



OBJETIVO

Familiarizarse con los módulos de destilación en estado estable disponibles en CHEMCAD, en particular la diferencia entre métodos cortos y métodos rigurosos.

INTRODUCCIÓN

CHEMCAD proporciona varios módulos para simular torres de destilación operando en estado estable. El más simple, denominado "Shortcut column" es el único que no efectúa cálculos rigurosos etapa por etapa. Los tres métodos rigurosos se denominan "Tower", "Tower Plus", y "SCDS" (Simultaneous Correction Distillation).

- **Shortcut column:** Usa el método de Fenske-Underwood-Gilliland para simular una columna de destilación simple con una entrada y dos salidas (destilado y fondos). Es el único método que puede efectuar cálculos de diseño (Design) y de operación (Rating). En modo de diseño, se especifican condiciones de las corrientes de producto y el módulo estima el número de platos y el plato de alimentación necesarios para alcanzar dicha separación. En el modo de operación, el número de platos y el plato de alimentación deben ser especificados, y las composiciones y flujos de los productos serán calculadas. No se debe usar para sistemas que formen azeótropos.
- **Tower:** Método riguroso "de adentro hacia afuera" (inside-out). Este módulo proporciona algunas configuraciones habituales de columnas de destilación, con un máximo de 5 entradas de alimentación y 4 productos laterales. También puede simular otros equipos de separación líquido-vapor por etapas, como columnas de absorción y de desorción. La convergencia se alcanza más rápidamente que con el método SCDS.
- **Tower Plus:** Básicamente el mismo que "Tower", pero permite simular configuraciones más complejas como columnas que incluyen intercambiadores de calor laterales, bombeo de líquido de un plato a otro, y columnas laterales de rectificación.
- **SCDS:** Método riguroso de correcciones simultáneas. Es el único que puede manejar eficiencias de Murphee menores al 100%, pero también es el que requiere mayor tiempo de computación y es el más difícil de converger. Puede simular destilación con dos o tres fases; si existen tres fases, el usuario tiene la opción de decantar una de las fases líquidas en el condensador y recircular la otra fase líquida. Es también el único que puede manejar adecuadamente mezclas reaccionantes en la columna.

Condiciones especiales que requieren el uso de un modelo en particular	Modelo requerido
Rectificadores laterales y/o bombeo de líquido de un plato a otro	Tower Plus
Especificación de las condiciones en un plato	Tower, Tower Plus
Eficiencia de plato menor al 100%	SCDS
Uso de un modelo de transferencia de masa (columna de platos o empacada)	SCDS
Destilación reactiva	SCDS

NOTA: En la especificación del condensador para los modelos rigurosos, la opción de especificar la relación de reflujo aparece incorrectamente como R/D. Lo correcto sería R o L_1/D .



EJERCICIO

1000 kmol/h de una mezcla de xilenos y otros compuestos aromáticos es separada en una columna de destilación operando aproximadamente a presión atmosférica. Las condiciones de alimentación son 150°C y 1.25 bar, con composición mostrada en la siguiente tabla:

Componente	T_B [°C]	x_F	% deseado de recuperación en destilado
etilbenceno	136.2	0.054	
p-xileno	138.5	0.221	
(clave ligero) m-xileno	139.1	0.488	99.0
(clave pesado) o-xileno	144.4	0.212	3.8
n-propilbenceno	159.3	0.025	

Referencia: McCabe, Smith, and Harriott, *Unit Operations of Chemical Engineering*, 5th Edition, McGraw-Hill, p. 612.

PARTE 1: DISEÑO PRELIMINAR USANDO EL MÉTODO CORTO

1. Usando una columna "Shortcut", estimar por prueba y error la relación de reflujo R/Rmin necesaria para lograr la separación usando 100 platos ideales, de acuerdo a las especificaciones mostradas en la tabla de arriba. La información obtenida de esta simulación se utilizará para la segunda parte del ejercicio.

PARTE 2: EVALUACIÓN DE LA OPERACIÓN DE UNA COLUMNA USANDO MÉTODOS RIGUROSOS

Ya que la información de la simulación anterior va a ser necesaria para esta segunda parte, es conveniente iniciar una segunda sesión con CHEMCAD.

1. En otra simulación, usar una columna "Tower" y especificar 100 platos, usando el plato de alimentación de acuerdo a la información obtenida en la parte 1 del ejercicio. Para especificar los balances de masa, fijar la relación de reflujo (para el condensador) y el flujo total molar (para el hervidor) de acuerdo también a las especificaciones obtenidas en la parte 1. Datos adicionales que sean necesarios como aproximaciones iniciales pueden ser proporcionados también a partir de la información de la parte 1.
2. Correr la simulación y obtener la composición molar tanto del destilado como de los fondos. Calcular también la fracción de los componentes clave ligero y pesado que sale en el destilado.
3. Repetir en otra simulación, usando en este caso una columna "SCDS". Especificar el modelo de simulación de transferencia de masa en columnas de platos ("Tray column mass transfer") y una eficiencia de plato de Murphee de 65% (constante en la columna). Aparecerá luego una segunda ventana para especificar las características de los platos. Especificar platos de campana de burbujas de un solo paso, usando el modelo de Chan-Fair, y con una sola sección en la columna de 0.75 m de diámetro.

Con la información obtenida en estas dos partes, llenar las tablas de la página siguiente.



SHORTCUT COLUMN		
Componente	Composición Fondos x_B [mol %]	Composición Destilado x_D [mol %]
Etilbenceno		
p-xileno		
m-xileno (CL)		
o-xileno (CP)		
n-propilbenceno		
Calor removido en el condensador (MJ/h):		
Calor requerido en el hervidor (MJ/h):		
Fracción recuperada de componente clave ligero en el destilado (moles de CL en D / moles de CL en F):		
Fracción recuperada de componente clave pesado en el destilado (moles de CP en D / moles de CP en F):		

TOWER COLUMN		
Componente	Composición Fondos x_B [mol %]	Composición Destilado x_D [mol %]
Etilbenceno		
p-xileno		
m-xileno (CL)		
o-xileno (CP)		
n-propilbenceno		
Fracción recuperada de componente clave ligero en el destilado (moles de CL en D / moles de CL en F):		
Fracción recuperada de componente clave pesado en el destilado (moles de CP en D / moles de CP en F):		

SCDS COLUMN		
Componente	Composición Fondos x_B [mol %]	Composición Destilado x_D [mol %]
Etilbenceno		
p-xileno		
m-xileno (CL)		
o-xileno (CP)		
n-propilbenceno		
Fracción recuperada de componente clave ligero en el destilado (moles de CL en D / moles de CL en F):		
Fracción recuperada de componente clave pesado en el destilado (moles de CP en D / moles de CP en F):		



GENERAL GUIDELINES FOR DISTILLATION

(From the CHEMCAD online help)

A. Degrees of freedom

All CHEMCAD rigorous distillation models require that you specify the number of trays, pressure profile, and all input streams. These specifications are enough to completely define all outputs from a simple absorber or stripper with no external heat loads and no side draws. In other words, the algorithm contains as many independent equations as there are unknowns, such that there are no remaining DEGREES OF FREEDOM. Each degree of freedom allows the user to specify an independent variable such as reflux ratio, heat load or component flow or fraction.

Each reboiler, condenser or side exchanger adds one degree of freedom to the column. Each side draw adds one degree of freedom. Each pumparound adds two degrees of freedom because the draw and return trays are different and the pumparound heat exchanger modifies the thermal condition of the return stream. A side stripper adds two degrees of freedom but CHEMCAD requires the user to define the stripper heat source, leaving one degree of freedom for the user.

B. Choosing specifications

As a general rule, the preferred specifications are those with the widest possible range. With such specs, the user is less likely to violate acceptable limits. For example, reflux ratios may theoretically vary from zero (no reflux) to infinity (total reflux). On the other hand, the temperature of a pure component is a point function. Both experience and intuition indicate that ease of convergence is proportional to the range of the specification chosen. Unfortunately, the acceptable spec. range is not always obvious and may vary with column configuration and pressure.

When the goals of the simulation demand the use of a narrow-range specification, it is possible to define the acceptable range by varying reflux ratio and noting the change in the desired specification. If the desired spec. cannot be achieved within the envelope of a very low and very high reflux ratio, it may be necessary to reconfigure the column, change the pressure or look for errors in the thermodynamic models.

C. Initializing difficult columns

Difficult columns can usually be initialized by arbitrarily choosing wide-range variables that are more likely to converge, providing a feasible path to the required solution. Starting from a converged solution (set initial flag=1), it is much more likely that the column will converge to the required specifications. For example, a standard column with reboiler and condenser can usually be converged by setting the reflux ratio, R/D, and bottoms flow. R/D is a preferred spec. because most values are acceptable and a fixed value stabilizes the vapor-liquid traffic in the column, which, in turn, stabilizes the temperature profile and K values. Similarly, bottoms flow is easily estimated from feed flow and purity requirements and stabilizes the overall material balance. Restarting from the converged "startup" profile, the column can usually be converged to component purity or other legitimate specs.

D. Estimations

Suitable estimations will often provide a better starting profile than the algorithm itself. However, since the algorithm always preferentially uses input estimates to initialize its profile, they should be well considered in advance. In general, no estimates are better than poor estimates. The following may be helpful:

- Temperatures may be estimated by synthesizing the expected overhead and bottom products and calculating bubble points.
- Overhead flow may be estimated from the expected product flow.
- Reflux flow may be estimated from the expected reflux ratio and product flow.

E. Damping factor

In the TOWR (inside-out) program, the damping factor may be used to minimize the effect of strong variations in the K-factor calculations. The value defaults to 1 and may be varied between 0 and 1.0 to bisect or average K values between global iterations within the algorithm. Low damping factors (0.2-0.5) minimize K-value oscillation but cannot make up for unrealistic or out-of-bounds specifications.

A similar damping effect can be achieved in SCDS by arbitrarily reducing the stage efficiency. This has the effect of minimizing K-value changes, allowing the material balance and concentration profiles to converge. This approach should not be used with concentration specifications since an inefficient column is less likely to be able to make such specs. With the concentration profile stabilized, the column can usually be "relaxed" to the required efficiency in one or more steps. This procedure is built into the SCDS damping factor.