

SIMULACIÓN Y DISEÑO DE PROCESOS INDUSTRIALES POR ORDENADOR

**Problemas a resolver con el programa FLASH**

1. Resuelve los siguientes cálculos de equilibrio. En todos los casos se debe determinar la temperatura, presión y composición y proporción de las fases en equilibrio.

FL1. Punto de rocío a 110°C de una mezcla que contiene un 67.4% en moles de n-heptano y 32.6% de n-octano.

FL2. Punto de rocío a 95°C, de una mezcla que contiene un 78.9% en moles de benceno, un 15.6% de tolueno y un 5.5% de xileno.

FL3. Punto de burbuja a 1 atm de una mezcla que contiene un 50% en moles de benceno, un 25% de tolueno y un 25% de xileno.

FL4. Punto de de burbuja a 110°C de una mezcla que contiene un 48.7% en moles de n-heptano y 51.3% de n-octano.

FL5. Fases en equilibrio a partir de un líquido subenfriado que contiene 50% en moles de benceno, 25% en moles de tolueno y 25% en moles de o-xileno a 1 atm y 100°C. Compara los resultados con los que se obtienen partiendo de un líquido saturado, de un vapor saturado y de un vapor sobrecalentado.

FL6. Fases en equilibrio obtenidas a partir de un líquido subenfriado que contiene 50% benceno, 25% tolueno y 25% o-xileno (en moles) que se somete a destilación flash con vaporización del 32.5% en moles de la carga a 1 atm de presión.

FL7. Composición del vapor en equilibrio a 1.2 atm con un líquido con la siguiente composición en moles: 95.2% de benceno, 0.7% de ciclohexano y 4.10% de tolueno.

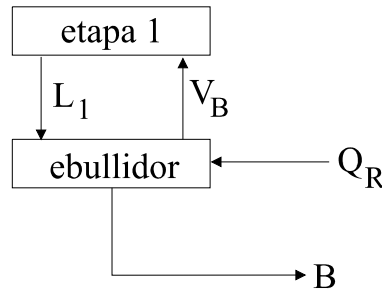
FL8. Composición del líquido en equilibrio a 1.5 atm con un vapor con la siguiente composición en moles: 48.9% de benceno, 32.1% de ciclohexano y 19% de acetato de etilo.

2. Obtén los datos de equilibrio líquido-vapor a 1 atm para los siguientes sistemas:

- |                      |                       |
|----------------------|-----------------------|
| - benceno-tolueno    | - benceno-ciclohexano |
| - benceno-cloroformo | - metanol-etanol      |
| - agua-etanol        | - agua-ciclohexano    |
| - agua-cloroformo    |                       |

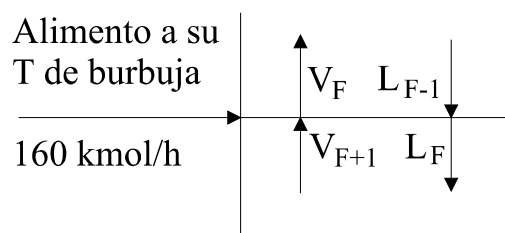
3. (FL9). Una mezcla equimolar de benceno y tolueno se evapora totalmente a una temperatura constante de 90°C. ¿Cuáles son las presiones de comienzo y finalización del proceso de vaporización?

4 (FL10). En el esquema que sigue, 150 kmol/h de un líquido saturado,  $L_1$  a 758 kPa y cuya composición molar es : propano 10%, n-butano 40% y n-pentano 50%, entra en el ebullidor procedente de la etapa 1. ¿Cuáles son las composiciones y cantidades de  $V_B$  y  $B$ ?. ¿Cuál es la capacidad  $Q_R$  del ebullidor?.  $B = 50$  kmol/h



5 (FL11). Ha de separarse propileno de 1-buteno por destilación, con el fin de obtener un vapor destilado que contenga 90% en moles de propileno. Calcula la presión de operación de la columna, suponiendo que la temperatura de salida del condensador parcial es de 100°F (la mínima alcanzable con el agua de refrigeración). Determina la composición del líquido de reflujo.

6 (FL12). Las corrientes que entran en la etapa F de una columna de destilación son las que se indican a continuación. ¿Cuál es la temperatura de la etapa y las cantidades de las corrientes  $V_F$  y  $L_F$  si la presión de todas las corrientes es de 758 kPa?.  $L_{F-1}=100$  kmol/h;  $V_{F+1}=196$  kmol/h



Fracciones molares	Alimento	$V_{F+1}$	$L_{F-1}$
Propano	0.2	0.3	0.15
n-Butano	0.4	0.5	0.45
n-Pentano	0.4	0.2	0.40

7 (ELL1). Calcula la composición de las fases en equilibrio resultantes al poner en contacto las siguientes mezclas líquidas a 25°C y 1 atm de presión:

F : 25 kg de agua, 20 kg de acetona y 55 kg de ácido acético

E2: 0.665 kg de agua, 0.875 kg de acetona, 9.52kg de ácido acético y 338.8 kg de cloroformo.

8 (ELL2). Calcula la composición de las fases en equilibrio resultantes al poner en contacto las siguientes mezclas líquidas a 25°C y 1 atm de presión:

R1: fracciones molares: 0.0476 de ciclohexano, 0.0920 de benceno, 0.788 de isooctano y 0.0718 de furfural. Caudal: 64.6 kmol/h.

E3: 0.0400 de ciclohexano, 0.105 de benceno, 0.0639 de isooctano y 0.791 de furfural. Caudal 248.8 kmol/h.

9 (ELL3). Calcula las composiciones de las dos fases en equilibrio que resultan al preparar una mezcla líquida a 25°C y 1 atm que contiene 4.18% de ácido acético, 46.4% de agua y 49.42% de isopropil éter (los porcentajes son en peso).

10. (ELL4). El sistema agua-etanol-benceno presenta, a 1 atm, un azeótropo heterogéneo con la siguiente composición: agua, 7.4% en peso; etanol, 18.5%; benceno, 74.1% en peso. Para la citada mezcla, calcula la temperatura de burbuja y la temperatura de rocío. Comenta los valores obtenidos.

11. Obtén la curva binodal correspondiente a los siguientes sistemas a 25°C y 1 atm:

- ácido acético-agua-isopropil éter
- agua-cloformo-acetona
- agua-etanol-benceno

12. Obtén los mapas de curvas de residuo y determina, si existen, los azeótropos de los siguientes sistemas:

- ácido acético-agua-isopropil éter
- agua-cloformo-acetona
- agua-etanol-benceno
- etanol-1-propanol-2-propanol

13 (FL13). En el sistema de cabeza de una columna de destilación se obtiene un vapor, procedente del primer piso de la columna, con la siguiente composición (fracción molar): 0.10 de etano, 0.20 de propano y 0.70 de butano y se retira un 10% del mismo como destilado en fase vapor a 100°C. ¿Cuál es la presión en el tanque de reflujo?

14. (FL14). Un líquido en equilibrio procedente de una cámara de flash a 100°F y 485 psia, con la siguiente composición (fracciones molares):  $H_2 = 0.0039$ ,  $CH_4 = 0.0584$ , benceno = 0.7101 y tolueno = 0.2276, entra como alimentación en un estabilizador para separar el  $H_2$  y el  $CH_4$  que quedan. La presión en el plato de alimentación del estabilizador es de 165 psia. Calcula el porcentaje de vaporización de la alimentación si la presión disminuye adiabáticamente desde 485 hasta 165 psia debido a la caída de presión en la válvula y en la conducción.

SOLUCIONES

FL1

Pres atm	1.0015	
Component mole fractions		
N-Heptane	0.674002	0.493877
N-Octane	0.325998	0.506123

FL2

Pres atm	0.9879	
Component mole fractions		
Benzene	0.789398	0.513062
Toluene	0.156077	0.245255
O-Xylene	0.054525	0.241683

FL3

Temp C	95.9735	
Component mole fractions		
Benzene	0.780308	0.499997
Toluene	0.161993	0.250001
O-Xylene	0.057698	0.250002

FL4

Pres atm	0.9963	
Component mole fractions		
N-Heptane	0.667940	0.486998
N-Octane	0.332060	0.513002

FL5

Stream Name	VAPOR	LÍQUIDO
Total kmol/h	28.2225	71.7775
Component mole fractions		
Benzene	0.718488	0.414092
Toluene	0.197821	0.270517
O-Xylene	0.083692	0.315391

FL6

Temp C	100.7254	
Component mole fractions		
Benzene	0.707416	0.400132
Toluene	0.203506	0.272386
O-Xylene	0.089078	0.327482

FL7

Temp C	87.1211	
Component mole fractions		
Benzene	0.975719	0.952000
Toluene	0.016960	0.041000
Cyclohexane	0.007321	0.007000

FL8

NRTL		
Temp C	89.3327	
Component mole fractions		
Benzene	0.488999	0.544957
Cyclohexane	0.321000	0.299667
Ethyl Acetate	0.190000	0.155377

FL9  
0.93 Y 0.75 atm

FL10  
Temp C 87.4837  
Component mole fractions  
Propane 0.130555 0.038890  
N-Butane 0.446118 0.307763  
N-Pentane 0.423327 0.653347

FL11  
Pres atm 12.7034 12.7034  
Vapor mole fraction 1.0000 0.00000

Component mole fractions  
Propylene 0.900000 0.766413  
1-Butene 0.100000 0.233587

FL12  
Temp C 68.5351 68.5351  
Vapor mole fraction 1.0000 0.00000  
Component mole fractions  
Propane 0.359974 0.137185  
N-Butane 0.463318 0.447003  
N-Pentane 0.176708 0.415812

ELL1  
UNIFAC  
Temp C 25.0000  
Pres atm 1.0000  
Component mole fractions  
Water 0.000000 0.812723 0.065435  
Acetone 0.000000 0.006418 0.081696  
Acetic Acid 0.000000 0.169983 0.194715  
Chloroform 0.000000 0.010876 0.658154

ELL2  
UNIFAC  
Temp C 25.0000  
Pres atm 1.0000  
Component mole fractions  
Cyclohexane 0.000000 0.086602 0.034009  
Benzene 0.000000 0.115971 0.100058  
2-Methylheptane 0.000000 0.579545 0.151784  
Furfural 0.000000 0.217882 0.714149

ELL3  
UNIFAC  
Temp C 25.0000  
Component mole fractions  
Acetic Acid 0.000000 0.021764 0.024466  
Water 0.000000 0.977848 0.110469  
DiisopropylEther 0.000000 0.000388 0.865065

ELL4  
UNIFAC  
Temp C 63.7298

Component mole fractions			
Water	0.200728	0.584287	0.015420
Ethanol	0.258509	0.375132	0.136758
Benzene	0.540763	0.040580	0.847822

Temp C	65.5461		
Component mole fractions			
Water	0.233259	0.011641	0.842041
Ethanol	0.228043	0.094990	0.152828
Benzene	0.538698	0.893368	0.005132

FLL13. 25.986 atm (ojo: si te sale 29.81 atm es que has usado i-butano)

FLL14. 3.52%

## Problemas a resolver con el programa EXTRACTOR

1 (EX1). Simula un extractor de 3 etapas en el que se separa una mezcla de agua (W), acetona (A), ácido acético (AC) y cloroformo (C) y en el que se introduce el disolvente C por la 1ª etapa, y por la última un alimento con la siguiente composición (fracción másica):  $X_W = 0.25$ ,  $X_A = 0.20$ ,  $X_{AC} = 0.55$ ,  $X_C = 0$ . El caudal de alimento es de 100 kg/h y el de disolvente de 350 kg/h.

Parámetros binarios para el modelo UNIQUAC (K)

	W	A	AC	C
W	0	-164.3	-151.1	440.1
A	453.7	0	926.1	-44.0
AC	366.0	-495.6	0	-75.1
C	1366.0	-226.2	312.8	0

2 (EX3). La separación de benceno (B) de n-hexano (H) por destilación ordinaria presenta cierta dificultad. A presión atmosférica los puntos de ebullición se diferencian en 18.3°C. Sin embargo, habida cuenta de la no idealidad de la fase líquida, la volatilidad relativa disminuye a un valor inferior a 1.15 para elevadas concentraciones de benceno. Un método alternativo de separación es la extracción líquido-líquido con una mezcla de dimetilformamida (DMF) y agua. El disolvente, a 20°C, es mucho más selectivo para el benceno que para el n-hexano. Calcula, para dos composiciones del disolvente, las composiciones y flujos de las corrientes interetapas para una cascada de extracción líquido-líquido de cinco etapas de equilibrio, con  $T = 20^\circ\text{C}$  y  $P = 20$  psia en todo el sistema, y con los siguientes caudales y composiciones:

Alimento (20°C, 20 psia): 300 lb-mol/h de H y 100 lb-mol/h de benceno

Disolvente (20°C, 20 psia): CASO A: 750 lb-mol/h de DMF y 250 lb-mol/h de agua; CASO B: 500 lb-mol/h de DMF y 500 lb-mol/h de agua

Los datos experimentales del equilibrio entre fases para el sistema cuaternario fueron ajustados por la ecuación NRTL por Cohen y Renon (Can. J. Chem. Eng., **48**, 291-296, 1970). Las constantes de los pares binarios resultantes son:

Par binario, i, j	$\tau_{ij} = (g_{ij} - g_{ji})/(RT)$	$\tau_{ji} = (g_{ji} - g_{ij})/(RT)$	$\alpha_{ji}$
DMF, H	2.036	1.910	.25
Agua, H	7.038	4.806	.15
B, H	1.196	-0.355	.30
Agua, DMF	2.506	-2.128	.253
B, DMF	-0.240	0.676	.425
B, agua	3.639	5.750	.203

3 (EX4). Se desea separar una mezcla de ciclohexano y ciclopentano por extracción líquido-líquido a 25°C con metanol. Calcula las composiciones y los

flujos tanto de productos como de corrientes interetapas para las siguientes condiciones:

Alimento: 700 lb-mol/h de ciclohexano y 300 lb-mol/h de ciclopentano

Disolvente: 1000 lb-mol/h de metanol

- a) 1 etapa de equilibrio
- b) 2 etapas de equilibrio
- c) 5 etapas de equilibrio
- d) 10 etapas de equilibrio

4 (EX5). Se desea extraer la acetona de una mezcla que contiene 30% en peso de acetona y 70% en peso de acetato de etilo a 30°C, usando agua pura como disolvente. El refinado final ha de contener 5% de acetona, en base libre de agua. Determina las relaciones mínima y máxima de caudales de disolvente y alimento y obtén el número de etapas de equilibrio necesarias para dos valores intermedios de dicha relación.

Sugerencias: se puede utilizar el análisis de sensibilidad para determinar los caudales máximo y mínimo de disolvente.

5 (EX6). 100 kg/h de una mezcla ácido acético-cloroformo de composición 35% de ácido acético, se extraen con agua en una columna de extracción en contracorriente a 18°C, para obtener un refinado que contenga menos del 3% en peso de ácido acético. Calcula el número de etapas necesarias si la cantidad de agua a emplear es de 25 kg/h.

6 (EX7). 200 kg/h de una mezcla ácido acético-cloroformo de composición 28% en peso de ácido acético se extraen con agua operando en una columna de extracción que consta de tres etapas de equilibrio. Determina la cantidad de agua a emplear como disolvente si se desea obtener un refinado que contenga un 1% de ácido acético.

7. (EX8). Se dispone de 1000 kg/h de una disolución acuosa de ácido benzoico de composición 30% en peso de ácido. Para separar el ácido benzoico se somete la mezcla a un proceso de extracción a 20°C, empleando 1800 kg/h de benceno como disolvente. Si el sistema consta de 2 etapas de equilibrio, ¿cuál es el porcentaje de ácido benzoico que ha pasado al refinado final?

8 (EX9). Se dispone de 1500 kg/h de una disolución acuosa de piridina de composición 50% en peso. Se pretende reducir su concentración por debajo del 3% en un proceso de extracción en contracorriente empleando clorobenceno como agente extractor. Calcula:

- a) La cantidad mínima de clorobenceno a emplear.
- b) El número de etapas teóricas si se emplean 1500 kg/h de clorobenceno
- c) La cantidad y composición del refinado y extracto que salen del sistema.



## SOLUCIONES

EX1

3 etapas-420.3 kg/h de extracto con fracción másica de agua de 0.0028

EX3

5 etapas-1016 lbmol/h de extracto con fracción molar de benceno de 0.038666 (caso B)

EX4

Modelo termodinámico: UNIFAC. 5 etapas-1100 lbmol/h de extracto con fracción molar de ciclopentano de 0,049792

EX5

Modelo termodinámico: UNIQUAC. Disolvente/Alimento, mínimo = 1.5. Disolvente/Alimento, máximo = 3.6. Disolvente/Alimento = 2: se necesitan 5 etapas

EX6

Modelo termodinámico: UNIFAC LLE. 3 etapas-67.9366 kg/h de extracto con fracción másica de ácido acético de 0.4974

EX7

Modelo termodinámico: UNIFAC LLE. 3 etapas-129.09 kg/h de extracto con fracción másica de ácido acético de 0.4233

EX8

Modelo termodinámico: UNIFAC LLE. 2 etapas-2104.5 kg de extracto con fracción másica de ácido benzoico de 0.142

EX9

Modelo termodinámico: UNIFAC LLE.

Mínimo = 1350 kg/h.

3 etapas (piridina en el refinado: 1.07% (peso))

## Problemas a resolver con el programa de columnas

1 (COL1). Se desea diseñar una columna de destilación para separar la mezcla cuya composición se muestra en la tabla adjunta. La presión de operación es de 315 psia. El alimento entra a la columna vaporizado en un 66% y la columna va equipada con un condensador parcial. Se desea conseguir el 98.4% del propano alimentado en el destilado, y el 98.2% del n-butano en el residuo. Calcula:

- El número de pisos teóricos necesarios para una columna trabajando a un reflujo 1.5 veces superior al mínimo
- El número mínimo de pisos
- La posición óptima del piso de alimentación
- La razón de reflujo mínima

	MOLES
Metano	26
Etano	9
Propano	25
n-butano	17
n-pentano	11
n-hexano	12

2 (COL2). Para la columna del problema COL1, obtén los caudales y las composiciones de las corrientes que salen de cada piso. Comprueba el efecto sobre la composición y el caudal de los productos de una modificación de:

- el número de pisos
- la razón de reflujo
- la condición térmica del alimento

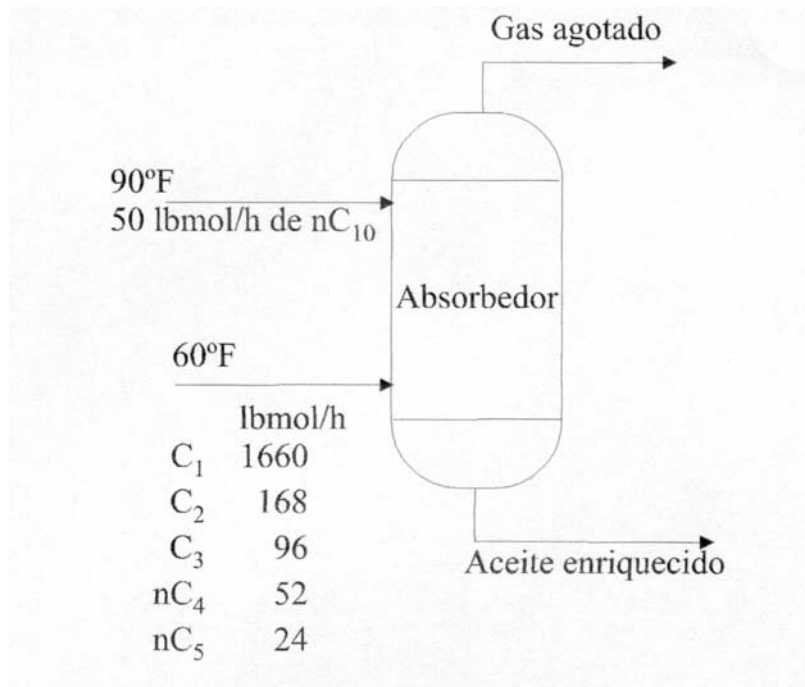
Simula la columna especificando en reflujo inferior al mínimo y un número de pisos inferior al mínimo. ¿Qué ocurre?

3 (COL3). Se dispone de 100 kmol/h de un alimento que contiene 45% en moles de  $CS_2$  y 55% en moles de  $Cl_4C$ . Se desea obtener más del 95% de  $CS_2$  en el destilado y más del 97% de  $Cl_4C$  en el residuo. Diseña la columna de destilación capaz de realizar dicha separación y obtén los perfiles de vapor, líquido y componente a lo largo de la columna. La presión de operación es 1 atm. El alimento se introduce en la columna como líquido saturado.

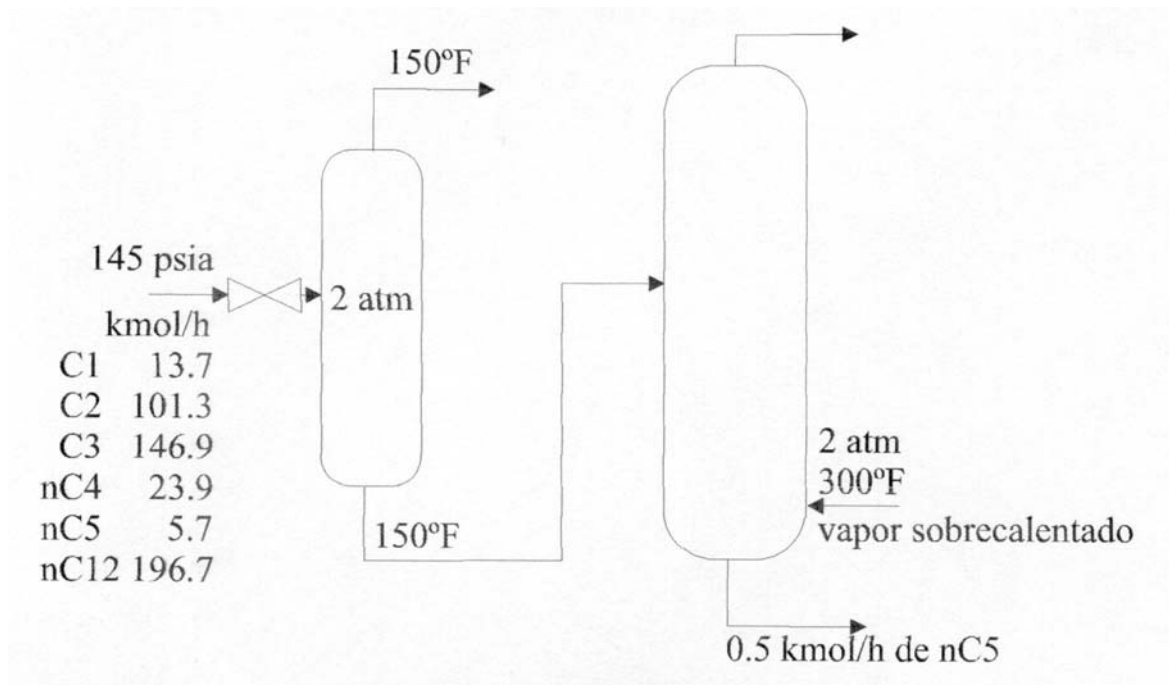
4 (COL4). Determina la separación que se puede alcanzar para la operación de absorción indicada más adelante, para las siguientes combinaciones de condiciones:

- seis etapas de equilibrio y una presión de operación de 75 psia
- tres etapas de equilibrio y una presión de operación de 150 psia

c) seis etapas de equilibrio y una presión de operación de 150 psia



5 (COL5). Para la operación de flash y stripping que se indica más abajo, determina los kg-mol/h de vapor de agua, si el sistema de stripping tiene diez etapas teóricas y opera a 2 atm. El alimento entra a 30°F.



6 (COL6). Calcula las composiciones de los productos, las temperaturas de las etapas, los flujos y composiciones interetapas, el servicio del ebullición y el del condensador para las siguientes especificaciones de destilación:

Columna provista de 9 platos, caldera y condensador parcial.  
 Alimento líquido en el punto de burbuja a 120 psia. Se introduce en el 5<sup>o</sup> piso (comenzando a contar desde el plato de cabeza).

	Lb-mol/h
C3	5
iC4	15
nC4	25
iC5	20
nC5	35

Destilado vapor. 48.9 Lb-mol/h  
 Reflujo: 126.1 Lb-mol/h  
 P = 120 psia en toda la columna

7 (COL7). Calcula la composición de los productos, temperatura de las etapas, flujos y composiciones interetapas, servicio del ebullidor y servicio del condensador para las siguientes especificaciones de destilación, que representan un intento para la obtención de cuatro productos casi puros en una operación de destilación simple. El reflujo es un líquido saturado.

La columna está provista de 28 platos, caldera y condensador total.  
 Alimento: 25 psia, 150<sup>o</sup>F. Se introduce en el piso 14 (comenzando a contar desde el plato de cabeza).

	Lb-mol/h
nC4	14.08
nC5	19.53
nC6	24.78
nC8	39.94

Destilado: 14.08 Lb-mol/h  
 Razón de reflujo: 20  
 Extracción de producto en el piso 10 (comenzando a contar desde el plato de cabeza): 19.53 Lb-mol/h  
 Extracción de producto en el piso 24 (comenzando a contar desde el plato de cabeza): 24.78 Lb-mol/h  
 P en el condensador = 20 psia  
 P en la caldera = 25 psia

8 (COL8). Calcula la composición de los productos, temperatura de las etapas, flujos y composiciones interetapas y servicio del ebullidor para el absorbedor con ebullición que se describe a continuación.

La columna está provista de 25 platos y caldera.  
 Aceite absorbente: 60<sup>o</sup>F, 230 psia, 40 Lb-mol de nC9  
 Alimento. 230 psia, 120<sup>o</sup>F. Se introduce en el piso 9 (comenzando a contar desde el plato de cabeza):

	Lb-mol/h
C1	46
C2	42
C3	66
iC4	13
nC4	49
iC5	11
nC5	20
nC6	24
nC9	148

Producto de cabeza: 103 Lb-mol/h

Ebullidor interetapas: piso 13 (comenzando a contar desde el plato de cabeza):  $10^6$  Btu/h

P = 230 psia en toda la torre

9 (COL9). Para reducir el contenido en dióxido de azufre de una corriente gaseosa se utiliza un absorbedor con 4 etapas. El gas a limpiar entra al fondo del absorbedor a  $40^{\circ}\text{C}$  y 1 bar con un caudal de 61884 kmol/h y composición expresada como porcentaje en volumen de 6.6% en  $\text{CO}_2$ , 0.045% en  $\text{SO}_2$  y el resto nitrógeno. El líquido absorbente está formado por una suspensión de carbonato cálcico en agua (19 g de carbonato por kg de agua) a  $20^{\circ}\text{C}$  que se introducirá por la parte superior del absorbedor. Determina el caudal de suspensión de carbonato necesaria para que la concentración de  $\text{SO}_2$  en el gas limpio de salida expresada como porcentaje en volumen sea inferior a 0.000023%.

10 (COL10). Se desea eliminar el contenido en cloruro de hidrógeno de una corriente de aire que contiene 36.3 kmol/h de nitrógeno, 9.1 de oxígeno y 13.6 de cloruro de hidrógeno a  $38^{\circ}\text{C}$  y 3.45 bar. Para ello se dispone de una columna de absorción de 20 etapas que opera a 3.45 bar. El absorbente utilizado es una corriente de agua de 113.4 kmol/h a  $38^{\circ}\text{C}$  (algo impurificada con 0.45 kmol/h de HCl) que entra a la parte superior de la columna. Obtén la composición y caudal de las corrientes obtenidas.

11 (COL11). Se dispone de una corriente líquida a  $60^{\circ}\text{C}$  y 4 bares compuesta por 1743 kmol/h de agua que lleva en disolución 2 kmol/h de sulfuro de hidrógeno y 3.26 kmol/h de amoníaco. Para separar el sulfuro de hidrogeno y el amoníaco de dicha corriente se lleva a una torre de destilación de 20 etapas. El alimento entra a la torre en la etapa 4. La presión en lo alto de la columna es de 1 bar y la caída de presión a lo largo de la columna es de 0.17 bares.

Para mejorar la eficacia de la columna se extrae una corriente lateral líquida de la etapa justo superior a la entrada de alimento (etapa 3), se enfría y se lleva a lo alto de la torre. Esto conduce a que la salida de gas por lo alto de la columna sea de 7 kmol/h.

Determina la composición de esta corriente gaseosa si al calderín de la columna de rectificación se está aportando un caudal de energía de 14000 MJ/h.

COL12. Para llevar a cabo la obtención de acetato de etilo por esterificación de etanol y ácido acético se dispone de una columna de rectificación de 20 etapas donde se va a llevar a cabo la reacción y separación de componentes. La columna operará con una razón de reflujo (reciclado/destilado) de 4 y el calderín aportará 8000 MJ/h de energía. Las eficiencias de las etapas superior e inferior son de 0.6. La columna opera a una presión de 1.013 bares y la caída de presión a lo largo de la columna es despreciable.

El etanol a una temperatura de 70°C y 1.2 bar con un caudal de 50 kmol/h (de los que solo 43 son de etanol y los otros 7 de agua) entra a la columna en la etapa 13. El acético, a 70°C y 1.2 bar con un caudal de 25 kmol/h lo hace en la etapa 6.

Supón que la reacción se lleva a cabo entre las etapas 4 y 18 y que el volumen de reacción de líquido retenido en los platos de la columna es de 20 litros. La cinética de la velocidad de esterificación viene dada por una reacción de orden cero en el que el factor de frecuencia A es de  $2.9E+4$  mol/(min L) y la energía de activación E es 7150 cal/mol. Para la velocidad de saponificación (de sentido inverso y que se da simultáneamente) A vale  $7.38e+3$  y E 7150. Determina la composición y caudal de las corrientes de salida de la columna.

13 (COL 13). Simula la siguiente columna de rectificación:

- 16 etapas, condensador mixto (etapa 1) y caldera (etapa 16)
- Presión en el condensador = 238 psia; presión en la caldera = 243 psia
- Alimento en el piso 6: 170°F, 300 psia, Composición (Lbmol/h): etano = 2.5, propano = 14.0, n-butano = 19.0, n-pentano = 5.0, n-hexano = 0.5.
- Alimento en el piso 9: 230°F, 275 psia, Composición (Lbmol/h): etano = 0.5, propano = 6.0, n-butano = 18.0, n-pentano = 30.0, n-hexano = 4.5.
- Condensador mixto: 15 Lbmol/h de destilado vapor y 5 Lbmol/h de destilado líquido.
- Enfriador interetapas en la etapa 3. Se eliminan 200000 Btu/h
- Extracción de corriente líquida lateral en el piso 3 de 3 Lbmol/h
- Extracción de corriente vapor lateral en el piso 13 de 37 Lbmol/h

## SOLUCIONES

COL1

$N_{\min}=11.72$ ,  $R_{\min}=0.901$

COL2

$N=26$

Alimento: piso 13

$D = 59.9$  kmol/h a  $77^{\circ}\text{C}$  y B a  $153.5^{\circ}\text{C}$

COL3  $N=14$

Alimento piso 11

$R=2.336$

COL4

Gas agotado: 83.8% C1, 8.4% C2, 4.76% C3, ...

COL5

Con 122 kmol/h de vapor: 0.36 kmol/h nC5

Solución 12158 kmol/h (con controlador)

COL6

$D = 48.9$  Lbmol/h con  $x_{C_2} = 0.10$  (molar) y  $T = 72^{\circ}\text{C}$

COL7

$D = 96.1\%$  nC4, producto 1: 96.7% nC5, producto 2: 83% de nC6 y B = 89.8% nC8

COL8

$D = 102.99$  kmol/h a  $108.4^{\circ}\text{F}$  y B a  $305.2^{\circ}\text{F}$

COL9

4025 kmol/h

COL10

gas (kmol/h):  $N=36.3$ ,  $O=9.1$ ,  $\text{HCl}=0.0001$ ,  $W=7.74$

COL11.

¡Ojo! Comprueba bien la temperatura a la que la corriente recirculada se devuelve a la columna

COL12

Residuo 24.96 kmol/h de agua, 1.65 de etanol y pequeñas cantidades de acético y acetato de etilo.

## Problemas a resolver con la base de datos de Chemcad

1. Selecciona un compuesto cualquiera de la base de datos de ChemCAD y visualiza sus propiedades mediante los siguientes comandos:

- Comp/Databank/View-Edit
- Comp/Databank/BIPs
- Comp/Databank/UNIFAC BIPs
- Reports
- Plot Properties

2. Introduce un componente nuevo mediante el comando Comp/Databank/New comp. Cambia e introduce datos para dicho componente. Elimínalo de la lista de componentes.

3. Modifica los datos existentes para un componente de la base de datos, mediante las opciones de:

1. Copiarlo
2. Cambiar los datos
3. Salir y editarlo
4. borrarlo

4. Obtén los parámetros binarios del modelo UNIQUAC para el cálculo del equilibrio líquido-líquido de un sistema ternario o cuaternario por regresión de los datos experimentales de equilibrio.

5. Obtén los parámetros binarios del modelo NRTL para el cálculo del equilibrio líquido-vapor de un sistema binario por regresión de los datos experimentales de equilibrio.

6 (DAT4). Propón una configuración para una columna de rectificación capaz de separar la siguiente mezcla, cuya composición se da en forma de curva de destilación. Se desea obtener como destilado una fracción de punto de ebullición inferior a 180°F. Como agente de calefacción se utiliza vapor directo. La columna ha de operar a 5 atm.

<u>Componente</u>	<u>% volumen</u>
Agua	
Metano	0.1
Etano	0.15
Propano	0.9
Iso-butano	0.4
n-butano	1.6
iso-pentano	1.2
n-pentano	1.7
resto: representado por su curva de destilación	

Densidad específica (grados Api): 31.4



<u>% destilado</u>	<u>T(°F)</u>
6.8	130
10	180
30	418
50	650
62	800
70	903
76	1000
90	1255

<u>% volumen</u>	<u>densidad especifica (grados Api)</u>
5	90
10	68
15	59.7
20	52
30	42
40	35
45	32
50	28.5
60	23
70	18
80	13.5

Los pseudocomponentes a definir en cada fracción son:

<u>Intervalo de T</u>	<u>Nº de pseudocomponentes</u>
50-150°F	4
150-550°F	16
550-750°F	4
750-1250°F	5

Como vapor de calefacción se utiliza vapor saturado a la presión de operación de la columna.

## Problemas correspondientes a procesos industriales

### **ABS1. PROCESO DE ABSORCIÓN-DESORCIÓN DE H<sub>2</sub>S (AGENTE DE ABSORCIÓN: AGUA)**

Se dispone de una corriente de aire que contiene un 5% en peso de H<sub>2</sub>S, a 150°C y 1 atm, y se desea separar, por absorción con agua, en una corriente de aire, prácticamente exento de H<sub>2</sub>S, y en otra de H<sub>2</sub>S, con menos del 2% de agua.

Para ello se utilizarán dos torres de absorción, con 10 pisos cada una: en la primera columna, el H<sub>2</sub>S es eliminado por absorción con agua, y en la segunda se desorbe.

La corriente de agua fría procedente de la primera columna, antes de ser introducida en la segunda columna, intercambia calor con el agua caliente procedente de la segunda columna, que, a su vez, se retorna a la primera para ser utilizada como absorbente.

Calcula los caudales y las condiciones de operación para tratar 100 kg/h de alimento.

### **ABS2. PROCESO DE ABSORCIÓN-DESORCIÓN DE H<sub>2</sub>S (AGENTE DE ABSORCIÓN: MONOETANOLAMINA)**

Se dispone de una corriente de aire que contiene un 5% en peso de H<sub>2</sub>S, a 150°C y 1 atm, y se desea separar, por absorción con monoetanolamina (MEA), en una corriente de aire, prácticamente exento de H<sub>2</sub>S, y en otra de H<sub>2</sub>S, con menos del 2% de MEA.

Para ello se utilizarán dos torres de absorción, con 10 pisos cada una: en la primera columna, el H<sub>2</sub>S es eliminado por absorción con MEA y en la segunda se desorbe.

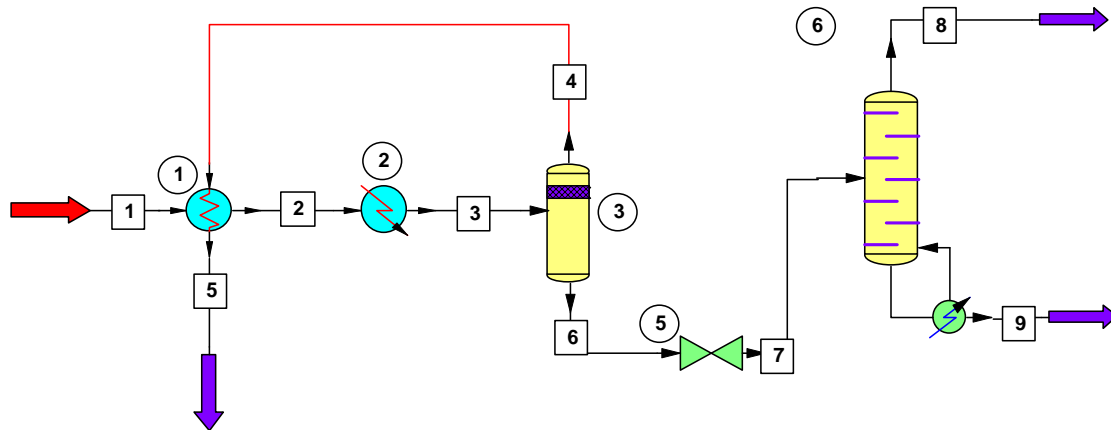
La corriente de MEA fría procedente de la primera columna, antes de ser introducida en la segunda columna, intercambia calor con la MEA caliente procedente de la segunda columna, que, a su vez, se retorna a la primera para ser utilizada como absorbente.

Calcula los caudales y las condiciones de operación para tratar 100 kg/h de alimento.

EST

### PLANTA ESTABILIZADORA DE CONDENSADO

Simula la siguiente operación para la estabilización de una corriente de condensado (1) procedente de otra sección de la planta:



La corriente 1 se encuentra a 75°F y 200 psia y su composición es la siguiente:

Componente	Caudal (lbmol/h)
N <sub>2</sub>	100.2
CH <sub>4</sub>	4505.5
C <sub>2</sub> H <sub>6</sub>	514.0
C <sub>3</sub> H <sub>8</sub>	214.0
i-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	19.2
n-C <sub>4</sub> H <sub>10</sub>	18.2
i-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	26.4
n-C <sub>5</sub> H <sub>12</sub>	14.0
n-C <sub>6</sub> H <sub>14</sub>	14.0

Dicha corriente 1 se enfría en el intercambiador de calor 1, y en el intercambiador de calor 2 se enfría todavía más, hasta conseguir una temperatura tal que se obtenga una mezcla parcialmente vaporizada apropiada para el funcionamiento de la planta. Se estima que la pérdida de presión en cada intercambiador es de 5 psia.

La condición térmica de la corriente 3 debe ser tal que en el separador de fases 3 se genere un vapor cuya temperatura de rocío a cualquier presión sea igual o menor que 25°F, ya que va a actuar como fluido de refrigeración en el intercambiador 1, dando como producto la corriente 5.

El líquido procedente de la cámara flash (corriente 6) se expande hasta 125 psia en la válvula 4, para dar la corriente 7, que se alimenta a una columna de

destilación, de la que se desea extraer un producto de cola, que es el condensado estabilizado deseado, que no debe contener más de un 1% de propano.

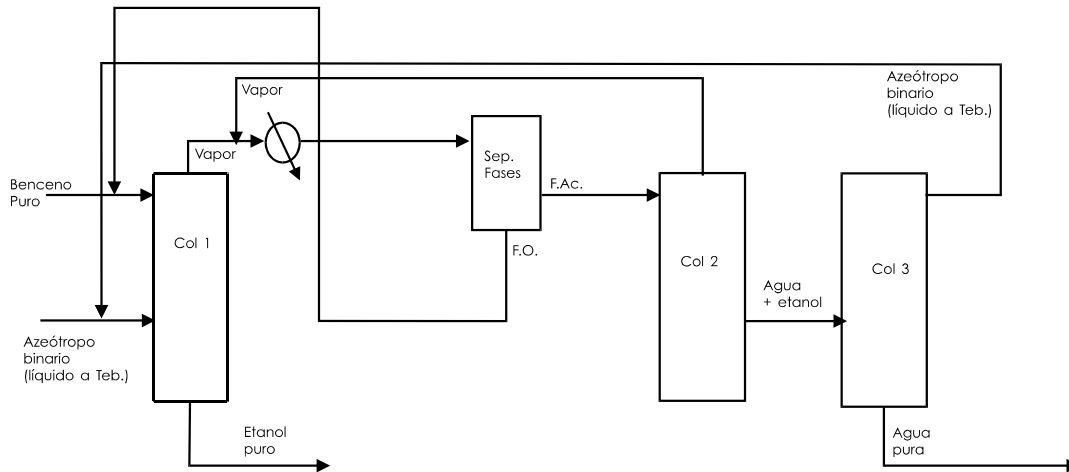
Otros datos de interés:

- El intercambiador de calor 2 funciona con propano como refrigerante, que proporciona un enfriamiento isoterma a  $-20^{\circ}\text{C}$ .
- Se dispone de vapor a 150 psia.
- El estabilizador usa pisos de válvulas.
- La presión de salida de la válvula 4 es de 125 psia.
- En la columna 5:
  - Presión de cabeza= 125 psia
  - Pérdida de presión en la columna = 5 psia
  - Número de pisos = 12
  - No hay condensador
  - Se desea 30 lbmol/h de producto de colas
  - El residuo ha de contener menos de 1% de propano.

## **ETANOL. OBTENCIÓN DE ETANOL PURO POR DESTILACIÓN AZEOTRÓPICA HETEROGÉNEA**

El agua y el etanol forman un azeótropo binario mínimo que contiene 95.6% en peso de alcohol, y que hierve a  $78.17^{\circ}\text{C}$  (a 101 kPa). Por consiguiente, es imposible obtener etanol absoluto ( $T_{\text{eb}} = 78.40^{\circ}\text{C}$ ) por destilación ordinaria. La adición de ciertos disolventes, como el benceno, a la mezcla alcohol-agua, da lugar a un heteroazeótropo ternario que tiene temperatura de ebullición mínima, cuyas composiciones en peso son 18.5% de alcohol, 74.1% de benceno y 7.4% de agua. Al condensar, el heteroazeótropo ternario se separa en dos fases líquidas: una capa inferior de 14.5% de alcohol, 84.5% de benceno y 1% de agua, y una capa superior de 53% de alcohol, 11% de benceno y 36% de agua, estando todas las composiciones expresadas en peso.

En una operación de destilación azeotrópica heterogénea de etanol, la capa rica en benceno se devuelve a la columna de destilación como reflujo. La otra capa se trata posteriormente por destilación para recuperar y recircular el alcohol y el benceno. El alcohol absoluto, que tiene una temperatura de ebullición superior a la del azeótropo, se separa por el fondo de la columna. En la siguiente figura se representa esquemáticamente el proceso descrito:



Calcula los caudales y las condiciones de operación para tratar 100 kg/h de alimento.

ConcAcH

## COMPARACIÓN DE TRES PROCESOS PARA CONCENTRAR ÁCIDO ACÉTICO

Se desea comparar la eficacia de tres procesos para concentrar una disolución acuosa de ácido acético, a 20°C, desde un 25.6% hasta un 99.5%. Las tres alternativas son:

- destilación azeotrópica con acetato de isopropilo. El vapor de cabeza de esta columna se ha de condensar y se recircula, al primer piso de la columna, la fase orgánica obtenida. El ácido acético se obtiene como residuo de esta columna.
- extracción continua en contracorriente con metilisobutilcetona, seguida de destilación del extracto a presión atmosférica (el disolvente recuperado ha de tener un máximo del 0.001% de ácido). El refinado obtenido ha de estar prácticamente exento de ácido acético. En la columna de rectificación se obtiene como destilado el disolvente recuperado, que se recircula a la columna de extracción y como residuo el ácido acético concentrado.
- Mismo proceso que b), pero con isopropil éter como disolvente.

La columna de destilación disponible está provista de 35 pisos (34 más la caldera). La columna de extracción está provista de un relleno cuya altura total puede considerarse equivalente a 15 etapas teóricas.