

TEMA 2. MÓDULOS PARA LA SIMULACIÓN DE OPERACIONES UNITARIAS DE TRANSFERENCIA DE MATERIA

1. UNIDAD PARA LA SIMULACIÓN DE UNA OPERACIÓN DE DESTILACION SÚBITA O FLASH

La unidad flash es un modelo general que permite varias operaciones flash. La selección del modo apropiado permite realizar cálculos en condiciones isotérmicas, isobáricas, adiabáticas, isoentrópicas, etc. Además, en aquellos casos en que se trate mezclas de agua e hidrocarburos, también se contempla la posibilidad de ir separando agua pura desde una mezcla de agua e hidrocarburos.

Se trata de una opción muy versátil: seleccionando el modo de operación adecuado se pueden resolver problemas de cálculo de temperaturas o presiones de burbuja o de rocío, problemas de equilibrio líquido-líquido, de equilibrio líquido-vapor, equilibrio líquido-líquido-vapor, etc.

Una vez ejecutado el cálculo, la misma pantalla de introducción de parámetros para el equipo muestra el valor obtenido para Q.

1.1. Modos de operación

Para seleccionar las condiciones del problema, y una vez que se ha diseñado el diagrama de flujo adecuado a éste, hay que acceder al comando **Specifications**, seleccionar **Select Unitops** e introducir el número de identificación del icono correspondiente a la operación unitaria Flash (también se accede haciendo dos veces Clic sobre dicho icono). Las distintas posibilidades se seleccionan mediante la combinación adecuada parámetros que corresponde a cada uno de los distintos **modos** de operación:

Destilación flash isotérmica en las mismas condiciones de P y T que las corrientes de entrada.

Modo = 0 (use inlet T and P; calculate V/F and heat)

Parámetro 1 = no necesita

Parámetro 2 = no necesita

Destilación flash a fracción vaporizada del alimento y P fijas. Haciendo la fracción vapor del alimento igual a cero, $V/F = 0$, se obtiene la temperatura de burbuja de la mezcla, y haciendo $V/F = 1$ se obtiene la temperatura de rocío.

Modo = 1 (specify V/F and P; calculate T and heat)

Parámetro 1 = fracción vaporizada del alimento

Parámetro 2 = P

Destilación flash a T y P fijas. Si no se introducen datos para los parámetros, se utilizan los de las corrientes de entrada.

Modo = 2 (specify T and P; calculate V/F and heat)

Parámetro 1 = T

Parámetro 2 = P

Destilación flash a entalpía y T fijas. Si no se introduce T como parámetro 1, se utiliza la de la corriente de entrada. Si se introduce una pérdida de calor = 0, se hace un cálculo de flash adiabático.

Modo = 3 (specify T and H; calculate V/F and P)

Parámetro 1 = T

Parámetro 2 = calor intercambiado

Destilación flash a fracción de vapor del alimento y T fijas. Haciendo la fracción vapor del alimento igual a cero, $V/F = 0$, se obtiene la presión de burbuja de la mezcla, y haciendo $V/F = 1$ se obtiene la presión de rocío.

Modo = 4 (specify V/F and T; calculate P and heat)

Parámetro 1 = fracción vaporizada del alimento

Parámetro 2 = T

Destilación flash a entalpía y P fijas. Si no se introduce P como parámetro 1, se utiliza la de la corriente de entrada. Si se introduce una pérdida de calor = 0, se hace un cálculo de flash adiabático.

Modo = 5 (specify P and H; calculate V/F and T)

Parámetro 1 = P

Parámetro 2 = calor intercambiado

Destilación flash isoentrópica a P fija. Si no se introduce P como parámetro 1, se utiliza la de la corriente de entrada.

Modo = 6 (specify P; isentropic flash)

Parámetro 1 = P

Parámetro 2 = no necesita

Destilación flash isoentrópica a T fija Si no se introduce T como parámetro 1, se utiliza la de la corriente de entrada.

Modo = 7 (specify T; isentropic flash)

Parámetro 1 = T

Parámetro 2 = no necesita

Cálculo de la temperatura de rocío del agua en una mezcla de agua e hidrocarburos a P fija. Si no se introduce P como parámetro 1, se utiliza la de la corriente de entrada.

Modo = 8 (specify P; water dew pt T (H₂O/HC))

Parámetro 1 = P

Parámetro 2 = no necesita

Cálculo de la temperatura de rocío del agua en una mezcla de agua e hidrocarburos a T fija. Si no se introduce T como parámetro 1, se utiliza la de la corriente de entrada.

Modo = 9 (specify P; water dew pt P (H₂O/HC))

Parámetro 1 = T

Parámetro 2 = no necesita

1.2. Número de corrientes

La operación puede realizarse con hasta tres corrientes de salida. Si se especifica sólo **una**, ésta siempre tendrá el mismo caudal y composición que la alimentación, pero sus condiciones térmicas (T, P, fracción vapor, etc.), serán diferentes, dependiendo del tipo de operación.

Si se especifican **dos** corrientes de salida, la primera es siempre un vapor y la segunda siempre un líquido. Si el resultado de la operación es una única corriente, de vapor, la segunda corriente estará “vacía”, con caudal cero, y con la misma T y P que el vapor de salida. Si la operación produce sólo una corriente, líquida, la primera corriente de salida, estará “vacía”, y la segunda tendrá el mismo caudal y composición que el alimento. Si en el modelo termodinámico se seleccionó la opción de inmiscibilidad con agua, el agua que se va eliminando se incluye en la segunda corriente de salida, a menos que se seleccionen tres corrientes de salida.

Si se seleccionan **tres** corrientes de salida, y se selecciona la opción de inmiscibilidad agua-hidrocarburos, la tercera corriente contiene el agua eliminada. En este caso, la primera corriente es el vapor, la segunda la fase hidrocarbonada con algo de agua disuelta, tal y como se predice en el modelo de solubilidad, y la tercera es el agua pura separada.

Si se seleccionan **tres** corrientes de salida, y la opción VLLS (en el menú de ThermoPhysical/K-values), se realizará un cálculo de flash riguroso con tres fases. La primera corriente de salida es el vapor, la segunda la fase líquida ligera, y la tercera la fase líquida pesada.

1.3. ejemplos de aplicación

1.3.1. Cálculo de P ó T en el punto de rocío o de burbuja

El diagrama de flujo constará de la unidad flash, un alimento y dos productos (vapor y líquido).

Las condiciones de operación se especifican en el menú de Specifications/Select Unitops:

* Para indicar que los cálculos corresponden al punto de rocío, se debe especificar, en el parámetro correspondiente, que la fracción vaporizada del alimento es el 100% ($V/F = 1$).

* Para indicar que los cálculos corresponden al punto de burbuja, se debe especificar, en el parámetro correspondiente, que la fracción vaporizada del alimento es el 0% ($V/F = 0$).

* Según lo que se desee calcular (P o T), se introducirá la otra variable como parámetro, siempre con el valor correspondiente en el equilibrio.

(Si sólo se desea calcular P o T, puede hacerse directamente desde el cuadro de diálogo de la corriente de alimentación).

1.3.2. Destilación flash

El problema se resuelve utilizando un diagrama de flujo conteniendo un alimento y dos productos y seleccionando las condiciones adecuadas tanto para el alimento como para el equipo.

1.3.3. Cálculo del equilibrio líquido-vapor: dada la composición de una fase, calcular la de la otra fase en equilibrio

Si se desea calcular la composición del vapor en equilibrio con un líquido, y se introduce como parámetro del equipo que $V/F = 0$, indicando que se trata de un cálculo de punto de burbuja, evidentemente, el resultado será una corriente de vapor que aparecerá como "vacía". Para obtener la composición del vapor, se puede introducir un valor de V/F lo suficientemente pequeño como para que se pueda considerar que se obtiene un líquido saturado, pero no tan pequeño como para que el programa lo considere como 0. De esta forma, el problema se resuelve como un flash, donde el alimento es la mezcla cuya composición es la del punto cuyo equilibrio se quiere calcular en cualquier condición térmica y seleccionando una de estas dos opciones:

a) modo de operación 4
parámetro 1 = 0.000001 (para calcular el vapor en equilibrio) ó 0.999999 (para calcular el líquido en equilibrio)

parámetro 2 = temperatura de equilibrio

b) modo de operación 1

parámetro 1 = 0.000001 (para calcular el vapor en equilibrio) ó 0.999999 (para calcular el líquido en equilibrio)

parámetro 2 = presión de equilibrio

Dependiendo del valor especificado para V/F, uno de los dos productos tendrá un caudal y composición prácticamente idénticos a los del alimento (el vapor, si se trata de un cálculo de punto de rocío, o el líquido, si se trata de un cálculo de punto de burbuja. La condición térmica del alimento afecta sólo al calor intercambiado, pero no a la T, P o composiciones de las fases en el equilibrio.

Otra opción para realizar cálculos de equilibrio es mediante el comando Plot, seleccionando TPXY, y delimitando y ampliando la escala tanto como se desee.

Conforme V/F se aproxime más a 0 (ó a 1), los resultados para el vapor (o el líquido) en equilibrio irían mejorando, pero si el caudal de la corriente a calcular es demasiado pequeño, se corre el riesgo de que el programa la considere como cero y no la calcule, o no la calcule bien.

1.3.4. Cálculo del equilibrio líquido-líquido

El cálculo del equilibrio líquido-líquido se realiza con la unidad flash, igual que el cálculo del equilibrio líquido-vapor, pero teniendo en cuenta que el diagrama de flujo debe contener tres corrientes de productos: una de vapor (cuyo caudal será lógicamente cero, es decir, es una corriente "vacía"), una correspondiente a la fase ligera, y otra correspondiente a la fase pesada.

La alimentación puede consistir:

a) en dos corrientes consistentes en dos líquidos miscibles o inmiscibles que al entrar en contacto produzcan las dos fases en equilibrio.

b) en una única corriente, que si cae dentro de la zona de inmiscibilidad, se desdoblará en dos fases en equilibrio.

Dentro del menú desplegado por Thermophysical/K-values, hay que seleccionar la opción vapor/líquido/líquido/sólido. No hay tener especial precaución en el orden de introducción de las corrientes de alimentación o de producto.

El modo de operación adecuado es mode = 0, a menos que se desee calcular el equilibrio líquido-líquido-vapor, que se seleccionará el modo de operación más adecuado al proceso que se desee simular.

Es obvio que para realizar un cálculo de equilibrio líquido-líquido o de equilibrio líquido-líquido vapor es **indispensable realizar una selección adecuada** tanto del modelo termodinámico que se utilice para el cálculo del equilibrio entre fases, como del conjunto de BIP utilizado.

1.4. Cálculo de los costes de instalación

CHEMCAD calcula los costes de instalación de los tanques y recipientes para el flash. Esta estimación del coste sólo está disponible para el módulo flash y no para el LLVF flash.

1.4.1. Definiciones de los parámetros

Bandera de estimación del coste:

0 = Off

1 = On

Tipo:

Recipiente horizontal

Recipiente vertical

Tanques de almacenamiento

Diámetro

Longitud

Espesor del recipiente

Espesor de la cabeza

Brida recta (Straight Flange)

Tipo de cabeza:

Elipsoidal

Hemiesférica

Abombada

Plana

Material del recipiente:

Carbon steel

Stainless steel 304

Stainless steel 316

Carpenter 20CB-3

Nickel 200

Monel 400

Inconel 600
Incoloy 825
Titanium

Densidad del metal: el valor por defecto es 501 lb/ft³ (SS 304).

Material del tanque de almacenamiento:

Carbon steel
Stainless steel 316
Stainless steel 304
Stainless steel 347
Nickel
Monel
Inconel
Zirconium
Titanium
Brick and rubber or brick and polyester-lined steel
Rubber or lead-lined steel
Polyester, fiberglass-reinforced
Aluminum
Copper
Concrete

Peso total: Puede introducirse, o dejar que el programa lo calcule a partir de los parámetros anteriores.

Volumen total: Puede introducirse, o dejar que el programa lo calcule a partir de los parámetros anteriores.

Factor de instalación: Es el factor para transformar el precio de compra al precio instalado. Si se omite, CHEMCAD considera un valor por defecto de 1.7.

Precio de compra

Precio instalado: es el precio de compra multiplicado por el factor de instalación.

2. MÓDULO PARA LA SIMULACIÓN DE UNA OPERACIÓN FLASH DE TRES FASES (LLVF)

Simula el cálculo riguroso del equilibrio V-L-L. **Requiere 3 corrientes de salida**, independientemente de que se formen o no las tres fases: la primera salida es la de la fase vapor, la segunda de líquido ligero, y la tercera de líquido pesado.

No debe confundirse con el módulo Flash con tres corrientes de salida: el módulo LLVF es un caso particular del módulo flash: no está disponible la opción de separación de agua de una mezcla de hidrocarburos mediante el modelo de solubilidad en agua, que existe en aquel, y **sólo admite un alimento**.

Las operaciones flash disponibles:

Flash isotérmico
Flash a fracción vaporizada fija
Flash adiabático

y los modelos termodinámicos recomendados son: UNIQUAC, NRTL y MARGULES.

Una vez ejecutado el cálculo, la misma pantalla de introducción de parámetros muestra el valor obtenido para Q.

3. EXTRACTOR LÍQUIDO-LÍQUIDO

La unidad **EXTRACTOR** calcula los balances de materia y de energía de un extractor líquido-líquido. Permite hasta 5 alimentos y 6 extracciones de productos (aparte del extracto y del refinado), y hasta 300 etapas de contacto. Utiliza el método de Newton-Raphson como método de convergencia simultánea.

Se considera que la “cabeza” de la columna es el extremo que produce el producto más ligero (de menor punto de ebullición), y la “base”, el que produce el más pesado (de mayor punto de ebullición). Las corrientes de alimentación deben introducirse desde la cabeza hasta la base (es decir, desde la más pesada hasta la más ligera), y los productos, en el siguiente orden: producto de la cabeza, producto de la base, productos laterales desde el más ligero al más pesado.

En esta unidad, en cada etapa hay dos fases líquidas, y no se considera la existencia de una fase vapor. La fase ligera, de menor punto de ebullición, asciende por la columna y la fase pesada desciende por ésta. A menos que se especifique lo contrario se supone que las fases están en equilibrio. Se puede especificar la eficacia de etapa.

Los parámetros a introducir para especificar el equipo son:

- Número de etapas: entre 2 y 300. Las etapas se numeran desde la cabeza hasta la base.
- Presión en la cabeza de la columna: Si no se introduce se considera igual a la del alimento
- Pérdida de presión en la columna: es un número positivo. Corresponde a la diferencia de presión entre la base y la cabeza de la columna. La

presión en cada etapa se calcula por interpolación lineal entre la cabeza y la base de la columna. Si no se introduce ningún valor se considera que es 0.

- Localización de las corrientes de alimentación: desde la cabeza hasta la base. La localización de los aportes o eliminaciones de calor deben introducirse aquí, ya que se tratan como corrientes con entalpía y sin caudal de componentes.
- Localización de las extracciones de producto: desde la cabeza hasta la base.
- Especificaciones de los productos laterales: Se puede especificar un caudal (molar o másico) de fase ligera o de fase pesada o la fracción de la corriente (ligera o pesada) que se extrae como producto.
- Eficiencia de la etapa 1: entre 0 y 1. El valor por defecto es 1.
- Eficiencia de la última etapa: entre 0 y 1. El valor por defecto es 1. La eficiencia de cada etapa se calcula por interpolación lineal entre las especificadas para los extremos de la columna.
- Número de iteraciones: por defecto, 40.
- Bandera inicial: la opción por defecto es 0, que no requiere información adicional. En otros casos, se puede comenzar el cálculo a partir de un perfil estimado, que puede ser el obtenido en un cálculo previo que haya convergido, realizado con el mismo equipo.
- Tolerancia. Es el error relativo de la simulación. El valor por defecto es 0.001.
- DK/DY: es la pendiente de la representación de los valores de K frente a la composición de la fase ligera. La opción por defecto no usa este valor para la búsqueda de una solución convergente. Si el valor asignado a este parámetro es 1, DK/DY se utiliza para la búsqueda de la solución final: cada iteración requiere más tiempo de cálculo, pero la solución se alcanza con menos iteraciones. Ambos métodos conducen al mismo resultado cuando convergen, y la elección del más eficiente dependerá de cada problema específico.
- Los valores de K se deben calcular por uno de los siguientes modelos: UNIFAC, UNIQUAC, NRTL, Margules, T.K.Wilson, Hiranama.

4. COLUMNAS DE DESTILACIÓN

CHEMCAD permite la posibilidad de seleccionar un tipo método aproximado o dos de métodos rigurosos para resolver la simulación o el diseño de columnas de destilación:

SHOR utiliza el método aproximado de Fenske-Underwood-Gilliland.

TOWER utiliza un método riguroso en columnas estándar.

TOWER PLUS utiliza un método riguroso en columnas complejas.

SCDS se utiliza para superfraccionadores y columnas con reacción química.

Algunos casos particulares que requieren la elección de un módulo determinado para el cálculo riguroso:

<u>Condición impuesta</u>	<u>Modelo necesario</u>
Eficiencia del piso < 100%	SCDS
Absorbedores, recirculaciones	TOWER PLUS
Especificación de las condiciones del piso	TOWER PLUS
Destilación reactiva	SCDS
Presencia de electrolitos	SCDS
Electrolitos	SCDS
Sistemas altamente no ideales	SCDS
Modelo de transferencia de materia	TOWER, TOWER PLUS

4.1. Destilación. Líneas generales

4.1.1. Grados de libertad

Todos los modelos rigurosos de destilación que contiene CHEMCAD requieren la especificación del número de pisos, perfil de presión y todas las corrientes de entrada. Estas especificaciones son suficientes para definir por completo las corrientes de salida en un absorbedor o desorbedor sencillo sin intercambio adicional de calor y sin extracción de corrientes laterales. Es decir, hay tantas ecuaciones independientes como incógnitas y por tanto no hay más grados de libertad. Cada grado de libertad adicional que se introduzca requiere la especificación de una variable independiente más, como puede ser la razón de reflujo, el calor aportado o eliminado o el caudal o composición de un componente.

Cada caldera, condensador o intercambiador lateral añade un grado de libertad a la columna. Cada corriente de producto lateral añade también un grado de libertad. Sin embargo, una recirculación adicional añade dos grados de libertad ya que los pisos donde se realiza la extracción y el retorno de la corriente son diferentes y se incorpora un intercambiador que modifica la condición térmica de la corriente de retorno.

4.1.2. Especificaciones del problema

Como norma general, se suelen preferir aquellas especificaciones que presentan un intervalo de variación posible más amplio (como por ejemplo la razón de reflujo), ya que son las que plantean menos problemas de convergencia. Sin embargo, en determinadas ocasiones esto no es obvio, y el intervalo de posible variación varía dependiendo de la configuración de la columna o de la presión del sistema.

Cuando los objetivos de la simulación requieren especificaciones con un intervalo estrecho de variación se puede recurrir a especificar la razón de reflujo e ir observando cómo influye en la especificación deseada. Si ésta no puede alcanzarse al ir variando la razón de reflujo desde valores muy bajos a

valores muy altos, será necesario reconfigurar la columna, cambiar la presión de operación o analizar la posibilidad de errores en los modelos termodinámicos seleccionados.

4.1.3. Inicialización de columnas difíciles

Las columnas difíciles suelen inicializarse arbitrariamente seleccionando variables con un intervalo de variación amplio que permitan que el problema converja fácilmente y proporcionen un punto de partida viable para ir aproximándose a la solución deseada. A partir de una solución “convergida” (haciendo “initial flag” = 1) es más fácil conseguir la convergencia a las especificaciones requeridas. Por ejemplo, una columna estándar con caldera y condensador suele converger si se especifican la razón de reflujo, R/D, y el caudal de residuo.

4.1.4. Estimaciones

La especificación de estimaciones adecuadas suele proporcionar un punto de partida mejor que el que está programado en el algoritmo de resolución del problema. Sin embargo, estas estimaciones deben ser razonables y, en general, suele ser mejor no dar estimaciones iniciales que dar malas estimaciones. Las siguientes indicaciones pueden ayudar a establecer las estimaciones iniciales:

- Las temperaturas pueden estimarse a partir de las temperaturas de burbuja de los productos esperados como destilado y residuo.
- Los caudales pueden estimarse a partir de los caudales de producto esperados.
- El caudal de reflujo puede estimarse a partir de la razón de reflujo esperada y de los caudales de producto.

4.1.5. Definición de un piso de la columna

En CHEMCAD las columnas se numeran de cabeza a cola. El piso de cabeza es el piso 1 y el último piso es el N. Si hay condensador o caldera, éstos son el piso 1 y N, respectivamente.

El caudal de vapor o de líquido de un piso se definen como los caudales molares respectivos que llegan al piso adyacente, de forma que el caudal que abandona el plato viene dado por la suma de dicho valor más la eventual extracción lateral de producto.

El reflujo procedente del condensador siempre se considera que es la corriente L1.

4.2. Programa de destilación SHORTCUT

El programa de destilación shortcut (shor) utiliza el método de Fenske-Underwood-Gilliland para simular una columna de destilación sencilla con un alimento (sólo) y dos productos, destilado (1ª corriente de salida) y residuo (2ª corriente de salida). Permite tanto la simulación (*rating*) como el diseño (*design*) de la columna. La localización del piso de alimentación se calcula por las ecuaciones de Fenske o de Kirkbride. También permite un estudio del caso en que se varíe la razón de reflujo dentro de un rango especificado, y examina el efecto que esto tiene sobre el funcionamiento de la columna.

Los parámetros a introducir son:

modo: 1 para simulación por el método de Fenske-Underwood-Gilliland.
2 para diseño por el método de Fenske-Underwood-Gilliland, con localización del piso de alimentación por el método de Fenske.
3 para diseño por el método de Fenske-Underwood-Gilliland, con localización del piso de alimentación por la ecuación de Kirkbride.

Tipo de condensador: 0 para condensador total (el destilado es un líquido)
1 para condensador parcial (el destilado es vapor)

Presión en la columna: (opcional) es el valor de la presión en el primer piso de la columna (en el condensador). Si no se introduce, se considera que la columna trabaja a la presión de la corriente de alimentación.

Pérdida de presión: el valor introducido más el correspondiente a la presión de la columna (parámetro anterior) proporciona la presión en el último piso (caldera).

Componente clave ligero (LK)

Recuperación del LK en la cabeza de la columna: (en el destilado). Se necesita un valor entre 0.5 y 1. En simulación el valor introducido se toma como punto de partida para las iteraciones, y si no se introduce, el valor por defecto es 0.95. Es imprescindible en problemas de diseño. Se define la recuperación como la fracción de la cantidad total de componente alimentado que se obtiene como producto en una determinada corriente, en este caso, en el destilado.

Componente clave pesado (HK)

Recuperación del HK en la cabeza de la columna: se requiere un valor entre 0 y 0.5. Se define la recuperación como la fracción de la cantidad total de componente alimentado que se obtiene como producto en una determinada corriente, en este caso, en el destilado.

Número de pisos: es un parámetro de entrada en simulación y es calculado en problemas de diseño.

Relación de reflujo: es necesaria en problemas de simulación.

$R/R_{\text{mínima}}$: es el cociente entre la razón de reflujo y la razón de reflujo mínima. Es un parámetro necesario para diseño. Si no se introduce se utiliza la razón de reflujo descrita arriba, por tanto, en diseño, si $R/R_{\text{mínima}}$ es cero, debe especificarse un valor para la razón de reflujo.

Número de puntos para el estudio del caso: Si se desea hacer un estudio de la influencia de la razón de reflujo sobre el funcionamiento de la columna, debe introducirse el número de puntos en que debe dividirse el intervalo para R/R_{min} .

Extremos para el intervalo de R/R_{min} . Estos dos últimos parámetros sólo se introducen en problemas de diseño, si se desea el estudio del caso.

El módulo permite sólo un alimento y dos productos: la primera corriente de salida es el destilado y la segunda el residuo.

Los métodos utilizados son:

Ecuación de Fenske para el número mínimo de pisos
Ecuación de Underwood para el reflujo mínimo
Correlación de Gilliland
Correlación de Fenske para localizar el piso de alimentación

El programa calcula el número mínimo de pisos, la posición del piso de alimentación, el calor eliminado en el condensador y el calor aportado en la caldera, el reflujo mínimo y la razón de reflujo.

4.3. Programa de destilación TOWER

Se trata de un programa que resuelve de forma rigurosa el problema de simulación de una columna de destilación. Las corrientes laterales, así como absorbedores, hervidores etc., también se calculan de forma rigurosa. Admite hasta cinco alimentos y cuatro productos laterales. No hay límite en el número de unidades de este tipo en un diagrama de flujo.

Se trata de una unidad muy flexible ya que admite una gran variedad de especificaciones. La convergencia es más rápida que con el módulo SCDS y se recomienda su uso a menos que se dé alguna de las siguientes situaciones:

- * La eficiencia del piso no es 1
- * Se trata de un sistema con aminas y la convergencia es lenta
- * Se producen problemas de convergencia

Cuando el número de corrientes sea mayor del admitido por esta unidad, o se incluyan bombas o strippers laterales, debe usarse la unidad TOWER PLUS.

4.3.1. Parámetros

Los parámetros a introducir son:

Tipo de condensador: 0 condensador total o no condensador
1 condensador parcial
2 condensador total con decantación de agua
3 condensador parcial con decantación de agua

Las opciones 2 y 3 corresponden a casos en que se tengan mezclas de agua e hidrocarburos y se desea decantar el agua. Se debe seleccionar la opción de “water-inmiscible” en el cuadro de diálogo de K-values. El agua decantada en el condensador no requiere la introducción de una corriente adicional en el diagrama de flujo.

Temperatura de subenfriamiento: opcional, para condensador total. Es la temperatura (fija) de operación del condensador. Si se introduce un valor superior a la temperatura de burbuja del destilado, el programa no convergerá. Si no se especifica ningún valor, se considera que el condensador produce un destilado a su temperatura de burbuja.

Presión en la cabeza: presión en el condensador. Si no se introduce se considera la presión del primer alimento.

Pérdida de presión en el condensador: este número (positivo) más la presión en el condensador, debe ser igual a la presión en el primer piso de la columna.

Pérdida de presión en la columna: número positivo que sumado a la presión en el primer piso (el siguiente al condensador), debe dar la presión en la caldera.

Número de pisos: incluye el condensador, que es el piso 1, y la caldera que es el piso N. El valor mínimo es 2 y no hay límite superior.

Localización de los alimentos: desde la cabeza hasta la base de la columna. Los aportes o eliminaciones de calor se introducen como corrientes con entalpía, pero con caudal cero, y sus localizaciones se introducen como si fueran alimentos. Se admiten alimentos que se introducen en un condensador o en una caldera. Si se introducen múltiples alimentos en un mismo piso, debe utilizarse el módulo MIXR.

modo del condensador: se elige dependiendo de los parámetros de entrada que se desee introducir:

- * Condensador sin especificaciones (hay condensador, pero las especificaciones se introducen para un piso en lugar de para el condensador)
- * no hay condensador
- * razón de reflujo
- * calor eliminado
- * T del destilado
- * caudal molar de destilado
- * caudal molar de un componente
- * fracción molar de un componente
- * grado de recuperación de un componente en el destilado
- * fracción de alimentos en el destilado
- * relación entre el caudal molar de dos componentes en el destilado
- * caudal volumétrico de destilado
- * caudal másico de destilado
- * fracción másica de un componente en el destilado
- * masa molar del destilado
- * densidad (API) del destilado
- * fracción volumétrica de un componente en el destilado

Especificaciones del condensador: Se introducen según sea el modo elegido (parámetro anterior).

Identificación del componente/s especificado/s en el destilado cuya composición o caudal se introduce (sólo si se ha seleccionado un modo que lo requiera)

modo de la caldera: se elige dependiendo de los parámetros de entrada que se desee introducir:

- * Caldera sin especificaciones (hay caldera, pero las especificaciones se introducen para un piso en lugar de para la caldera)
- * no hay caldera
- * cociente V/Residuo
- * calor aportado
- * T del residuo
- * caudal molar de residuo
- * caudal molar de un componente
- * fracción molar de un componente
- * grado de recuperación de un componente en el residuo
- * fracción de alimentos en el residuo
- * relación entre el caudal molar de dos componentes en el residuo
- * caudal volumétrico de residuo
- * caudal másico de residuo
- * fracción másica de un componente en el residuo
- * masa molar del residuo
- * densidad (API) del residuo
- * fracción volumétrica de un componente en el residuo

Especificaciones de la caldera: Se introducen según sea el modo elegido (parámetro anterior).

Identificación del componente/s especificado/s en la caldera cuya composición o caudal se introduce (sólo si se ha seleccionado un modo que lo requiera)

Número del piso para el que se introducen especificaciones (opcional). No debe introducirse si se han dado especificaciones para el condensador y para la caldera, ya que se violarían los grados de libertad en las ecuaciones del sistema. Solo se necesita si el modo de alguno de ellos era -1 (no hay especificaciones).

¡SE CONSIDERA QUE EL CONDENSADOR ES EL PISO 1 Y LA CALDERA EL PISO N!

modo del piso: se elige dependiendo de los parámetros de entrada que se desee introducir:

- * piso sin especificaciones
- * temperatura
- * caudal molar de líquido
- * caudal molar de un componente en el líquido
- * fracción molar de un componente en el líquido
- * caudal molar de vapor
- * caudal molar de un componente en el vapor
- * fracción molar de un componente en el vapor
- * caudal volumétrico de líquido
- * caudal másico de líquido
- * fracción másica de un componente en el líquido
- * masa molar del líquido
- * densidad (API) del líquido
- * razón vapor /líquido
- * presión de vapor verdadera del vapor a 100°F
- * presión de vapor verdadera del líquido a 100°F
- * punto flash del vapor
- * ...

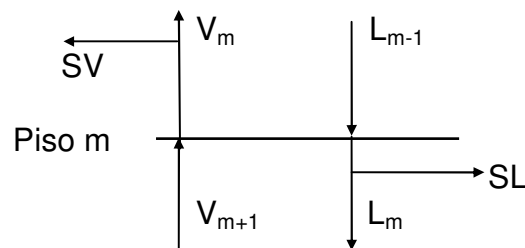
Especificaciones del piso: Se introducen según sea al modo elegido (parámetro anterior).

Identificación del componente especificado en el piso cuya composición o caudal se introduce (sólo si se ha seleccionado un modo que lo requiera)

Localización de los productos laterales: Desde la cabeza hasta la base de la columna.

Modo para los productos laterales: valores positivos para extracciones de vapor y negativos para extracciones de líquido. Se admiten diversas especificaciones dependiendo del dato de entrada para dicha corriente:

- * Razón de corriente lateral extraída: SV/V_m ó SL/L_m (ver figura adjunta)
- * Caudal (molar)
- * Caudal molar de un componente
- * Fracción molar de un componente
- * Caudal volumétrico (BPSD o $m^3/día$)
- * Caudal másico
- * Fracción másica de un componente



Especificaciones de las corrientes laterales: Se introducen según sea al modo elegido (parámetro anterior).

Especificación del componente de la corriente lateral cuya composición o caudal se introduce (sólo si se ha seleccionado un modo que lo requiera)

La siguiente página de parámetros contiene las especificaciones para los parámetros de convergencia:

Caudal de destilado estimado

Caudal de reflujo estimado

Temperatura estimada en el condensador (cabeza)

Temperatura estimada en la caldera (base)

Estos parámetros deben introducirse procurando que sean próximos a los reales. En ocasiones podrán proceder de un cálculo realizado con la unidad SHOR. Si no se dan valores, el programa los pide.

Temperatura estimada en el piso 2. Se debe introducir si la diferencia de temperatura entre el condensador y la caldera es muy grande.

Caudal estimado para productos laterales

Máximo número de iteraciones

Relación de amortiguamiento para el modelo de K. El valor por defecto es 1, que es el correspondiente para sistemas ideales. Para los no ideales, se introducirá un valor inferior a la unidad. Cuando el problema converge sin dificultad, pero el valor de K depende mucho de la composición, debe reducirse

en el rango de 0.3 a 0.7. Ésto suele ocurrir cuando se selecciona uno de los siguientes modelos: Amine, Sour, NRTL, Wilson, Margules o Van Laar. Para los modelos Amine y Sour se recomienda un valor entre 0.3 y 0.5. Cuando se reduce, se requieren más iteraciones, y puede ser necesario aumentar el número máximo de iteraciones.

Tolerancia

Tipo de inicialización. Está relacionado con el perfil inicial para el cálculo.

- 0 Opción por defecto. Requiere la mínima información de entrada. Comienza con su propia estimación inicial. En la mayoría de los casos no suele plantear problemas de convergencia.
- 1 Carga el perfil completo de la simulación previa. Suele ser el más efectivo, pero hay que estar seguros de que hubo una simulación previa. El número de pisos y de componentes del caso anterior debe de ser el mismo. Esta opción es la que se usa internamente si la columna forma parte de un bucle.
- 2 Estima el perfil de T
- 3 Estima los perfiles de T y caudal de vapor
- 4 Estima los perfiles de T y caudales de vapor y de líquido.
- 5 Estima los perfiles de T, L, V y P.

No hace falta dar estimaciones para cada piso del menú, sólo de aquellos que se desee, y el programa realiza una interpolación lineal para encontrar la estimación inicial del resto. Sí hay que dar las estimaciones del primer y último pisos.

Modelo de Quenching. Está relacionado con la cantidad de agua en los pisos

Fracción de vapor extraída si hay termosifón

Los valores que se calculan son:

Calor aportado en la caldera

Calor eliminado en el condensador

Razón de reflujo

Caudal (molar y másico) de reflujo

4.3.2. Topología

En cuanto a la topología, la columna se numera de la cabeza a la base. Los alimentos se introducen como números positivos y las extracciones, como números negativos. Las corrientes se numeran desde arriba hacia abajo. Entalpías positivas representan aportes de calor, y negativas, eliminaciones. Los calentadores o enfriadores se introducen como corrientes de entalpía, con caudal cero. La primera corriente de salida siempre es el destilado, y la última el residuo: si hay más de dos corrientes de salida, las otras se tratan como

corrientes laterales (y se introducen desde arriba hacia abajo). Si la columna dispone de condensador parcial del que salen un líquido y un vapor, el vapor se considera como el destilado, y el líquido es la primera corriente lateral.

Si se decanta agua de un condensador (se usa la opción agua/hidrocarburos inmiscibles), no ha de introducirse como un producto en la topología.

4.3.3. Método

Utiliza un **algoritmo inside-out**. Cuando se está ejecutando el programa, se puede visualizar en pantalla la siguiente información:

1. Perfil inicial.
2. Coeficientes para el modelo de K (modelo kb)
3. Nuevo perfil generado por el programa a partir del moledo kb y valores para alguna de las especificaciones.
4. Los coeficientes del modelo de entalpía
5. Cálculo de la matriz Jacobiana.
6. Inversión de la matriz Jacobiana.
7. Inicio del bucle inside de cálculo.
8. Fin del bucle de cálculo y resumen de errores .
9. Bucle exterior
10. Repetición desde el paso 7 hasta alcanzar convergencia o superar el número de máximo de iteraciones.

4.3.4. Observaciones

El módulo TOWER también permite simular columnas de **destilación con tres fases** en alguno de sus pisos (seleccionar la opción LLV en el menú para el cálculo de K y llevar cuidado en la selección del modelo termodinámico, que debe ser capaz de reconocer la existencia de dos fases líquidas, y de los BIP's. Sin embargo, dado que en estos casos se trata de mezclas de naturaleza altamente no ideal, se suele recomendar usar el módulo SCDS.

Cuando se realiza una simulación con tres fases:

- Las dos fases líquidas aparecen cuando se visualizan o imprimen los resultados.
- El reflujo contiene ambas fases líquidas si éstas están presentes en el condensador.
- No es necesario indicar si se forman o no dos fases líquidas: CHEMCAD es quien lo reconoce y lo indica al usuario.
- Si se desea decantar una fase en el condensador, se debe elegir el módulo SCDS o separar el condensador de la columna.

Cuando la columna opera a **presiones elevadas**, pueden producirse problemas de convergencia: en este caso se debe resolver el problema a

presiones más bajas, y utilizar el resultado como perfil inicial para el recálculo de la columna a la P deseada.

Si los componentes a separar tienen **puntos de ebullición próximos**, la diferencia de temperatura entre los extremos de la columna será pequeña, y la estimación inicial de las temperaturas es importante. Si el perfil inicial no es adecuado, se debe suponer una estimación de T más baja si la columna se seca en la base, y más alta si se seca en la cabeza.

Para **sistemas altamente no ideales**, se debe reducir el factor de amortiguamiento, y si aún así hay problemas de convergencia, seleccionar otra opción para el cálculo de K.

Si se presentan problemas de convergencia se deben tener en cuenta los siguientes aspectos:

- Comprobar que no hay errores de sintaxis.
- Comprobar que no hay especificaciones no razonables (aportes o eliminaciones de calor en la caldera, condensador o corrientes laterales que hagan salir todo el producto por arriba o por abajo; T no accesible a la P y composición especificadas, separaciones inalcanzables a las condiciones de operación especificadas, especificaciones de caudales incompatibles con el caudal de alimentación).
- Comprobar los valores estimados. A menudo es peor una mala estimación que la no estimación de un parámetro
- Repasar la información de la pantalla:
 - ✓ Si los caudales son muy pequeños o la torre se seca en algunos pisos, aumentar la razón de reflujo.
 - ✓ Comprobar el coeficiente B del modelo kb en el paso 2. Generalmente B aumenta desde la cabeza hacia la base. Si el mensaje es “problemas en el modelo kb”, se trata de un problema difícil: P elevada o valores de K no ideales. El programa trata de corregir el error, pero puede haber entonces problemas de convergencia.
 - ✓ Si el paso 3 muestra un error mayor de 0.5, se comenzó con un perfil malo: comprobar las especificaciones y las estimaciones iniciales.
 - ✓ Si en el paso 6 aparece un mensaje “Pivot error” y el programa se detiene, probablemente haya un problema en las especificaciones.
 - ✓ En el paso 7, el error inicial suele ser menor que 1. Un error mayor indica que el perfil resultante del paso 3 es malo. Si el error disminuye en cada iteración, se deja que continúe, si aumenta, revisar el perfil de la torre y buscar el origen posible de los errores: cambiar las especificaciones relacionadas con los caudales (caudales molares o másicos o razón de reflujo). Cuando se alcance la convergencia, cambiar a las especificaciones deseadas, usar la opción 1 para la bandera inicial, y reejecutar el cálculo.

- ✓ Revisar el resumen de errores del paso 8. Normalmente, el error de la volatilidad debe ser menor de 0.5 y el de la entalpía menor de 0.2. Si el error de la volatilidad es mayor que 0.5, puede ser debido a:
 - a. Un gran error en la estimación inicial de T. El programa corrige este error.
 - b. Valores de k muy dependientes de la composición. El programa avanza, pero mientras que el bucle interior converge, el exterior diverge: se debe usar un valor menor para el coeficiente de amortiguamiento.

Si tras seguir todos estos pasos, sigue habiendo fallos de convergencia, se debe intentar utilizar las opciones 2, 3 o 4 para el perfil inicial. El programa linealiza el perfil entre los pisos que se especifiquen, por tanto se deben realizar estimaciones en aquellos pisos que muestren características más desviadas de la normalidad.

Cuando las desviaciones de la idealidad sean dominantes, debe usarse el módulo SCDS, aunque es más lento.

4.4. Programa TOWER PLUS

Es similar al programa TOWER, pero permite resolver columnas más complejas, incluyendo desorbedores, bombas de recirculación, intercambiadores laterales, etc. El número máximo de corrientes, de entrada y de salida es de 14, no afectando esta restricción a las bombas de recirculación o desorbedores, que sólo afectan a corrientes internas. La posible corriente de agua decantada del condensador o de determinados pisos tampoco se considera como corriente de salida. Los intercambiadores laterales no pueden introducirse como alimentos con entalpía pero sin caudal. En un diagrama de flujo se puede incluir hasta 50 unidades TOWER PLUS.

Las etapas se numeran desde arriba hacia abajo, y la numeración de los pisos de los desorbedores laterales es consecutiva a la de los pisos de la columna principal. Las alimentaciones se introducen como números positivos, y las corrientes de salida como números negativos. Los datos de las alimentaciones se introducen desde arriba hacia abajo, y el orden de introducción de las corrientes de salida es: producto de cabeza (destilado), producto de cola (residuo), líquido de la cabeza (si existe condensador parcial que produce vapor y líquido), productos laterales de la columna principal desde arriba hacia abajo, y productos de la base de los desorbedores laterales, también en orden descendente.

Las especificaciones para TPLS incluyen:

- configuración de la torre
- columna principal
- condensador

- caldera
- desorbedores laterales
- bombas de recirculación
- intercambiadores laterales
- productos laterales
- especificaciones de los pisos
- parámetros de convergencia
- estimaciones
- parámetros para el cálculo del coste

Cada una de estas categorías se selecciona a partir del submenú de TOWER PLUS y a su vez despliega su correspondiente submenú.

4.4.1. Configuración

- Número de desorbedores laterales
- Número de bombas de recirculación
- Número de intercambiadores
- Número de productos laterales (procedentes de la columna principal)

Los productos procedentes de los desorbedores no se incluyen aquí, CHEMCAD reconoce que si existe un desorbedor, tendrá su correspondiente producto.

4.4.2. Parámetros para las unidades incluidas en la operación

4.4.2.1. Columna principal

- *Número de pisos (incluyendo condensador y caldera)
- *Presión en la columna (en el piso 2 si hay condensador) y pérdida de presión
- *Caudal, P y T del vapor que entra por la base de la columna principal
- *Localización de los pisos de alimentación (hasta 10, en orden descendente)

Se permiten alimentos que entren al condensador o a la caldera. Si hay múltiples alimentos que llegan al mismo piso, debe usarse el módulo MIXER previo a la torre.

4.4.2.2. Condensador

Las especificaciones del condensador sólo son tenidas en cuenta si se marca la opción "si" como respuesta a la pregunta ¿Hay condensador?.

Especificaciones:

- *Tipo (total o parcial, con o sin decantación de agua)

- *Temperatura de subenfriamiento
- *Presión en el condensador
- *Estimaciones (flujos de destilado y reflujo y T del condensador): sólo si se dispone de estimaciones razonables. Generalmente sólo se introduce T.
- *Especificaciones: son similares a las del módulo TOWER. Pueden seleccionarse hasta dos opciones (la opción 3 se refiere, en el caso de condensador parcial a la T de rocío, y a la de burbuja para condensador total. Si se usa un condensador total con subenfriamiento, no debe usarse esta opción ya que la T se habrá especificado antes).
- *Curva de % en volumen (en el caso en que se haya introducido una opción que lo requiera, se especifica el % en volumen deseado. 1 indica el punto inicial y 99 el punto final, se requiere un valor entre 1 y 99).
- *Posición de componente i en el destilado
- *Posición de componente j en el destilado

4.4.2.3. Caldera

Las especificaciones de la caldera sólo son tenidas en cuenta si se marca la opción "sí" como respuesta a la pregunta ¿Hay caldera?.

Especificaciones:

- *T estimada
- *Especificaciones (similares a TOWER. Es válido lo descrito previamente para el condensador)

4.4.2.4. Desorbedores laterales

Pueden añadirse hasta 10 desorbedores laterales. Cada uno de ellos ha de tener al menos 1 piso. Admiten tanto caldera como inyección de vapor directo. Se trata de equipos que recogen un líquido de una etapa y retornan vapor a una etapa superior. No incluyen condensadores, aunque si se desea se puede recircular a la columna principal parte del producto de colas mediante una "recirculación" (pumparound).

La numeración de los pisos del desorbedor es consecutiva a la de los pisos de la columna principal.

- *Número de pisos
- *Piso de la columna principal del que procede el líquido
- *Piso de la columna principal al que retorna el vapor
- *P en el primer piso del desorbedor
- *Pérdida de P en el desorbedor
(si no se introduce P, se considera la del piso de procedencia del líquido)
- *Especificaciones: Hay hasta 9 opciones. Si hay inyección de vapor en la base del desorbedor, también se incluye el caudal, la P y la T de este vapor.

Las estimaciones en el desorbedor no son necesarias a menos que seleccionen las opciones para especificar el caudal molar o la fracción molar del componente i.

4.4.2.5. Bombas de recirculación

Son piezas auxiliares que recogen el fluido procedente de un piso, lo enfrían, y lo devuelven a un piso superior, o más raramente, lo calientan y lo devuelven a un piso inferior. El fluido puede ser vapor o líquido, y la opción por defecto es el líquido. Puede haber hasta 10 por torre. El menú requiere la introducción de los siguientes datos:

*Piso del que se recoge el fluido y piso al que se retorna y fase (0 para líquido y 1 para vapor)

Las especificaciones pueden clasificarse en dos categorías:

1. Balance de material: caudal molar, caudal másico, caudal volumétrico o razón de fluido extraído.
2. Balance de energía: calor intercambiado (negativo para enfriamiento y positivo para calentamiento), temperatura de salida de la bomba, diferencia de temperatura.

Normalmente se selecciona una opción del balance de material y otra del de energía, aunque las especificaciones de las recirculaciones son muy flexibles y puede especificarse sólo en el balance de materia o sólo en el de energía.

Una recirculación añade 2 grados de libertad a la columna y por tanto requiere 2 especificaciones. Si se dan menos de 2 especificaciones en el menú de la recirculación, deben añadirse especificaciones en un piso para suplir la diferencia entre grados de libertad y especificaciones. Normalmente se suelen elegir pisos próximos a la recirculación. Si no se selecciona una especificación de balance de materia se recomienda dar una estimación de caudal.

4.4.2.6. Intercambiadores laterales

Se debe especificar su localización y la pérdida de calor (positiva para calentamiento y negativa para enfriamiento). Puede introducirse el valor 0, y en ese caso, el calor intercambiado es calculado por el programa.

4.4.2.7. Productos laterales

Se admiten hasta 10 productos laterales por columna, y los parámetros requeridos son su localización y la fase extraída (la opción por defecto, 0, es

líquido). Análogamente a los casos anteriores, existen diversas opciones para las especificaciones.

4.4.2.8. Especificaciones de los pisos

Se pueden especificar las condiciones de hasta 10 pisos, disponiéndose de un menú con diferentes opciones para las especificaciones. Proporcionan gran flexibilidad para los cálculos, facilitando la convergencia de los mismos ya que cualquier especificación correspondiente a la columna o a un equipo accesorio puede cambiarse por una especificación en un piso.

4.4.3. Parámetros de convergencia

Todas las variables son opcionales y permiten modificar las tolerancias para la convergencia. Dentro de este menú se deben especificar los números de los pisos en los que se produce decantación de agua (hasta 10). Si se produce dicha decantación en el condensador, no se debe especificar aquí ya que sería redundante. Se debe asegurar que realmente existe agua para decantar en dichos pisos para que las condiciones de operación de la columna sean reales.

El menú del perfil estimado debe utilizarse si se eligen las opciones de tipo de perfil inicial (*initial profile flag*) 2 (T), 3 (V y T) ó 4(V, L y T). Se puede especificar la estimación de hasta 30 pisos. Se recomienda introducirla para los pisos 1 y N, y para los desorbedores laterales.

Los parámetros de convergencia a especificar son:

- * **Water quench flag:** El valor por defecto es cero. Si la torre presenta decantación de agua en la cabeza, y en los pisos existe una fase acuosa, se debe asignar el valor de 1.
- * **Nº máximo de iteraciones** (20 por defecto).
- * **Perfil inicial.** Nº entre 0 y 5. El valor por defecto es 0.

0	iteraciones utilizando la información de entrada (especificaciones y estimaciones).
1	carga como perfil el resultado del ejemplo previo.
2	perfil de T
3	perfil de T y V
4	perfil de T, V y L
5	estimaciones iniciales y/o perfil de P

Se deben tener en cuenta las mismas consideraciones que en el tipo de inicialización en el menú de TOWER.

- * **Trace level:** el valor por defecto es 0 (mínima información en pantalla). El nivel 3 permite evaluar el comportamiento de la torre durante las iteraciones.
- * **Tolerancia para el bucle externo.** Por defecto 10^{-5} . Se recomienda no

cambiarlo.

- * **Tolerancia para K.** Por defecto, 10^{-4} .
- * **Tolerancia para H.** Por defecto, 10^{-4} .
- * **Factor de amortiguamiento para K** (igual que en módulo TOWR).
- * **Delta h y delta K:** tolerancias para los modelos de K y H, para decidir cuando el bucle converge: si la diferencia entre el modelo elegido y el riguroso es menor que estas tolerancias, se considera que el bucle converge. El valor por defecto para ambas es 0.00005.
- * **Eta de decantación de agua:** se debe estar seguro que puede decantarse agua de algún piso de la columna. Si se decanta del condensador, el especificar una corriente lateral en el piso 1 es redundante.

4.4.4. Método

Los algoritmos usados y la información en pantalla durante la ejecución de los cálculos es similar a TOWR, al igual que las observaciones para columnas a alta presión, compuestos con puntos de ebullición próximos, valores de k no ideales y resolución de problemas que pueden presentarse.

4.5. Programa de destilación SCDS

Esta unidad realiza el cálculo riguroso de una columna de destilación por el método de corrección simultánea, con posibilidad de introducir la eficiencia de Murphree para los pisos. Admite un número ilimitado de pisos, hasta 5 alimentos y hasta 4 productos laterales. Permite gran variedad de opciones para las especificaciones. Simula de forma rigurosa la destilación de sistemas conteniendo dos o tres fases, tanto ideales como no ideales.

El módulo está ideado para simular sistemas no ideales. Usa el método de convergencia de Newton-Raphson y calcula rigurosamente las derivadas de cada ecuación. Suele ser más lento que los otros módulos, especialmente cuando el número de componentes es mayor que 10.

4.5.1. Parámetros

Los parámetros a introducir son similares a los del módulo TOWER, aunque existen algunas diferencias IMPORTANTES que NO DEBEN OLVIDARSE. Son:

***Tipo de condensador (presenta ligeras diferencias con respecto a TOWER).**

0 - Condensador total. Destilado líquido

1- condensador parcial de dos fases: el destilado es sólo vapor del condensador. En la opción por defecto, todo el líquido se devuelve como

reflujo. Si se desea condensador parcial con extracción de parte del líquido como producto de cabeza, debe especificarse una corriente lateral extraída de la etapa 1, que debe identificarse adecuadamente en el diagrama.

2 - Condensador de tres fases con decantación: se forman dos fases líquidas en el condensador y puede especificarse la porción de condensado que se retorna como reflujo, la porción que se decanta y la porción que se extrae como producto. El destilado siempre es una porción de fase ligera. Se requiere también, como en el caso anterior, la especificación de una corriente adicional de producto que contendrá al líquido decantado, aunque en este caso no se genera un grado de libertad extra y por tanto no se requiere ninguna especificación adicional. La proporción de cada fase se especifica en los parámetros α y β (página 1 del menú SCDS).

3 - Condensador parcial de tres fases con decantación. Se forma un vapor y dos líquidos. El vapor es el destilado y las fases líquidas pueden decantarse o devolverse como reflujo. Igual que en el caso anterior, se requiere la especificación de una corriente adicional de producto que contendrá al líquido decantado y que tampoco requiere ninguna especificación adicional. La proporción de cada fase se especifica en los parámetros α y β (página 1 del menú SCDS).

Cuando se usan las opciones 2 ó 3 no hay que definir el piso de decantación, SCDS asume que la primera corriente lateral es el decantado del condensador.

***Grado de subenfriamiento (DIFERENTE DE TOWER).** Indica la diferencia entre la temperatura de burbuja del destilado y la temperatura del destilado. Es decir, no es una temperatura sino una diferencia de temperaturas ($T_{\text{burbuja}} - T_{\text{destilado}}$).

***Presión en el condensador (IGUAL QUE EN TOWER)**

***Pérdida de presión en el condensador (IGUAL QUE EN TOWER)**

***Pérdida de presión en la columna (IGUAL QUE EN TOWER)**

***Presión en la bomba de reflujo.** Determina la presión del destilado y del reflujo.

***Presión en la bomba de residuo.** Determina la presión del vapor procedente de la caldera.

***Número de pisos/segmentos (SIMILAR A TOWER).** Para modelos de transferencia de materia en columnas de pisos (Tray mass transfer models), es el número de etapas teóricas (no ideales) de la columna. Para modelos de transferencia de materia en columnas de relleno (Packed Column Mass Transfer), es el número de segmentos utilizados como segmentos de cálculo en los métodos numéricos para el modelo de transferencia de materia. (VER EL SIGUIENTE PARÁMETRO)

***Modelo de simulación. regular VLE model** utiliza el modelo SCDS normal para el cálculo de una columna de N etapas, suponiendo mezcla en equilibrio en cada etapa. Las opciones de transferencia de material utilizan las difusividades y la correlación empírica de Maxwell-Stefan para calcular la matriz de coeficientes globales de transferencia de materia. Con **regular VLE**, CHEMCAD hace un cálculo del equilibrio líquido-vapor en cada etapa. Para columnas de relleno, CHEMCAD hace cálculos de equilibrio líquido-vapor y de transferencia de materia en cada segmento. El uso de muy pocos segmentos equivale al uso de incrementos demasiado grandes en la integración numérica; el resultado es el ajuste a curvas demasiado suavizadas. El uso de muchos segmentos puede proporcionar el resultado correcto pero con tiempos de cálculo muy elevados. Como regla general, se deben considerar 25-100 segmentos, dependiendo del grado de no idealidad del sistema considerado.

***Localización de los alimentos. (IGUAL QUE EN TOWER).** De arriba hacia abajo, con los mismos criterios que en TOWER. Se admiten alimentos al condensador y a la caldera. Si se requiere la entrada de múltiples corrientes al mismo piso, utilizar el módulo MIXER antes de la columna.

*** α y β .** Son las fracciones de cada fase líquida que se decanta (sólo para opciones 2 y 3 de tipo de condensador). α se refiere a la fase ligera y β a la fase pesada. Si $\alpha = 1$, toda la fase ligera se envía al decantador, y se recircula nada como reflujo. Si $\alpha = 0$, toda la fase ligera se recircula como reflujo y no se envía nada al decantador. Si $\beta = 1$, toda la fase pesada va al decantador y no se devuelve nada como reflujo y si $\beta = 0$, toda la fase pesada se devuelve como reflujo y no va nada al decantador. α y β varían entre 0 y 1.

***Destilación con reacción química.** Hay que especificar si hay o no reacción química. En caso de que la haya, el programa preguntará la estequiometría, los órdenes, los factores preexponenciales y las energías de activación para las distintas reacciones, correlaciones para el cálculo de constantes de equilibrio, etc.

***Eficiencia del piso en el piso 1 y N.** Se especifica la eficacia de Murphree para las etapas 1 y N, el programa calcula las de las etapas intermedias por interpolación lineal. El valor por defecto es 1.

***Control de las tres fases (opcional).**

0 - destilación con dos fases

1- destilación con tres fases (Equivalente a utilizar la opción LLV en el submenú de k-value)

- Inicio del sector con tres fases. La opción por defecto es el cálculo riguroso de tres fases en toda la columna. Para ahorrar tiempo y ganar velocidad se puede especificar la primera etapa del sector donde comienza a haber tres fases (aquí) y la última.

- Fin del sector con tres fases.

***Modo para condensador, con las correspondientes especificaciones (SIMILAR A TOWER)**

***Modo para caldera, con las correspondientes especificaciones (SIMILAR A TOWER)**

***Localización de las extracciones laterales de productos y sus especificaciones (SIMILAR A TOWER).**

***Valores estimados (IGUAL QUE EN TOWER):**

caudal molar de D
caudal molar de reflujo
T en la cabeza
T en la cola
T en el piso 2
T en el piso N-1

*** Especificaciones opcionales en pisos**

Pueden utilizarse en sustitución de una especificación en el condensador, la caldera o en una corriente lateral. Sigue siendo necesario dar la especificación original de la manera habitual. El programa varía entonces la especificación original hasta alcanzar el valor especificado en el piso. Para utilizar esta opción hay que rellenar campos donde se indica la variable a modificar, el valor de consigna, el n^o de piso, etc.

***Parámetros de convergencia (SIMILAR A TOWER)**

SCDS calcula la tolerancia de convergencia (parámetro opcional):

$$\text{Fac} = (\text{V2} + \text{L1} + \text{Feed}/3)/2$$

$$\text{Tolerancia} = 10^{-9} * [(2 * \text{nc} + 1) * \text{nstage}] * (\text{fac} * 4)^2$$

donde V2 = Caudal de vapor que sale de la etapa 2
L1 = Caudal de líquido que sale de la etapa 1
Feed = moles totales de alimento
nc = número de componentes
nstage = número de pisos

Se puede especificar la tolerancia, pero teniendo en cuenta que un valor demasiado pequeño puede ocasionar problemas de redondeo durante el cálculo.

En lo que respecta al factor de amortiguamiento, debe usarse un valor entre 0 y 1 sólo si no hay convergencia por los métodos ordinarios. La tecla Esc. permite retornar la eficiencia al valor especificado.

Si la caldera es de termosifón, se puede especificar la salida de vapor de la caldera. CHEMCAD calcula el caudal de calor y la curva de calentamiento,

pero ésto no afecta al cálculo de la destilación, sólo aporta información acerca de la caldera.

El perfil de eficiencia de pisos permite especificar la eficiencia de Murphree por piso o por componente y piso. Si se proporciona un perfil incompleto, el programa interpola para los pisos no especificados.

4.5.2. Topología

En lo referente a topología, columnas a presión elevada, el tratamiento de las mezclas con componentes de puntos de ebullición próximos y la resolución de problemas que puedan plantearse, este módulo es similar al anterior. Dado que este módulo da solución a alguno de los problemas que se plantean con las otras opciones de cálculo de destiladores, aquí una opción adicional para solucionar posibles problemas es la de cambiar el perfil inicial.

Al usar la destilación de tres fases, hay que tener en cuenta:

1. Hay que usar el método termodinámico adecuado.
2. Hay que seleccionar la opción LLV en el menú k-value

Cuando se realiza una simulación de destilación con tres fases, ambas fases aparecen cuando se visualizan los perfiles en la columna. No es necesario decirle al programa que se forman dos fases: CHEMCAD informa al usuario de cuando éstas se forman.

4.5.3. Destilación reactiva

Se simula con SCDS y definiendo las reacciones como cinética y/o equilibrio en la fase líquida y/o en la fase vapor. Las expresiones para el equilibrio y para la velocidad de reacción son las mismas que se describen en el capítulo de reactores.

La opción de destilación reactiva se activa respondiendo “Y” a la pregunta “Reactive distillation?” del primer menú de SCDS.

La **pantalla de datos generales** contiene los siguientes parámetros:

- nº de reacciones en fase líquida (se permiten hasta 20 reacciones entre ambas fases)
- nº de reacciones en fase vapor
- Unidades para el caudal molar
- Unidades para la energía de activación
- Unidades para el volumen
- Unidades para el tiempo

- Opción para elegir las unidades de los términos de concentración (concentración o presión parcial)
- Unidades de P
- Unidades de T

La **pantalla de tipo de reacción** pide que se indique, para cada reacción, si es una cinética o un equilibrio.

La **pantalla de volumen de reacción** pide los volúmenes de vapor y de líquido en cada piso de la columna.

La **pantalla de datos cinéticos/de equilibrio** pide los parámetros de reacción y la estequiometría de cada reacción:

a) Datos cinéticos:

- i. fase en la que ocurre la reacción,
- ii. energía de activación,
- iii. tercer parámetro reservado para casos especiales
- iv. para cada componente (hasta un máximo de 10):
 1. coeficiente estequiométrico
 2. factor exponencial
 3. factor de adsorción
 4. energía de adsorción

b) Datos de equilibrio

- i. fase en la que ocurre la reacción
- ii. parámetros A, B, C y D de la ecuación:

$$\ln(K) = A + B/T + C \cdot \ln T + D \cdot T + E \cdot T^2$$

con T en las unidades especificadas. También se indican los coeficientes estequiométricos para cada componente (hasta 10).

Aparece una **pantalla de “reacciones desactivadas”**, que permite anular una o dos reacciones en cada piso.

Los parámetros y las líneas generales de actuación, son los mismos que en el módulo SCDS.

En SCDS una disminución arbitraria de la eficiencia consigue un efecto similar al que produce el factor de amortiguamiento.

4.6. Cálculo del coste

CHEMCAD calcula el coste de compra e instalación de columnas de destilación y de absorbedores, cuando éstos se simulan mediante SCDS o TOWER. Se incluyen los cálculos del coste del condensador y caldera.

El coste de la carcasa es función del diámetro, longitud, material y espesor de la misma. El coste de los pisos se calcula en función del material, tipo de piso, diámetro de la columna y número de pisos. Los costes de plataformas y escaleras se obtienen a partir del diámetro y altura de la columna. Para torres de relleno, el coste depende del tipo y del volumen de relleno. El coste del condensador y de la caldera se discute en el capítulo dedicado a los intercambiadores de calor (HTXR).

Los mismos criterios pueden usarse para el cálculo del coste de unidades simuladas con unidades TOWER PLUS.

4.6.1. Definición de parámetros

Bandera de estimación de coste:

0 = Off

1 = On

Tipo de columna:

0 = de pisos

1 = de relleno

Tipo de pisos:

0 = de válvulas

1 = de rejilla

2 = de campanas

3 = perforado

Material de la columna:

0 = Carbon steel

1 = Stainless steel 304

2 = Stainless steel 316

3 = Carpenter 20CB-3

4 = Nickel 200

5 = Monel 400

6 = Inconel 600

7 = Incoloy 825

8 = Titanium

Material de los pisos:

0 = Carbon steel

1 = Stainless steel 304

2 = Stainless steel 316

3 = Carpenter 20CB-3

- 4 = Nickel 200
- 5 = Monel 400
- 6 = Inconel 600
- 7 = Incoloy 825
- 8 = Titanium

Número de pisos: excluyendo el condensador y la caldera

Diámetro de la columna

Espaciado entre pisos

Longitud de la columna: es la longitud de la columna de tangente a tangente.

Espesor (top): espesor de la columna en la cabeza.

Espesor (bot): espesor de la columna en la base.

Densidad del material: densidad del material del que está construida la columna. El valor por defecto es 501 lb/ft³ (304 SS).

Coste del relleno

Volumen de relleno

Factor de instalación: es el factor para pasar del precio de compra a precio instalado. El valor por defecto es 2.1 para columnas de acero al carbón y 3.0 para las demás.

4.6.2. Múltiples secciones

Nº de secciones: si hay más de una sección, se deben especificar los datos para cada sección. El nº máximo de secciones es 2.

Diámetro de la 2ª sección

Longitud de la 2ª sección: longitud de la columna de tangente a tangente.

Nº de pisos de la 2ª sección, excluyendo el condensador y la caldera.

Volumen de relleno en la sección 2

4.6.3. Condensadores y calderas

Tipo:

- 0 = Fixed head
- 1 = Kettle reboiler
- 2 = U-tube

Material:

- 0 = Carbon steel
- 1 = Stainless steel 304
- 2 = Stainless steel 316
- 3 = Carpenter 20CB-3
- 4 = Nickel 200
- 5 = Monel 400
- 6 = Inconel 600
- 7 = Incoloy 825
- 8 = Titanium

Area: área de transferencia de calor del intercambiador instalado. Debe teclearse, ya que CHEMCAD no es capaz de leerlo desde otra parte del programa.

Presión de diseño: el valor por defecto es la mayor presión de las corrientes de entrada.

Factor de instalación del condensador: para transformar el precio de compra en el precio instalado. El valor por defecto es.

4.6.4. Cálculo del coste

Coste total de adquisición: coste total de adquisición calculado para la columna, incluyendo condensador y caldera.

Coste total instalado: los costes de compra de los diversos componentes de la torre se multiplican por sus factores de instalación respectivos.

Peso de la carcasa: en este campo se calcula el peso de la carcasa, a partir del que se calcula el coste de ésta.

Precio de compra de la columna (excluyendo el condensador y la caldera)
Precio de la columna instalada

Coste de la carcasa

Coste de los pisos (coste total de los pisos de la columna)

Plataformas y escaleras

Coste del relleno

Coste de compra del condensador

Coste del condensador instalado

Coste de compra de la caldera

Coste de la caldera instalada

4.6.5. Tower plus

Se necesitan los mismos parámetros que para la estimación de los costes con SCDS y TOWER.

5. OTRAS UNIDADES DE TRANSFERENCIA DE MATERIA

5.1. Separador de componentes (CSEP)

Divide una corriente de entrada en dos corrientes de salida de diferente composición y condiciones térmicas. Se puede considerar como un separador “abstracto” en el que puede plantearse casi cualquier separación sin más que especificar la fracción separada. Las definiciones de los parámetros son:

T mode top: modo de temperatura para el producto de cabeza y especificación correspondiente.

T mode bottom: modo de temperatura para el producto de cola y especificación correspondiente.

En ambos casos (cabeza y cola):

Modo = 0

especificación de T = Temperatura de la corriente

La corriente se somete a flash a la T especificada para determinar su estado térmico (si no se especifica T, considera T de la corriente de entrada)

Modo = 1

especificación de T = no se requiere

El producto es un líquido y su T es la T de burbuja a la P del separador.

Modo = 2
especificación de T = no se requiere

El producto es un vapor y su T es la T de rocío a la P del separador

Modo = 3
especificación de T = grado de subenfriamiento

El producto es un líquido a una T igual a la T de burbuja menos el grado de subenfriamiento.

Modo = 4
especificación de T = grado de sobrecalentamiento

El producto es un líquido a una T igual a la T de rocío más el grado de sobrecalentamiento.

Component Split mode

- | | |
|---|------------------------------------|
| 0 | se especifica la fracción separada |
| 1 | se especifican caudales molares |

En función de la opción seleccionada aquí, se rellena el último campo (**split fractions/mole flowrates**) para cada componente (hasta 46)

P y Pressure drop: se puede especificar la presión de operación (que es la de salida) o la pérdida de presión en la unidad, pero no ambas. Si se deja en blanco el campo de pérdida de presión, se considera que es 0.

El módulo requiere una corriente de entrada y dos de salida. No es importante el orden de las salidas. Generalmente la primera salida se considera que es el producto de cabeza, y la segunda el de cola. El separador se trata como una "caja negra": se definen las condiciones de salida individualmente y el balance de energía se realiza teniendo en cuenta que el calor acumulado por la unidad es la diferencia entre las entalpías de la corriente de entrada y las de salida.

5.2. Generador de fases (PGEN)

Realiza una serie de cálculos de flash en un rango de condiciones de operación especificado por el usuario. Se pueden trabajar todos los modos de cálculo del módulo Flash, y el resultado muestra T, P, balance global de materia y energía y factores de compresibilidad del vapor y del líquido obtenido para cada cálculo del flash. La T y P introducidas sirven como estimación inicial para el primer flash que se calcula.

Cada cálculo parte de los resultados del flash previo, por tanto conviene que las condiciones de la corriente de entrada se introduzcan lo más próximas que sea posible a las condiciones del primer flash. Los factores de compresibilidad

pueden servir para chequear cuando las operaciones flash están próximas o por encima de las condiciones críticas de la corriente.

Se especifica el modo para el flash, y en función de éste, los límites superiores e inferiores de los parámetros del flash, y el número de puntos deseado. Cuando las condiciones se aproximen a las condiciones críticas de la corriente, se recomienda seleccionar más puntos.

BIBLIOGRAFÍA

- Manual del programa. Disponible en la ayuda en línea de CHEMCAD
- “Introducció a l’ús del simulador de processos químics CHEMCAD 5.2.0”, A. Gómez Siurana, A. Font Escamilla, S. Menargues Irlles, Col·lecció Joan Fuster nº 95, Secretariat de Promoció del Valencià. Universitat d’Alacant.