

SIMULACIÓN Y OPTIMIZACIÓN DE PROCESOS QUÍMICOS

GUÍA DE LA PRÁCTICA 2

Ángel L. Villanueva Perales

Departamento de Ingeniería Química y Ambiental

Universidad de Sevilla

Marzo 2010

TABLA DE CONTENIDOS

TABLA DE CONTENIDOS.....	1
1. Columnas para separación en Aspen Plus	2
2. Diseño de columnas de destilación simple	3
2.1 Selección del sistema de unidades, componentes y método termodinámico.....	3
2.2 Diseñando con el modelo DSTWU	5
2.3 Diseño riguroso con el modelo Radfrac.....	11
2.4 Especificaciones de diseño con Radfrac	22
3. Simulación de absorbedores y strippers	30
3.1 Selección del sistema de unidades, componentes y método termodinámico. Seleccionando constantes de Henry.	31
3.2 Simulación del absorbedor con el modelo Radfrac	34
3.3 Definiendo especificaciones de diseño genéricas en Aspen Plus	38

1. Columnas para separación en Aspen Plus

Las modelos de unidades de proceso que posee Aspen Plus para separación de componentes se encuentran en la pestaña *Columns* de la librería de modelos, tal como se muestra en la Figura 1:

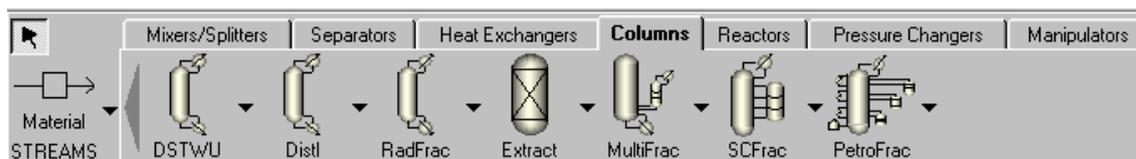


Figura 1. Columnas de separación disponibles en Aspen Plus

Las características de cada una de ellas son:

- *DSTWU*: Diseño aproximado de columnas simples de destilación basado en el método Winn-Underwood-Gilliland. No es válido para mezclas azeotrópicas o con dos fases líquidas.
- *Distl*: Simulación de columnas simples de destilación basado en el método aproximado de Edmister.
- *Radfrac*: Simulación rigurosa de equipos a partir de etapas de equilibrio. Útil para columnas de destilación simple o con extracciones intermedias, absorbedores y strippers.
- *Extract*: Simulación rigurosa de equipos para extracción líquido-líquido operando en contracorriente
- *Multifrac*: Simulación rigurosa de columnas de destilación con cualquier configuración compleja
- *Petrofrac*: Idem que Multifrac pero enfocado a aplicaciones petrolíferas y de refino.
- *SCFrac*: Diseño aproximado de columnas simples con extracciones laterales. Enfocado a aplicaciones petrolíferas o de refino.



Nota: Por columna de destilación simple nos referimos a una que tiene una alimentación y dos productos, destilado y colas, y posee un condensador y un hervidor.

Todos estos equipos están basados en conceptos de etapa de equilibrio. El modelo *Radfrac* permite dos formas de simular etapas reales:

- 1) Aplicando eficiencias o HETP a las etapas de equilibrio. Esto sólo afecta al cálculo de pérdida de carga en la torre.
- 2) Usando la opción *RateSep* para simular la torre a partir de coeficientes de transferencia en. En tal caso las etapas se consideran etapas reales y no de equilibrio.

2. Diseño de columnas de destilación simple

Los modelos DSTWU y *Radfrac* son los más comúnmente usados para el diseño de columnas de destilación simple. Vamos a explicar sus características a partir de un ejemplo donde se diseña una columna de destilación simple para separar una mezcla de hidrocarburos, cuya composición se muestra en la tabla 1. El objetivo es recuperar el 99% de los C4 por cabeza y el 99% de los C5 por colas. Se usará un condensador total y la presión de la columna debe ajustarse de manera que el condensador trabaje a 50 °C para que pueda usarse agua de refrigeración como refrigerante.

Compuesto	Caudal (kmol/h)
i-butano	20
n-butano	25
i-pentano	60
n-pentano	40
Presión	5 bar
Temperatura	25 °C
Estado	Líquido

Tabla 1. Corriente a separar por destilación

En primer lugar se hará un diseño aproximado de la torre con el modelo DSTWU y después el diseño se comprobará y ajustará simulando la torre de manera rigurosa con el modelo *Radfrac*.

2.1 Selección del sistema de unidades, componentes y método termodinámico

Al comenzar la simulación elegimos *Templates* → *General with metric units* ya que el problema nos lo dan en unidades métricas. En la figura 2 se muestran los componentes ya introducidos en la simulación y renombrados manualmente (columna *Component ID*) para que sean fácilmente reconocibles en las tablas de resultados. Todos

los componentes se encuentran fácilmente buscando por su nombre genérico: isopentane, isobutane, n-pentane, n-butane.

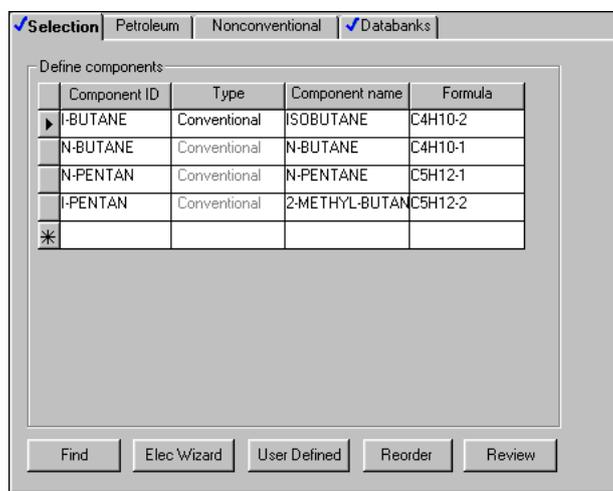


Figura 2. Componentes introducidos en la simulación

El método termodinámico elegido es el de Chao-Seader (CHAO-SEA en Aspen Plus) que es apropiado para mezclas de hidrocarburos y en especial para la simulación de columnas debutanizadoras como es el caso (Mira la lista de métodos termodinámicos que se mostró en clase). Debe aclararse que el método de Chao-Seader es predictivo basado en ecuaciones de estado y, por tanto, no aparecen parámetros de interacción en la carpeta *Parameters* → *Binary Interaction*. En la Figura 3 se muestra cómo se elige dicho método en Aspen Plus. Una vez realizado todo lo anterior podemos afrontar el diseño de la torre de destilación.

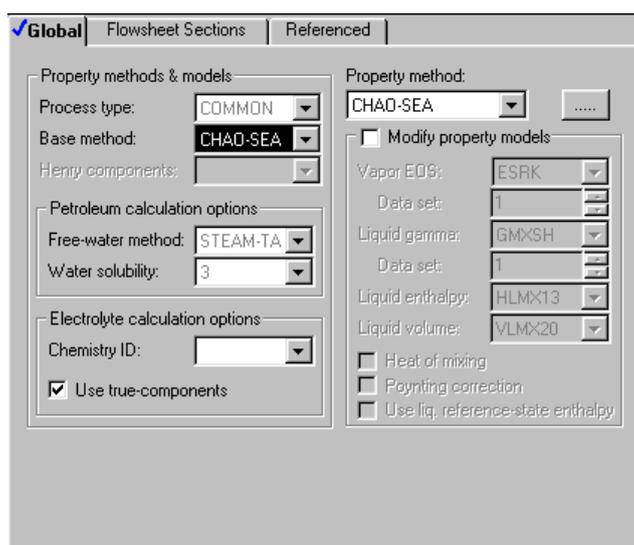


Figura 3. Elección del método Chao-Seader en Aspen Plus

2.2 Diseñando con el modelo DSTWU

El método Winn-Underwood-Gilliland en el que se basa el modelo DSTWU no es válido para mezclas azeotrópicas ni heterogéneas. Ya que la mezcla es de hidrocarburos semejantes y no polares, la presencia de azeótropos es poco probable. Esto se puede comprobar si se analizan los diagramas T-x-y entre los diferentes pares de compuestos pero ¿a qué presión realizamos el cálculo de los diagramas T-x-y?

La presión de la columna debe fijarse para que el condensador total opere a 50 °C. Como destilado vamos a obtener una corriente que va a estar formada prácticamente por los C4 que entran a la torre. Con un cálculo flash podemos calcular la presión de punto de burbuja que corresponde a una temperatura de 50 °C para dicha corriente. Esto se deja a manos del lector y se le anime a que use dicha presión para el resto del ejercicio.

Una vez determinada dicha presión se puede comprobar con los diagramas T-x-y que no existen azeótropos en la mezcla a dicha presión y por tanto el uso de la DSTWU es válido.

⚠ Importante: No obstante, si las volatilidades relativas de los compuestos varían mucho en la torre, como es el caso de mezclas muy no ideales, las estimaciones del método DSTWU serán bastante pobres.

Para usar el modelo DSTWU vamos a la pestaña *Columns* de la librería de equipos y lo elegimos con el botón izquierdo para después colocarlo en el escritorio de Aspen, como muestra la Figura 3-izquierda.

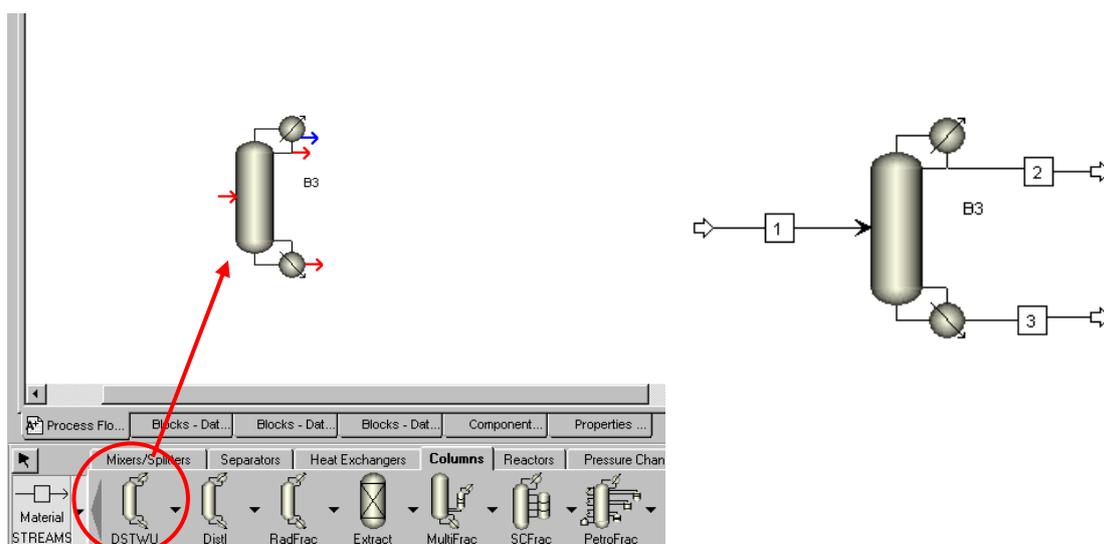


Figura 3. Izquierda: Puertos modelo DSTWU. Derecha: Corrientes conectadas

Al pulsar sobre *Material Streams* y acercarnos al modelo DSTWU observamos que hay tres puertos obligatorios (en rojo) en los que debemos conectar corrientes de materia: alimentación, destilado y cola. Existe otra en azul que no vamos a usar. Si quiere información sobre cada puerto coloque el cursor en forma de cruz encima de cada puerto. La Figura 3-derecha muestra como quedan colocadas las corrientes.

Después especificamos la alimentación a la torre con los datos del problema (Figura 4).

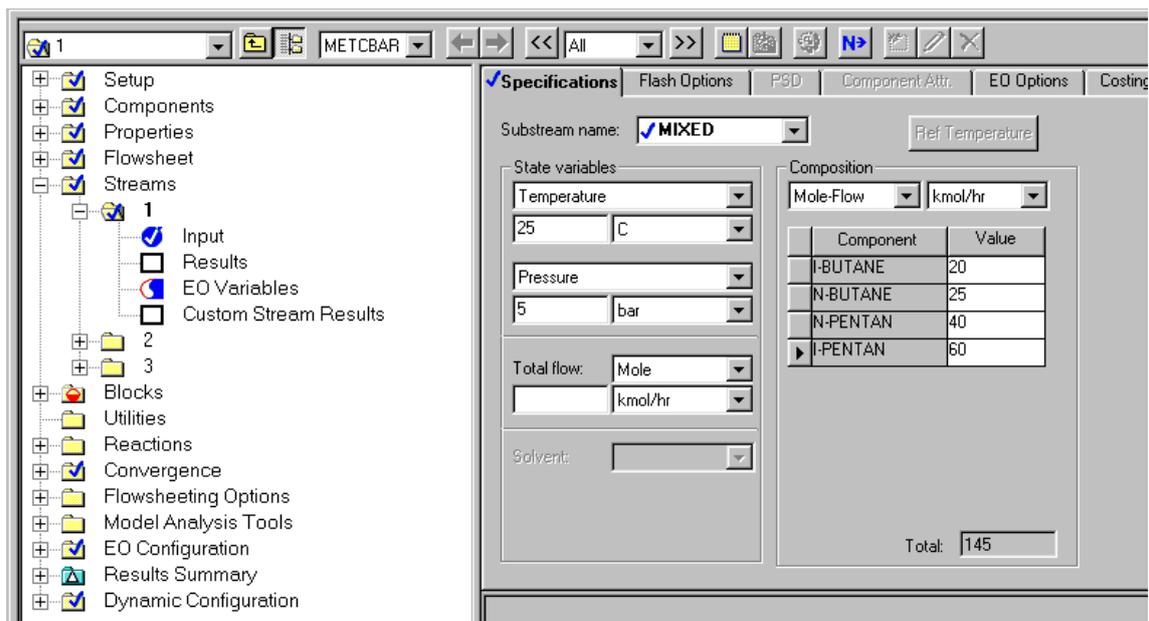


Figura 4. Especificación de la alimentación al modelo DSTWU

Una vez especificada la alimentación solo nos queda especificar el modelo DSTWU. Para ello pulsamos dos veces con el botón izquierdo sobre el modelo o nos vamos a la carpeta *Blocks* del navegador de Aspen Plus y pulsamos sobre la carpeta con el nombre del modelo DSTWU (en este ejemplo se llama B3), que debe estar señalado en rojo ya que aún no está especificado

La pantalla de especificación del modelo DSTWU se muestra en la Figura 5. Para especificar el modelo DSTWU debemos introducir:

1) *Recuperación de los claves (Key component recoveries)*. Con los menús desplegables se eligen los componentes claves. Estos compuestos definen la separación que se desea en la torre, como se explicará más adelante. **La recuperación del clave ligero y el clave pesado se especifica con respecto a destilado**, en tanto por uno, es decir:

$$\text{Recuperación clave ligero} = \frac{\text{moles clave ligero en destilado}}{\text{moles clave ligero en alimentación}}$$

$$\text{Recuperación clave pesado} = \frac{\text{moles clave pesado en destilado}}{\text{moles clave pesado en alimentación}}$$

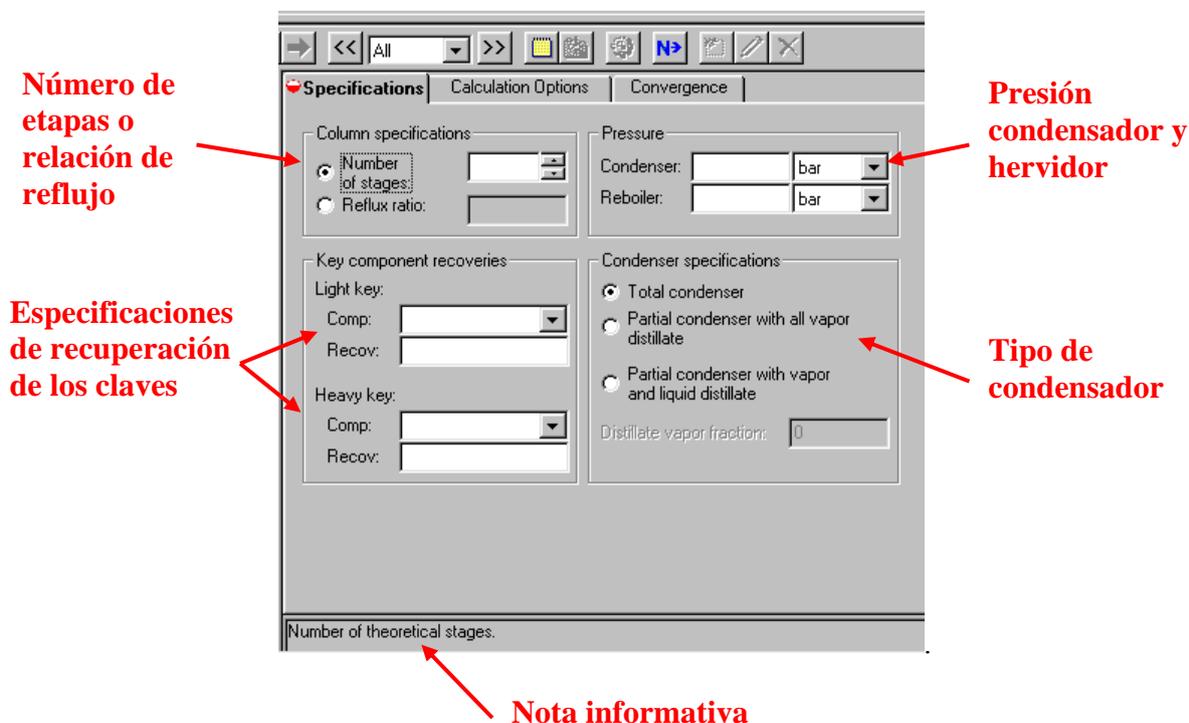


Figura 5. Pantalla de especificación modelo DSTWU

2) *Número de etapas o relación de reflujo*. Ya que no se sabe cuál es el número mínimo de platos o la relación de reflujo mínima para la separación que se ha especificado es difícil saber qué datos introducir. Generalmente se especifica que la torre se diseñe con una relación de reflujo de 1,2 veces la relación de reflujo mínima. Esto se especifica introduciendo **-1,2** en el campo de *Reflux Ratio* ya que en dicho campo cuando se escribe un *número negativo* x se indica que la relación de reflujo sea x veces la relación de reflujo mínima. Si se introdujese un número positivo se indicaría el valor real de la relación de reflujo.

3) *Presión del condensador y hervidor*. Si se especifican ambas iguales se considera que no hay pérdida de carga en la torre. En cualquier caso, la presión del hervidor debe ser siempre mayor o igual que la del condensador. Elegimos 3,5 bar de presión (no es la correcta para obtener 50 °C en el condensador; se deja a manos del lector).

4) *Tipo de condensador: total, parcial o mixto.* Si se elige parcial o mixto, el número de etapas ideales que proporciona DSTWU incluye al condensador parcial o mixto, que se considera una etapa de equilibrio. En este caso elegimos total como nos indica el problema.

La elección de los componentes clave debe hacerse en función de la separación que se desea. En este caso no hay azeótropos y no hay ningún límite para separar los componentes en base a la volatilidad relativa que existe entre ellos. Si miramos la presión de vapor de los diferentes compuestos podemos *hacernos una idea* de cómo ordenarlos en función de su volatilidad: a mayor presión de vapor, mayor volatilidad. Si hacemos esto, el orden de mayor a menor volatilidad es: iso-butano, n-butano, iso-pentano y n-pentano. Por tanto si quiero separar por cabeza los C4 y por colas los C5 *los compuestos que me sirven para definir dicha separación* son el n-butano y el iso-pentano. El n-butano será el compuesto clave ligero, ya que especificando su separación implícitamente se especifica la de los componentes más ligeros que él (el iso-butano), que acabarán también en el destilado. Análogamente, el iso-pentano es el compuesto clave pesado, ya que especificando su separación implícitamente se especifica la de los componentes más pesados que él (el n-pentano), que acabarán también en colas.

Ya que nos dicen que el 99% de los C4 deben recuperarse por cabeza, eso se cumplirá si la recuperación del n-butano (clave ligero) en el destilado es del 99%. La recuperación del iso-pentano (clave pesado) *en el destilado* la especificamos en 0,01% asegurándonos que se recupera el 99% de los C5 por colas.

De tal manera, la especificación del modelo DSTWU queda como muestra la Figura 6.

Figura 6. Pantalla de especificación modelo DSTWU para la debutanizadora

Observamos que en la pestaña *Specification* del modelo DSTWU aparece una marca azul indicando que el modelo está perfectamente especificado. Existe una opción de cálculo alternativa disponible en la pestaña *Calculation Options* en la que podemos generar una *tabla adicional* de cómo varía el número de etapas con la relación de reflujo (Figura 7) para la separación especificada para los claves. No obstante, el diseño proporcionado por DSTWU se basará en las especificaciones introducidas en la pestaña *Specification*. No vamos a usar esta opción pero se deja en manos del lector.

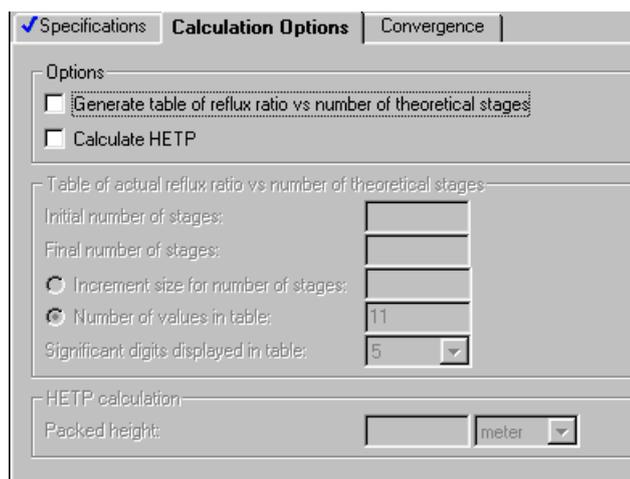


Figura 7. Relación número de etapas de equilibrio-relación de reflujo

Una vez especificado el modelo DSTWU pulsamos el botón de simular en Aspen Plus y la simulación debería converger sin problemas. Si la simulación no converge se recuerda que debe comprobarse dónde aparecen los errores y cuál es su naturaleza con el *Botón de Estado* explicado en la práctica 1.

Para ver los resultados del modelo DSTWU podemos pulsar con el botón derecho sobre el mismo y elegir *Results* o podemos ir a la barra de herramientas de Aspen Plus, pulsar sobre la carpeta de resultados () y dirigimos en el navegador de Aspen a la carpeta correspondiente al modelo DSTWU.

La pantalla de resultados del modelo DSTWU se muestra en la Figura 8. Por orden aparece:

- Relación de reflujo mínima
- Relación de reflujo real (1,2 veces la mínima como impusimos)
- Mínimo número de etapas de equilibrio (correspondientes a reflujo total)
- Número de etapas de equilibrio actuales (correspondientes a la relación de reflujo actual)
- Etapa de alimentación

- Etapas por encima de la alimentación
- Carga de calor en el hervidor y el condensador
- Temperatura de destilado y colas
- Relación caudal de destilado/alimentación

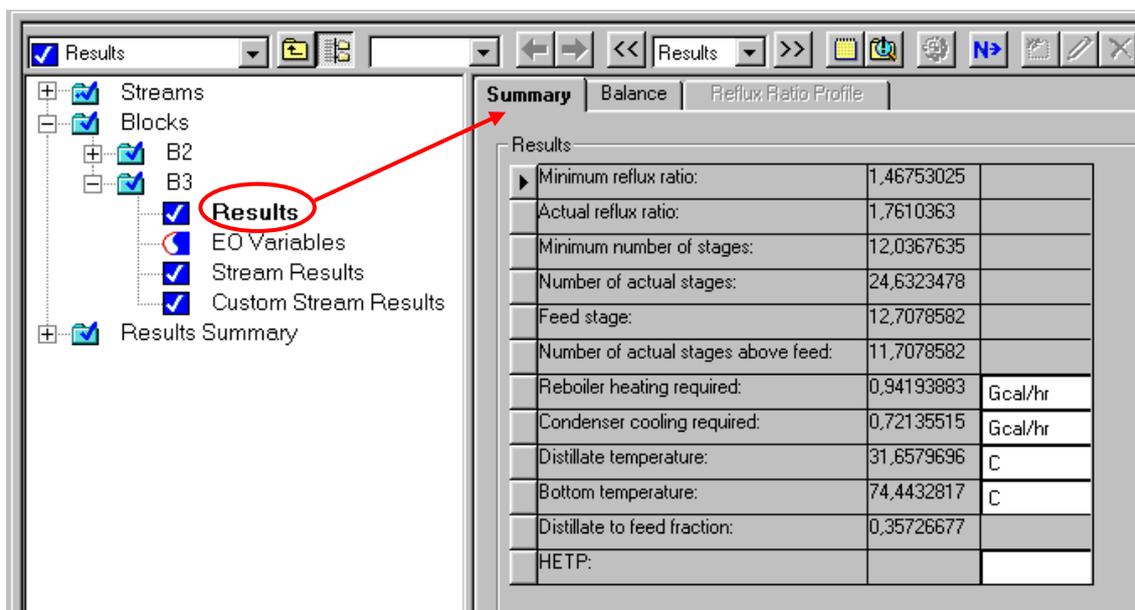


Figura 8. Pantalla de resultados del modelo DSTWU

En la pestaña balance se muestra el error en los balances de materia y energía al resolver la torre.

Para ver cómo se han separado los componentes en la torre podemos pulsar *Stream Results* en el navegador de Aspen o con el botón derecho sobre el modelo DSTWU elegir *Stream Results*. Aparecerá una pantalla (Figura 9) donde se muestra información de las corrientes que entran y salen del modelo DSTWU. Como se observa, el diseño consigue separar el 99% de los C4 por cabeza (corriente 2) y el 99% de los C5 por colas (corriente 3). Obsérvese que la temperatura del destilado es de 31,7 °C en vez de 50 °C ya que no se ha elegido la presión adecuada en el condensador.

Una vez que tenemos el diseño inicial de la torre vamos a comprobarlo simulando la torre de manera rigurosa con el modelo *Radfrac*.

	1	2	3
Temperature C	25,0	31,7	74,4
Pressure bar	5,000	3,500	3,500
Vapor Frac	0,000	0,000	0,000
Mole Flow kmol/hr	155,000	55,376	99,624
Mass Flow kg/hr	10411,815	3227,569	7184,246
Volume Flow cum/hr	17,327	5,828	12,745
Enthalpy MMkcal/hr	-6,212	-1,995	-3,996
Mole Flow kmol/hr			
I-BUTANE	30,000	29,991	0,009
N-BUTANE	25,000	24,750	0,250
N-PENTAN	40,000	0,035	39,965
I-PENTAN	60,000	0,600	59,400

Figura 9. Pantalla de resultados de las corrientes del modelo DSTWU.

2.3 Diseño riguroso con el modelo Radfrac

Para usar el modelo Radfrac vamos a la pestaña *Columns* de la librería de equipos y lo elegimos con el botón izquierdo para después colocarlo en el escritorio de Aspen, como muestra la Figura 10-izquierda.

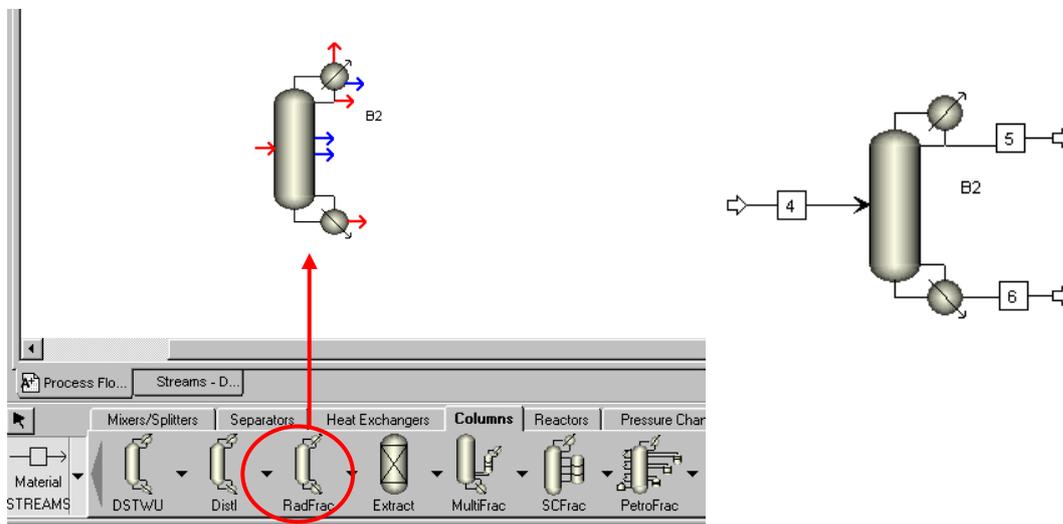


Figura 10. Izquierda: Puertos modelo Radfrac. Derecha: Corrientes conectadas

Al pulsar sobre *Material Streams* y acercarnos al modelo Radfrac observamos que hay cuatro puertos en rojo, uno asociado a la alimentación, otro al hervidor (colas) y dos puertos superiores asociados al condensador. El puerto de alimentación y colas son

obligatorios y dependiendo del tipo de condensador elegido deberemos usar uno o dos de los puertos asociados al condensador:

- Condensador total: Destilado en forma líquida. Usamos el puerto inferior asociado al condensador para el destilado
- Condensador parcial: Destilado en forma de vapor. Usamos el puerto superior asociado al condensador para el destilado.
- Condensador mixto: Destilado retirado en forma vapor y líquida. Usamos ambos puertos.

En nuestro caso el condensador es total y las corrientes quedan conectadas como se indica en la Figura 10-derecha.

Al pulsar dos veces con el botón izquierdo sobre el modelo Radfrac aparece la pantalla de especificación del modelo Radfrac (Figura 11). Existen varias pestañas: *Configuration*, *Streams* y *Pressure* que aparecen marcadas con un semicírculo rojo y deben introducirse especificaciones en ellas.

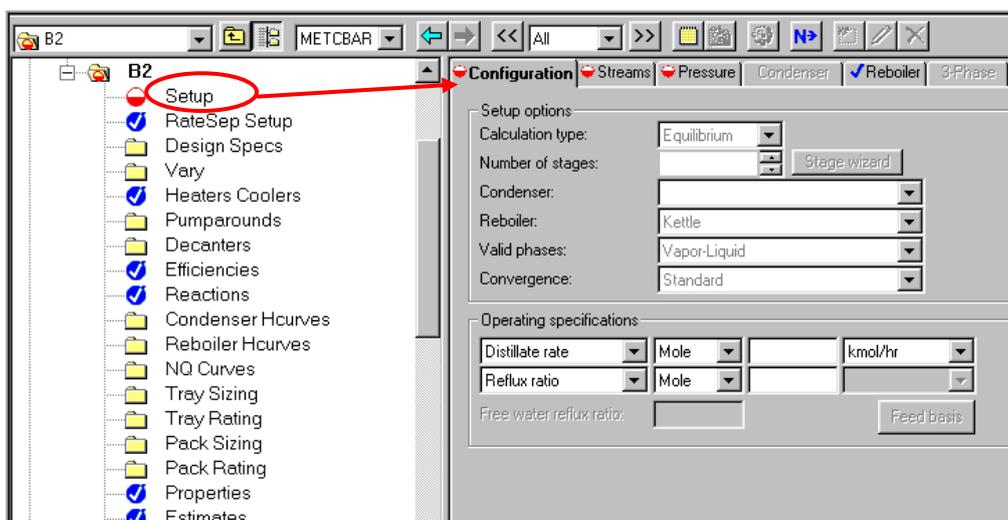


Figura 11. Pestaña *Configuration* del modelo Radfrac

En la pestaña *Configuration* se introducen los siguientes datos:

- *Calculation type*: Existe la opción de *Equilibrium* y *Rate-Based*. La opción *Equilibrium* es para simular etapas de equilibrio mientras que *Rate-Based* es para simular en base a coeficientes de transferencia.

- *Number of stages*: Número de etapas, incluyendo condensador y hervidor. Son de equilibrio si en la opción anterior está elegido *Equilibrium* o etapas reales si se eligió *Rate-Based*. Las etapas se enumeran a partir del 1 empezando por el condensador. Si éste es total, no es realmente una etapa de equilibrio y habría que especificar una etapa más de las estimadas por DSTWU.
- *Condenser*: Se puede elegir condensador total (Total), parcial (Partial-Vapor), mixto (Partial-Vapor-Liquid) o sin condensador (none).
- *Reboiler*: Se puede elegir tipo Kettle, Termosifón o sin hervidor (none). El hervidor tipo Kettle se comporta como una etapa de equilibrio.
- *Valid Phases*: Tipo de equilibrio líquido-vapor considerado en la torre (con una o dos fases líquidas)
- *Convergence*: Tipo de método de convergencia
- *Operating Specifications*: Deben introducirse dos variables de operación. Se puede elegir entre :
 - Caudal de destilado (*Distillate rate*) o colas (*Distillate bottom*)
 - Relación de reflujo (*Reflux ratio*) o boilup (*Boilup ratio*)
 - Relación destilado/alimentación (*Distillate to feed ratio*) o colas/alimentación (*Bottoms to feed ratio*)
 - Carga de calor en el condensador (*Condenser Duty*) o hervidor (*Boiler Duty*).

En nuestro caso, a partir de los resultados obtenidos por el modelo DSTWU (Figura 8) introducimos:

- *Calculation type*: Equilibrium
- *Number of stages*: Redondeando DSTWU calculó 27 etapas. Especificamos 28 ya que el condensador va a ser de tipo total y no es una etapa de equilibrio.
- *Condenser*: Condensador total
- *Reboiler*: Kettle.
- *Valid Phases*: Vapor-Liquid
- *Convergence*: Standard
- *Operating Specifications*: Consideramos como variables de operación la relación de reflujo obtenida de DSTWU y el caudal de uno de los productos. En este caso elegimos el caudal de destilado frente al de colas, ya que el caudal de destilado es menor y esto mejora la convergencia. La relación de reflujo obtenida en DSTWU es 1,7 pero para ser conservadores vamos a introducir 2 ya que el método de DSTWU tiende a subestimar la relación de reflujo mínima. El caudal de destilado, según la Figura 9 es 55,37 kmol/h.

La pestaña *Configuration* queda especificada como muestra la Figura 12:

Figura 12. Pestaña *Configuration* especificada del modelo Radfrac

En la pestaña *Streams* se especifica en qué etapa(s) se introduce(n) la(s) alimentación(es) (sección *Feed Streams*) y de qué etapas se retiran los productos (sección *Products Streams*) (Figura 13). En este caso tenemos una alimentación (corriente 4) y dos productos: destilado (corriente 5) y colas (corriente 6).

Feed streams			
	Name	Stage	Convention
▶	4	14	Above-Stage

Product streams								
	Name	Stage	Phase	Basis	Flow	Units	Flow ratio	Feed specs
	5	1	Liquid	Mole		kmol/hr		Feed basis
	6	28	Liquid	Mole		kmol/hr		Feed basis

Figura 13. Pestaña *Streams* especificada en el modelo Radfrac

Según DSTWU la alimentación debería introducirse en la etapa de equilibrio 13. Ya que en Radfrac empezamos a contar desde el condensador, que es total y no es una etapa de equilibrio, especificamos la etapa 14. Hay dos convenios (*Convention*) para introducir la alimentación en la torre. La alimentación puede introducirse entre la etapa de alimentación y justamente la superior (*Above-Stage*) o en la propia etapa de alimentación (*On-Stage*). Al elegir *Above-Stage*, el vapor presente en la alimentación

se irá a la etapa superior en cuanto entre a la torre mientras que el líquido presente en la alimentación caerá en la etapa de alimentación. Si la alimentación es totalmente líquida no hay diferencia entre elegir On-Stage o Above-Stage y se prefiere elegir On-Stage ya que así no es necesario realizar un cálculo flash de la alimentación a la entrada de la torre y se ahorra tiempo. En nuestro caso es líquida pero vamos a dejar Above-Stage.

En la sección *Products Streams* vemos que el destilado (corriente 5) y las colas (corriente 6) están colocados de manera automática en la primera etapa (condensador) y la última etapa (hervidor).

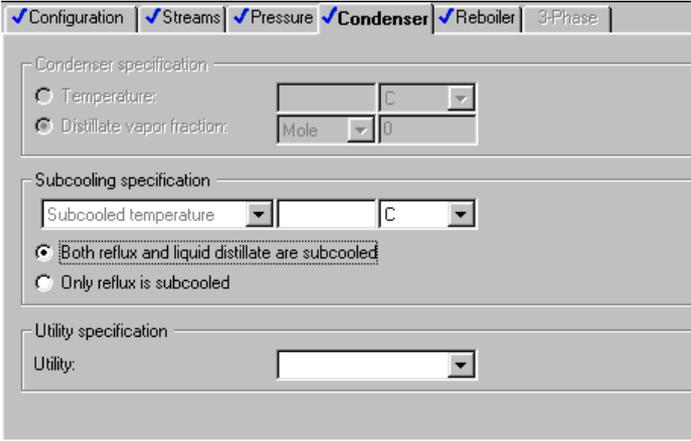
En la pestaña *Pressure* (Figura 14) se introducen datos relativos la presión en la columna. Al menos hay que introducir la presión del condensador y de manera opcional puede introducir la presión de la segunda etapa, es decir, la primera etapa situada en la propia torre. También puede introducirse de manera opcional la pérdida de carga en cada etapa (*Stage pressure drop*) o en toda la columna (*Column pressure drop*). Si estos dos últimos campos se dejan en blanco se supone que la presión es constante en toda la columna. En este caso vamos a dejarlos en blanco pero para torres de platos es común suponer una pérdida de carga de 0,1 psi por plato.

The screenshot shows a software interface for configuring pressure parameters. At the top, there are several tabs: 'Configuration', 'Streams', 'Pressure' (which is selected), 'Condenser', 'Reboiler', and '3-Phase'. Below the tabs, there is a 'View' dropdown menu set to 'Top / Bottom'. The main area is divided into three sections. The first section is 'Top stage / Condenser pressure', containing a field for 'Stage 1 / Condenser pressure' with the value '3.5' and a unit dropdown set to 'bar'. The second section is 'Stage 2 pressure (optional)', containing two radio buttons: 'Stage 2 pressure:' (which is selected) and 'Condenser pressure drop:'. Both have empty input fields and unit dropdowns set to 'bar'. The third section is 'Pressure drop for rest of column (optional)', containing two radio buttons: 'Stage pressure drop:' (which is selected) and 'Column pressure drop:'. Both have empty input fields and unit dropdowns set to 'bar'.

Figura 14. Presión en el condensador y pérdida de carga en las etapas

 **Nota:** En el modo *Equilibrium* de Radfrac se trabaja con etapas de equilibrio y no con platos reales por lo que realmente estamos refiriendo la pérdida de carga a la etapa de equilibrio. Para obtener una pérdida de carga más realista en la torre habría que especificar la eficiencia de las etapas para que Radfrac pudiera calcular el número de platos reales (mayor que el de etapas de equilibrio) y a partir de ahí la pérdida de carga en la columna. En este caso, por simplicidad, no vamos a especificar ni la pérdida de carga ni la eficiencia de las etapas.

 **Importante:** Si la presión de la alimentación es menor que la presión a la cual opera la columna nos aparecerá un mensaje de aviso, ya que es físicamente imposible que esa situación ocurra. En tal caso habría que presurizar la alimentación un poco por encima de la presión de la columna, usando es equipo apropiado de la sección *Pressure Changers* de la librería de modelos.



The screenshot shows the 'Condenser' specification dialog box in Aspen Plus. The 'Condenser' tab is active. Under 'Condenser specification', there are two radio buttons: 'Temperature' (unselected) and 'Distillate vapor fraction' (selected). The 'Distillate vapor fraction' field is set to 'Mole' and '0'. Under 'Subcooling specification', there is a 'Subcooled temperature' dropdown set to 'C' and a value field. There are two radio buttons: 'Both reflux and liquid distillate are subcooled' (selected) and 'Only reflux is subcooled' (unselected). Under 'Utility specification', there is a 'Utility' dropdown menu.

Figura 15. Opciones del condensador

En la pestaña *Condenser* se introduce información adicional dependiendo del tipo de condensador elegido. Siempre puede especificarse el grado de subenfriamiento del condensado en el campo *Subcooling Specification*. Si el campo se deja en blanco significa que el condensado se considera en su punto de burbuja (líquido saturado). En el caso de que se usase un condensador mixto se puede introducir una especificación adicional en el campo *Condenser specification*.

La pestaña *Reboiler* hay que especificarla si se elige como tipo de hervidor Termosifón. Para el caso de hervidor *Kettle* no es necesario introducir datos.

Cuando todas las pestañas están marcadas en azul el modelo *Radfrac* está completamente especificado y se puede llevar a cabo la simulación. Al converger la simulación podemos ver los resultados del modelo *Radfrac* pulsando con el botón derecho sobre el mismo y elegir *Results* o podemos ir a la barra de herramientas de Aspen Plus, pulsar sobre la carpeta de resultados () y dirigirnos en el navegador de Aspen a la carpeta correspondiente al modelo *Radfrac*. Observaremos una pantalla como la que se muestra en la Figura 16.

En la pestaña *Summary* se proporciona información resumida asociada al condensador y destilado, si en el menú desplegable *View* está seleccionado *Condenser/Top Page*, o del hervidor y colas si en el menú desplegable está seleccionado

Reboiler/Bottom Stage. En esta pestaña podemos ver la carga de calor (*Heat Duty*) del condensador (negativa pues se retira) y hervidor (positiva pues se aporta), caudal de destilado y colas, temperaturas en el hervidor y condensador, relación de reflujo y relación boilup. Se recomienda al lector que compare dichas variables con las obtenidas previamente con el método DSTWU.

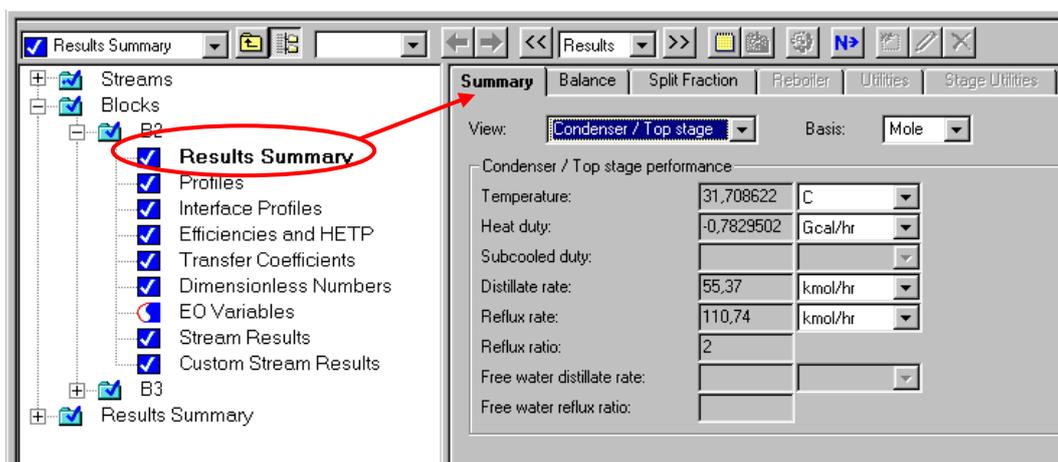


Figura 16. Resultados del modelos Radfrac

En la pestaña *Balance* se muestra el error en el balance de materia y energía a resolver la torre.

La pestaña *Split Fraction* es importante pues muestra para cada componente qué fracción ha acabado en destilado o colas, lo que da información cuantitativa de la separación que se ha llevado a cabo (Figura 17). Podemos observar que el grado de separación obtenido es el que se esperaba, pues prácticamente el 99% (98,3%) del n-butano se recupera como destilado y el 99% del iso-pentano (98,7%) se recupera por colas. Por lo tanto, el diseño aproximado inicial ha coincidido con el diseño final.

Component split fractions in product streams			
Component	5	6	
I-BUTANE	0,99976955	0,00023045	
N-BUTANE	0,98372746	0,01627254	
N-PENTAN	0,00081697	0,99918303	
I-PENTAN	0,01251747	0,98748253	

Figura 17. Pestaña *Split Fraction*

Otra manera de comprobar la separación realizada en la torre es comparar las corrientes de alimentación, destilado y colas pulsando en el campo *Stream Results* del bloque Radfrac, como se muestra en la Figura 17.

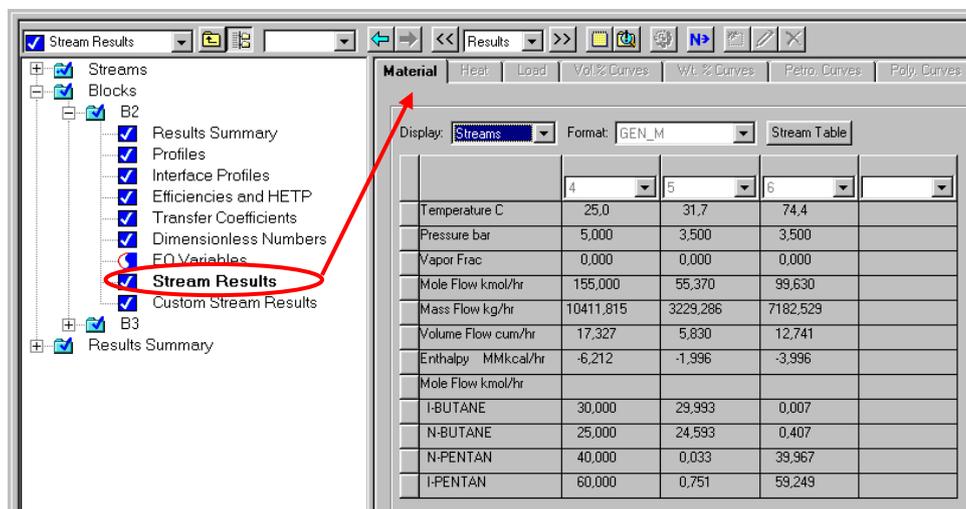


Figura 17. Pantalla de *Stream Results* de Radfrac

Una vez resuelta la torre es posible representar y analizar diferentes perfiles a lo largo de la torre, como temperatura, caudales molares, másicos, composición, factor de separación, etc. Para ello, estando dentro de la carpeta asociada a Radfrac en el navegador de Aspen Plus (no importa exactamente dónde) vamos a la barra de tareas superior y elegimos *Tools* → *Plot Wizard* (Figura 18). Se abrirá una pantalla de presentación del asistente y si pulsamos en el botón *Next* aparecerá una pantalla de los diferentes perfiles que podemos representar (Figura 19).

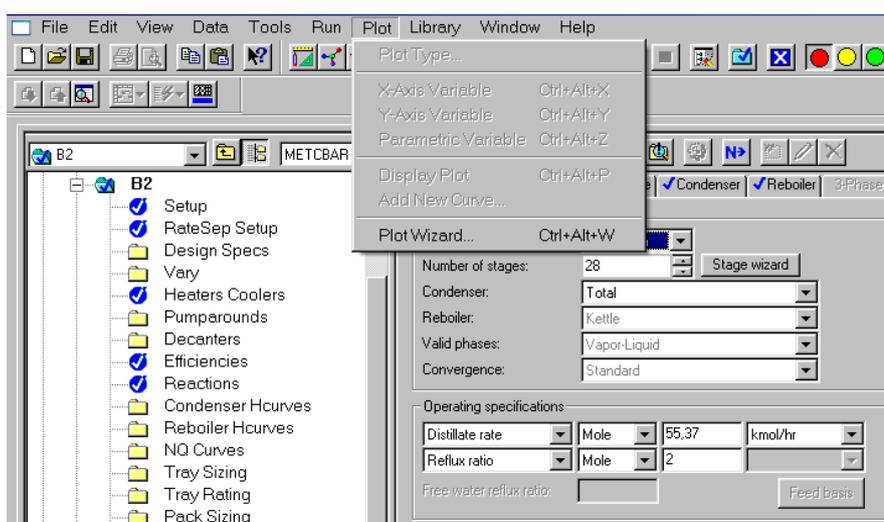


Figura 18. Asistente gráfico para dibujar perfiles en la torre.

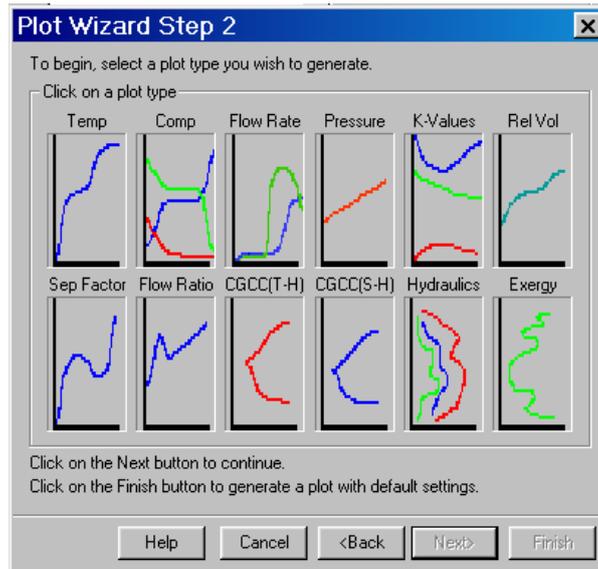


Figura 19. Opciones de perfiles a representar en Radfrac

Los perfiles disponibles son:

- *Temp*: Perfil de temperatura a lo largo de la torre. La temperatura de vapor y líquido a lo largo de la torre es idéntica ya que se alcanza el equilibrio en cada etapa.
- *Comp*: Perfil de composición de cualquier componente, ya sea en fase vapor o líquida en cada etapa.
- *Flow rate*: Caudal másicos o molares de cualquier componente en fase vapor o líquida.
- *Pressure*: Perfil de presión
- *K-values*: Coeficientes de distribución de cada compuesto a lo largo de la torre.
- *Rel Vol*: Volatilidad relativa de los componentes respecto a un componente base de la mezcla. Si la volatilidad varía mucho los resultados del diseño aproximado serán bastante erróneos.
- *Sep factor*: Factor de separación de un compuesto respecto a otro: relación entre la composición en fase líquida de un compuesto respecto a otro a lo largo de una columna. Si se eligen los componentes clave se representa el diagrama de Hengstebeck.
- *CGCC(T-H)* y *CGCC(S-H)*: Gran curva compuesta Temperatura-Entalpía o Etapa-Entalpía de la columna. Sirve para el análisis térmico de la columna.
- *Hydraulics*: Análisis hidráulico de la columna
- *Exergy*: Perfil de exergía en la columna.



Nota: Las dos últimas opciones están disponibles por defecto. Para activarlas hay que ir a la opción Analysis dentro de Radfrac y activar las casillas de análisis energético y exergético (Figura 20).

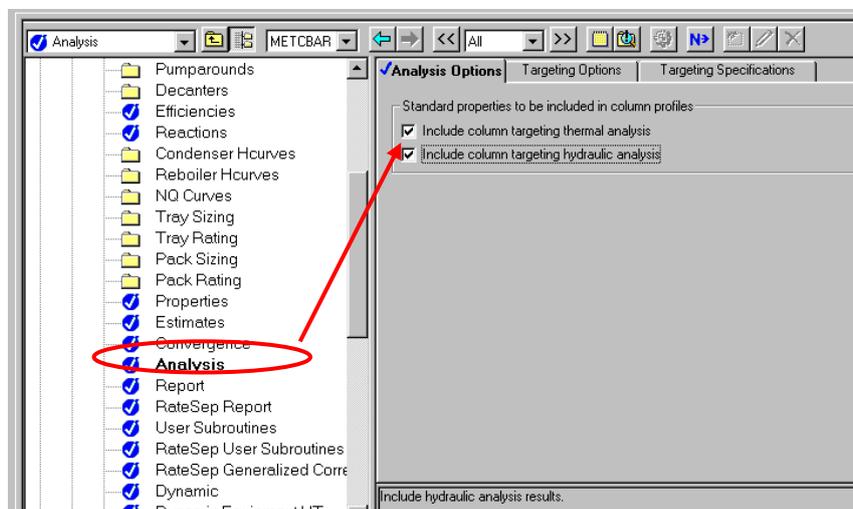


Figura 20. Opciones de análisis en Radfrac

Para comprobar que la etapa de alimentación es correcta vamos a representar el diagrama de Hengstebeck. Para ello elegimos en el asistente elegimos *Sep Factor* y pulsamos *Next*. Nos aparecerá una pantalla como la de la Figura 21-izquierda. En la esquina superior derecha seleccionamos el componente clave pesado (iso-pentano) mientras que en la esquina inferior izquierda seleccionamos el componente clave ligero (n-butano). También marcamos como opción que la escala vertical sea logarítmica como ocurre en el diagrama de Henstebeck.

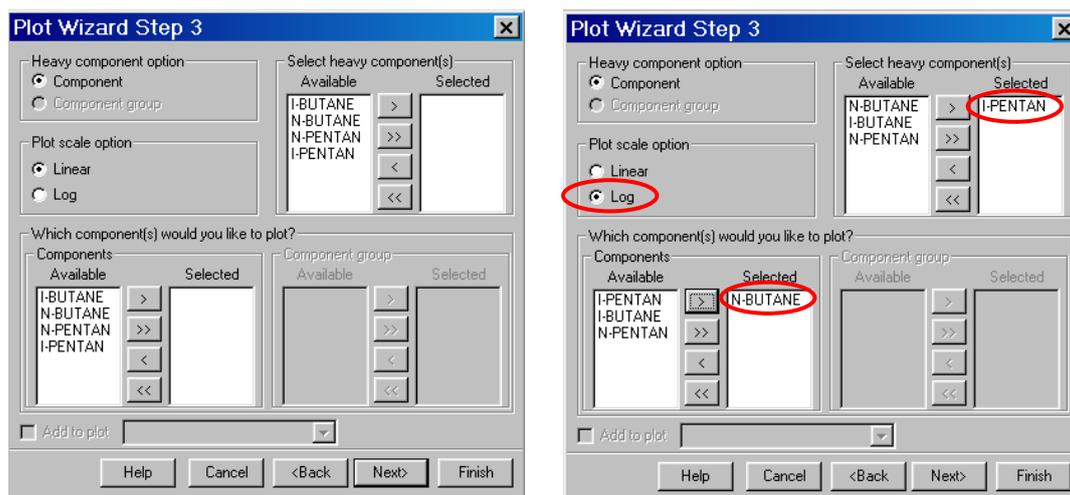


Figura 21. Izquierda: Primer paso de opción Sep Factor. Derecha: Elección componentes claves y escala logarítmica.

Pulsamos la el botón Next y aparecerá una pantalla con opciones de edición para la representación del gráfico (Figura 22), que suele ser parecida si se representan otros perfiles. Una opción útil es la que se encuentra en la parte derecha, para actualizar la gráfica si se realizan nuevas simulaciones con la columna (se conoce como *Live Plot* en Aspen). Si marcamos *Yes* la gráfica se actualizará.

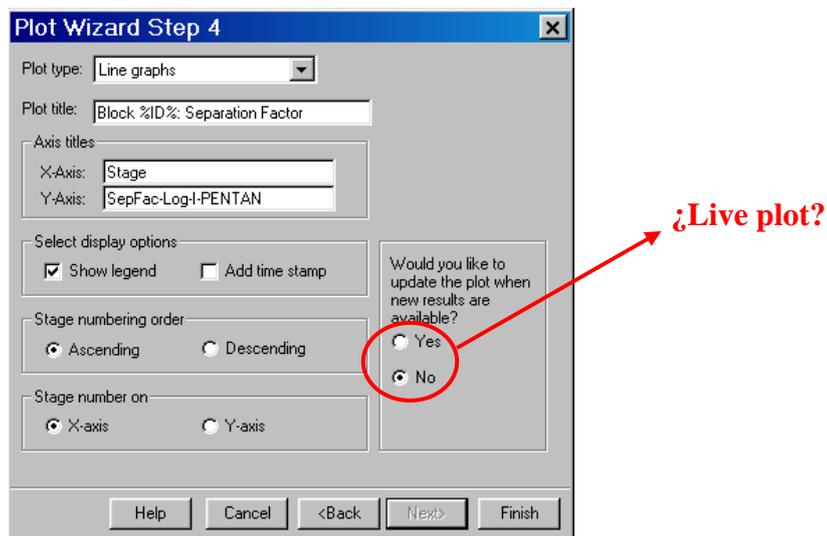


Figura 22. Segunda paso de *Sep Factor*.

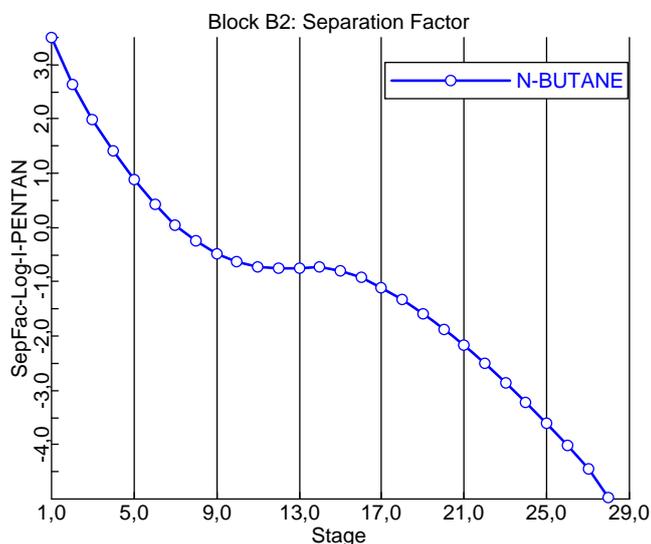


Figura 23. Diagrama de Hengstebek de la columna para las condiciones de operación impuestas

Si pulsamos *Finish* representamos el diagrama de Hengstebek que será parecido al que se muestra en la Figura 23. Se observa que la curva posee bastante pendiente lejos de la alimentación (etapa 13) indicando que en dichas etapas los claves

se separan apreciablemente de una etapa a otra. Sin embargo cerca de la alimentación la separación entre claves es poco pronunciada ya que la curva se aplanan. Ese aplanamiento es típico si la relación de reflujo no es muy alta con respecto a la relación de reflujo mínimo, pero no indica necesariamente que la alimentación esté mal colocada. En las etapas cercanas a la alimentación la separación sí suele ser acusada entre los componentes más ligeros que el clave ligero y los más pesados que el clave pesado. Se deja en manos del lector como variaría el diagrama de Hengstebeck si se aumenta la relación de reflujo. También se recomienda dibujar otros tipos de perfiles para entender mejor cómo funciona la torre (composición, volatilidad relativa, caudales).

 **Importante:** *Un indicativo claro de que la alimentación está colocada incorrectamente es que en el diagrama de Hengstebeck la pendiente de la curva cambia bruscamente cerca de la alimentación.*

En conclusión, el diseño aproximado de la columna para separar los C4 de los C5 según las especificaciones de separación impuestas es válido y no es necesario modificarlo. El diseño, verificado en Radfrac es (a falta de elegir una presión adecuada en el condensador para operarlo a 50 °C):

- Presión de operación: 3,5 bar (31 °C en condensador, 74 °C hervidor)
- Número de etapas: 28 (1 condensador total + 26 etapas de equilibrio en torre +1 etapa equilibrio hervidor)
- Etapa de alimentación: 14
- Condensador: Total
- Relación de reflujo: 2
- Carga de calor en el condensador: 910 kW
- Carga de calor en el hervidor: 1167 kW

2.4 Especificaciones de diseño con Radfrac

Si comprobando el diseño aproximado de DSTWU en *Radfrac* no hubiésemos conseguido obtener la separación deseada, podríamos haber optado por mantener el número de platos y la etapa de alimentación y variar las condiciones de operación de la torre para conseguirlo.

Las especificaciones de diseño en *Radfrac* van asociadas a las variables de operación que hayamos especificado en la pestaña *Configuration* (Figura 12). Habíamos usado la relación de reflujo y el caudal de destilado para caracterizar la operación de la

columna y esas variables son las que las se van a manipular para satisfacer las condiciones de diseño que impongamos. *Sólo podemos imponer dos condiciones de diseño* ya que *sólo tenemos dos variables de operación* para variar la operación de la columna.

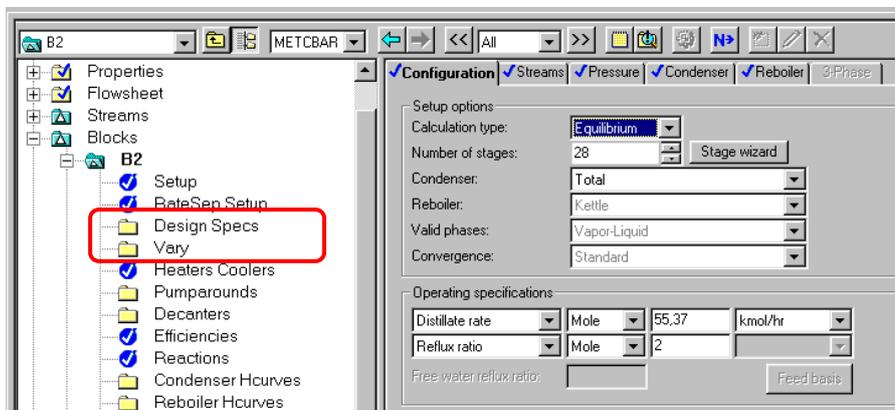


Figura 24. Carpetas para definir las especificaciones de diseño en Radfrac

Dentro del bloque *Radfrac* existen dos carpetas asociadas a las especificaciones de diseño:

- *Design Specs*: Se define la especificación, generalmente asociada a la recuperación o pureza de un compuesto en una corriente producto
- *Vary*: Se indica el rango en el que se permite manipular las variables de operación para satisfacer las especificaciones de diseño.

Vamos a crear dos especificaciones de diseño asociadas a la recuperación de los claves que impusimos en el diseño. Para ello vamos a la carpeta *Design Specs* y pulsamos en *New* para crear una especificación (Figura 25). Le damos un nombre (por defecto viene 1) y pulsamos en *OK*.

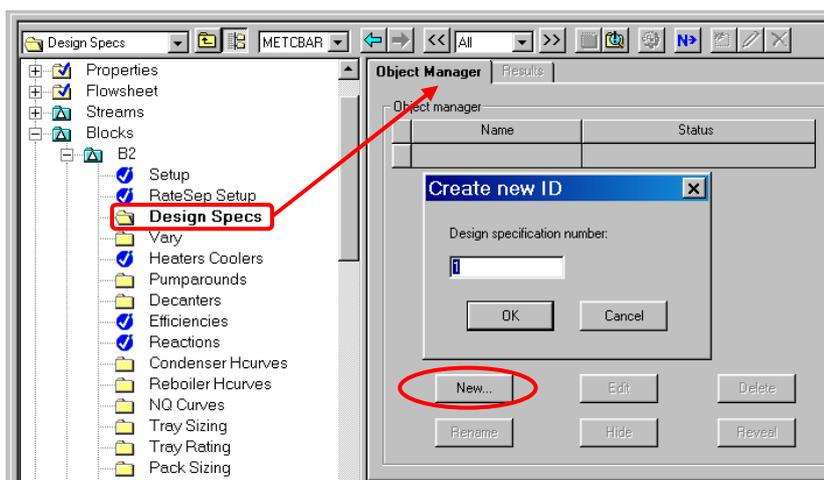


Figura 25. Carpetas para definir las especificaciones de diseño en Radfrac

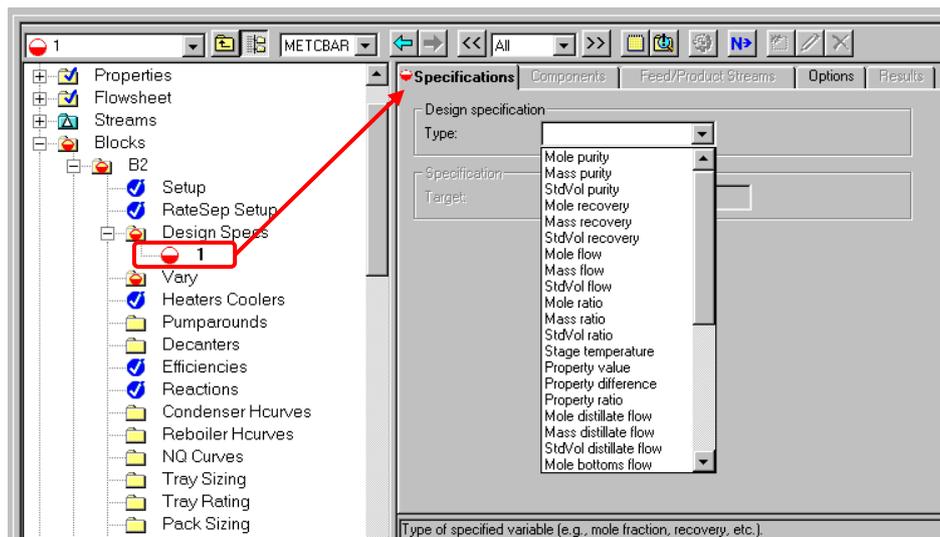


Figura 26. Opciones de Design Spec

Después de pulsar OK estaremos en la pestaña *Specification* de la especificación de diseño que acabamos de crear (Figura 26). Hay podemos elegir entre multitud de diferentes tipos de especificaciones (recordar que cada una de ella se explica en la nota informativa en el pie de pantalla). Como vamos a imponer que se recupere el 99% del n-butano por cabeza, elegimos la opción *Mole recovery*. Después introducimos el grado de recuperación deseado en tanto por uno (0,99 en este caso, como muestra la Figura 27). Nos queda por asociar dicha recuperación al n-butano. Para ello, en la pestaña *Components* elegimos n-butano (Figura 28). Finalmente en la pestaña *Feed/Product Streams* especificamos a qué corriente producto está asociada dicha recuperación (Figura 29). Como corriente producto elegimos la de destilado (en nuestro caso corriente 5) y la recuperación está referida a la alimentación de la columna (corriente 4). Ya hemos definido completamente la primera especificación de diseño. La segunda se hace análogamente para el iso-pentano del cual debe recuperarse el 99% por colas. Para ello debemos crear otra especificación y repetir el proceso.



Figura 27. Mole recovery

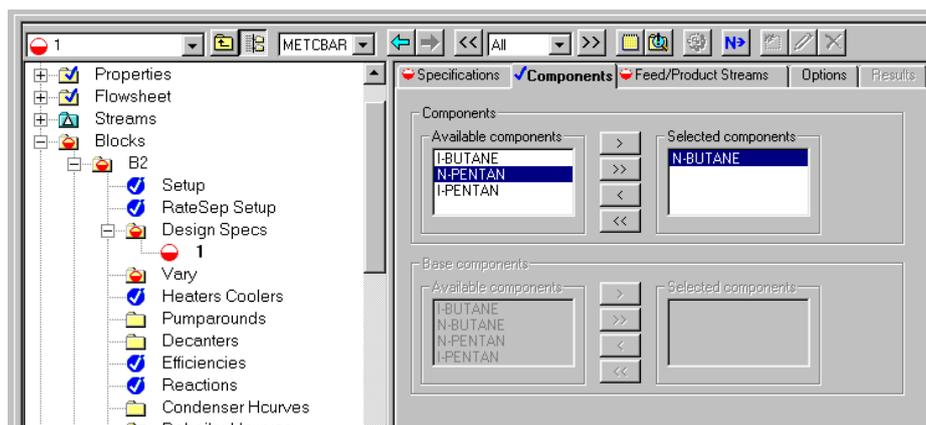


Figura 28. Elección del componente asociado a la especificación de diseño

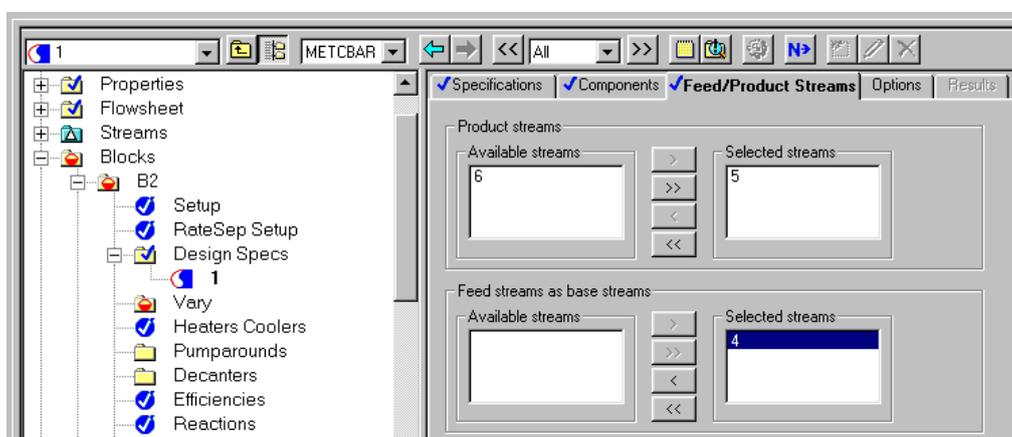


Figura 29. Corrientes asociadas a la especificación.

Después de crear las dos especificaciones debemos indicar que variables de operación se van a manipular, que **forzosamente** deben ser las mismas que usamos en la pestaña de *Configuration* de *Radfrac*. Para ello vamos a la carpeta *Vary*, y pulsamos en *New* (Figura 30) y posteriormente en OK. Especificamos como variable manipulada la relación de reflujo y vamos a permitir que se varíe alrededor de 2 (Figura 31), sabiendo que es el valor que dará la separación deseada. En la mayoría de los casos no sabremos la solución y el rango de la variable manipulada deberá ser lo suficientemente amplio. Debe tenerse en cuenta que el valor especificado del reflujo en *Configuration* (Figura 12) debe estar dentro del rango que hemos definido, de otra manera obtendremos un error diciéndonos que el valor especificado del reflujo está fuera del rango. De manera análoga repetimos el procedimiento para la otra variable de operación, que es el caudal de destilado (Figura 32). Una vez definidas las especificaciones podemos simular la torre y comprobar los resultados (Figura 33).

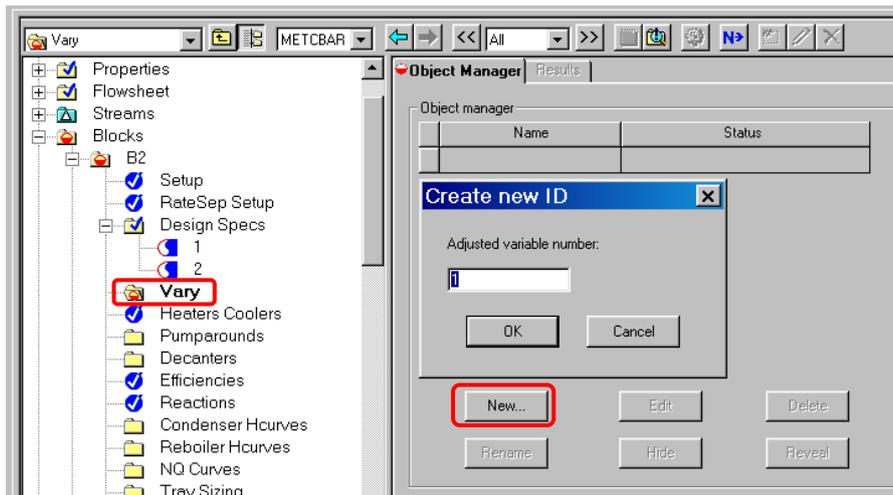


Figura 30. Creación de una variable manipulada

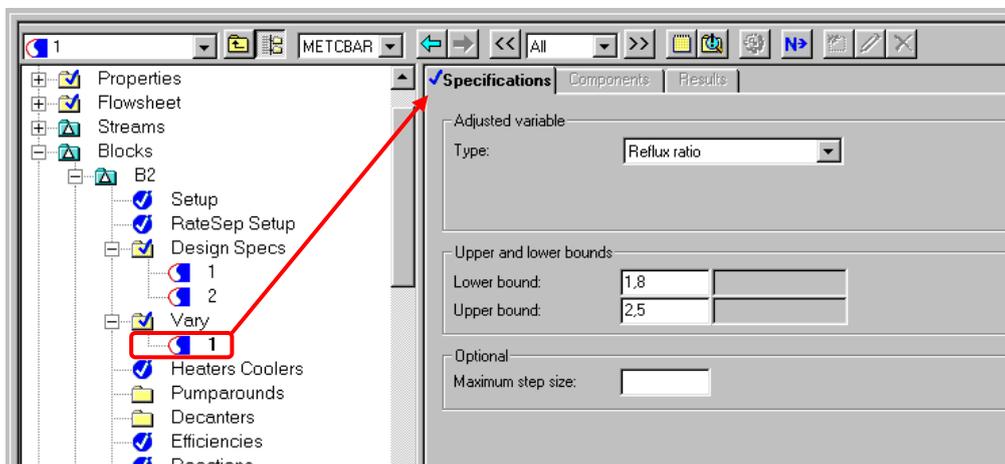


Figura 31. Especificación de la variable manipulada reflujo

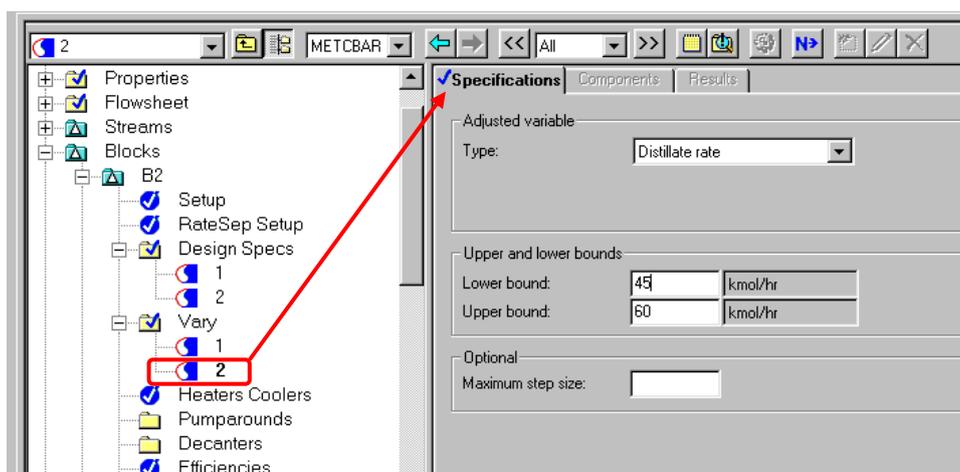


Figura 32. Especificación de la variable manipulada caudal de destilado

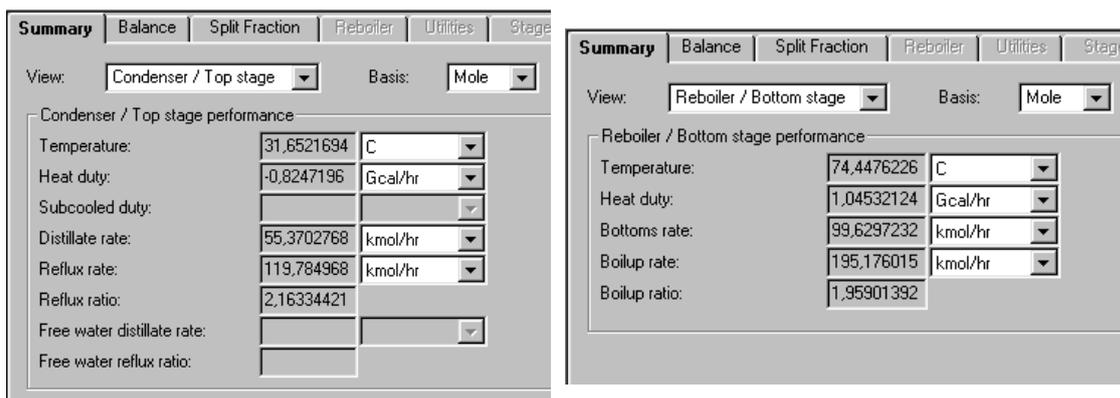


Figura 33. Resultados del modelo Radfrac con especificaciones de diseño

Comparando los resultados con los de la simulación sin especificaciones de diseño (Figura 16) observamos que la relación de reflujo a aumentado de 2 a 2,16, un 7,5% mayor aproximadamente, lo que se traduce en mayores cargas de calor en el condensador y hervidor. Esto es debido a que en la simulación con Radfrac del diseño aproximado de DSTWU no se cumplían exactamente las especificaciones de separación de los compuestos claves que hemos impuesto con las especificaciones de diseño. Esto queda claro si se compara las fracciones de recuperación de los compuestos clave (n-butano e iso-pentano) con y sin especificaciones de diseño (Figuras 17 y 34, respectivamente).

Component	5	6
I-BUTANE	0,99980451	0,00019549
N-BUTANE	0,99000035	0,00999965
N-PENTAN	0,00076934	0,99923065
I-PENTAN	0,00999986	0,99000014

Figura 34. Fracciones de separación imponiendo especificaciones de diseño

⚠ Muy Importante: Una buena práctica es primero simular la torre sin especificaciones de diseño, y una vez comprobado que converge sin problemas, usar especificaciones de diseño si es necesario.

Vamos a comprobar cuantitativamente si la alimentación está bien colocada variando la etapa de la alimentación alrededor de su posición actual **a la vez** que imponemos las especificaciones de diseño para la separación de los claves. Para el caso actual la etapa de alimentación es la 14 y la carga de calor en el condensador es 959 kW

(a retirar, lógicamente). Cambiando la etapa de alimentación y simulando la torre para cada caso obtenemos la Tabla 2. Se observa que es posible reducir el consumo energético de la columna, *manteniendo el número total de etapas*, si se alimenta en la etapa 11 en vez de la etapa 14 (Figura 35). La refrigeración en el condensador se reduce un 4%, de 959 kW a 920 kW, mientras que la carga de calor en el hervidor se reduce un 3%, de 1217 a 1777 kW.

Etapa alimentación	Carga calor condensador (kW)
9	964
10	932
11	920
12	922
13	935
14 (Actual)	959
15	994

Tabla 2. Carga de calor en el condensador en función de la etapa de alimentación

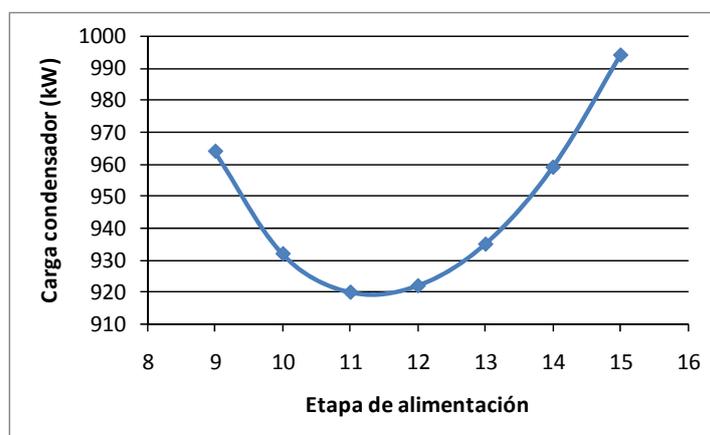


Figura 35. Diagrama etapa alimentación-carga condensador.

Si comparamos el diagrama de Hengstebeck para la etapa de alimentación óptima (etapa 11) (Figura 36) y la etapa de alimentación 14 (Figura 37) observamos que la zona alrededor de la alimentación donde el factor de separación era constante (no había separación efectiva entre los claves) desaparece cuando la alimentación se coloca de manera correcta. En el diagrama la diferencia no es muy significativa ya que la etapa de alimentación originalmente no estaba muy alejada de la etapa óptima pero aún así es perceptible.

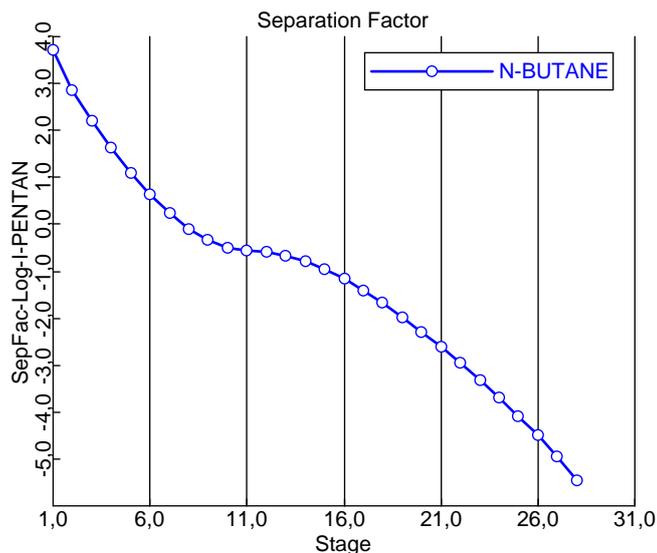


Figura 36. Diagrama de Hengstebeck con etapa de alimentación óptima (etapa 11)

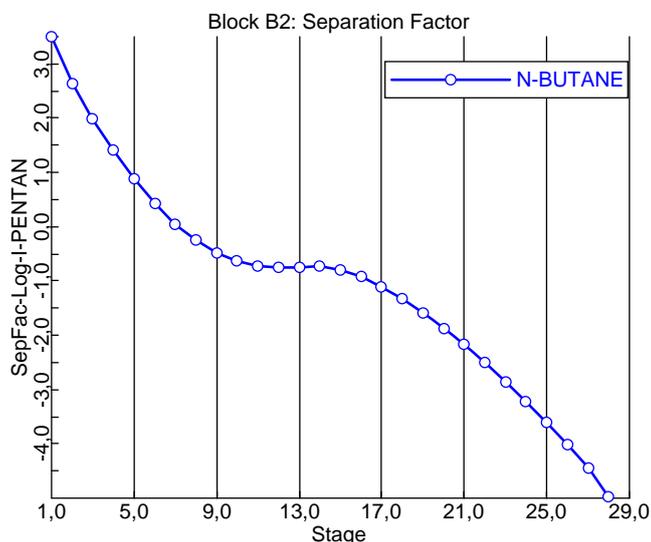


Figura 37. Diagrama de Hengstebeck con etapa de alimentación 14

El diseño definitivo de la torre de destilación es el siguiente:

- Presión de operación: 3,5 bar (31 °C en condensador, 74 °C hervidor)
- Número de etapas: 28 (1 condensador total + 26 etapas de equilibrio en torre +1 etapa equilibrio hervidor)
- Etapa de alimentación: 11
- Condensador: Total
- Relación de reflujo: 2,03
- Carga de calor en el condensador: 920 kW
- Carga de calor en el hervidor: 1177 kW

3. Simulación de absorbedores y strippers

Aspen Plus no dispone de modelos para el diseño aproximado de absorbedores o strippers. Sin embargo, el modelo *Radfrac* puede usarse para la simulación rigurosa de absorbedores y strippers, pues no son más que equipos multietapa de contacto líquido-vapor. También puede usarse para diseñar absorbedores y strippers mediante tanteo como mostraremos más adelante.

Si queremos usar el modelo *Radfrac* para simular absorbedores o strippers simplemente tenemos que seleccionar en la pestaña *Configuration* de *Radfrac* que el equipo no tiene ni condensador ni hervidor. Con ello, simplemente simularemos una torre con múltiples etapas.

Vamos a mostrar con un ejemplo como se puede simular y diseñar un absorbedor usando Aspen Plus. En el ejemplo se desea eliminar metanol presente en una corriente de gases ligeros (Tabla 3) mediante lavado con agua en una torre que opera a presión atmosférica. El agua es pura y se encuentra a 25 °C. Se pretende determinar el número de etapas y caudal de agua necesario para rebajar la pureza del metanol hasta 100 ppm

Compuesto	Fracción molar (%)
CO	55
H ₂	20
CH ₄	15
CH ₃ OH	10
Caudal total	200 kmol/h
Temperatura	80 °C
Presión	1 atm

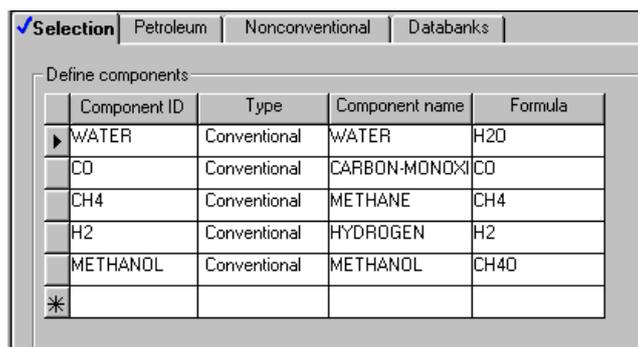
Tabla 3. Corriente de gases a tratar

Está claro que existe un compromiso entre número de etapas y caudal de agua de lavado. A mayor caudal de agua menor será el número de etapas necesario y viceversa. Dicho compromiso viene dado por factores económicos que no se incluirán en este análisis. Generalmente el diseño de un absorbedor se realiza para un caudal de lavado que es 1,5 veces el caudal de lavado mínimo, es decir, aquél que en este caso permitiría rebajar la concentración de metanol hasta 100 ppm usando una torre con infinitas etapas. El caudal de lavado mínimo puede obtenerse por simulación como se comentará

más adelante, pero por simplicidad no basaremos el diseño en la anterior regla heurística.

3.1 Selección del sistema de unidades, componentes y método termodinámico. Seleccionando constantes de Henry.

El sistema de unidades elegido es el métrico. Los componentes ya introducidos en Aspen Plus se muestran en la Figura 38.



Component ID	Type	Component name	Formula
WATER	Conventional	WATER	H2O
CO	Conventional	CARBON-MONOXI	CO
CH4	Conventional	METHANE	CH4
H2	Conventional	HYDROGEN	H2
METHANOL	Conventional	METHANOL	CH4O
*			

Figura 38. Componentes para el ejemplo de absorción

Para la elección del método termodinámico hay que tener en cuenta varias circunstancias:

- Tenemos una mezcla de hidrocarburos (CO, CH₄), gases ligeros (H₂) y sustancias polares (metanol y agua).
- Con respecto a las condiciones de presión y temperatura la torre opera a presión atmosférica. La temperatura a lo largo de la torre estará entre 25 °C y 80 °C, las temperaturas de las corrientes de entrada.

Al aparecer compuestos polares si queremos usar ecuaciones de estado deben ser ecuaciones de estado modificadas para tratar con compuestos polares. Aspen dispone de estas ecuaciones de estado pero, extrañamente, no con parámetros de interacción para compuestos polares. Deben buscarse datos experimentales para ajustarlos. Por otra parte, los métodos basados en coeficientes de actividad también son aplicables, pues tratan fácilmente mezclas con compuestos polares y son apropiados a bajas presiones. Sin embargo, debemos tener en cuenta que el CO, CH₄ y H₂ son compuestos *supercríticos* a la temperatura que operará la torre. Ello implica que si usamos *métodos basados en coeficientes de actividad* tendremos que usar *coeficientes de Henry* para dichos compuestos para caracterizar su equilibrio con el agua y el metanol.

Ya que entre el metanol y el agua no aparecen dos fases líquidas, cualquier método basado en coeficientes de actividad puede ser útil, por ejemplo, el método Wilson. Este método usa la ecuación de estado de los gases ideales para la fase vapor. En la Figura 39-izquierda se muestra la selección del método Wilson y a la derecha se muestran los parámetros de interacción del método Wilson para el metanol y el agua, válidos entre 25 y 100 °C, abarcando las condiciones de temperatura en la torre. Lógicamente, no tiene parámetros de interacción para compuestos supercríticos, cuyo equilibrio modelaremos usando constantes de Henry.

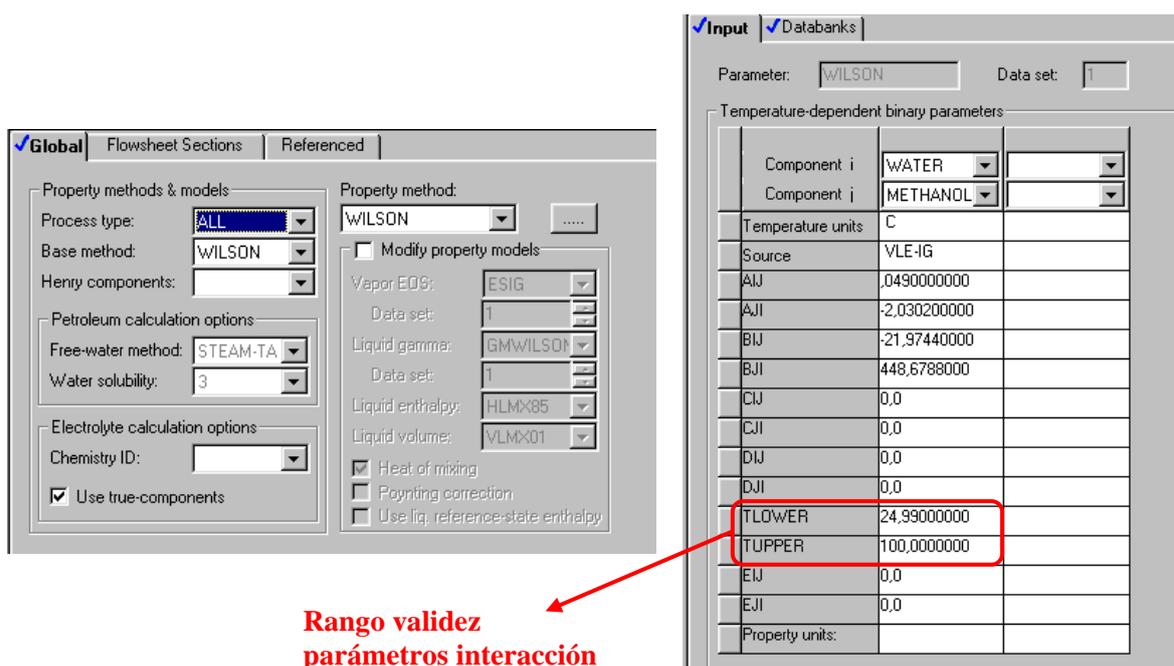


Figura 39. Izquierda: selección del método Wilson. Derecha: Parámetros de interacción del método Wilson.

Para usar las constantes de Henry con el método Wilson debemos especificar qué compuestos de la simulación queremos modelar con constantes de Henry. Para ello en el navegador de Aspen nos dirigimos a la carpeta *Components*→*Henry Comps* y pulsamos en *New*. Pulsamos OK y pasaremos a una pantalla donde aparecerán todos los compuestos que hemos introducido en la simulación (Figura 41). De ellos, debemos seleccionar aquellos cuyo equilibrio queremos modelar usando constantes de Henry, es decir, los compuestos supercríticos: CO, CH₄ e H₂ (Figura 42). Una vez hecho esto en la siempre en la carpeta *Properties*→*Parameters*→*Binary interaction*→*Henry-1* podremos ver para cada par soluto-solvente las correlaciones de las constantes de Henry que dispone Aspen Plus. En este caso Aspen Plus dispone de constantes de Henry para todos los pares soluto-solvente entre CO, CH₄, H₂ con metanol y agua. Lamentablemente el rango de validez de algunas de esas correlaciones no abarca el

rango de temperatura dentro de la torre. Se necesitarían datos experimentales para expandir su validez.

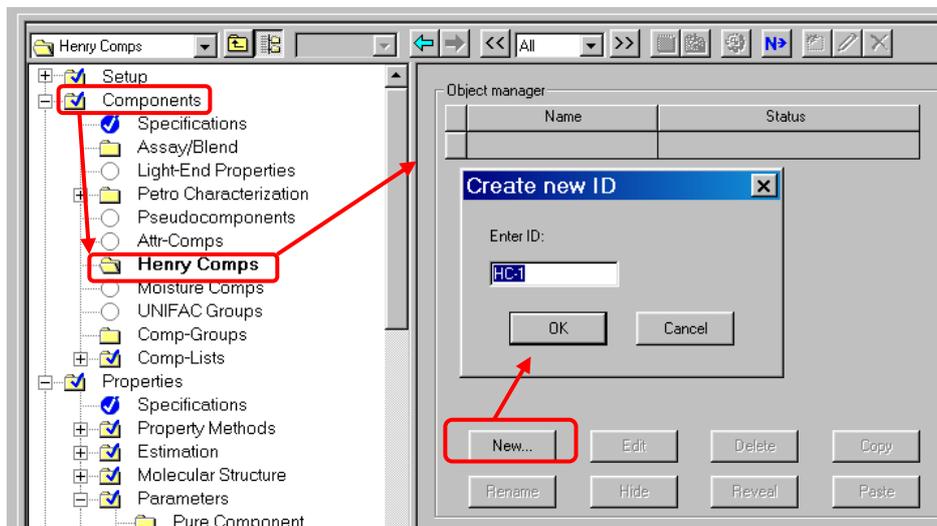


Figura 40. Especificación de los compuestos de Henry en la simulación (Paso 1).

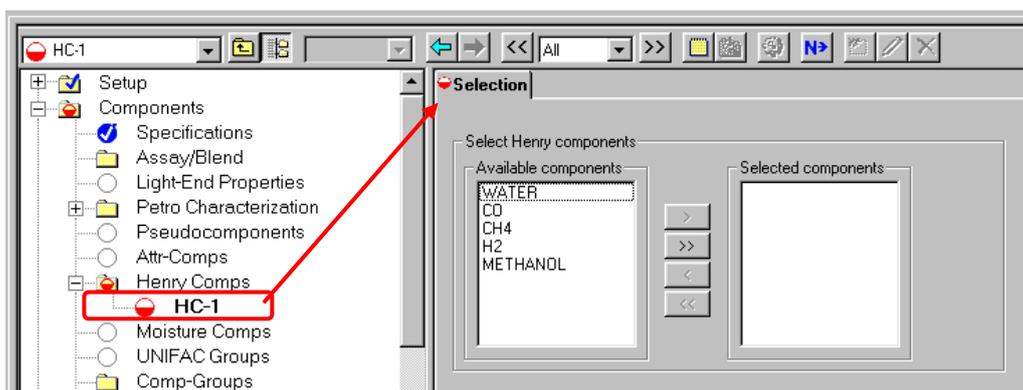


Figura 41. Especificación de los compuestos de Henry en la simulación (Paso 2).

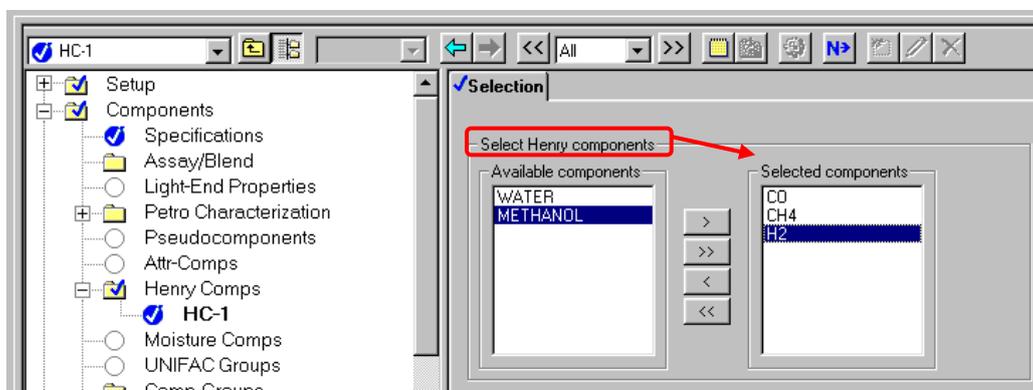


Figura 42. Especificación de los compuestos de Henry en la simulación (Paso 3).

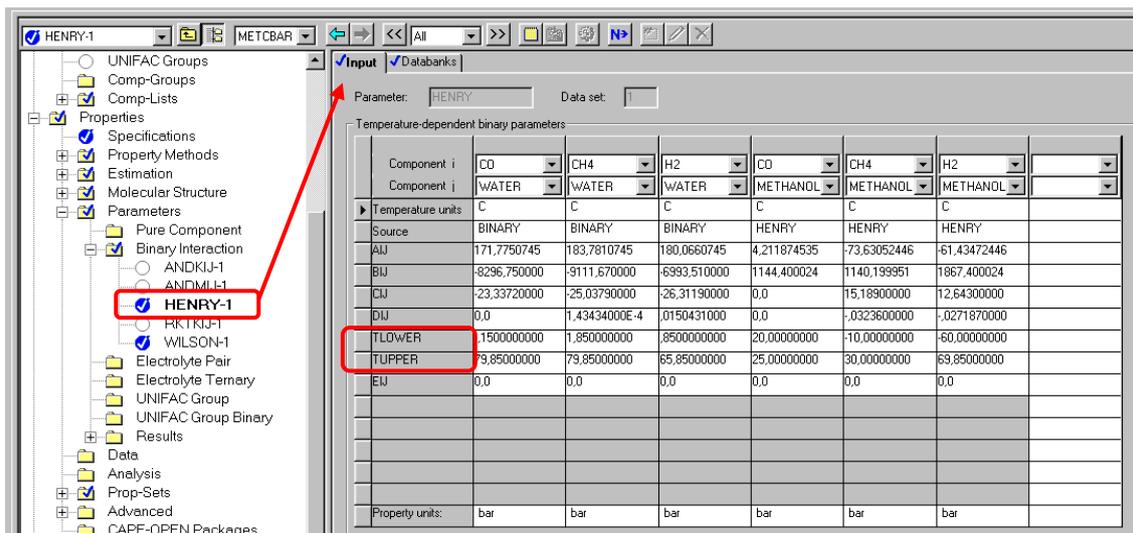


Figura 43. Constantes de Henry entre los compuestos supercríticos y subcríticos.

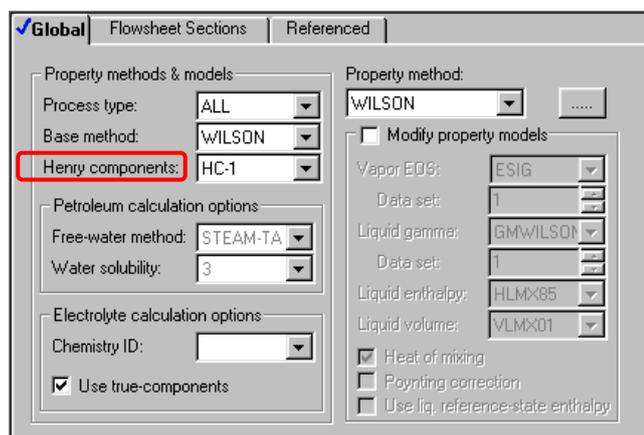


Figura 44. Especificando el uso de constantes de Henry en la simulación.

El último paso para especificar el uso constantes de Henry con *métodos de coeficientes de actividad* es elegir en el campo *Henry Components* el grupo de compuestos supercríticos que anteriormente creamos (Figura 44).

3.2 Simulación del absorbedor con el modelo Radfrac

Para simular el absorbedor usamos el modelo Radfrac. Es posible usar multitud de iconos para el modelo Radfrac, como se muestra en la Figura 45-izquierda, aunque es importante entender que el uso de un icono es un detalle *meramente estético* y no afecta a las funcionalidades y usos que se le pueda dar al modelo Radfrac. No obstante, es conveniente elegir un icono correspondiente al uso que se le esté dando al modelo Radfrac para diferenciarlo de otras unidades de proceso.

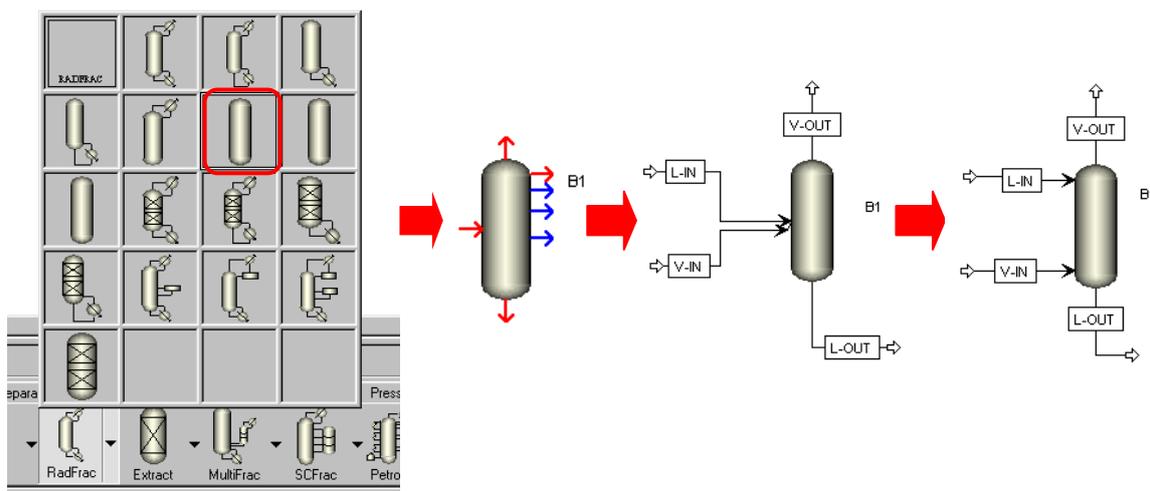


Figura 45. Conectando las corrientes al modelo Radfrac como absorbedor.

Aunque hayamos usado el icono de absorbedor, los puertos del modelo Radfrac siguen siendo los mismos que cuando se usó para destilación (Figura 45). En este caso conectamos dos corrientes al puerto de alimentación, correspondientes al gas a limpiar (V-IN) y al caudal de absorbente (L-IN). La corriente de salida del gas (V-OUT) la conectamos al puerto superior, al cual Aspen Plus se refiere como *Vapor Distillate*, aunque no vayamos a simular una columna de destilación. La corriente de salida del absorbente líquido (L-OUT) la conectamos al puerto inferior, al cual Aspen Plus se refiere como *Bottoms*.

 **Nota:** Para cambiar el nombre de una corriente pulse sobre ella con el botón derecho y elija *Rename Stream*.

Es posible desplazar el puerto asociado a cada corriente alrededor de un icono, en este caso, para hacer más intuitiva la apariencia del absorbedor. Para ello colocamos el cursor (en forma de flecha, fuera del modo *Material streams*) sobre el puerto donde está conectada la corriente y mantenemos pulsado el botón izquierdo. El cursor se transformará en una doble flecha permitiéndonos desplazar el puerto de la corriente por el contorno del icono. De esta manera la vista del absorbedor quedaría como en la Figura 45-derecha.

 **Importante:** Desplazar el puerto no cambia el tipo de puerto al que está conectado una corriente. Para ello, pulsamos el botón derecho sobre la corriente y elegimos *Reconnect Destination*.

A partir de los datos de la tabla 3 podemos especificar la corriente del gas a limpiar (V-IN). De la corriente de absorbente (agua) (L-IN) podemos especificar su presión y temperatura pero no conocemos su caudal, que dependerá del número de etapas usado en la torre, con el fin de conseguir la concentración de metanol deseada en el gas purificado (V-OUT). Hemos comentado que el diseño suele realizarse para 1,5 veces el caudal mínimo, y este último se podría obtener por tanteo simulando la torre con un número muy alto de etapas. No obstante, operar la torre en condiciones tan extremas suele dar problemas de convergencia. En nuestro caso vamos a fijar el número de etapas en la torre y calcular el caudal de absorbente necesario.

En primer lugar vamos a configurar el modelo *Radfrac*. En la pestaña *Configuration* especificamos que no existe ni condensador ni hervidor (elegimos *none*, en los campos *Condenser* y *Reboiler*, Figura 46-izquierda). Finalmente, vamos a elegir arbitrariamente 15 etapas de equilibrio.

En la pestaña *Streams* (Figura 46-derecha) la corriente de absorbente (L-IN) la alimentamos en cabeza de torre (etapa 1) mientras que la corriente de gas (V-IN) la alimentamos en el fondo de la torre (etapa 15). En ambos casos elegimos como convención *On-Stage*.

Finalmente en la pestaña *Pressure* especificamos que la presión de la primera etapa (Top Stage/Condenser) es de 1 bar. Al no especificar pérdidas de carga esto implica que la columna entera opera a presión atmosférica.

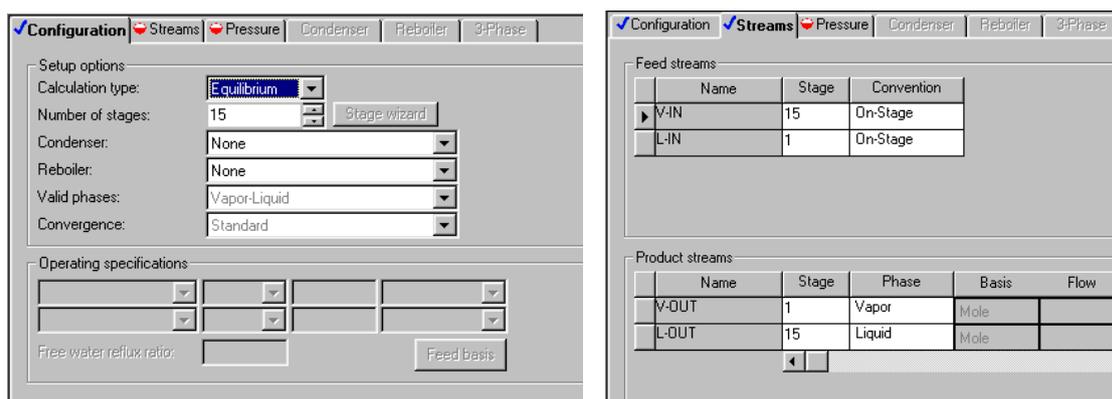


Figura 46. Configurando el modelo Radfrac como absorbedor.

Para llevar a cabo la simulación sólo nos queda especificar el caudal de agua, pero ¿cómo determinamos el caudal necesario para conseguir 100 ppm de metanol en el gas a la salida? Obviamente, puede hacerse por tanteo. Por ejemplo, especificamos 50 kmol/h de agua y realizamos la simulación de la torre. En la Figura 47 se muestra la

composición del gas a la salida, donde se observa que la concentración molar de metanol es de 3,5%. Por tanto, el caudal de agua debe ser mayor para recuperar más etanol y disminuir la concentración hasta 100 ppm.

Property	Value
Temperature C	42.7
Pressure bar	1.000
Vapor Frac	1.000
Mole Flow kmol/hr	203,570
Mass Flow kg/hr	4167,193
Volume Flow cum/hr	5345,475
Enthalpy MMkcal/hr	-4,704
Mole Flow kmol/hr	
WATER	16,478
CO	109,999
CH4	29,999
H2	40,000
METHANOL	7,095
Mole Frac	
WATER	0,081
CO	0,540
CH4	0,147
H2	0,196
METHANOL	0,035

Figura 47. Corriente de gas a la salida usando 15 etapas y 50 kmol/h de agua

 **Nota:** Para que se muestre la fracción molar de los componentes en los resultados de las corrientes hay que dirigirse a Setup→Report Options y después en la pestaña Stream marcar Mole dentro del cuadro Fraction Basis.

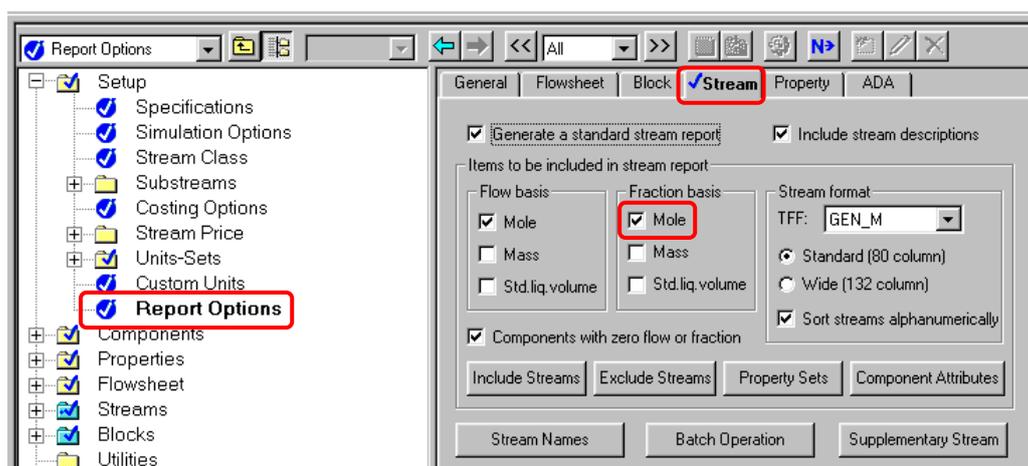


Figura 48. Pantalla de selección de opciones para la presentación de resultado de corrientes

Si se simula con 100, 150, 200, 250 y 300 kmol/h de agua, la fracción molar de metanol en el gas de salida se reduce hasta 1,4%, 0,5%, 0,2%, 395 ppm y 70 ppm, respectivamente. Por tanto, el caudal necesario debe estar entre 250 y 300 kmol/h.

Acotando la solución, podemos determinar su valor exacto usando especificaciones de diseño. Dicha especificación de diseño puede configurarse en el propio modelo *Radfrac*, como ya se mostró anteriormente. No obstante, *Radfrac* es una excepción ya que es el único modelo de Aspen Plus que tiene especificaciones de diseño propias. Para cualquier otro equipo deben usarse especificaciones de diseño genéricas que están disponibles en Aspen Plus. En este caso, vamos a usar dichas especificaciones de diseño genéricas en vez de las que dispone el modelo *Radfrac*.

3.3 Definiendo especificaciones de diseño genéricas en Aspen Plus

Para definir una especificación de diseño genérica nos dirigimos a la carpeta del navegador de Aspen *Flowsheet Options*→*Design Specs* y pulsamos *New* (Figura 49). Nombramos la especificación de diseño de manera que sea intuitivo saber cuál es el propósito de la especificación. En este caso, se ha elegido el nombre REC-MET, ya que está asociada a la recuperación del metanol. Después pulsamos OK y aparecerá una pantalla parecida a la Figura 50.

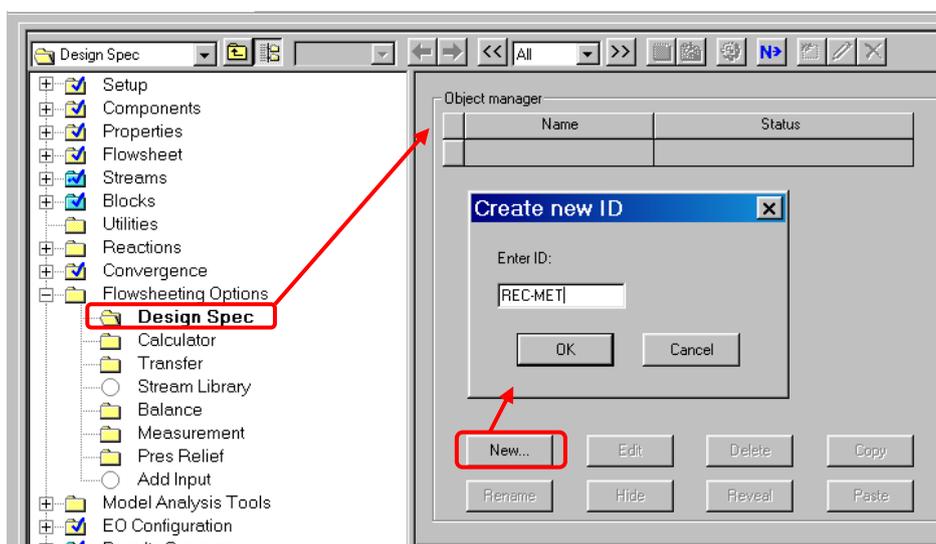


Figura 49. Creación de una especificación de diseño genérica

La especificación de diseño se llama algunas veces *controlador* en el argot de simulación debido ya que se basa en la manipulación de una variable para mantener (controlar) otra en un valor fijo, pero todo ello dentro del marco de una simulación en

régimen permanente. Para definir la especificación de diseño es necesario seguir tres pasos, correspondientes a las tres pestañas asociadas a la especificación de diseño (Figura 50):

- Pestaña *Define*: se define la variable que se desea controlar. En este caso, la fracción molar de metanol en el gas de salida del absorbedor.
- Pestaña *Spec*: se especifica el valor al que se fija la variable controlada. En este caso, 100 ppm
- Pestaña *Vary*: se especifica la variable manipulada y el rango de variación. En este caso, el caudal de agua introducido al absorbedor entre 250 y 300 kmol/h.

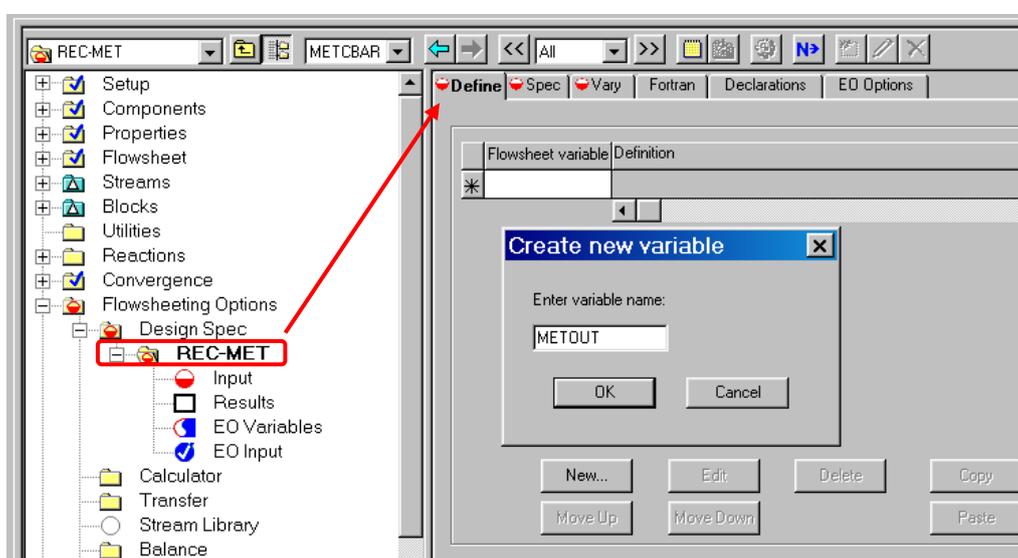


Figura 50. Creando la variable a controlar

Para definir la variable a controlar en la pestaña *Define* pulsamos en *New* y nombramos dicha variable apropiadamente. En la Figura 50 se ha elegido el nombre de METOUT. Después pulsamos el botón OK y aparecerá una ventana (Figura 51-izquierda) que debemos usar para apuntar a la variable que acabamos de crear. Para facilitar la búsqueda a la izquierda aparece la sección *Category*, que nos permite restringir la búsqueda por tipos de variables. Ya que la fracción de metanol es una variable asociada a la corriente de gas a la salida (V-OUT), restringimos la búsqueda a variables asociadas a corrientes (*Streams*). A la derecha se afina el tipo de variable al que se apunta usando diferentes campos:

- *Type*: Indica los tipos de variable disponibles, restringidos a la categoría seleccionada. En este caso elegimos *Mole-frac*, para referirnos a fracción

molar. Debe recalarse que en la parte inferior de dicha ventana aparece una nota descriptiva cada vez que pasamos por encima de un tipo de variable (Figura 51-izquierda).

- *Stream*: Elegimos la corriente a la cuál vamos a referir el tipo de variable seleccionado. En este caso elegimos V-OUT.
- *Substream*: En nuestro caso dejamos siempre MIXED.
- *Component*: Elegimos el componente de la corriente seleccionada en *Streams* al cuál vamos a referir el tipo de variable seleccionada en *Type*. En este caso, metanol.

Finalmente quedará una pantalla como el de la Figura 51-derecha, donde queda claro que la variable MET-OUT hace referencia a la fracción molar del metanol en la corriente V-OUT. Una vez terminado, pulsamos *Close* y la variable ya definida aparecerá en una lista, con su definición, como se observa en la Figura 52.

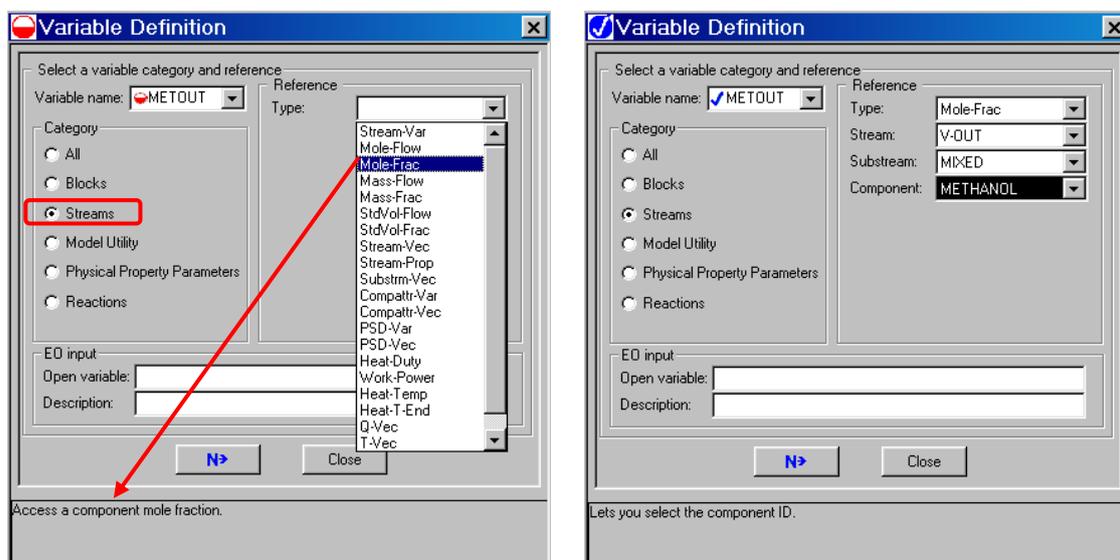


Figura 51. Definiendo la variable a controlar, paso 2.

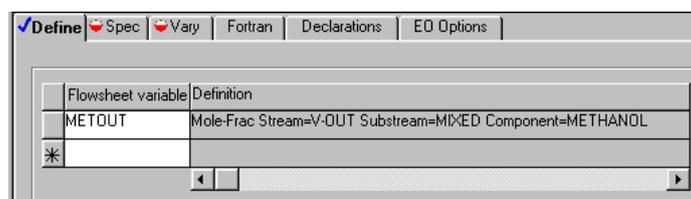


Figura 52. Variable controlada ya definida

Si pulsamos en la pestaña *Spec* aparecen 3 campos (Figura 53):

- *Spec*: especificamos qué variable queremos controlar. Para ello nos apoyamos en la variable anteriormente definida en la pestaña *Define*.
- *Target*: valor de diseño al que fijamos la variable introducida en el campo anterior
- *Tolerance*: máximo error absoluto permitido entre el valor fijado en *Target* y el calculado en la simulación.

Se recalca nuevamente que en la parte inferior de la ventana aparece una nota explicativa de cada campo cada vez que se pulsa en uno de ellos (Figura 53). La Figura 54 muestra los campos rellenos para especificar que la fracción molar de metanol sea de 100 ppm (debe especificarse en tanto por uno) con un error de 5 ppm (error absoluto del 5%, que es aceptable para el rango de concentración en el que nos movemos).



Figura 53. Pestaña para especificar el valor de la variable controlada

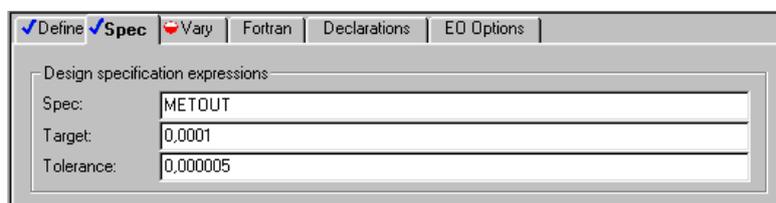


Figura 54. Valor de diseño

Finalmente queda por especificar la variable manipulada en la pestaña *Vary*. En la Figura 55 se muestra cómo se especifica que la variable manipulada sea el caudal de la corriente de agua (L-IN) con un rango de variación entre 250 y 300 kmol/h, donde sabemos que está la solución. En el campo *Type* de *Manipulated Variable* elegimos *Stream-Var*. Este tipo de variable nos permite acceder a variables globales de la corriente como temperatura, presión, caudales totales, etc. En *Variable* elegimos *Mole-flow* que hace referencia al caudal molar total de la corriente.

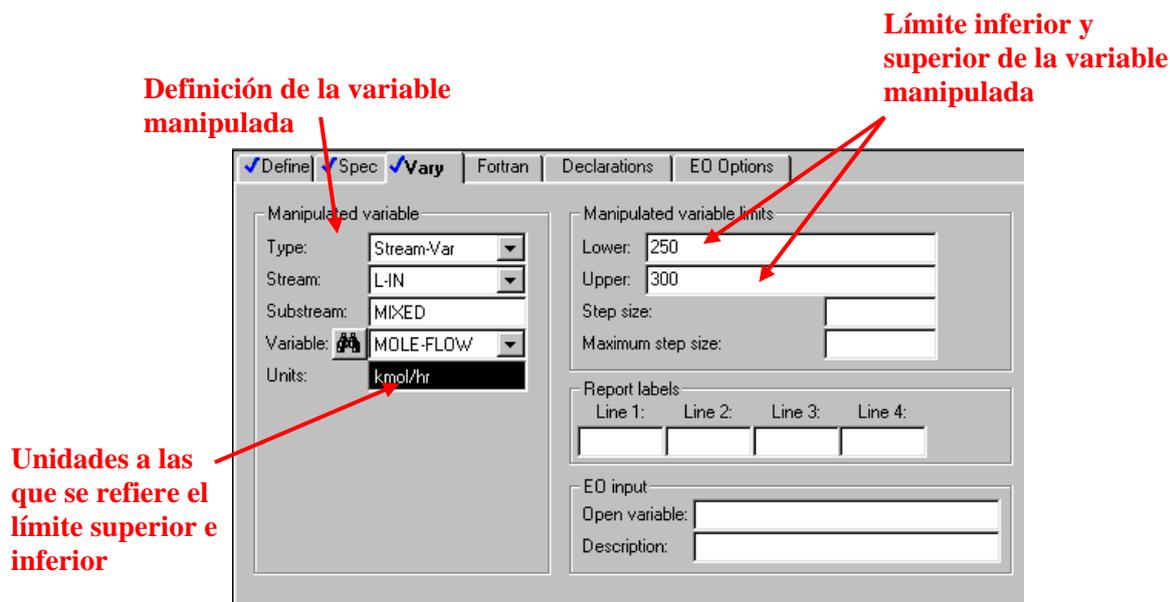


Figura 55. Variable manipulada ya especificada

⚠ Importante: en el campo *Type* existe un tipo de variable que es *Mole-flow*. Éste permite referirse al caudal de uno de los componentes de la corriente. Si se usase este tipo de variable debe tenerse en cuenta que con la especificación de diseño cambiaríamos el caudal de un componente en una corriente manteniendo los caudales del resto de componentes constantes. En nuestro caso la corriente L-IN sólo tiene un componente, el agua, y usar el tipo de variable *Stream-var* y *Mole-flow* es indiferente.

Una vez que hemos definido completamente la especificación de diseño podemos ejecutar la simulación.

⚠ Importante: Antes de empezar la simulación debe asegurarse que el valor de la variable manipulada introducido en la simulación está dentro del rango definido en la pestaña *Vary*, pues de otra manera aparecerá un error al ejecutar la simulación. Esto es así porque el algoritmo de convergencia parte del valor introducido en la

simulación para comenzar las iteraciones y por tanto, no puede estar fuera del rango especificado.

En la Figura 56 se muestran las corrientes de entrada y salida del absorbedor una vez que la simulación ha convergido. Para conseguir 100 ppm de metanol en el gas a la salida se necesitan **290,1 kmol/h** de caudal de agua, recordando que este resultado es válido para una torre con **15 platos**. Si hubiésemos elegido más platos en la torre el caudal de agua necesario hubiera sido menor. Se deja en manos del lector comprobar cómo varía el caudal de agua necesario en función del número de platos totales en la torre.

	L-IN	V-IN	V-OUT	L-OUT
Temperature C	25,0	80,0	41,4	43,0
Pressure bar	1,000	1,000	1,000	1,000
Vapor Frac	0,000	1,000	1,000	0,000
Mole Flow kmol/hr	290,081	200,000	195,537	294,544
Mass Flow kg/hr	5225,890	4283,905	3923,220	5586,576
Volume Flow cum/hr	5,258	5872,411	5113,200	5,908
Enthalpy MMkcal/hr	-19,794	-4,314	-4,312	-19,796
Mole Flow kmol/hr				
WATER	290,081		15,523	274,558
CO		110,000	109,997	0,003
CH4		30,000	29,999	0,001
H2		40,000	39,999	0,001
METHANOL		20,000	0,020	19,980
Mole Frac				
WATER	1,000		0,079	0,932
CO		0,550	0,563	11 PPM
CH4		0,150	0,153	4 PPM
H2		0,200	0,205	4 PPM
METHANOL		0,100	100 PPM	0,068

Figura 56. Resultados de la simulación cumpliendo la especificación de diseño

 **Nota:** Es posible desactivar una especificación de diseño para que no se ejecute en una simulación. Para ello pulsamos con el botón derecho sobre la especificación de diseño y seleccionamos *Desactivate* (Figura 57). Aparecerá una *d* en color verde sobre la especificación indicando que está desactivada. Para activarla de nuevo volvemos a pulsar con el botón derecho sobre ella y pulsamos *Activate*.

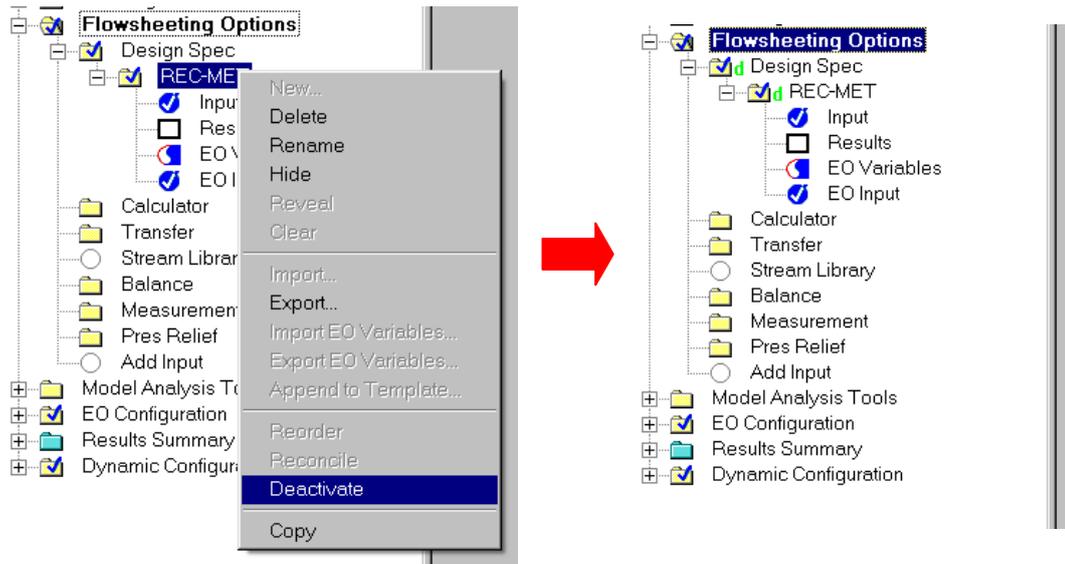


Figura 57. Desactivación de una especificación de diseño