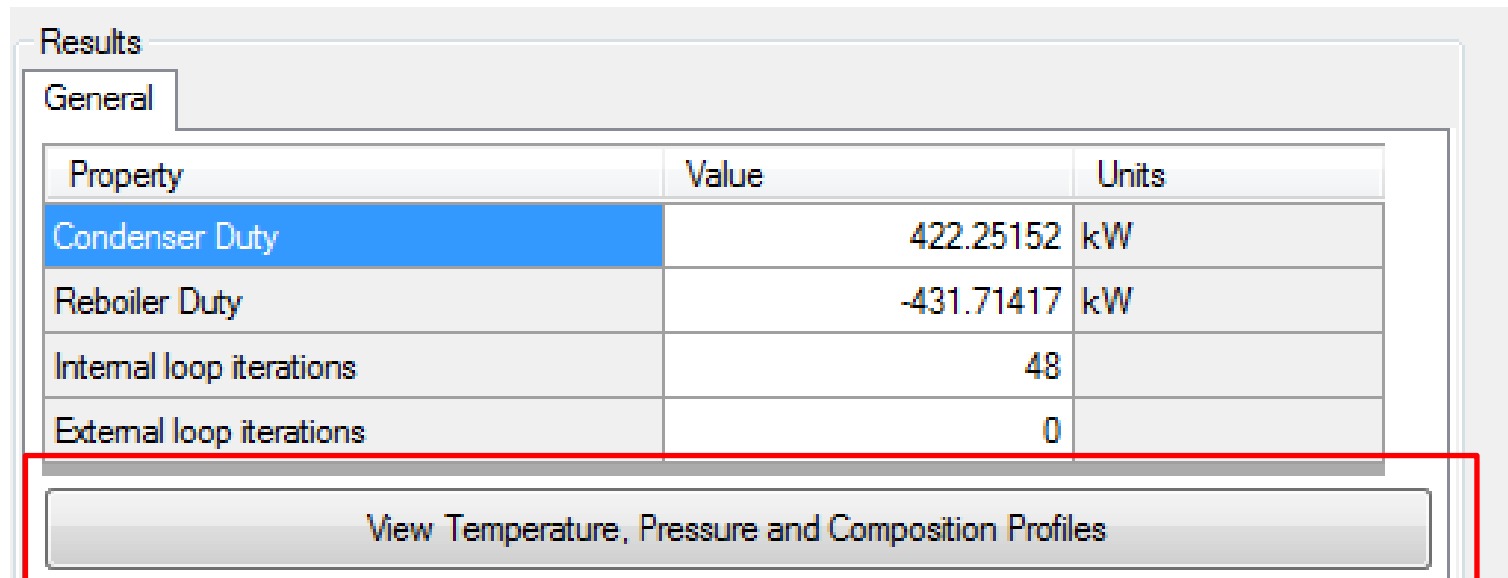
Stop at Iteration #

-1

En esta solapa se manipulan las opciones del tipo de algoritmo de resolución elegido.

Distillation Column (Results)

- Una vez definidos todos los parámetros y conexiones de la columna se debe presionar (como siempre) F5 para la resolución del flowsheet.
- Si se llega a una solución que cumple con las especificaciones y tolerancias establecidas, en la solapa Results se presentaran los resultados.



Results		
General		
Property	Value	Units
Condenser Duty	422.25152	kW
Reboiler Duty	-431.71417	kW
Internal loop iterations	48	
External loop iterations	0	
View Temperature, Pressure and Composition Profiles		

Permite observar los perfiles dentro de la columna

Ejemplo de aplicación

Se desea separar una corriente de 10 mol/s de una mezcla equimolar de N-hexano y N-heptano a 1 atm en condiciones de liquido saturado.

- La destilación se realiza en condiciones atmosféricas.
- La pureza de cada producto se desea de 0.99 en fracción molar.

Un análisis FUG (shortcut) arrojó los siguientes resultados:

Results		
Property	Value	Units
Minimum Reflux Ratio	1.2857969	
Minimum Number of Stages	10.025458	
Actual Number of Stages	18.416831	
Optimal Feed Stage	9.2084153	
Stripping Liquid	19.65	mol/s
Rectify Liquid	9.65	mol/s
Stripping Vapor	14.65	mol/s
Rectify Vapor	14.65	mol/s
Condenser Duty	421.57439	kW
Reboiler Duty	431.43021	kW

Armado del Caso

- Se crea el caso de estudio y se seleccionan los componentes.
- Se utiliza la ley de Raoult.
- Se propone una torre de 18 etapas alimentada en la etapa 9
- Como especificación en el condensador se establece una relación de reflujo de 1.93
- Como especificación en el rehervidor se ingresa un flujo molar de producto de 5 mol/s
- El algoritmo de resolución Wang-Henke (Bubble-Point) no permite muchas especificaciones pero es robusto en su resolución.
- Recordar completar el perfil de presiones



Armado del Caso

Column Specs

General Condenser Reboiler

Absorber Operating Mode

Number of Stages

Solver

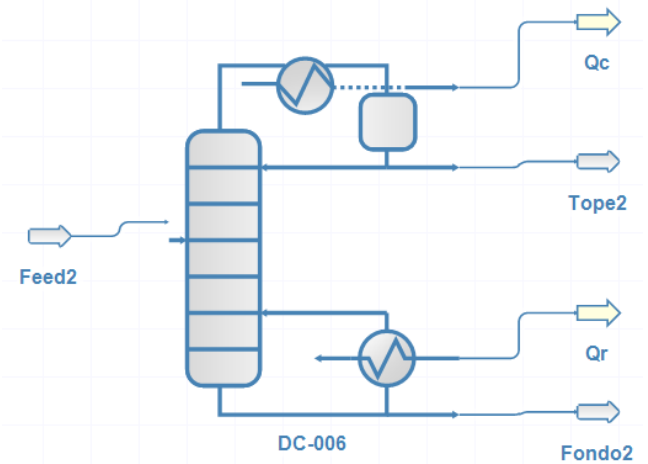
Solving Scheme

Maximum Number of Iterations

Convergence Tolerance

Property Package 

Flash Algorithm 



Armado del Caso

Column Configuration

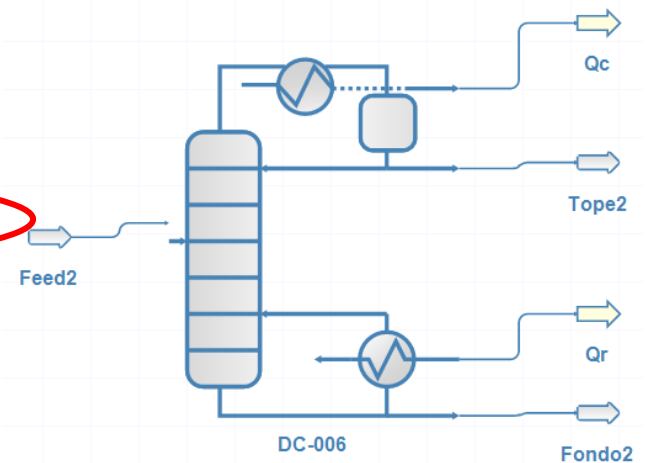
Connections Stages Initial Estimates BP Solver

Feeds

#	To Stage	Stream
1	Stage9	Feed2

Products

Location	Stream
Condenser	Tope2
Reboiler	Fondo2



Prestar atención a la enumeración de las etapas

Armado del Caso

Column Configuration

Connections Stages Initial Estimates BP Solver

Heat Loads / Exchangers

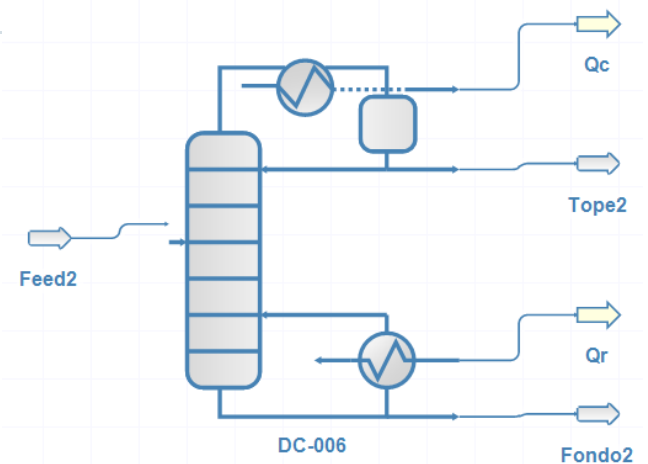


Location		Stream	
Condenser	▼	Qc	▼
Reboiler	▼	Qr	▼

Side Draws



#	From Stage	Stream	Type	Flow Rate (mol/s)

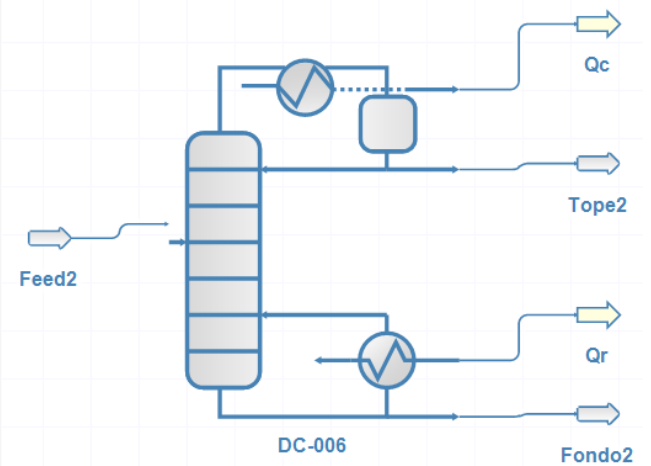


Armado del Caso

Column Configuration

Connections Stages Initial Estimates BP Solver

Stage	Name	Pressure (Pa)	Efficiency
0	Condenser	101325	1
1	Stage1	101325	1
2	Stage2	101325	1
3	Stage3	101325	1
4	Stage4	101325	1
5	Stage5	101325	1
6	Stage6	101325	1
7	Stage7	101325	1
8	Stage8	101325	1
9	Stage9	101325	1
10	Stage10	101325	1
11	Stage_11	101325	1
12	Stage_12	101325	1
13	Stage_13	101325	1
14	Stage_14	101325	1



Armado del Caso

Column Specs

General

Condenser

Reboiler

Condenser Type Total

Condenser Pressure 101325 Pa

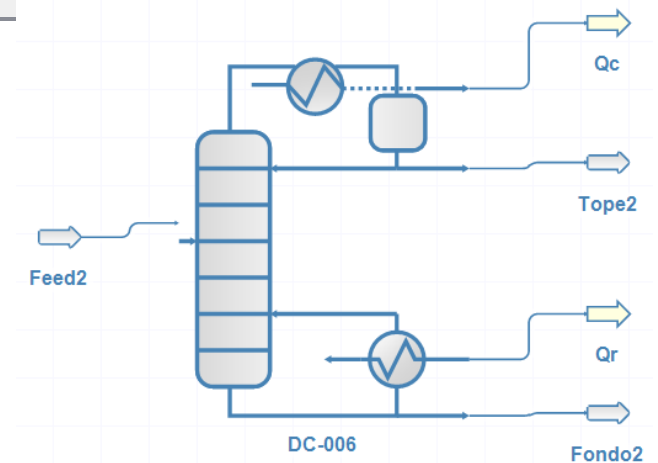
Condenser Pressure Drop 0 Pa

Specification Reflux Ratio

Compound N-hexane

1.93

Vapor Product Flow Rate 0 mol/s



Armado del Caso

Column Specs

General

Condenser

Reboiler

Reboiler Pressure

101325

Pa

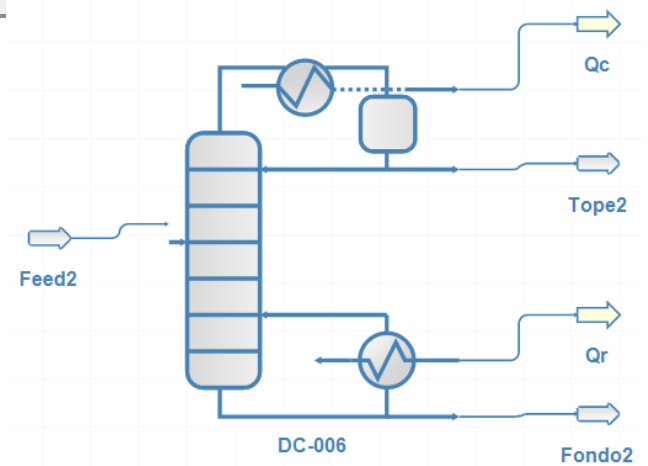
Specification

Product Molar Flow

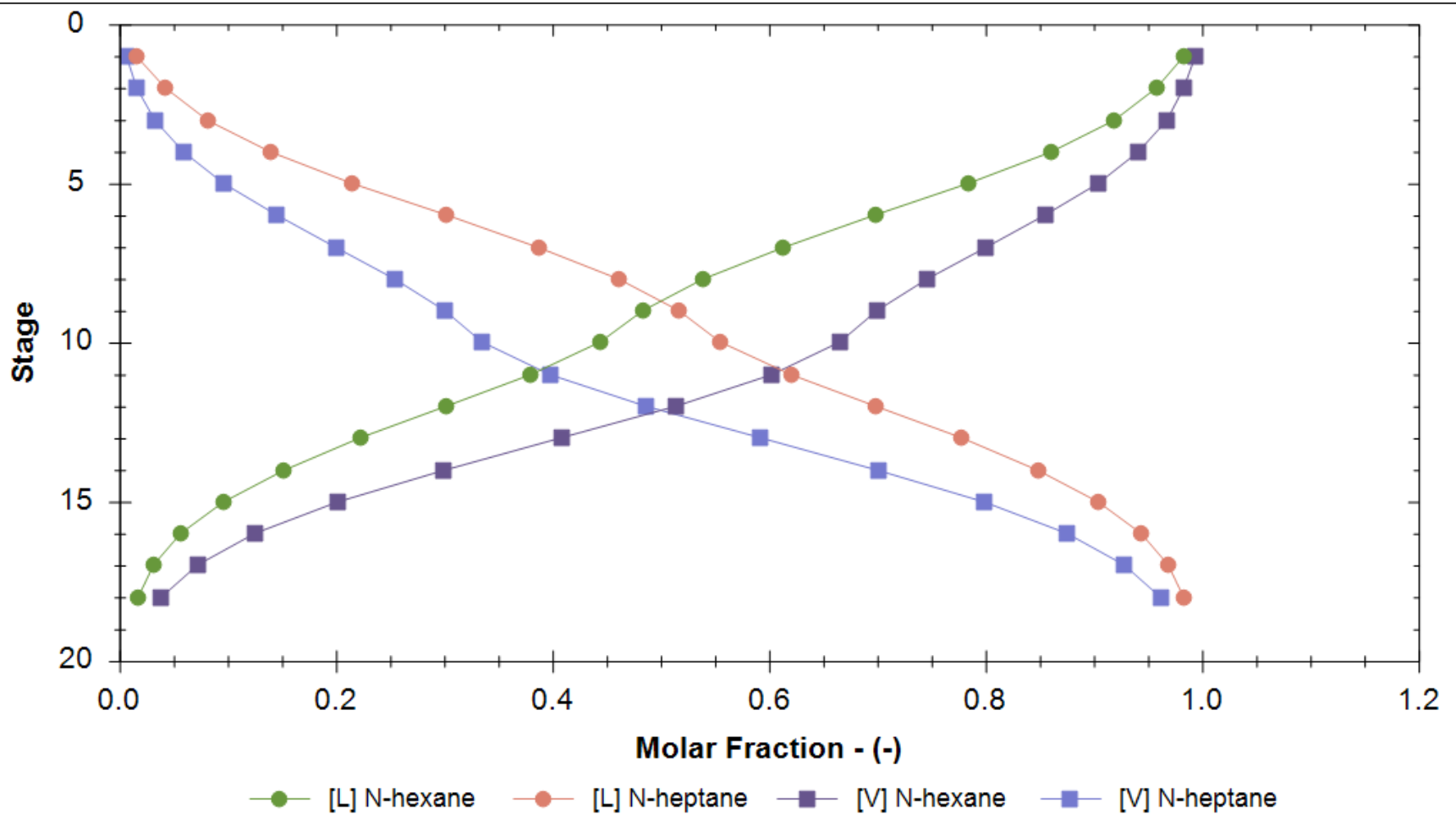
Compound

5

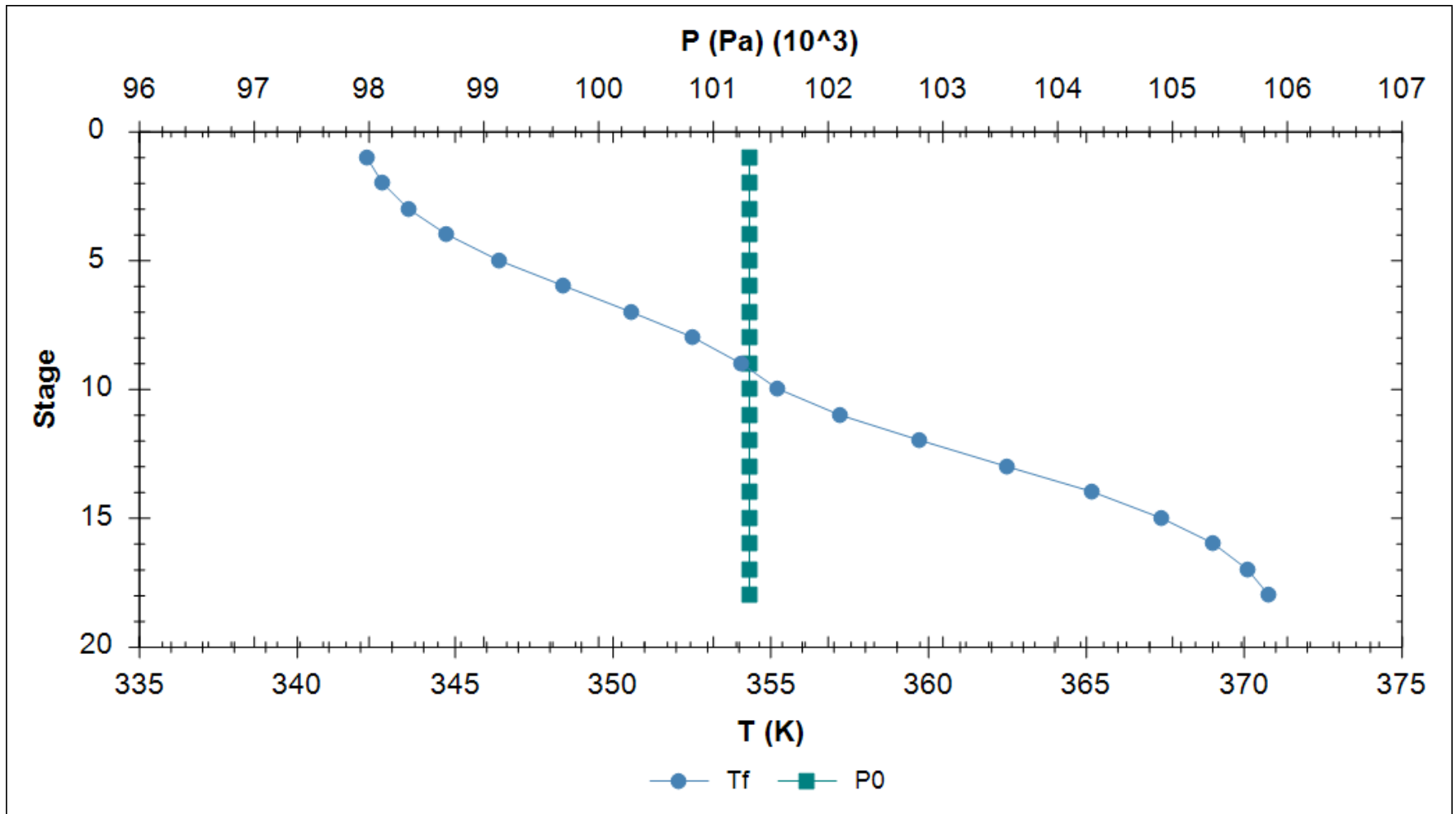
mol/s



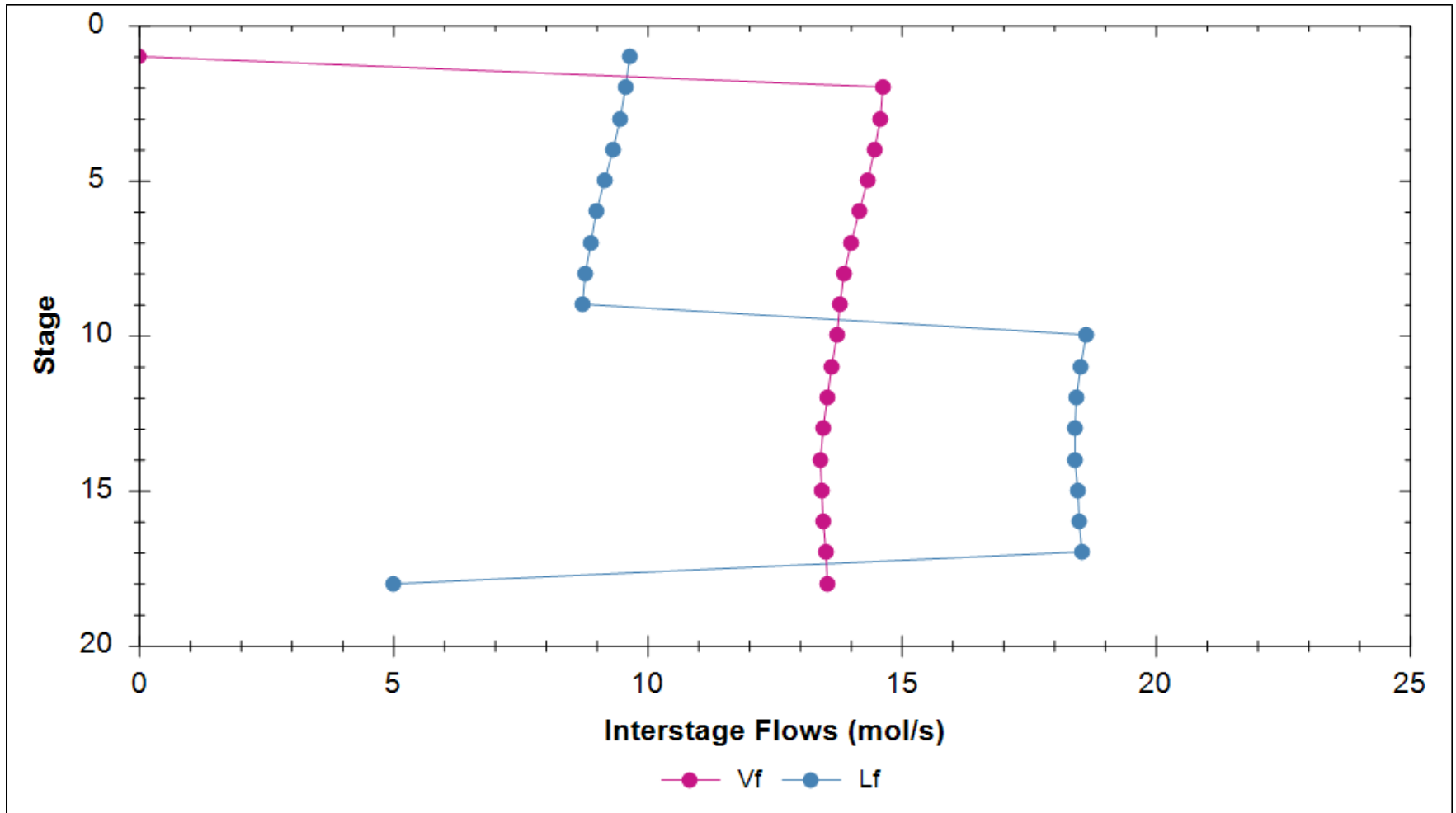
Resultados (perfil de composiciones)



Resultados (perfil de presión y temperatura)



Resultados (perfil de flujo molar)



Resultados (perfil de flujo molar)

	Feed	Tope	Fondo
Temperature (K)	353.61829	342.22333	370.79905
Pressure (Pa)	101325	101325	101325
Molar Flow (mol/s)	10	5	5
Molar Fraction (Mixture) / N-heptane	0.5	0.01626994	0.98361232
Molar Fraction (Mixture) / N-hexane	0.5	0.98373006	0.01638768

La composición de salida no es la deseada.



Los valores de diseño del análisis shortcut son aproximados

¿Cómo se puede mejorar la separación?

Resultados (perfil de flujo molar)

	Feed	Tope	Fondo
Temperature (K)	353.61829	342.09569	371.08915
Pressure (Pa)	101325	101325	101325
Molar Flow (mol/s)	10	5	5
Molar Fraction (Mixture) / N-heptane	0.5	0.00978733	0.99006247
Molar Fraction (Mixture) / N-hexane	0.5	0.99021267	0.00993753

Etapas constantes: Se aumenta la relación de reflujo hasta obtener la composición deseada. Se puede realizar de forma manual o utilizando un bloque controlador.

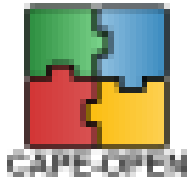
RR=2.31 y 18 etapas

Resultados (perfil de flujo molar)

	Feed	Tope	Fondo
Temperature (K)	353.61829	342.10105	371.08911
Pressure (Pa)	101325	101325	101325
Molar Flow (mol/s)	10	5	5
Molar Fraction (Mixture) / N-heptane	0.5	0.010060007	0.99006156
Molar Fraction (Mixture) / N-hexane	0.5	0.98993999	0.0099384367

Relación de reflujo constante: Se aumenta la cantidad de etapas hasta obtener la composición deseada. Se debe realizar si o si de forma manual.

RR=1.93 y 20 etapas



CAPE-OPEN Unit Operation

Model for utilization of a CAPE-OPEN
Unit Operation in the flowsheet



ChemSep
Column

- En las versiones recientes Chemsep ya cuenta con un quipo propio.
- El procedimiento es similar ya que se trata de una conexión directa a ChemSep mediante Cape Open

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

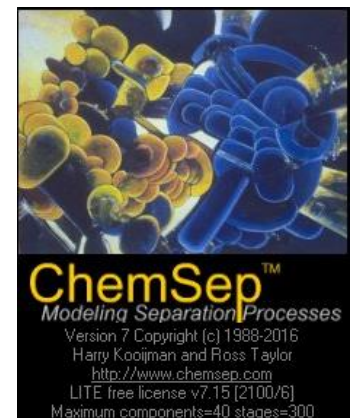
Simulación Mediante el protocolo CAPE OPEN (ChemSep)

- El estándar de interfaz CAPE-OPEN consiste en una serie de especificaciones para ampliar el rango de aplicación de las tecnologías de simulación de procesos.
- Las especificaciones CAPE-OPEN comprenden un conjunto de interfaces de software que permiten la interoperabilidad plug and play entre un entorno de modelado de proceso (PME) y un componente de modelado de proceso (PMC) de terceros.



CAPE-OPEN Unit Operation

Model for utilization of a CAPE-OPEN
Unit Operation in the flowsheet

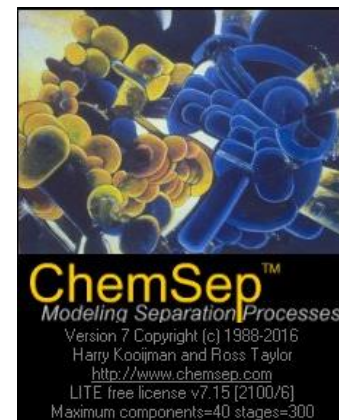


Conexión Mediante el protocolo CAPE OPEN (ChemSep)

- ChemSep es un simulador de columnas para operaciones de destilación, absorción y extracción.
- Puede ser utilizado de manera aislada (solo columnas) o integrado a un flowsheet en un simulador de procesos.
- ChemSep LITE permite modelar columnas de equilibrio con hasta 40 componentes y 300 etapas utilizando una base de datos que cubre más de 400 productos químicos.



CAPE-OPEN Unit Operation
Model for utilization of a CAPE-OPEN
Unit Operation in the flowsheet

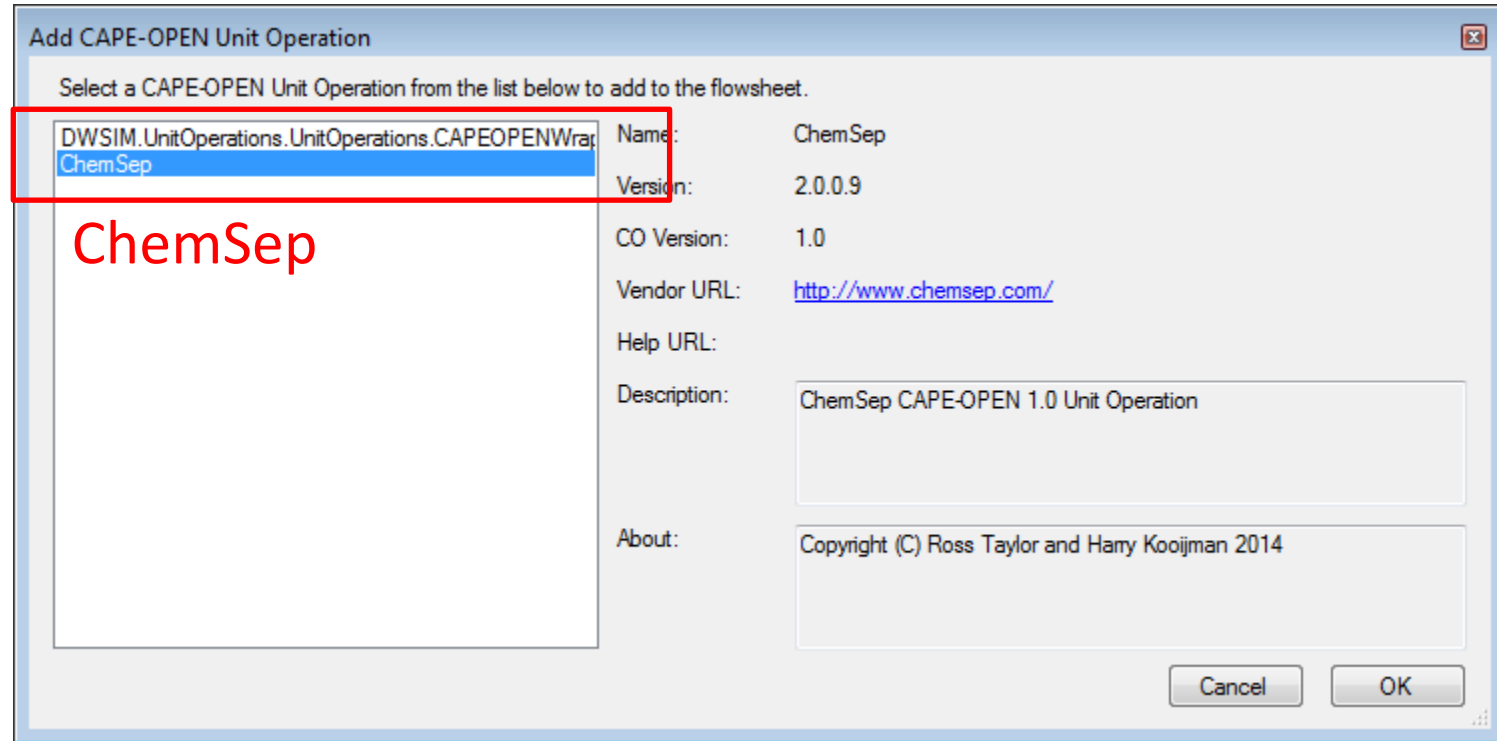


ChemSep mediante CAPE OPEN



CAPE-OPEN Unit Operation

Model for utilization of a CAPE-OPEN
Unit Operation in the flowsheet



Al agregar una operación unitaria CAPE OPEN se visualizan las opciones disponibles. Existen numerosas alternativas que pueden instalarse para contar con mas equipos (Ej: COCO simulator)

ChemSep mediante CAPE OPEN

CAPE-OPEN Unit Operation: COUO-012

General Info

Object: COUO-012

Status: Not Calculated

Linked to:

CAPE-OPEN

Name: ChemSep

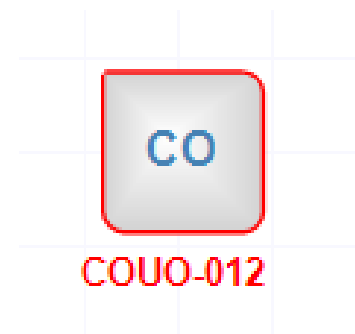
Description: ChemSep CAPE-OPEN 1.0 Unit Operation

Object / CAPE-OPEN Version: 2.0.0.9 / 1.0

Editor

Open CAPE-OPEN Object Editor

Nombre



Detalles de la librería CAPE OPEN

Configuración externa

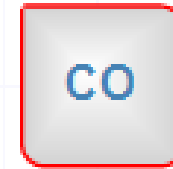
ChemSep mediante CAPE OPEN

Connections

Inlet Outlet Energy

Name	Stream		
feed		C	D

Conexiones de entrada



COUO-012

Settings

Flowsheet Object Appearance DefaultShape

Se puede cambiar la apariencia (solo estética)

Connections

Inlet Outlet Energy

Name	Stream		
top		C	D
bottom		C	D

Conexiones de salida

DistillationColumn



COUO-012

Connections

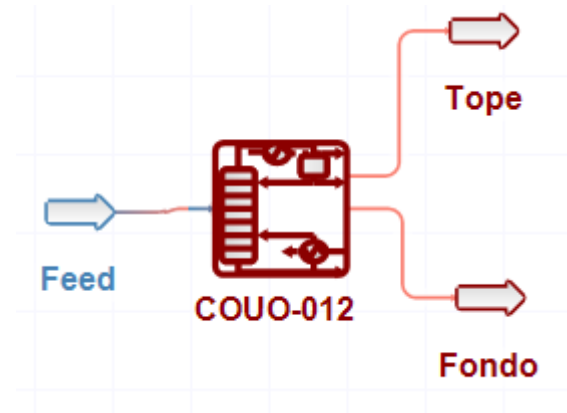
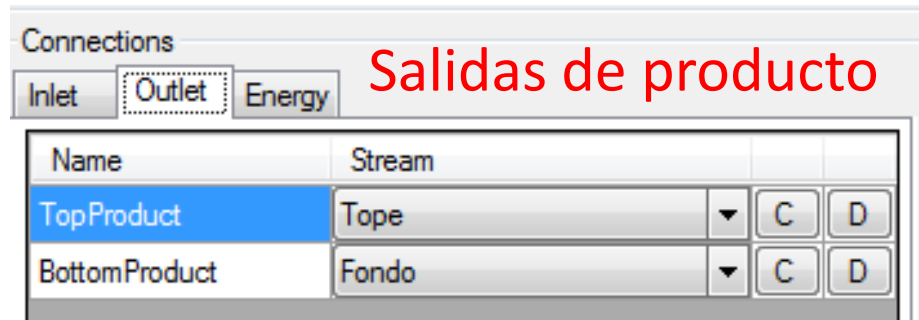
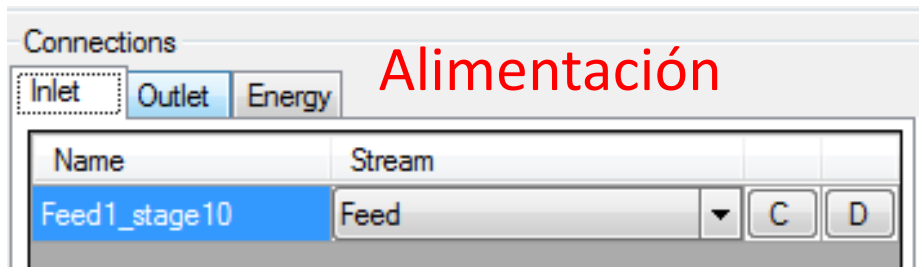
Inlet Outlet Energy

Name	Stream		
------	--------	--	--

Conexiones de energía

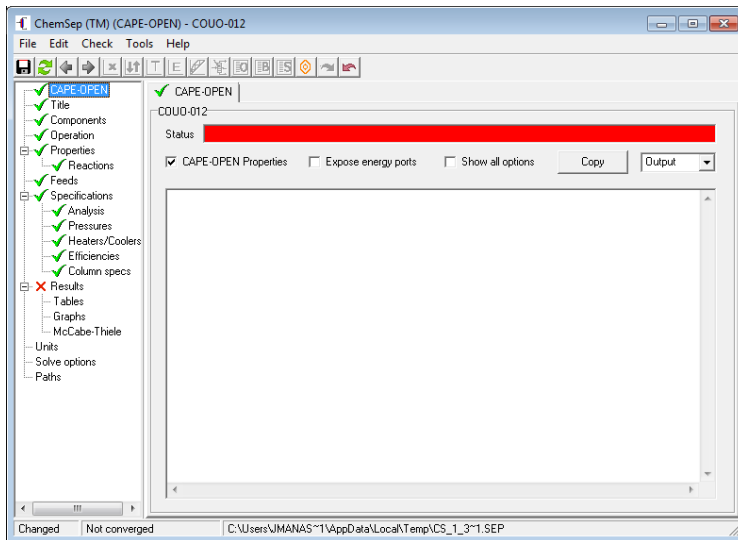
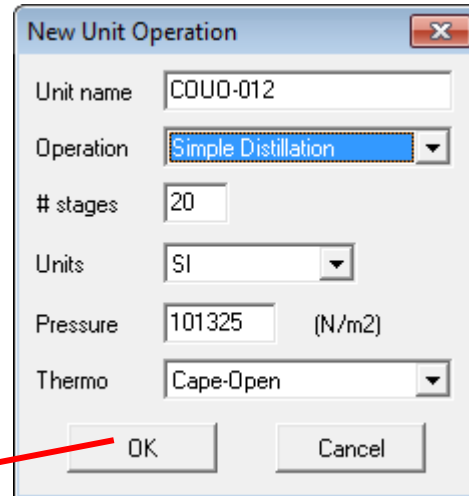
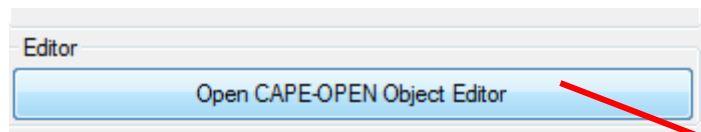
ChemSep mediante CAPE OPEN

- Las conexiones dependen de la configuración de la torre.
- Por defecto se agrega una columna de destilación simple, con condensador total, una alimentación y dos salidas de producto (tope y fondo).



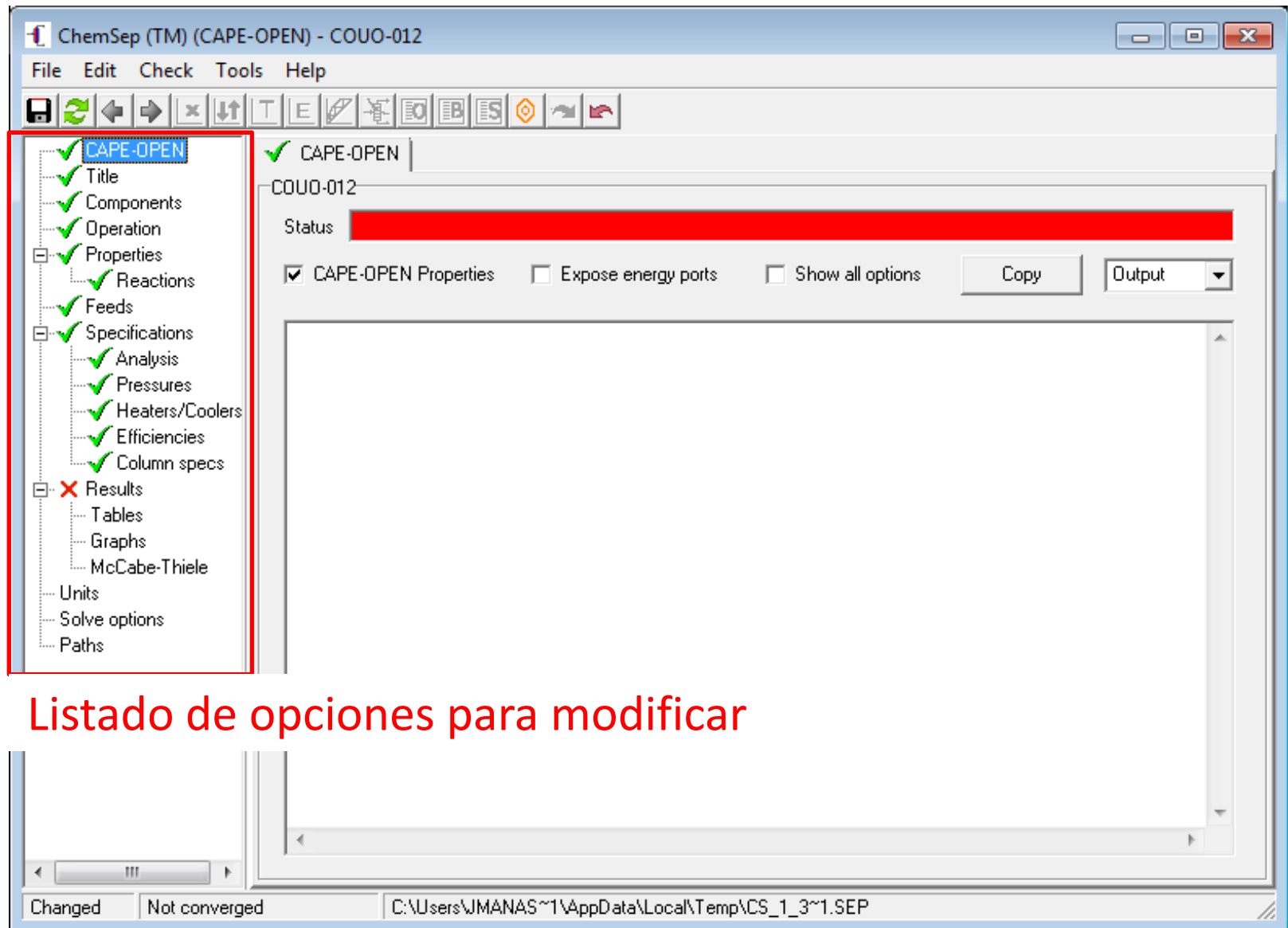
ChemSep mediante CAPE OPEN

- Dentro de ChemSep se debe modificar la configuración interna de la torre.
- Las entradas y salidas varían según la configuración interna de la torre.



Es una configuración preliminar rápida. Pueden definirse los valores o dar OK y configurar en detalle dentro de ChemSep.

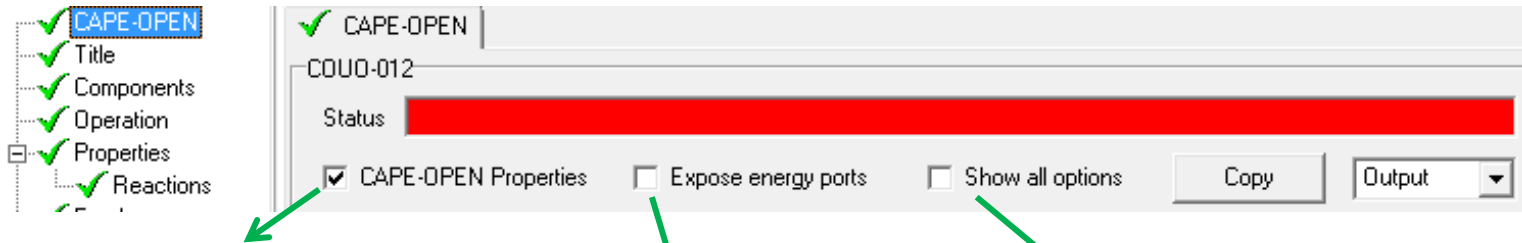
ChemSep (ventana principal)



Listado de opciones para modificar

ChemSep > CAPE-OPEN

- En esta solapa se especifican todas las opciones referidas al protocolo CAPE OPEN



Check: Se comunica vía CAPE OPEN para el calculo de propiedades fisicoquímicas

Uncheck: Chemsep utiliza su paquete interno de propiedades fisicoquímicas

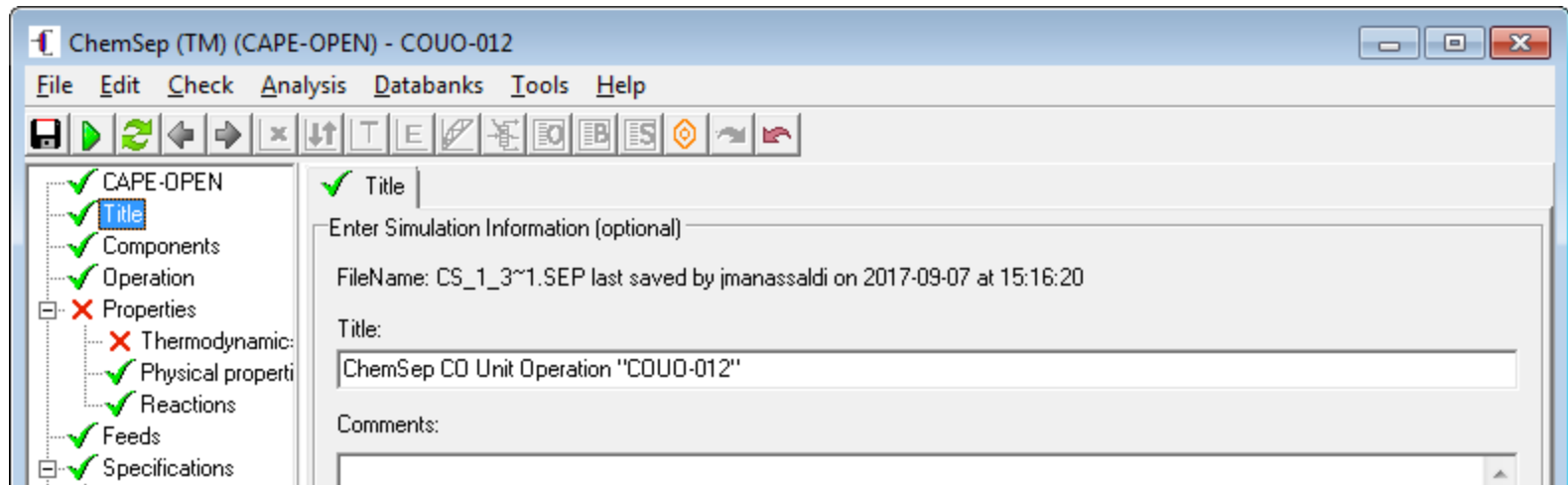
Muestra opciones avanzadas

Check: Exportar las corrientes energéticas a DWSIM. Si se elige esta opción, se deben definir y conectar dentro del entorno de DWSIM.

- Al destildar esta opción se elige el paquete termodinámico dentro de ChemSep.
- En algunas versiones existe un error pero en la ultima versión ya se solucionó (probar)
- Al destildar aparece una solapa para configurar el paquete fisicoquímico.

ChemSep > Title

- Se puede definir un titulo e introducir comentarios



ChemSep > Operation (configuración de la columna)

✓ Operation |

Select Type of Simulation

☐ Flash

☒ Equilibrium column

☐ Nonequilibrium column

Configuration

Operation: Simple Distillation

Condenser: Total (Liquid product)

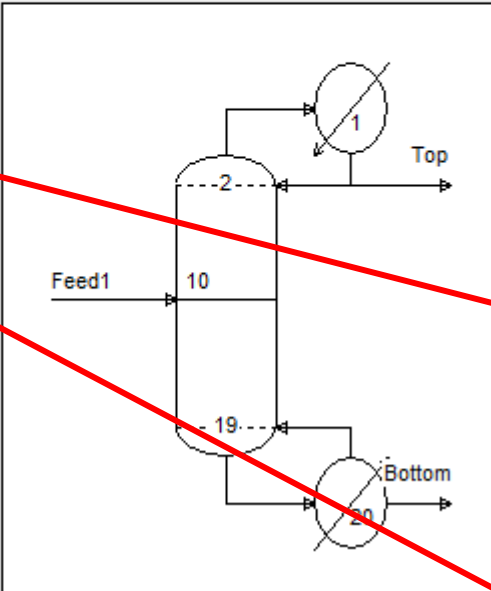
Reboiler: Partial (Liquid product)

Number of stages (e.g. 10) 20

Feed stage(s) (e.g. 5,7) 10

Sidestream stage(s) (e.g. 2,9)

Pumparound(s) (e.g. 6>8, 9>1)



Tipo de simulación

- Simple Distillation
- Simple Distillation
- Extractive Distillation
- Azeotropic Distillation
- Simple Absorber/Stripper
- Reboiled Absorber/Stripper
- Refluxed Absorber/Stripper
- Single Column Stage
- Simple Extractor
- Single Extraction Stage
- Complex Column
- Total Reflux Column

- Total (Liquid product)
- Total (Liquid product)
- Total (Subcooled product)
- Partial (Vapour product)
- Partial (L & V product)
- None

- Partial (Liquid product)
- Partial (Liquid product)
- Total (Vapour product)
- Total (Liquid product)
- Total (Superheated product)
- None

Etapas de equilibrio, lugar de alimentación, salidas laterales y conexiones entre etapas


Prestar atención en como se enumeran las etapas

ChemSep > Properties (configuración del paquete fisicoquímico)

The screenshot shows the 'Properties' dialog box in ChemSep. It has three tabs: 'Thermodynamics' (marked with a red X), 'Physical properties' (marked with a green check), and 'Reactions' (marked with a green check). The 'Physical properties' tab is active. Under 'Select Thermodynamic Models', there are several dropdown menus: 'K-value', 'Equation of state' (highlighted with a red box), 'Activity coefficient' (highlighted with a red box), 'Vapour pressure', and 'Enthalpy'. To the right, under 'Enthalpy / Exergy', there are fields for 'Reference state' (set to 'Vapour'), 'Reference temperature' (set to '298.1 (K)'), 'Heat of formation' (set to 'Excluded'), 'Surroundings T' (set to '298.150 (K)'), 'Heat Capacity IG' (set to 'T correlation'), and 'Heat Capacity L' (set to 'Mole fraction a_v'). Below these is a section for 'Select Thermodynamic Model parameters (when required)'. A red box on the right lists the available models: Raoult's law, EOS, Gamma-Phi, DECHEMA, Chao-Seader, Polynomial K, Liquid-Liquid (gamma), Prausnitz, Wilson, and Relative volatility. Red arrows point from the 'Equation of state' dropdown to the 'Ecuación de estado para la fase vapor y modelo de actividad para fase liquida' box, from the 'Activity coefficient' dropdown to the 'Ecuación para el calculo de la presión de vapor' box, and from the 'Enthalpy' dropdown to the 'Modelo de entalpía' box.

Thermodynamics Physical properties Reactions

Select Thermodynamic Models

K-value

Equation of state

Activity coefficient

Vapour pressure

Enthalpy

Enthalpy / Exergy

Reference state Vapour 298.1 (K)

Heat of formation Excluded

Surroundings T 298.150 (K)

Heat Capacity IG T correlation

Heat Capacity L Mole fraction a_v

Select Thermodynamic Model parameters (when required)

Raoult's law
EOS
Gamma-Phi
DECHEMA
Chao-Seader
Polynomial K
Liquid-Liquid (gamma)
Prausnitz
Wilson
Relative volatility

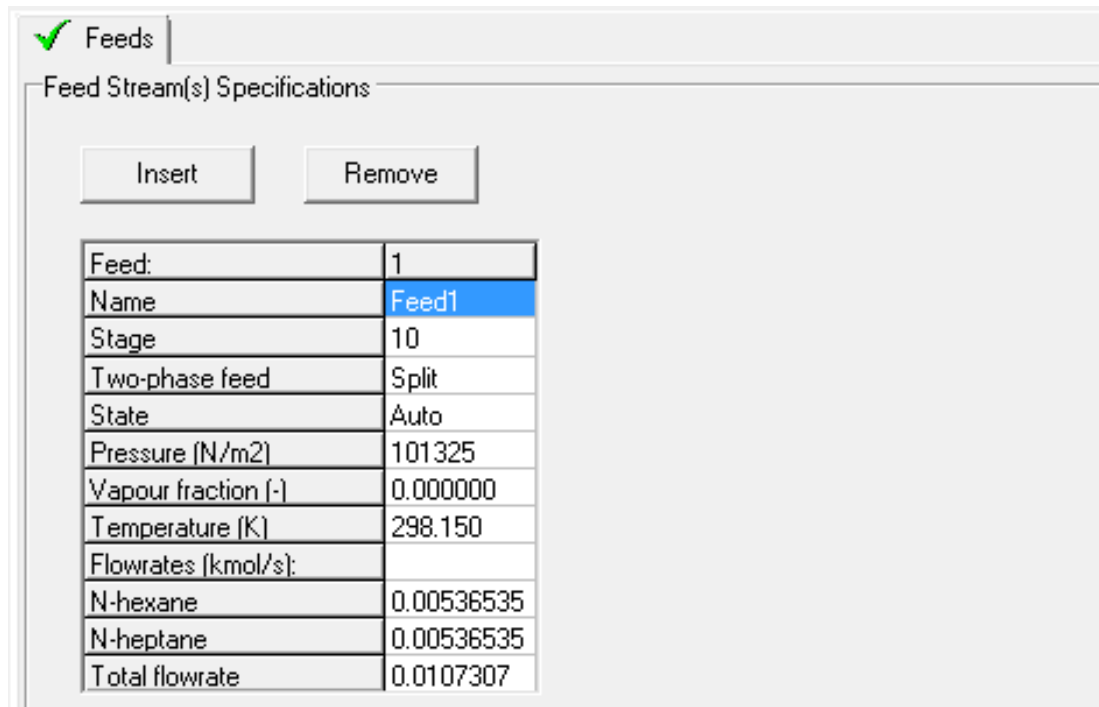
Modelo de entalpía

Ecuación para el calculo de la presión de vapor

Ecuación de estado para la fase vapor y modelo de actividad para fase liquida

ChemSep > Feeds

- Los datos de la alimentación provienen de la corriente conectada en DWSIM.
- Si se agregan mas alimentaciones, se deben definir y conectar dentro del entorno de DWSIM.



✓ Feeds

Feed Stream(s) Specifications

Insert Remove

Feed:	1
Name	Feed1
Stage	10
Two-phase feed	Split
State	Auto
Pressure (N/m ²)	101325
Vapour fraction (-)	0.000000
Temperature (K)	298.150
Flowrates (kmol/s):	
N-hexane	0.00536535
N-heptane	0.00536535
Total flowrate	0.0107307

ChemSep > Specification > Analysis

- Presenta un análisis detallado de todo lo que se debe definir de la columna para completar todos los grados de libertad.

✓ Analysis | ✓ Pressures | ✓ Heaters/Coolers | ✓ Efficiencies | ✓ Column specs |

Degrees of Freedom Analysis

ChemSep requires the following to be specified:

- The number of stages (1)
- The location of all feeds (1)
- The location of all sidestreams (0)
- For each feed stream you must specify
the component flows (2)
and two of the temperature, pressure and vapor fraction (2)
- The pressure in each stage (18)
- The heat duty on each stage except reboilers and condensers (18),
the heat duty will be assumed to be zero unless specified differently
- The pressure in the condenser (1)
- For the condenser you must select one variable to specify (1)
- The pressure in the reboiler (1)
- For the reboiler you must select one variable to specify (1)

Therefore, the total number of degrees of freedom is 46.

ChemSep > Specification > Pressures

- En esta solapa se define el perfil de presiones a lo largo de la columna

✓ Analysis ✓ Pressures ✓ Heaters/Coolers ✓ Efficiencies ✓ Column specs

Column Pressure Specifications

Condenser pressure	<input type="text" value="101325"/>	(N/m ²)
Column pressure	<input type="text" value="Constant pressure"/>	
Top pressure	<input type="text" value="101325"/>	(N/m ²)
Pressure drop / stage	<input type="text" value="*"/>	(N/m ²)
Bottom pressure	<input type="text" value="*"/>	(N/m ²)

Constant pressure ▼

- Constant pressure
- Bottom & top pressures
- Fixed pressure drop/stage
- Estimated pressure drop
- Specified pressure profile

Según lo que se elija se deberán dar diferentes datos

ChemSep > Specification > Heater/Coolers

- Permiten establecer la perdida de calor en la columna.
- Se pueden agregar calentamientos o enfriamientos intermedios

✓ Analysis

✓ Pressures

✓ Heaters/Coolers

✓ Efficiencies

✓ Column specs

Define Column Heat Exchangers

Column heat loss (J/s)

Name column duty

Stage heat exchangers:

Insert

Remove

Remove All

ChemSep > Specification > Efficiencies

- Se definen las eficiencias en cada etapa (por defecto 1)

✓ Analysis | ✓ Pressures | ✓ Heaters/Coolers | ✓ Efficiencies | ✓ Column specs

Define Column Stage Efficiencies

Default stage efficiency (-)

ChemSep > Specification > Column Specs

- Especificaciones de la columna para su simulación
- La implementación de este software es bastante robusta y soporta varios tipos de especificaciones.

✓ Analysis | ✓ Pressures | ✓ Heaters/Coolers | ✓ Efficiencies | ✓ Column specs

Column Product Specifications

Top product name: Condenser duty name:

Top specification: = (-)

Bottom product name: Reboiler duty name:

Bottom specification: = (-)

Product Guesses (optional)

☐ Use guesses for initialization

Reflux ratio

- Reflux ratio
- Heat duty of condenser
- Temperature of condensate
- Distillate flow rate
- Reflux flow rate
- Component flow
- Mole fraction of a component
- Component recovery
- Fraction of combined feeds recovered
- Split between two components
- Flexible

Fraction of combined feeds recovered

- Boilup ratio
- Heat duty of reboiler
- Temperature of reboiler
- Bottom product flow rate
- Reboiled vapour flow
- Component flow
- Mole fraction of a component
- Component recovery
- Fraction of combined feeds recovered
- Split between two components
- Flexible

ChemSep > Specification > Solve options

- En esta solapa se pueden manipular todas las opciones de resolución.

Solve options

Numerics Options

Initialization: Automatic

Method: Newton's method

Accuracy: 1.0000E-06

Number of Iterations: 30

Trace threshold: 0.000000

Newton step limits:

Flow	0.500000	(-)
Temperature	10.0000	(K)
Composition	1.00000	(-)
Flux	1.00000	(-)

Iteration History Settings

Write history to: Screen

☒ Iteration count ☐ T/V/L profiles ☐ Variables

☐ Interactive ☐ X/Y profiles ☐ Jacobian

History file:

Logging: ☐ Thermo ☐ Phys.Prop. ☐ H & S ☐ Numerical derivatives ☐ Time From iteration: 0

ChemSep (CO): ☐ K ☐ H ☐ S ☐ Flash ☐ Activity Coefficient ☐ Vapor Pressure

☐ Density ☐ Viscosity ☐ Thermal conductivity ☐ Cp ☐ Surface tension ☐ Diffusivity

Run options

Temporary file: SCRATCH.TMP Compiler: Gfortran #int:

User program: Show window: #d:

Old results

Automatic

User

Old results

Old results and design

Newton's method

Newton's method

2-pass constant H first

2-pass ideal H first

2-pass ideal K + H first

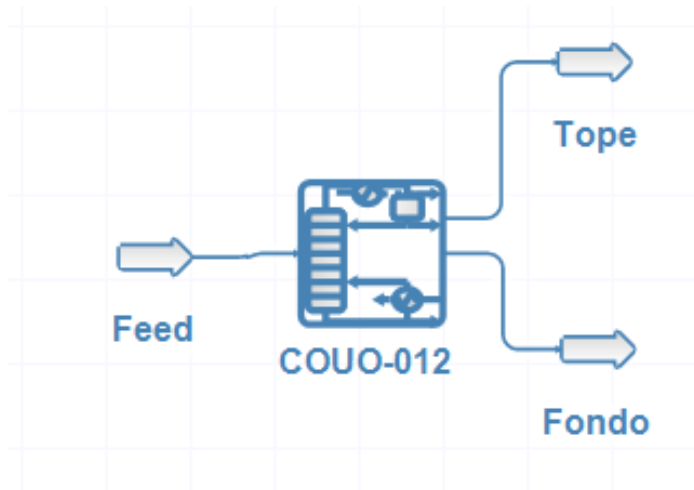
2-pass ideal K + constant H first

2-pass ideal K, constant H, k first

2-pass constant k first

Conexión Mediante el protocolo CAPE OPEN (ChemSep)

- Una vez definidas todas las especificaciones en ChemSep se puede cerrar la ventana y volver al entorno de DWSIM.
- Presionar F5 para resolver el flowsheet.
- Al contar con una solución ya se pueden analizar todos los resultados dentro de Chemsep.
- Al ser un software específico de destilación cuenta con numerosas herramientas de análisis.



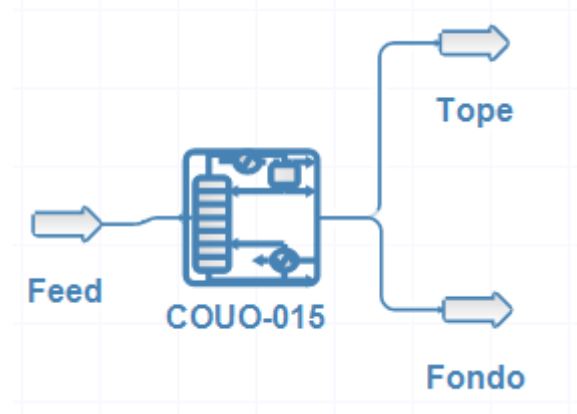
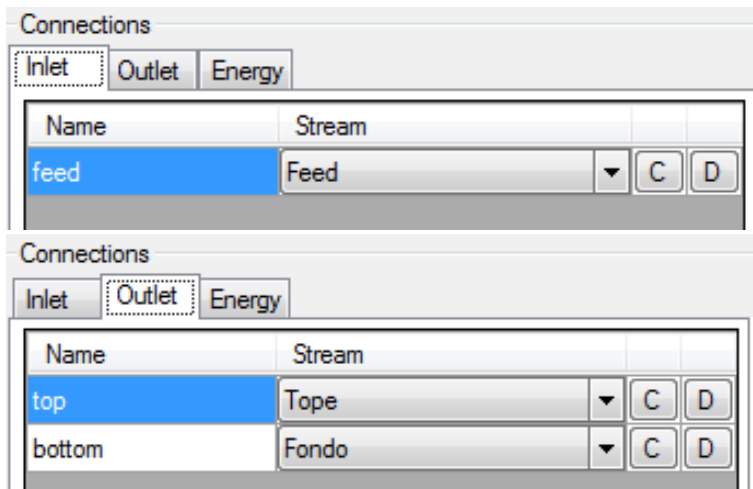
Ejemplo de aplicación de ChemSep

Se desea separar una corriente de 10 mol/s de una mezcla equimolar de N-hexano y N-heptano a 1 atm en condiciones de liquido saturado.

- La destilación se realiza en condiciones atmosféricas.
- La pureza deseada de cada producto es de 0.99 en fracción molar.
- Se propone una columna de destilación simple de 20 etapas de equilibrio con un condensador total.
- La alimentación se introduce 9 etapas por debajo del condensador

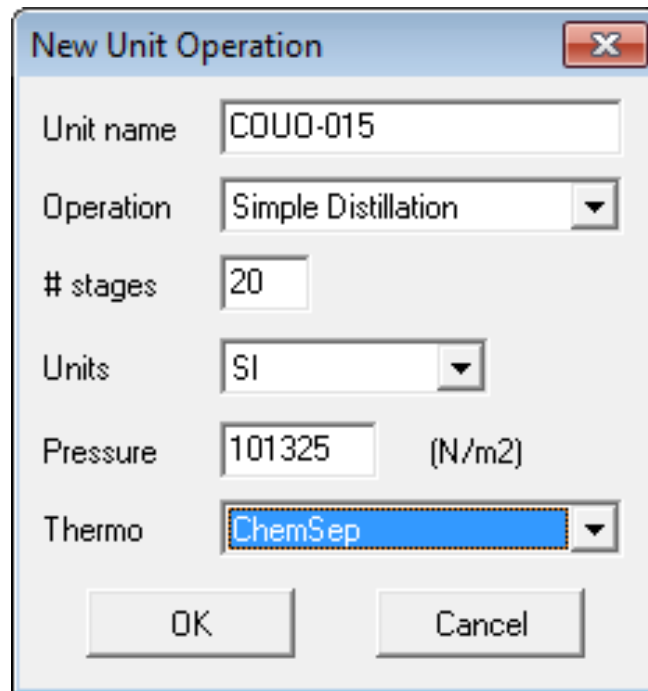
Armado del Caso

- Se crea el caso de estudio y se seleccionan los componentes.
- Se utiliza la ley de Raoult.
- Se agrega el modulo CAPE OPEN de ChemSep
- Se crean y vinculan las corrientes intervinientes.
- Se puede modificar la apariencia del modulo para una mejor visualización.



Armado del Caso (configuración de ChemSep)

- Se introducen algunos datos en la configuración rápida.
- Se establece el numero de etapas y se elige ChemSep como paquete termodinámico.
- Todos estos parámetros pueden modificarse luego sin problemas.



The screenshot shows a dialog box titled "New Unit Operation" with a close button (X) in the top right corner. The dialog contains the following fields and controls:

- Unit name:** A text input field containing "COU0-015".
- Operation:** A dropdown menu showing "Simple Distillation".
- # stages:** A text input field containing "20".
- Units:** A dropdown menu showing "SI".
- Pressure:** A text input field containing "101325" with the unit "(N/m2)" displayed to its right.
- Thermo:** A dropdown menu showing "ChemSep", which is highlighted in blue.
- Buttons:** "OK" and "Cancel" buttons at the bottom.

Armado del Caso (configuración de ChemSep)

- En la solapa Operation se define la configuración operativa de la columna.

✓ Operation

Select Type of Simulation

☐ Flash

☒ Equilibrium column

☐ Nonequilibrium column

Configuration

Operation: Simple Distillation

Condenser: Total (Liquid product)

Reboiler: Partial (Liquid product)

Number of stages (e.g. 10) 20

Feed stage(s) (e.g. 5,7) 10

Sidestream stage(s) (e.g. 2,9)

Pumparound(s) (e.g. 6>8, 9>1)

The diagram shows a distillation column with 20 stages. Feed1 enters at stage 10. The top product is taken from stage 2 (labeled 'Top'). The bottom product is taken from stage 19 (labeled 'Bottom'). A condenser (1) is connected to the top, and a reboiler (20) is connected to the bottom.

Armado del Caso (configuración de ChemSep)

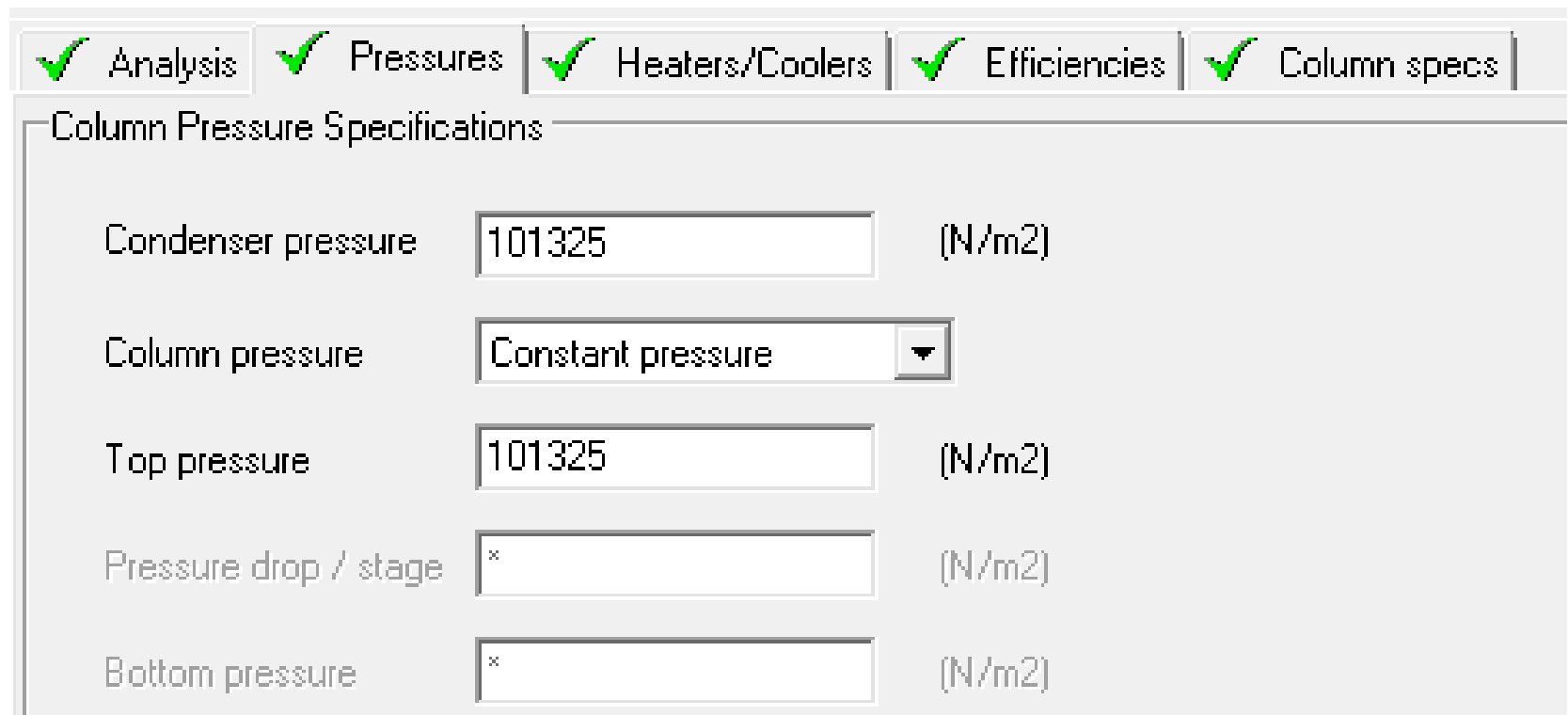
- En la solapa Properties se define el paquete termodinámico, las opciones dependen del paquete seleccionado.

The screenshot shows the 'Properties' tab in the ChemSep software interface. At the top, there are two tabs: 'Thermodynamics' (selected, indicated by a green checkmark) and 'Physical properties' (also indicated by a green checkmark). Below the tabs is a section titled 'Select Thermodynamic Models'. This section contains five rows, each with a label on the left and a dropdown menu on the right. The selected options in the dropdowns are: 'Raoult's law' for K-value, 'Ideal gas law' for Equation of state, 'Ideal solution' for Activity coefficient, 'Antoine' for Vapour pressure, and 'Ideal' for Enthalpy.

Property	Selected Model
K-value	Raoult's law
Equation of state	Ideal gas law
Activity coefficient	Ideal solution
Vapour pressure	Antoine
Enthalpy	Ideal

Armado del Caso (configuración de ChemSep)

- Por defecto, el perfil de presiones es constante.
- El resto de las opciones no es necesario ajustarlas para este caso.



✓ Analysis ✓ Pressures ✓ Heaters/Coolers ✓ Efficiencies ✓ Column specs

Column Pressure Specifications

Condenser pressure	<input type="text" value="101325"/>	(N/m2)
Column pressure	<input type="text" value="Constant pressure"/>	
Top pressure	<input type="text" value="101325"/>	(N/m2)
Pressure drop / stage	<input type="text" value="*"/>	(N/m2)
Bottom pressure	<input type="text" value="*"/>	(N/m2)

Armado del Caso (configuración de ChemSep)

- Luego de chequear todo el diseño se introducen las especificaciones.

✓ Analysis | ✓ Pressures | ✓ Heaters/Coolers | ✓ Efficiencies | ✓ Column specs

Column Product Specifications

Top product name: Condenser duty name:

Top specification: = (-)

Bottom product name: Reboiler duty name:

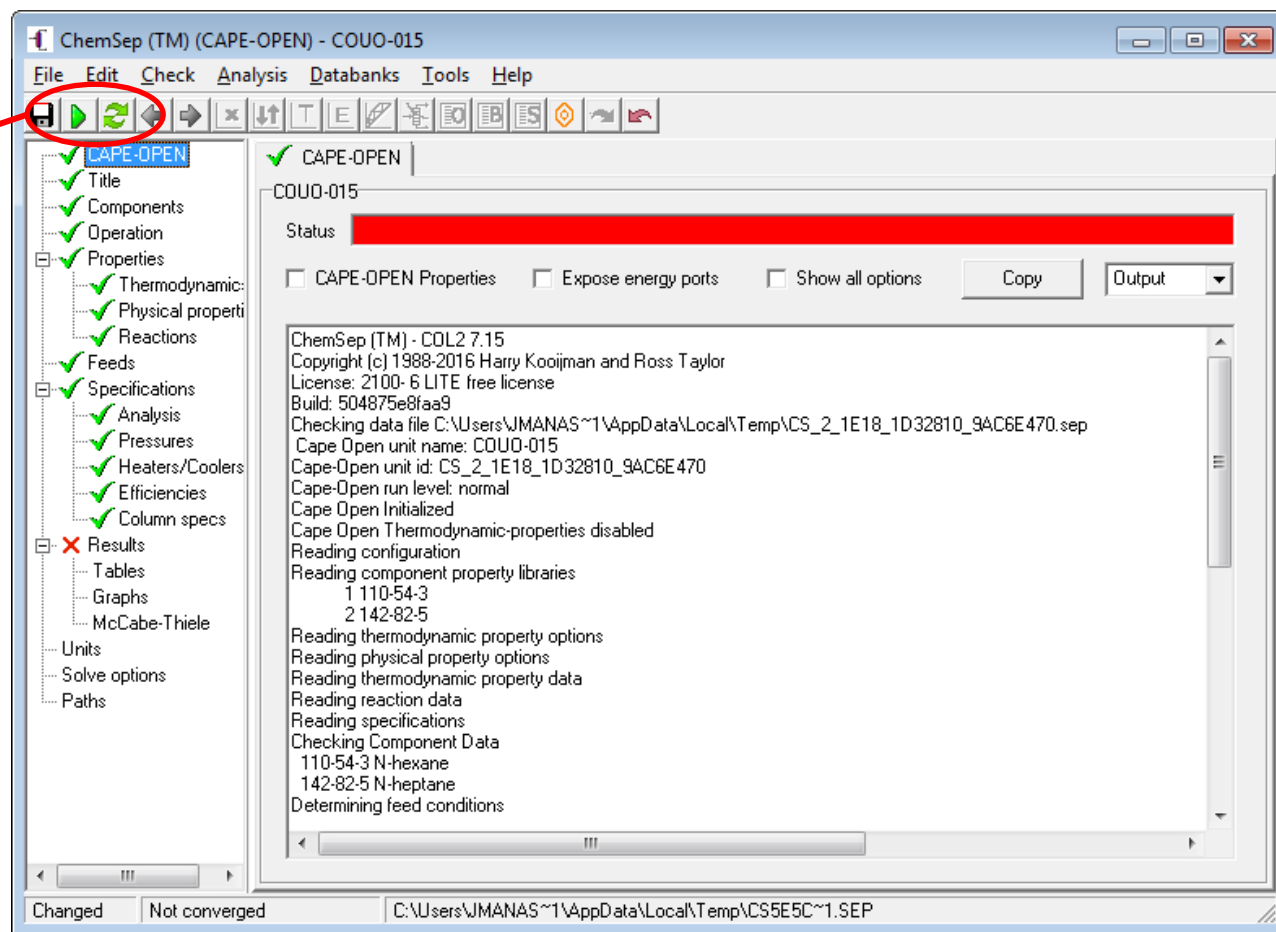
Bottom specification: = (-)



Especificar las composiciones de salida no siempre tiene solución

Armado del Caso (configuración de ChemSep)

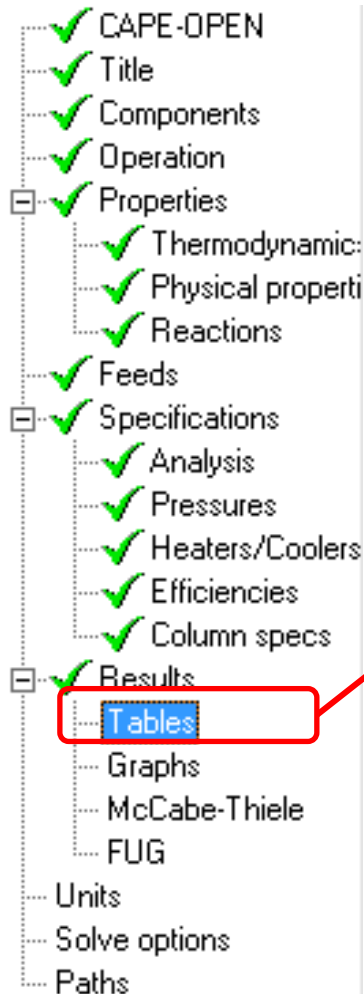
- Finalmente todas las opciones tienen el tilde verde.
- Cerrar la ventana y aceptar guardar el caso



Se puede correr el caso
pero los resultados
solo quedaran dentro
de ChemSep.

Resultados

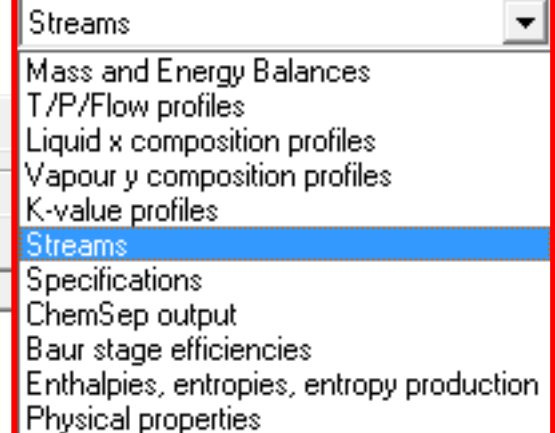
- Resolver el flowsheet en DWSIM (F5) y volver a ChemSep para analizar los resultados.



Tables | Graphs | McCabe-Thiele | FUG

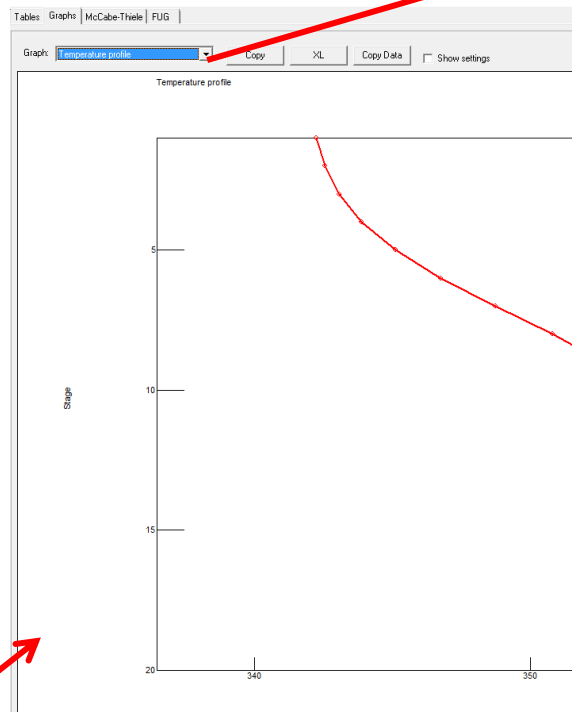
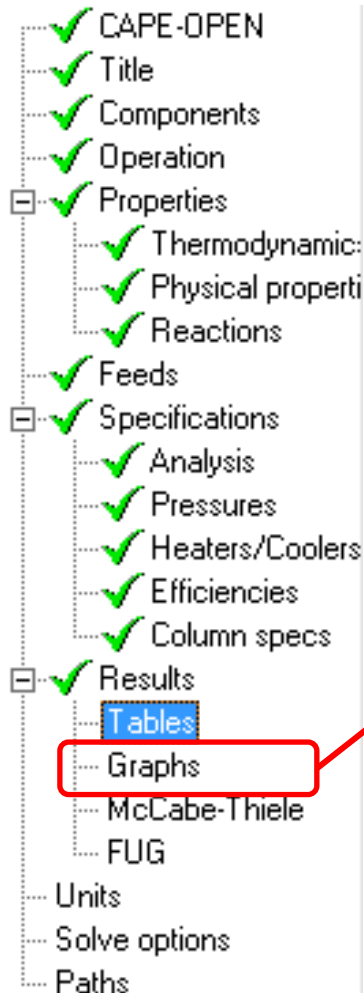
Select table: **Streams**

Stream	Feed1		
Stage	10		
Pressure (N/m ²)	101325		
Vapour fraction (-)	0.000000	0.000000	0.000000
Temperature (K)	353.618	342.236	371.196
Enthalpy (J/kmol)	-2.125E+07	-2.202E+07	-1.847E+07
Entropy (J/kmol/K)	-18027.8	-31124.1	-11305.4
Total molar flow (kmol/s)	0.01000000	0.00500000	0.00500000
Total mass flow (kg/s)	0.931905	0.431586	0.500319
Vapour std.vol.flow (m ³ /s)			
Liquid std.vol.flow (m ³ /s)	0.00138110	6.5167E-04	7.2942E-04
Mole flows (kmol/s)			
N-hexane	0.00500000	0.00495000	5.0000E-05
N-heptane	0.00500000	5.0000E-05	0.00495000
Mole fractions (-)			
N-hexane	0.500000	0.990000	0.01000000
N-heptane	0.500000	0.01000000	0.990000



Resultados

- Resolver el flowsheet en DWSIM (F5) y volver a ChemSep para analizar los resultados.

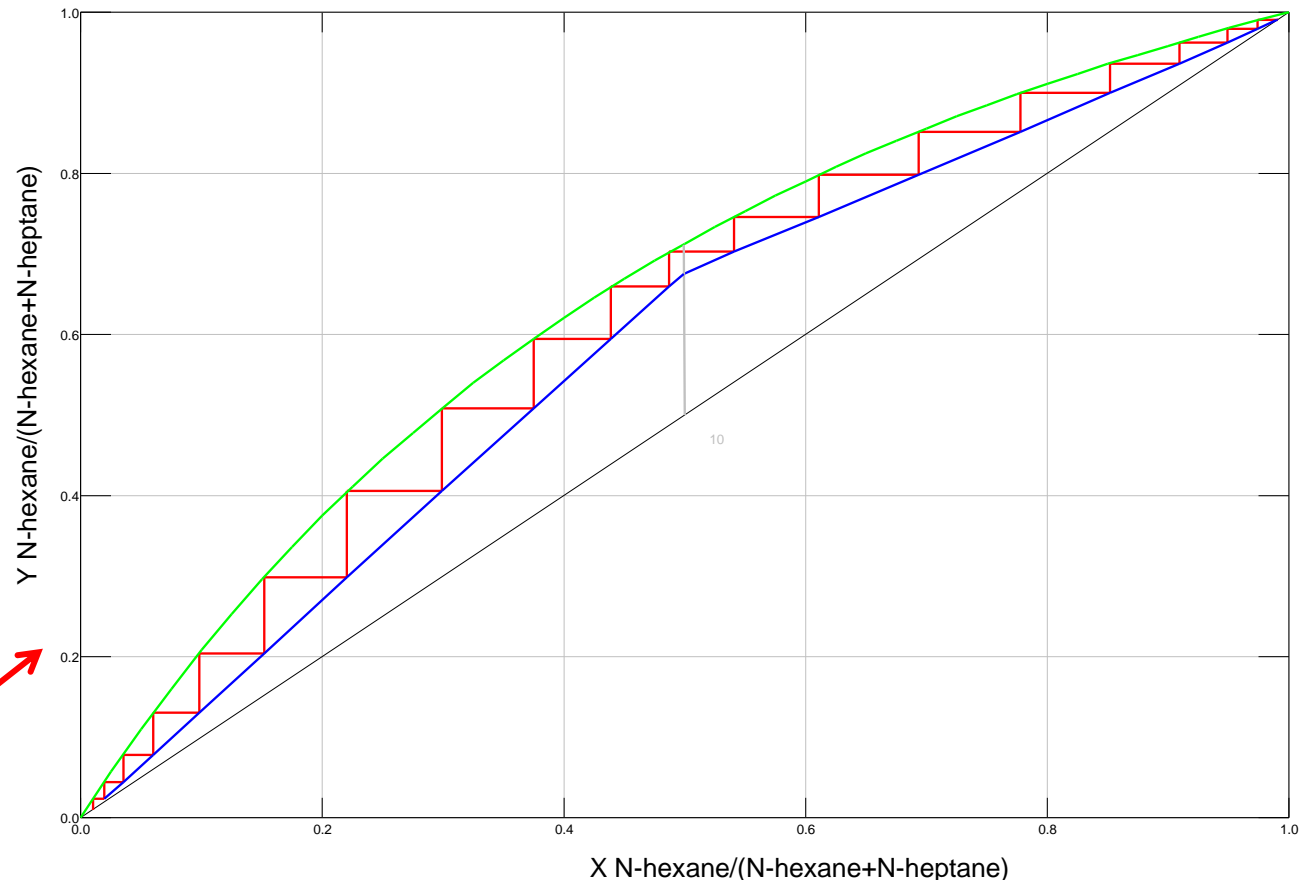
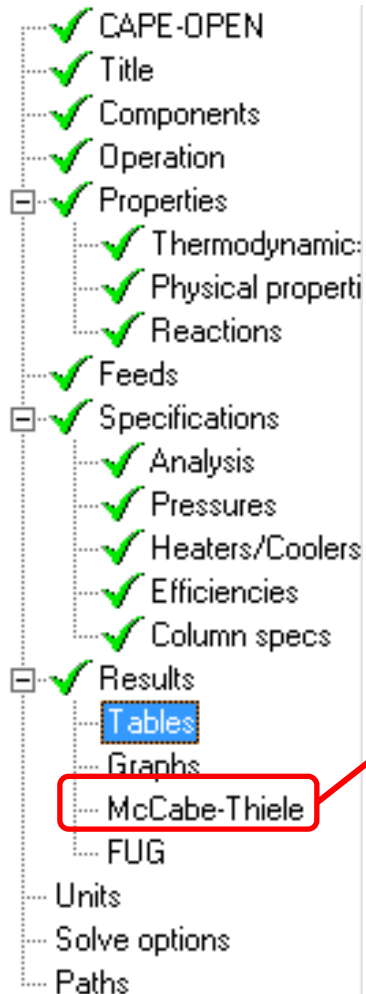


Temperature profile

Liquid phase composition profiles
Vapour phase composition profiles
K-value profiles
Temperature profile
Pressure profile
Flow profiles
Mass transfer rates
Driving forces
Stripping factors
Key ratio profiles
Relative volatility
Enthalpy profiles
Entropy production profile
Baur efficiency
Densities
Viscosities
Thermal conductivities
Surface tension
Operation flowsheet
Lambda
O'Connell Efficiency Plot

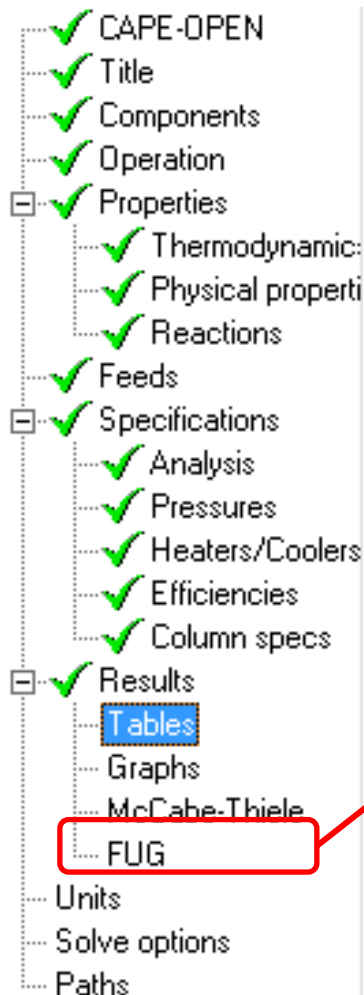
Resultados

- Resolver el flowsheet en DWSIM (F5) y volver a ChemSep para analizar los resultados.



Resultados

- Resolver el flowsheet en DWSIM (F5) y volver a ChemSep para analizar los resultados.



Fenske-Underwood-Gilliland Analysis

Auto select key comp's

Light

N-hexane

Recovery in D

0.99

Heavy

N-heptane

Recovery in B

0.99

Relative volatility

Geometric average

Design RR/RRmin

1.2

Relative volatility = 2.464868

q feed = 1

Minimum number of stages (Fenske) = 10.18718

D = 0.005 (kmol/s)

Minimum reflux ratio (Underwood) = 1.318046

B = 0.005 (kmol/s)

Number of Stages (Eduljee) = 23.54526

phi = 1.422777

Reflux ratio (Eduljee) = 1.581655

err = 7.033686E-07

Feed stage (Fenske) = 19.68132

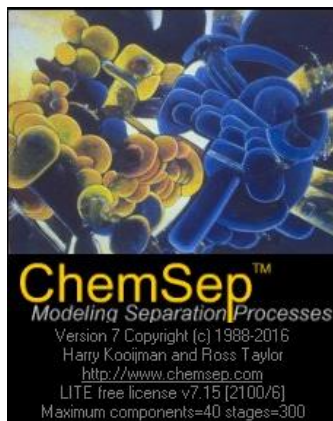
Integración IV



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

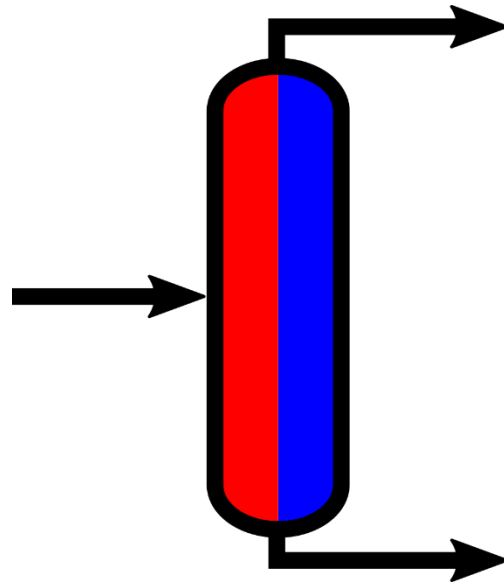
ChemSep

- ChemSep is a column simulator for distillation, absorption, and extraction operations.
- It combines the classic equilibrium stage column model with a nonequilibrium (rate-based) column model in one easy and intuitive interface.
- Test-drive the equilibrium column model and convince yourself with the free ChemSep LITE with up to 40 components and 300 equilibrium stages using a database covering 400+ chemicals.



ChemSep

- Es posible utilizar Chemsep desde su interfaz (sin CAPE-OPEN).
- Solamente se puede simular una columna de destilación.
- La única diferencia respecto de lo anterior es que se deben seleccionar los compuestos y las corrientes de entrada dentro de la interfaz de ChemSep.

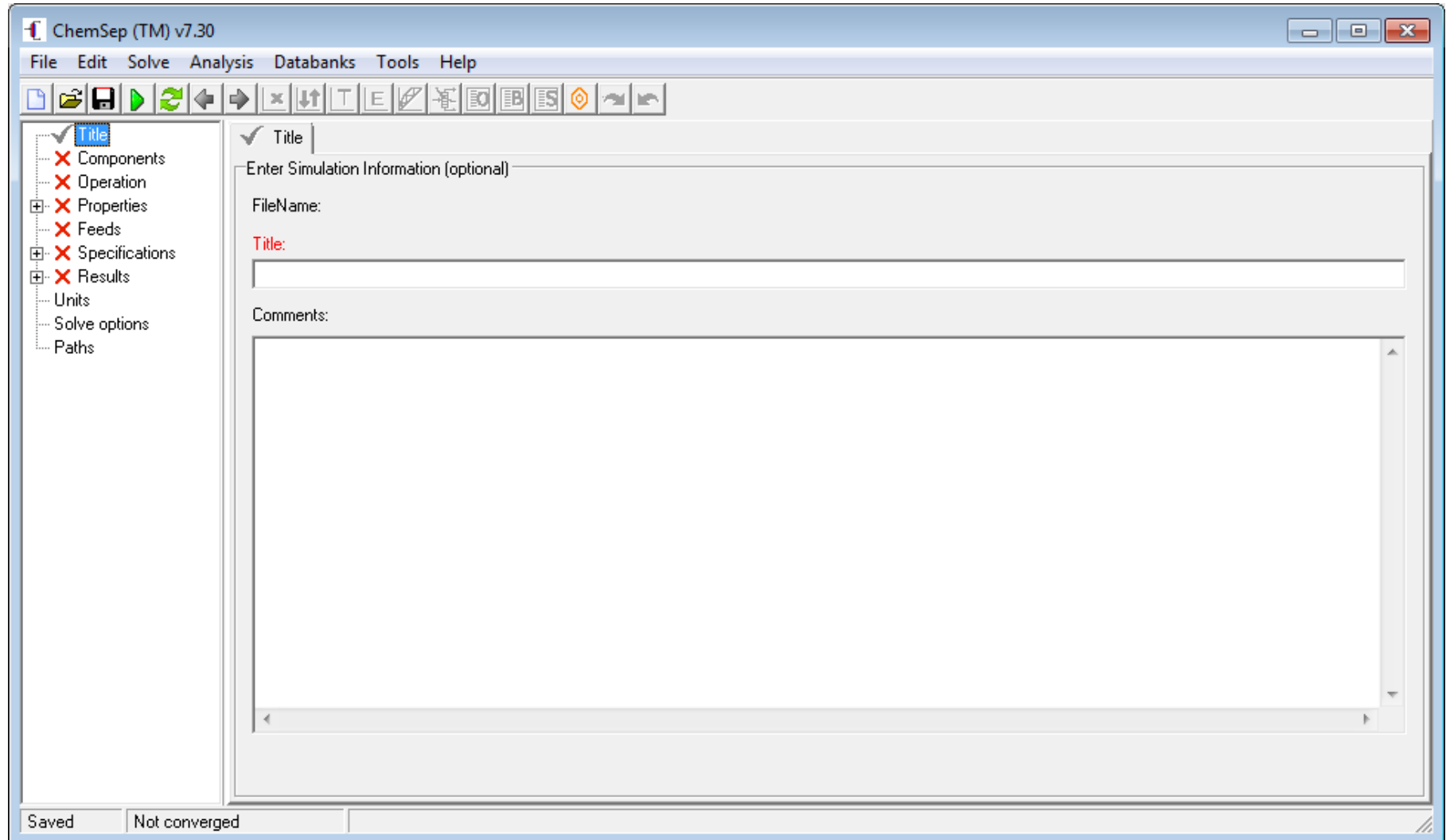


Ejemplo de aplicación de ChemSep

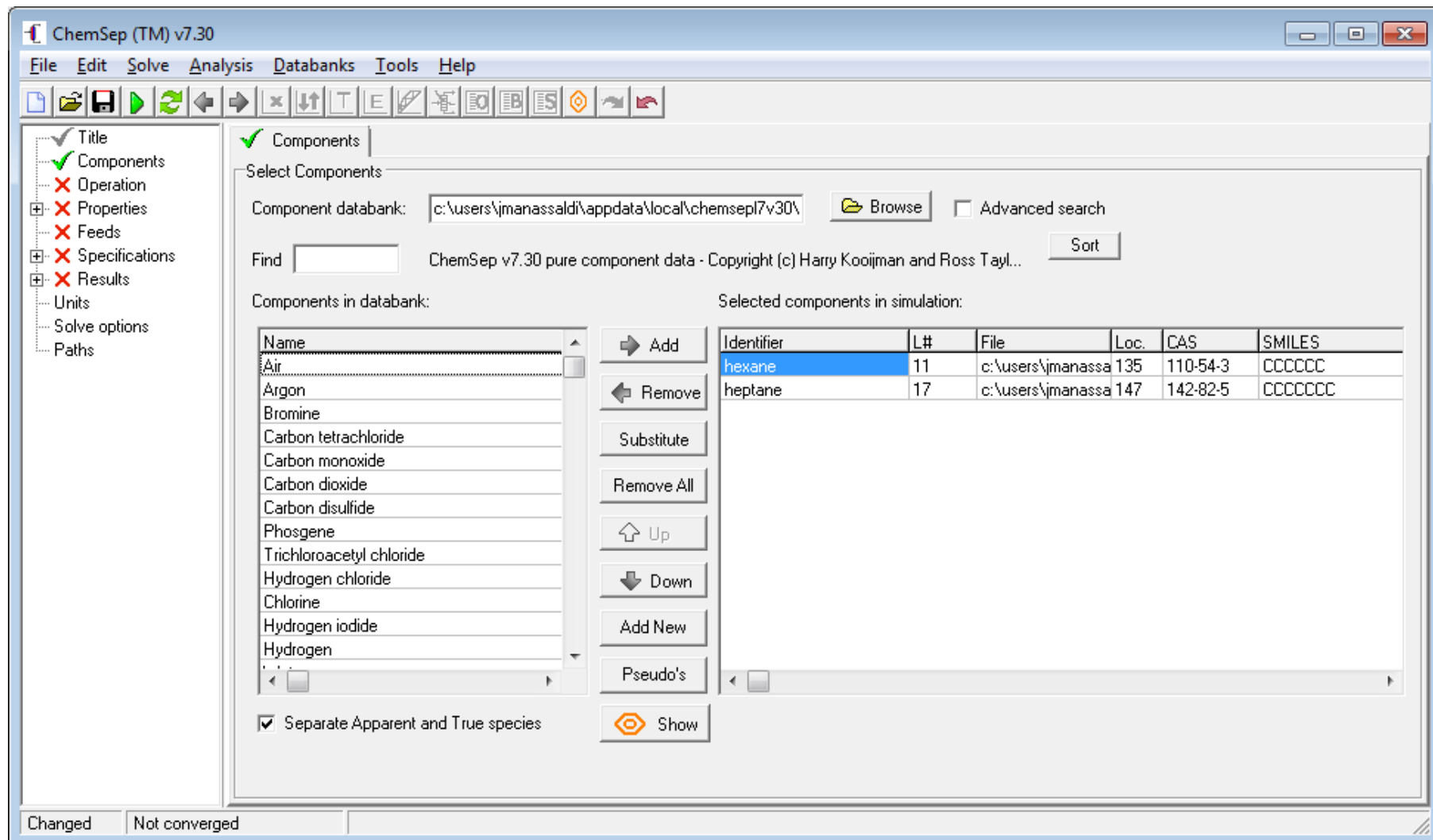
Se desea separar una corriente de 10 mol/s de una mezcla equimolar de N-hexano y N-heptano a 1 atm en condiciones de liquido saturado.

- La destilación se realiza en condiciones atmosféricas.
- La pureza deseada de cada producto es de 0.99 en fracción molar.
- Se propone una columna de destilación simple de 20 etapas de equilibrio con un condensador total.
- La alimentación se introduce 9 etapas por debajo del condensador

Ejemplo de aplicación de ChemSep



Ejemplo de aplicación de ChemSep



Ejemplo de aplicación de ChemSep

ChemSep (TM) v7.30

File Edit Solve Analysis Databanks Tools Help

✓ Title
✓ Components
✓ Operation
✗ Properties
✗ Feeds
✗ Specifications
✗ Results
Units
Solve options
Paths

✓ Operation

Select Type of Simulation

☐ Flash
☒ Equilibrium column
☐ Nonequilibrium column

Configuration

Operation: Simple Distillation

Condenser: Total (Liquid product)

Reboiler: Partial (Liquid product)

Number of stages (e.g. 10) 20

Feed stage(s) (e.g. 5,7) 10

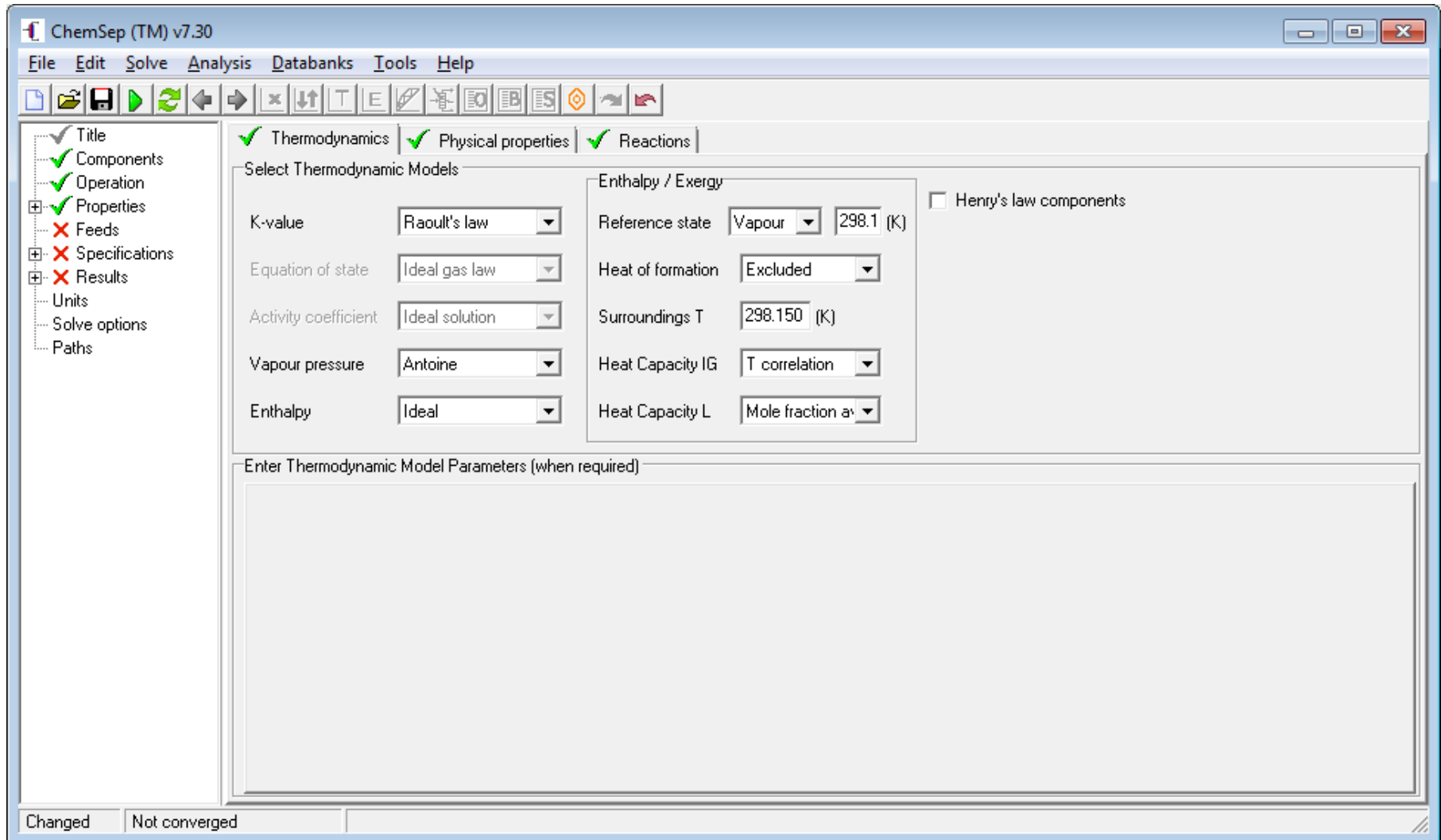
Sidestream stage(s) (e.g. 2,9)

Pumparound(s) (e.g. 6>8, 9>1)

Changed Not converged

```
graph TD
    Feed1 --> S10
    subgraph Column
        S2 --- S19
    end
    S2 --> C1
    C1 --> Top
    S19 --> R20
    R20 --> Bottom
```

Ejemplo de aplicación de ChemSep



Ejemplo de aplicación de ChemSep

ChemSep (TM) v7.30

File Edit Solve Analysis Databanks Tools Help

✓ Title
✓ Components
✓ Operation
+ ✓ Properties
+ ✓ Feeds
+ ✗ Specifications
+ ✗ Results
Units
Solve options
Paths

✓ Feeds

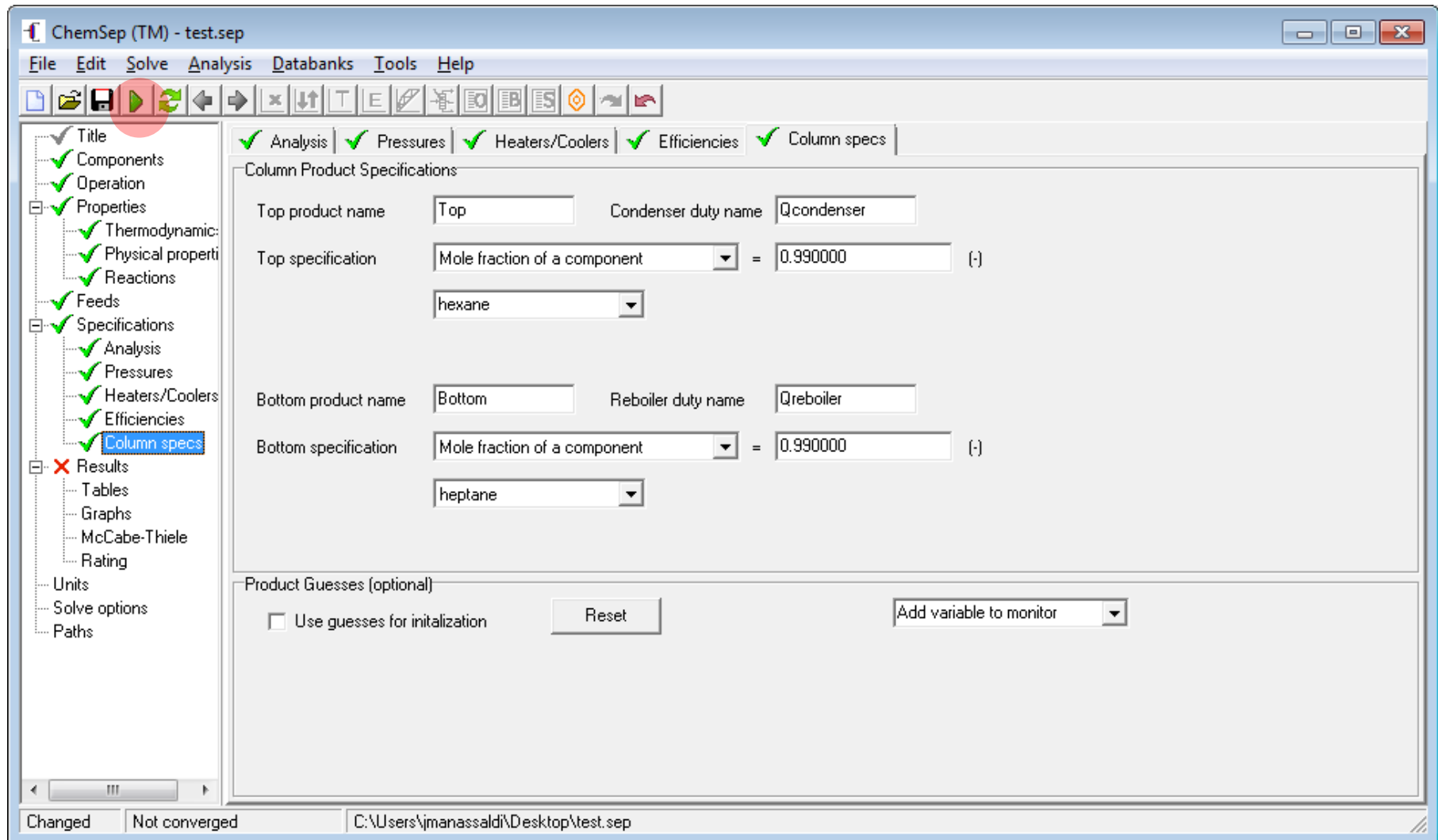
Feed Stream(s) Specifications

Insert Remove Molar flows ▼

Feed:	1
Name	Feed1
Stage	10
Two-phase feed	Split
State	p & V
Pressure (N/m ²)	101325
Vapour fraction (-)	0.000000
Temperature (K)	
Flowrates (kmol/s):	
hexane	0.00500000
heptane	0.00500000
Total flowrate	0.01000000

Changed Not converged

Ejemplo de aplicación de ChemSep



Ejemplo de aplicación de ChemSep

ChemSep (TM) - test.sep

File Edit Solve Analysis Databanks Tools Help

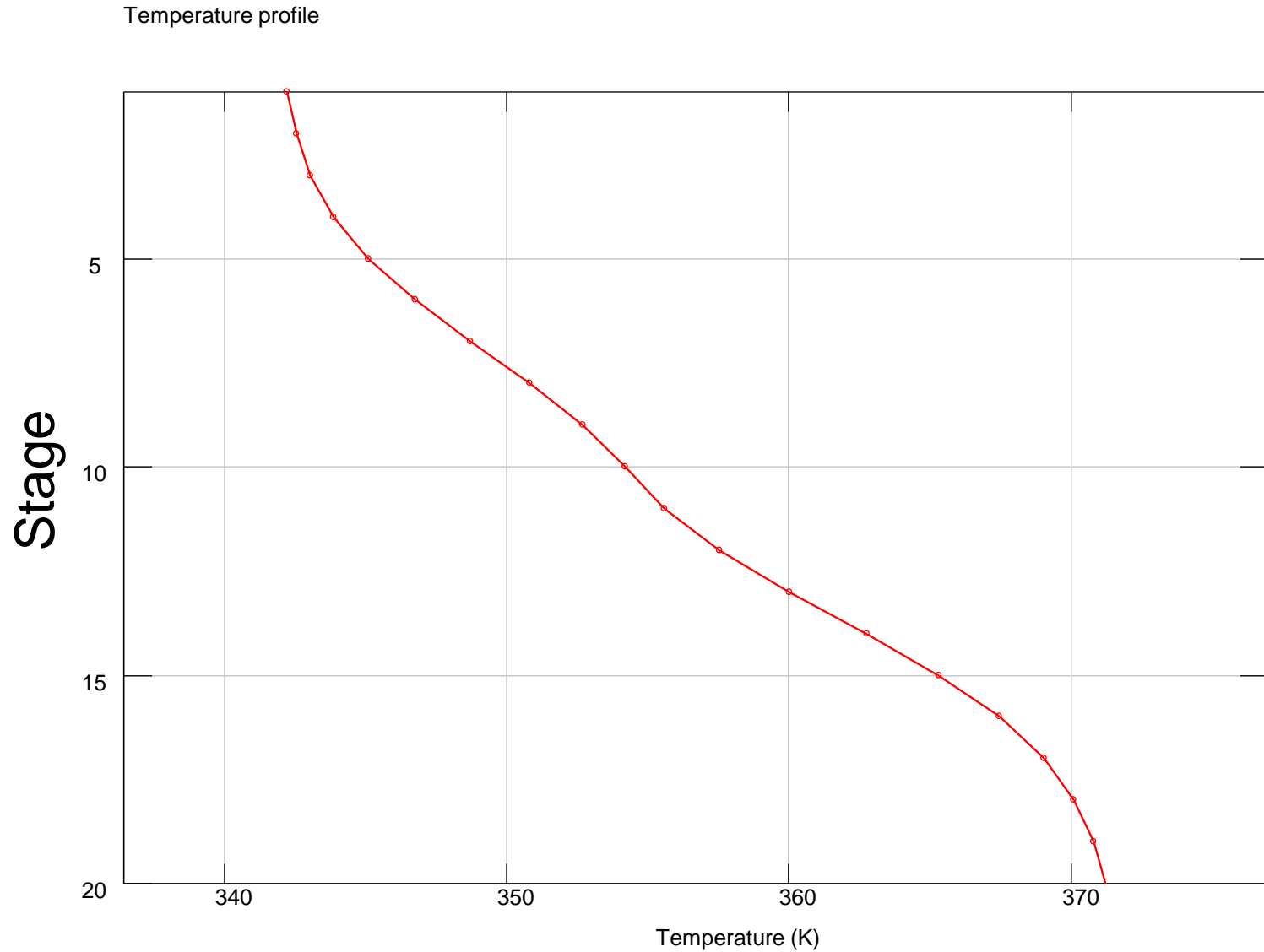
Tables Graphs McCabe-Thiele Rating FUG

Select table: Streams XL Edit Copy Font Print

Stream	Feed1	Top	Bottom
Stage	10	1	20
Pressure (Pa)	101325	101325	101325
Vapour fraction (-)	0.000000	0.000000	0.000000
Temperature (K)	353.821	342.236	371.196
Enthalpy (J/kmol)	-2.120E+07	-2.202E+07	-1.847E+07
Entropy (J/kmol/K)	-17920.2	-31124.1	-11305.4
Total molar flow (mol/s)	10.0000	5.00000	5.00000
Total mass flow (kg/s)	0.931905	0.431586	0.500319
Vapour std.vol.flow (m3/s)			
Liquid std.vol.flow (m3/s)	0.00138045	6.5136E-04	7.2907E-04
Mole flows (mol/s)			
hexane	5.00000	4.95000	0.0500000
heptane	5.00000	0.0500000	4.95000
Mole fractions (-)			
hexane	0.500000	0.990000	0.01000000
heptane	0.500000	0.01000000	0.990000
Mass flows (kg/s)			
hexane	0.430885	0.426576	0.00430885

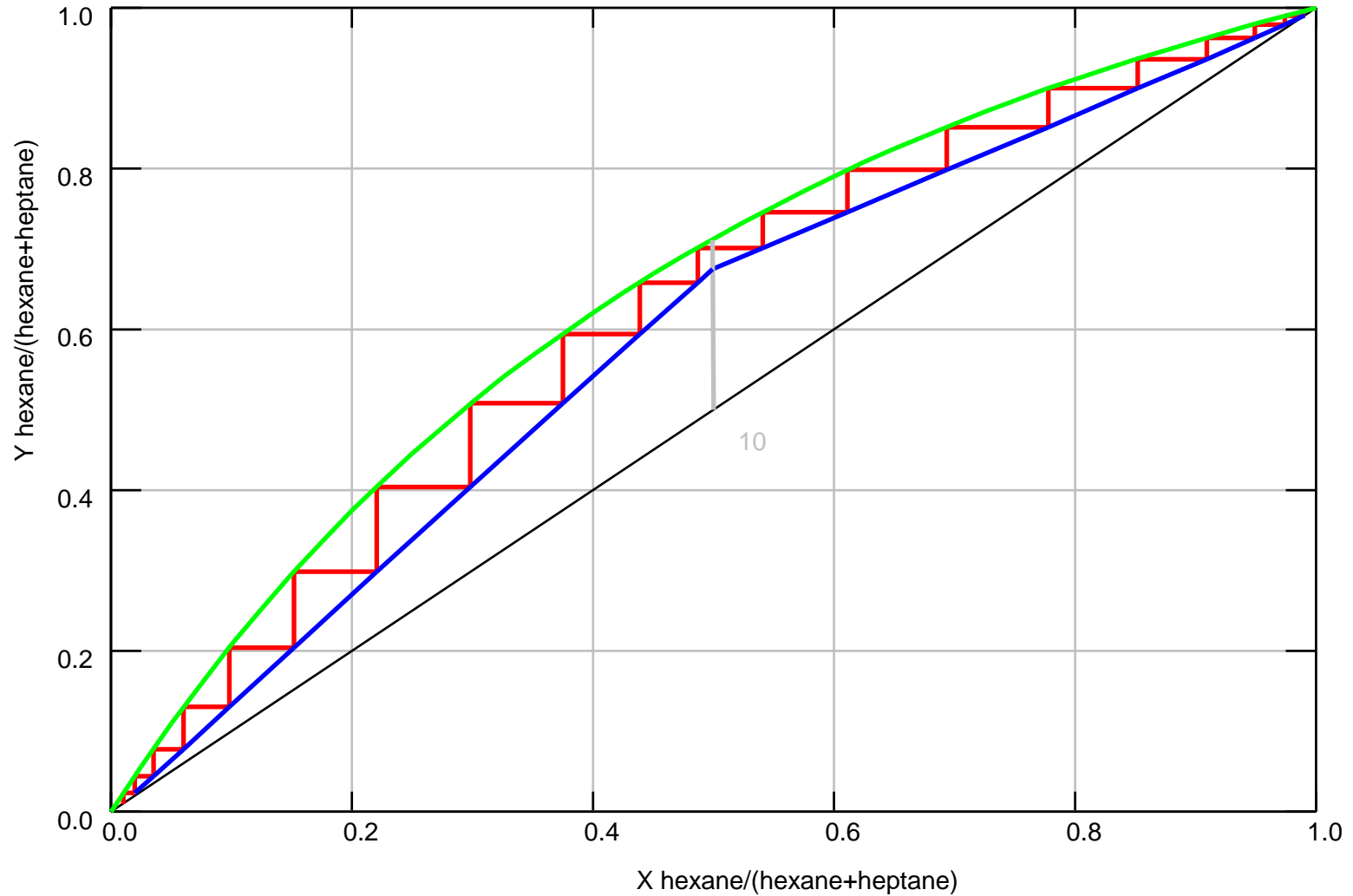
Saved Converged 6 iterations C:\Users\jmanassaldi\Desktop\test.sep

Ejemplo de aplicación de ChemSep



Ejemplo de aplicación de ChemSep

McCabe-Thiele diagram hexane - heptane



Integración IV

Pressure Swing Distillation
Separación de Metanol y Acetona

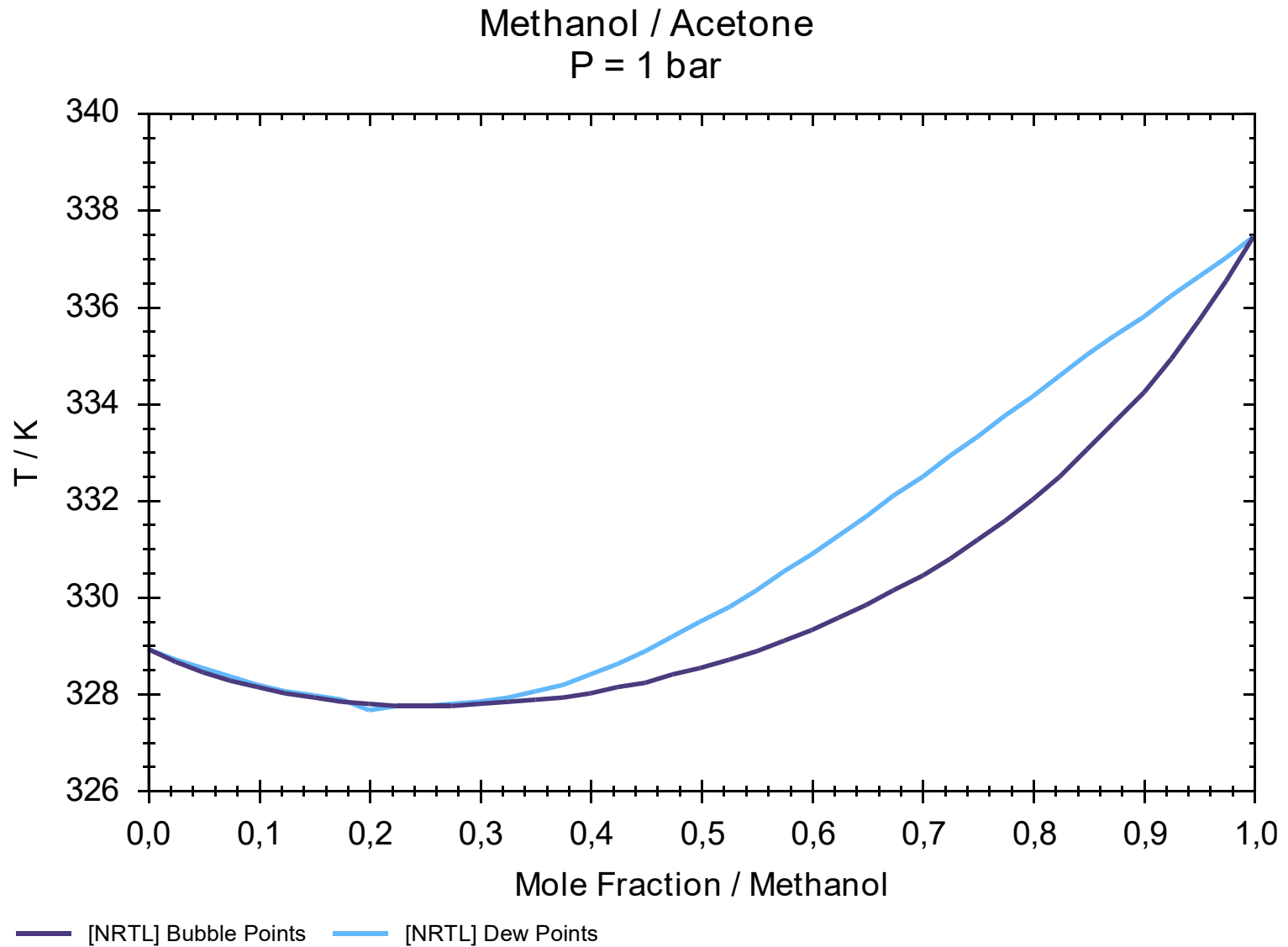
2020

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

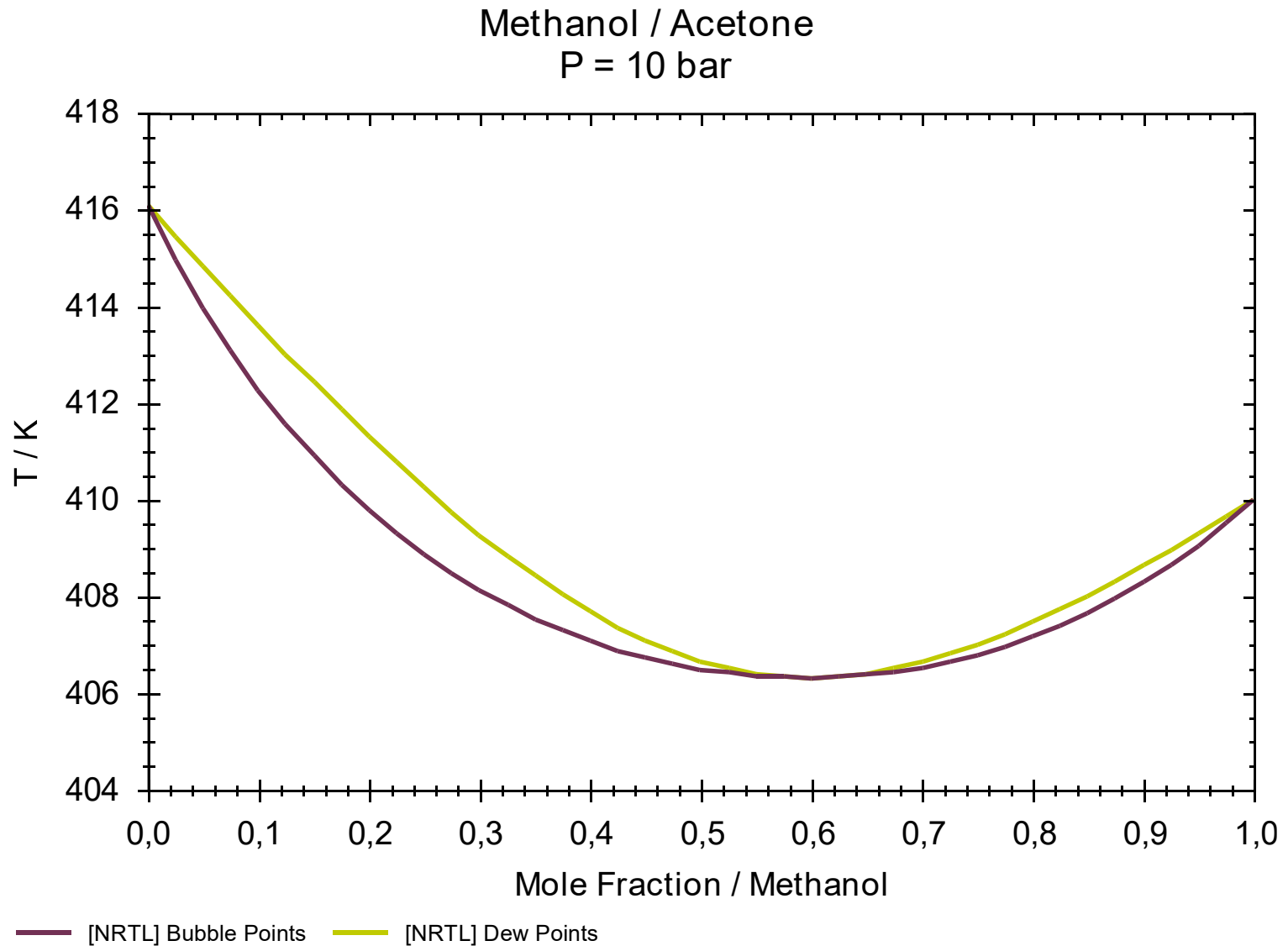
Pressure Swing Distillation

- Es un método para separar un azeótropo sensible a la presión utilizando dos columnas operadas en secuencia a dos presiones diferentes.
- El método aprovecha el “corrimiento” del azeótropo para poder obtener ambos componentes puros.

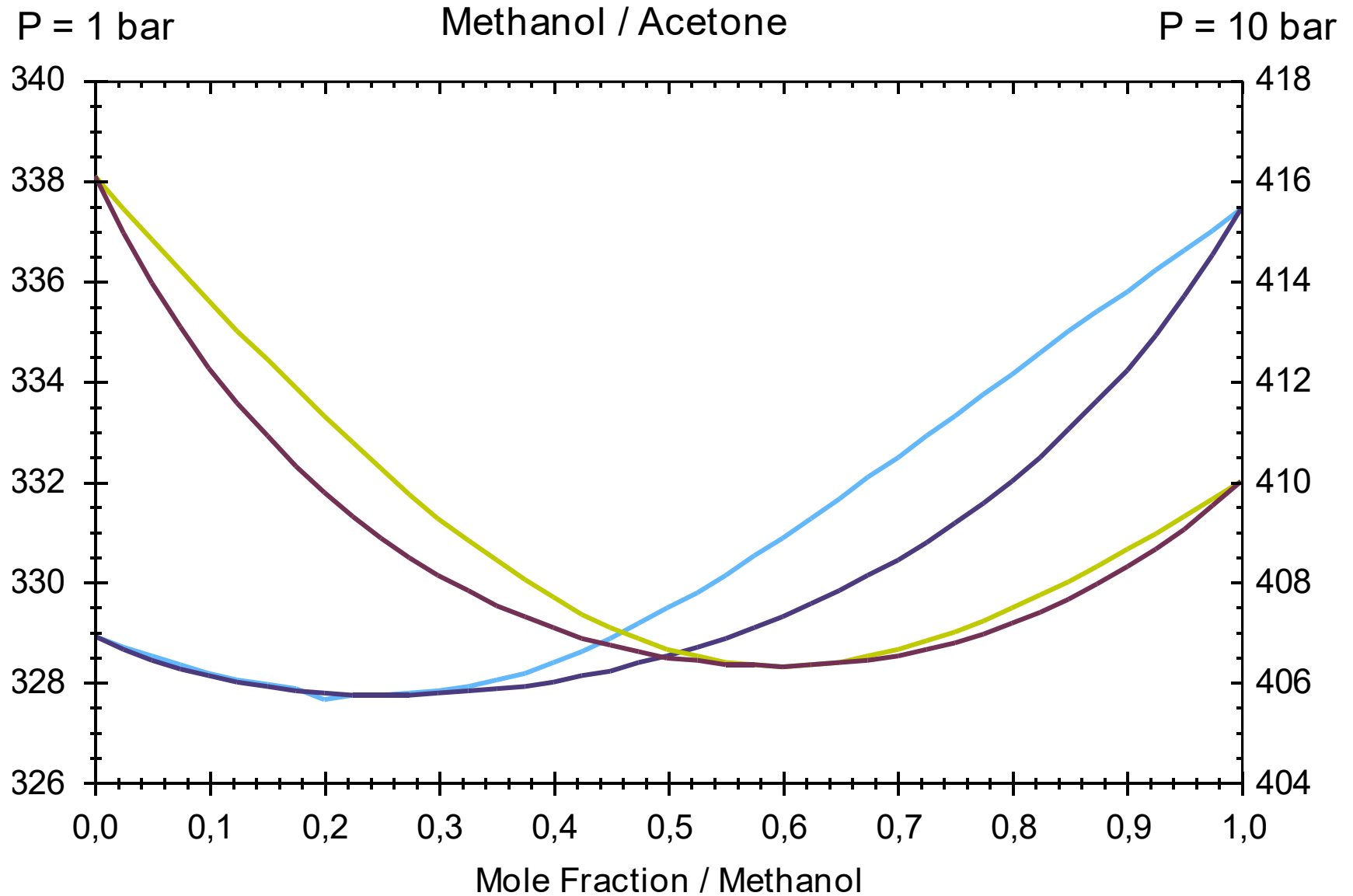
Pressure Swing Distillation



Pressure Swing Distillation



Pressure Swing Distillation



Pressure Swing Distillation

