

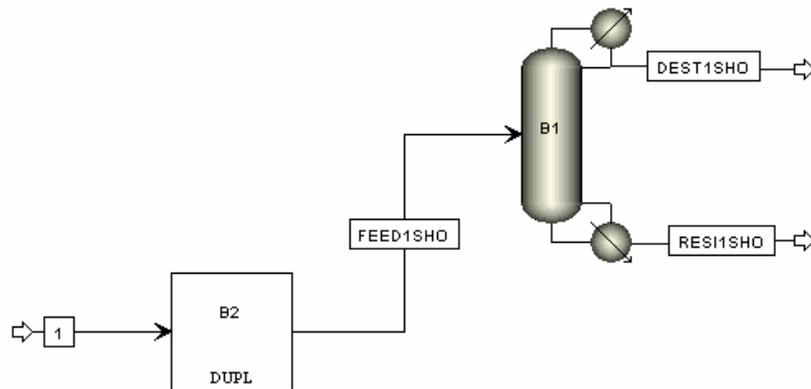
Caso 6

OBJETIVO

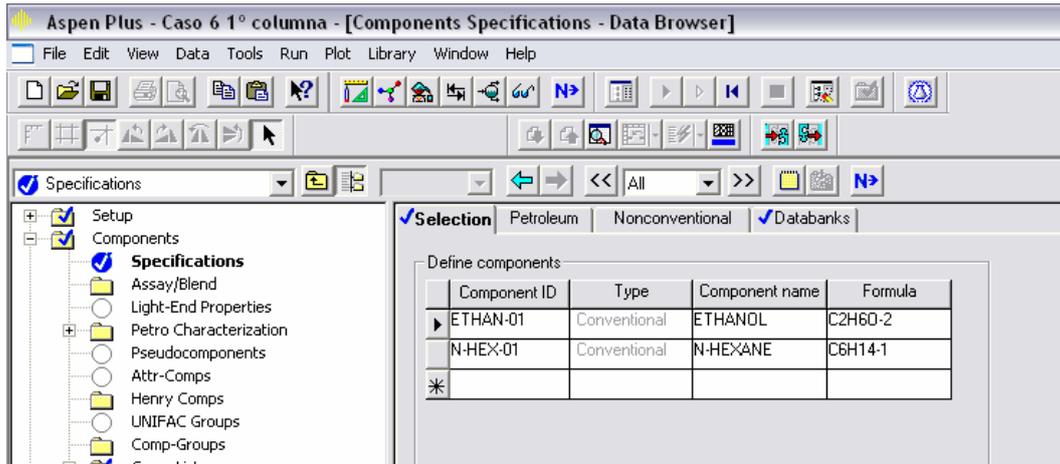
El objetivo de es la recuperación de etanol y n-hexano con una pureza superior al 95%, de una corriente alimento constituida por una fracción molar de etanol de 0.65 y una de n-hexano de 0.35. Para ello disponemos de dos columna de destilación que pueden trabajar con una relación de reflujo máxima de 10 y una presión entre 1 y 10 atm.

PROCEDIMIENTO:

En primer lugar realizaremos la simulación de la primera corriente con una ShortCut (DSTWU), con lo que podemos obtener datos para resolver la columna RadFrac. Para facilitar el trabajo, consideramos la utilización de un duplicador (Manipulators \longrightarrow Dupl) para poder utilizar una corriente, de las mismas características, como entrada a la columna DSTWU y Rad Frac.

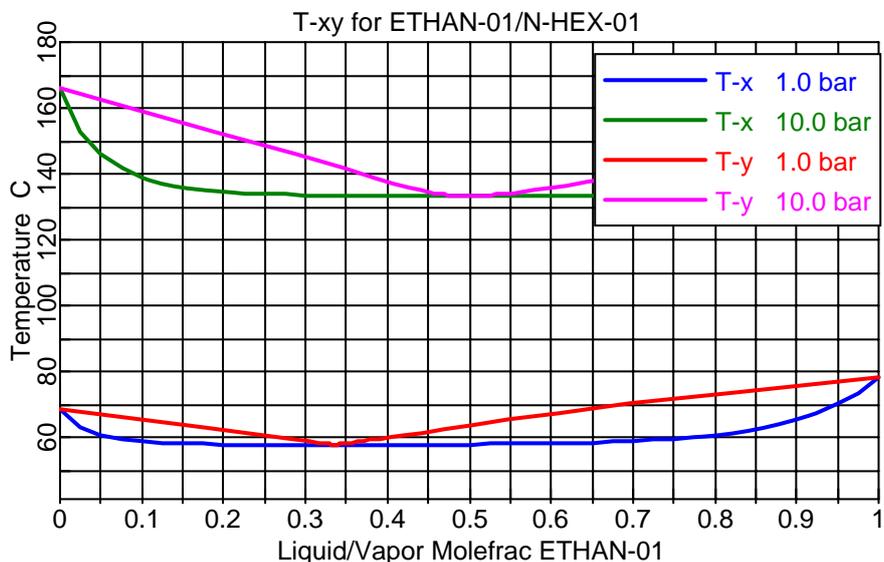


Posteriormente se indican los componentes que participan en la simulación:



Después indicamos el modelo termodinámico a utilizar. En este caso se ha considerado adecuado un modelo de coeficiente de actividad Unifac, ya que tenemos un componente polar, el etanol, y el modelo Peng Robinson no simula bien este tipo de compuestos.

Para verificar que en esta mezcla existe un azeótropo, se representa los datos de equilibrio. (Tools → Análisis → Property → Binary). Se indica el tipo de gráfico T-xy y la presión a la que se quieren obtener los datos (se ha indicado una presión de 1 y 10 bar).

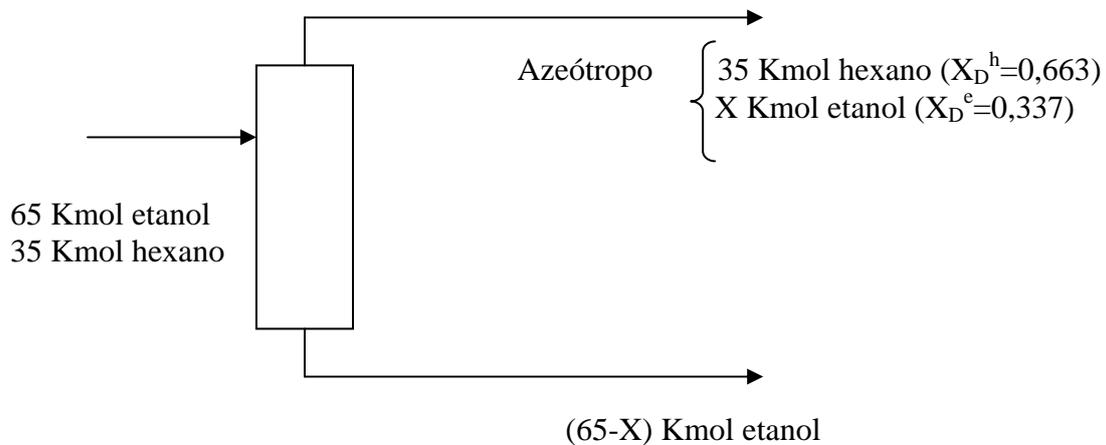


Como se observa en la representación el sistema etanol,n-hexano forma un azeótropo. Para una presión de 10 atmósferas la composición del azeótropo es de una fracción molar de etanol de 0,5 y para 1 atmósfera la composición es de 0,337 de etanol.

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

Para la primera columna, a baja presión, en la simulación de la Shortcut indicamos una relación de reflujo inicial de 6 (inferior a la máxima fijada como 10). Después indicamos la recuperación del componente clave ligero (hexano) en un valor muy alto (el mayor número posible que permite el programa es 0,9999999) y el componente clave pesado es el etanol. Para fijar la recuperación debemos de realizar el siguiente cálculo:

- Datos iniciales supuestos:
- Alimentación 100 Kmol.
 - n-hexano en el residuo: 0 Kmol.



- o Cálculo del caudal de destilado

Aplicando la siguiente regla de tres:

$$\left. \begin{array}{l} 35 \text{ Kmol hexano} \text{ ————— } 0,663 \\ \zeta \text{ (destilado total)} \text{ ————— } 1 \end{array} \right\}$$

Destilado total: 52,79 Kmol

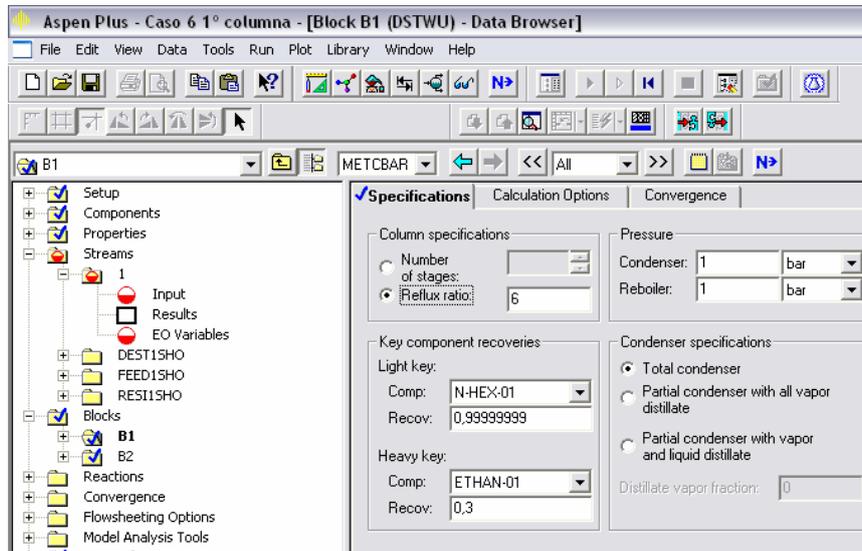
- o Cálculo del caudal de etanol en el destilado

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

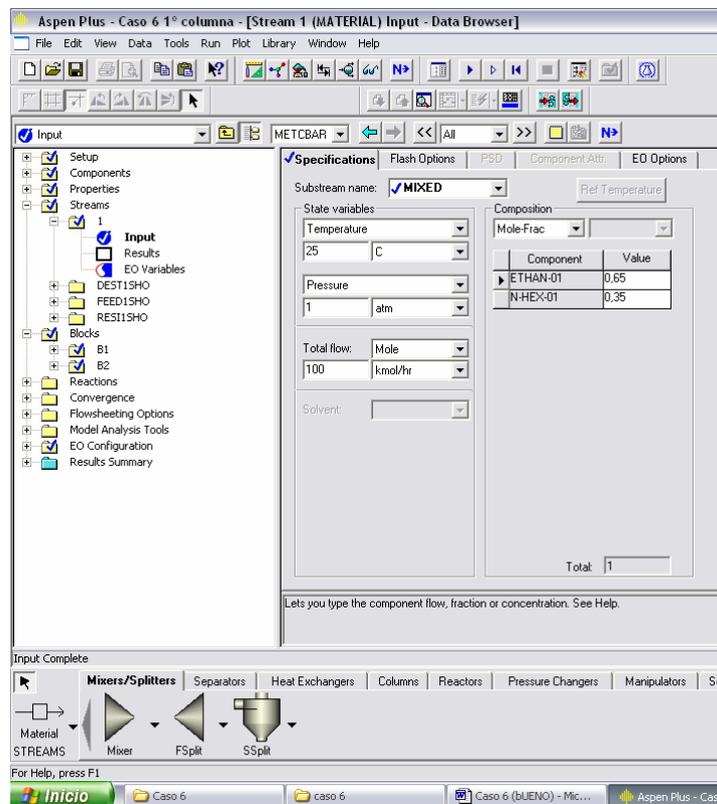
- o Cálculo de la pérdida de etanol por cabeza

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

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

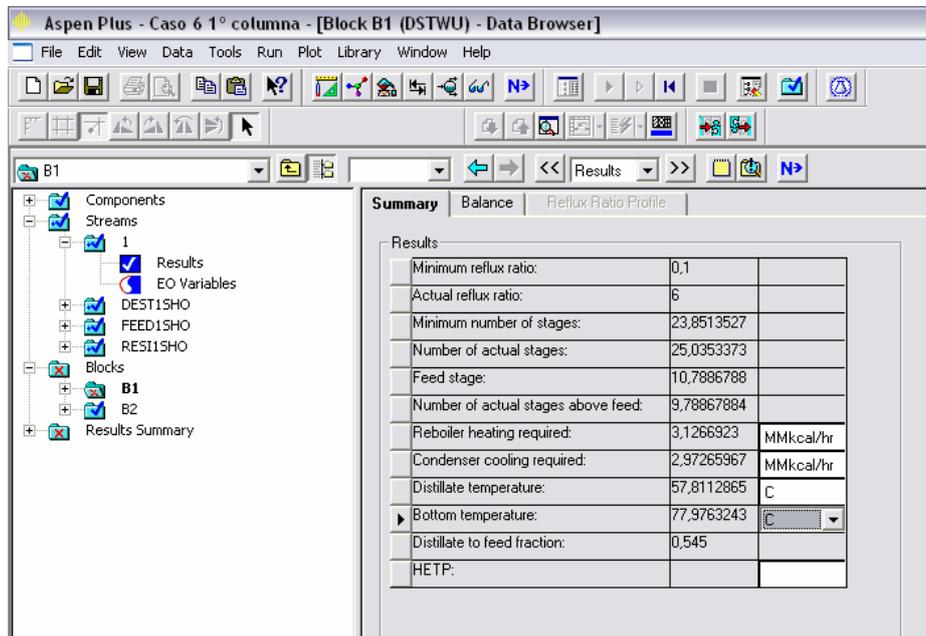


Posteriormente indicamos las condiciones de la corriente de entrada (25°C, 1 atm, fracción molar de etanol 0,65 y fracción molar de n-hexano 0,35).



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

Caso 6 1º Columna						
Stream ID		1	DEST1SHO	FEED1SHO	FEED2RAD	RESI1SHO
Temperature	C	25,0	57,8	25,0	25,0	78,0
Pressure	bar	1,013	1,000	1,013	1,013	1,000
Vapor Frac		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Mole Flow	kmol/hr	100,000	54,500	100,000	100,000	45,500
Mass Flow	kg/hr	6010,688	3914,547	6010,688	6010,688	2096,141
Volume Flow	cum/hr	8,354	5,934	8,354	8,354	2,963
Enthalpy	MMkcal/hr	-5,957	-2,865	-5,957	-5,957	-2,938
Mole Flow	kmol/hr					
ETHAN-01		65,000	19,500	65,000	65,000	45,500
N-HEX-01		35,000	35,000	35,000	35,000	trace
Mole Frac						
ETHAN-01		0,650	0,358	0,650	0,650	1,000
N-HEX-01		0,350	0,642	0,350	0,350	8 PPB



Aspen Plus - Caso 6 1º columna - [Block B1 (DSTWU) - Data Browser]

Summary | Balance | Reflux Ratio Profile

Results

Minimum reflux ratio:	0,1	
Actual reflux ratio:	6	
Minimum number of stages:	23,8513527	
Number of actual stages:	25,0353373	
Feed stage:	10,7886788	
Number of actual stages above feed:	9,78867884	
Reboiler heating required:	3,1266923	MMkcal/hr
Condenser cooling required:	2,97265967	MMkcal/hr
Distillate temperature:	57,8112865	C
Bottom temperature:	77,9763243	C
Distillate to feed fraction:	0,545	
HETP:		

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

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

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

B3 METCBAR Input

Configuration
 Streams
 Pressure
 Condenser
 Reboiler
 3-Phase

Setup options

Number of stages: 28
 Condenser: Total
 Reboiler: Kettle
 Valid phases: Vapor-Liquid
 Convergence: Standard

Operating specifications

Reflux ratio: Mole 0,5
 Distillate to feed ratio: Mole 0,545
 Free water reflux ratio: Feed basis

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

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

B3 METCBAR Input

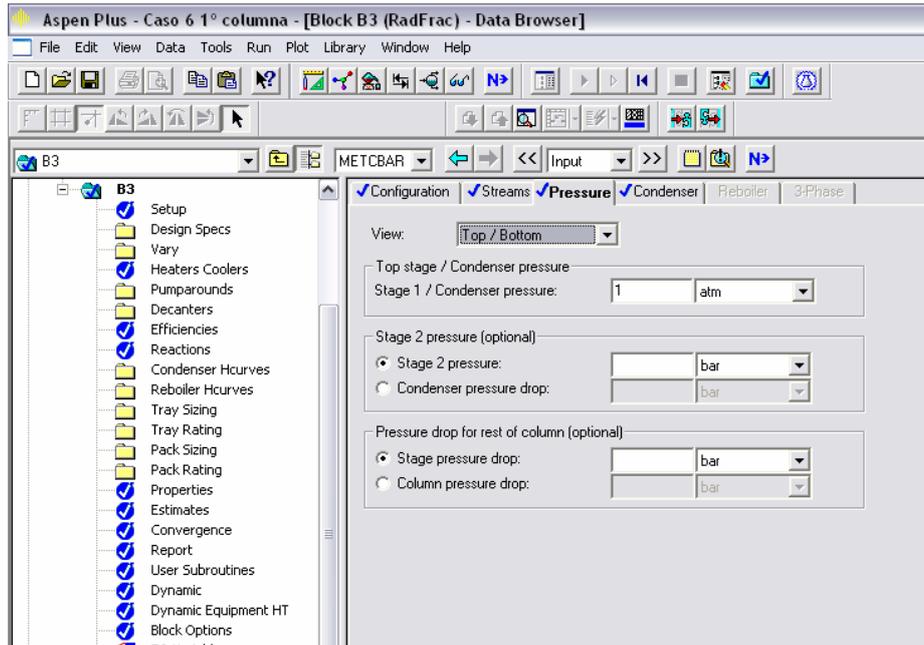
Configuration
 Streams
 Pressure
 Condenser
 Reboiler
 3-Phase

Feed streams

Name	Stage	Convention
FEED2RAD	12	Above-Stage

Product streams

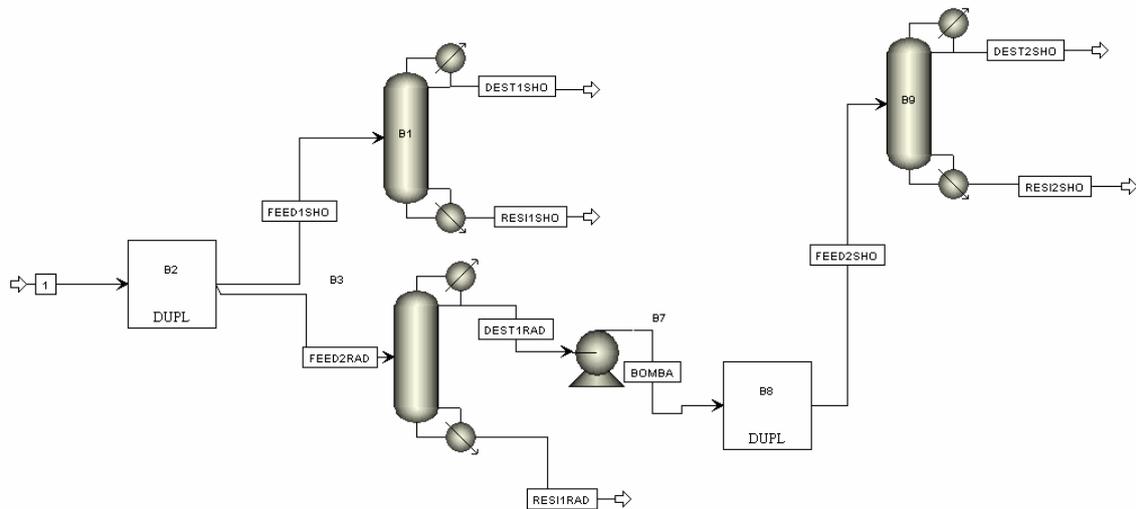
Name	Stage	Phase	Basis	Flow	Units	Flow ratio	Feed specs
DEST1RAD	1	Liquid	Mole		kmol/hr		Feed basis
RES11RAD	28	Liquid	Mole		kmol/hr		Feed basis



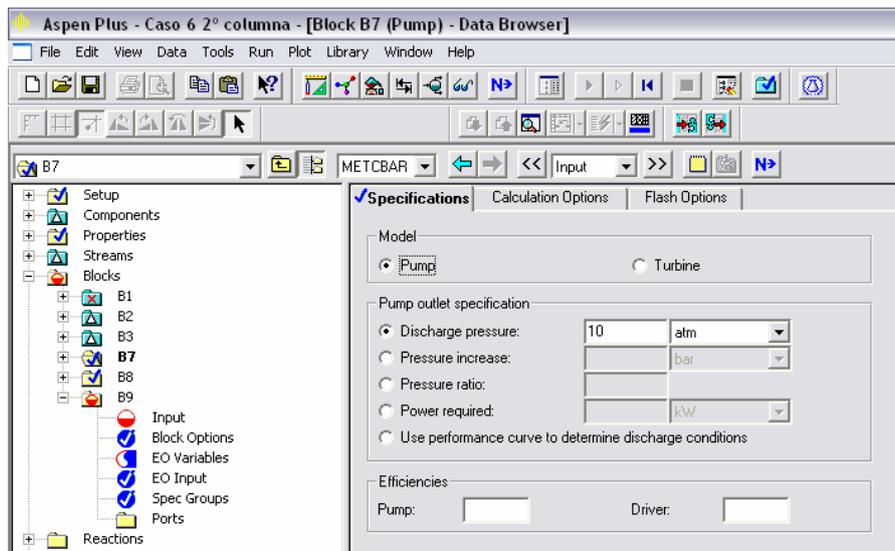
Caso 6 1º Columna								
Stream ID		1	DEST1RAD	DEST1SHO	FEED1SHO	FEED2RAD	RESI1RAD	RESI1SHO
Temperature	C	25,0	58,2	57,8	25,0	25,0	78,3	78,0
Pressure	bar	1,013	1,013	1,000	1,013	1,013	1,013	1,000
Vapor Frac		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Mole Flw	kmol/hr	100,000	54,500	54,500	100,000	100,000	45,500	45,500
Mass Flow	kg/hr	6010,688	3914,547	3914,547	6010,688	6010,688	2096,141	2096,141
Volume Flow	cum/hr	8,354	5,938	5,934	8,354	8,354	2,965	2,963
Enthalpy	MMkcal/hr	-5,957	-2,864	-2,865	-5,957	-5,957	-2,938	-2,938
Mole Flw	kmol/hr							
ETHAN-01		65,000	19,500	19,500	65,000	65,000	45,500	45,500
N-HEX-01		35,000	35,000	35,000	35,000	35,000	trace	trace
Mole Frac								
ETHAN-01		0,650	0,358	0,358	0,650	0,650	1,000	1,000
N-HEX-01		0,350	0,642	0,642	0,350	0,350	trace	8 PPB

Los resultados obtenidos muestran como el etanol se obtiene prácticamente puro en el residuo y por cabeza se obtienen el azeotropo correspondiente a una presión de 1 atm.

Una vez conseguido el etanol prácticamente puro utilizaremos una columna a alta presión para separar el n-hexano. En primer lugar colocamos una bomba para aumentar la presión hasta un valor de 10 atmósferas. Posteriormente colocamos un duplicador para facilitar la simulación con la Shortcut y posteriormente con la RadFrac.

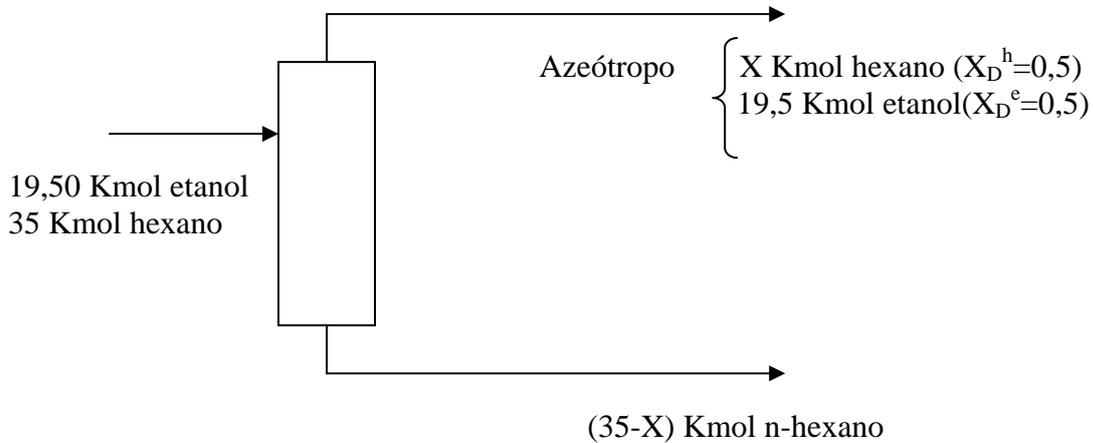


Para simular la bomba simplemente es necesario indicar del equipo que se trata y la presión de descarga.



Para la simulación de la Shortcut indicamos una relación de reflujo inicial de 6 (inferior a la máxima fijada como 10). Después indicamos la recuperación del componente clave ligero (etanol) en un valor muy alto (el mayor número posible que permite el programa es 0,99999999) y el componente clave pesado es el n-hexano. Para fijar la recuperación debemos de realizar el siguiente cálculo:

Datos iniciales:- Composición y caudal de la corriente de destilado de la 1^o columna
 - etanol en el residuo: 0 Kmol.



- Cálculo del caudal de destilado

Aplicando la siguiente regla de tres:

$$\left. \begin{array}{l} 19.5 \text{ Kmol etanol} \text{ ————— } 0,5 \\ i \text{ (destilado total)} \text{ ————— } 1 \end{array} \right\}$$

Destilado total: 39 Kmol

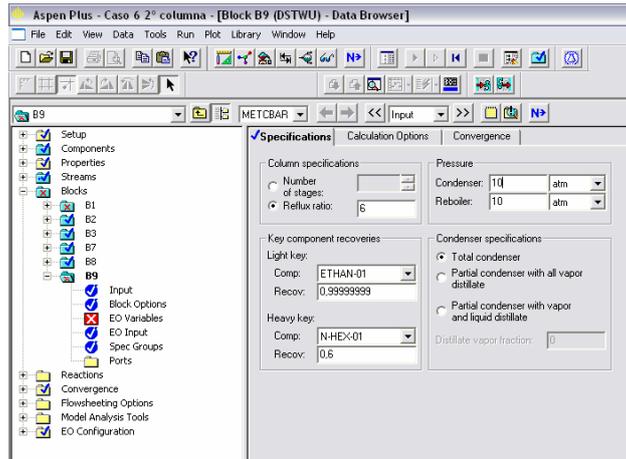
- Cálculo del caudal de n-hexano en el destilado

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

- Cálculo de la pérdida de n-hexano por cabeza

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

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



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

Caso 6 1ª Columna												
Stream ID		1	BOMBA	DEST1RAD	DEST1SHO	DEST2SHO	FEED1SHO	FEED2RAD	FEED2SHO	RESI1RAD	RESI1SHO	RESI2SHO
Temperature	C	25,0	59,4	58,2	57,8	133,6	25,0	25,0	59,4	78,3	78,0	166,6
Pressure	bar	1,013	10,133	1,013	1,000	10,133	1,013	1,013	10,133	1,013	1,000	10,133
Vapor Frac		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Mole Flow	kmol/hr	100,000	54,500	54,500	54,500	40,500	100,000	100,000	54,500	45,500	45,500	14,000
Mass Flow	kg/hr	6010,688	3914,547	3914,547	3914,547	2708,067	6010,688	6010,688	3914,547	2096,141	2096,141	1206,480
Volume Flow	cum/hr	8,354	5,950	5,938	5,934	4,713	8,354	8,354	5,950	2,965	2,963	2,399
Enthalpy	MM kcal/hr	-5,957	-2,860	-2,864	-2,865	-2,082	-5,957	-5,957	-2,860	-2,938	-2,938	-0,553
Mole Flow	kmol/hr											
ETHAN-01		65,000	19,500	19,500	19,500	19,500	65,000	65,000	19,500	45,500	45,500	trace
N-HEX-01		35,000	35,000	35,000	35,000	21,000	35,000	35,000	35,000	trace	trace	14,000
Mole Frac												
ETHAN-01		0,650	0,358	0,358	0,358	0,481	0,650	0,650	0,358	1,000	1,000	14 PPB
N-HEX-01		0,350	0,642	0,642	0,642	0,519	0,350	0,350	0,642	trace	8 PPB	1,000

Aspen Plus - Caso 6 2^o columna - [Block B9 (DSTWU) Results - Data Browser]

File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help

Results

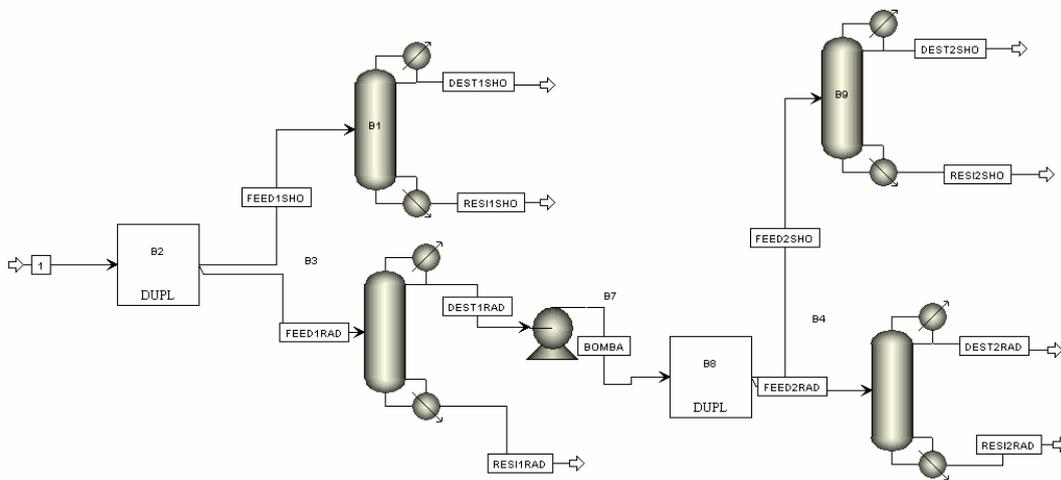
Components
Streams
Blocks
B1
B2
B3
B7
B8
B9
Results
EO Variables
Stream Results
Results Summary

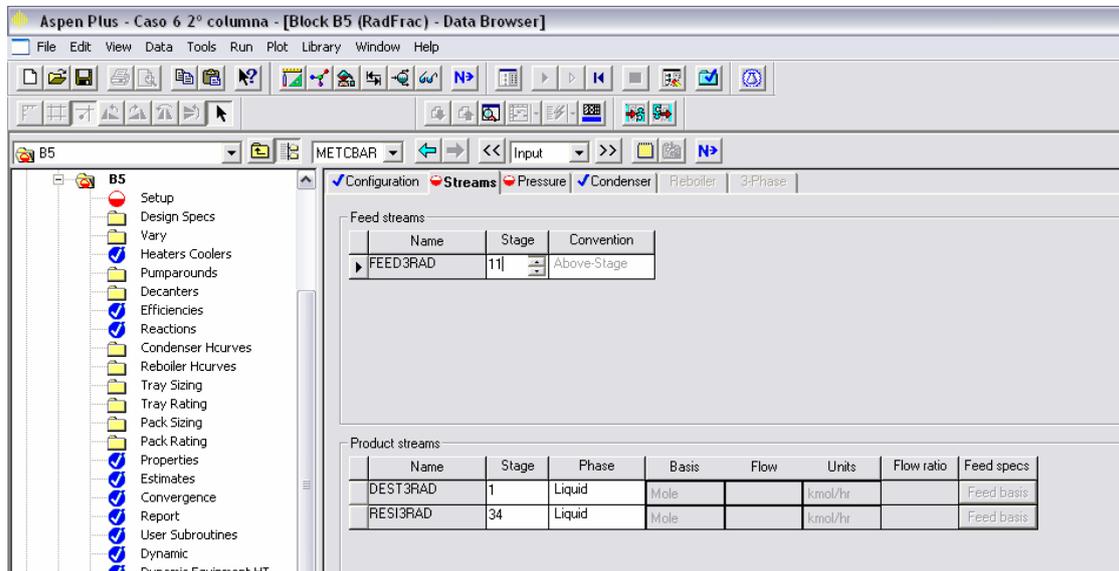
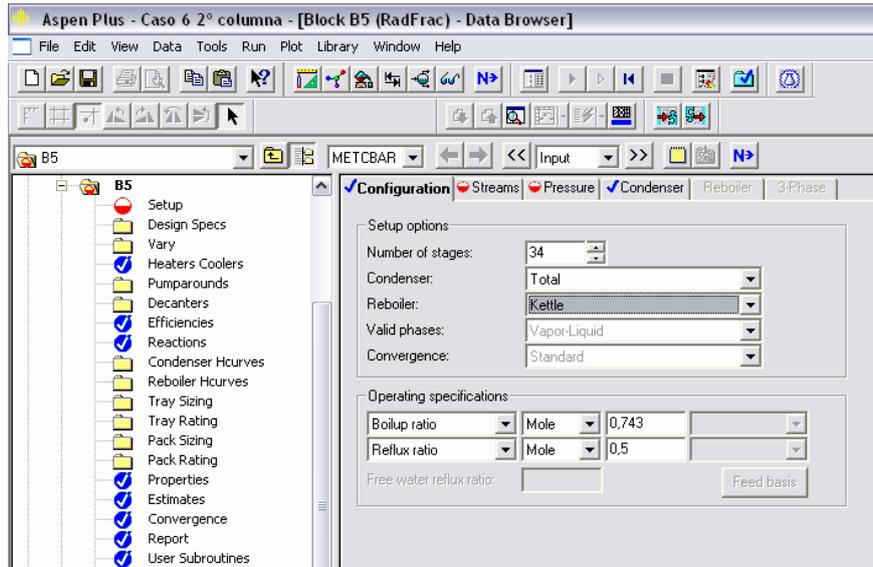
Summary Balance Reflux Ratio Profile

Results

Minimum reflux ratio:	0,1	
Actual reflux ratio:	6	
Minimum number of stages:	30,3350278	
Number of actual stages:	31,827912	
Feed stage:	9,00027617	
Number of actual stages above feed:	8,00027617	
Reboiler heating required:	2,05566188	MMkcal/hr
Condenser cooling required:	1,83008978	MMkcal/hr
Distillate temperature:	133,582729	C
Bottom temperature:	166,563176	C
Distillate to feed fraction:	0,74311926	
HETP:		

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





Caso 6 1ª Columna															
Stream ID		1	BOMBA	DEST1RAD	DEST1SHO	DEST2RAD	DEST2SHO	FEED1RAD	FEED1SHO	FEED2RAD	FEED2SHO	RESI1RAD	RESI1SHO	RESI2RAD	RESI2SHO
Temperature	C	25,0	59,4	58,2	57,8	133,6	133,1	25,0	25,0	59,4	59,4	78,3	78,0	166,6	165,8
Pressure	bar	1,013	10,133	1,013	1,000	10,133	10,000	1,013	1,013	10,133	10,133	1,013	1,000	10,133	10,000
Vapor Frac		0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
Mole Flow	kmol/hr	100,000	54,500	54,500	54,500	40,493	40,500	100,000	100,000	54,500	54,500	45,500	45,500	14,007	14,000
Mass Flow	kg/hr	6010,688	3914,547	3914,547	3914,547	2707,506	2708,067	6010,688	6010,688	3914,547	3914,547	2096,141	2096,141	1207,040	1206,480
Volume Flow	cm ³ /hr	8,354	5,950	5,938	5,934	4,712	4,707	8,354	8,354	5,950	5,950	2,965	2,963	2,401	2,394
Enthalpy	MMkcal/hr	-5,957	-2,860	-2,864	-2,865	-2,082	-2,083	-5,957	-5,957	-2,860	-2,860	-2,938	-2,938	-0,553	-0,553
Mole Flow	kmol/hr														
ETHAN-01		65,000	19,500	19,500	19,500	19,500	19,500	65,000	65,000	19,500	19,500	45,500	45,500	trace	trace
N-HEX-01		35,000	35,000	35,000	35,000	20,993	21,000	35,000	35,000	35,000	35,000	trace	trace	14,007	14,000
Mole Frac															
ETHAN-01		0,650	0,358	0,358	0,358	0,482	0,481	0,650	0,650	0,358	0,358	1,000	1,000	trace	14 PPB
N-HEX-01		0,350	0,642	0,642	0,642	0,518	0,519	0,350	0,350	0,642	0,642	trace	8 PPB	1,000	1,000

Los resultados obtenidos muestran como el n-hexano se obtiene prácticamente puro en el residuo y por cabeza se obtienen el azeotropo correspondiente a una presión de 10 atm.

CONCLUSIONES:

En el siguiente cuadro se resumen las condiciones de trabajo de las dos columnas utilizadas para obtener el etanol y el n-hexano prácticamente puros y la recuperación de cada uno de los productos. La recuperación se calcula como la cantidad del producto obtenido dividido entre la cantidad de este producto alimentado.

1º Columna			2º Columna		Recuperación (%)		
Relación reflujo	Presión	Nº Pisos	Relación reflujo	Presión	Nº Pisos	Etanol	n-hexano
0,5	1	28	0,5	10	34	0,7	40,02