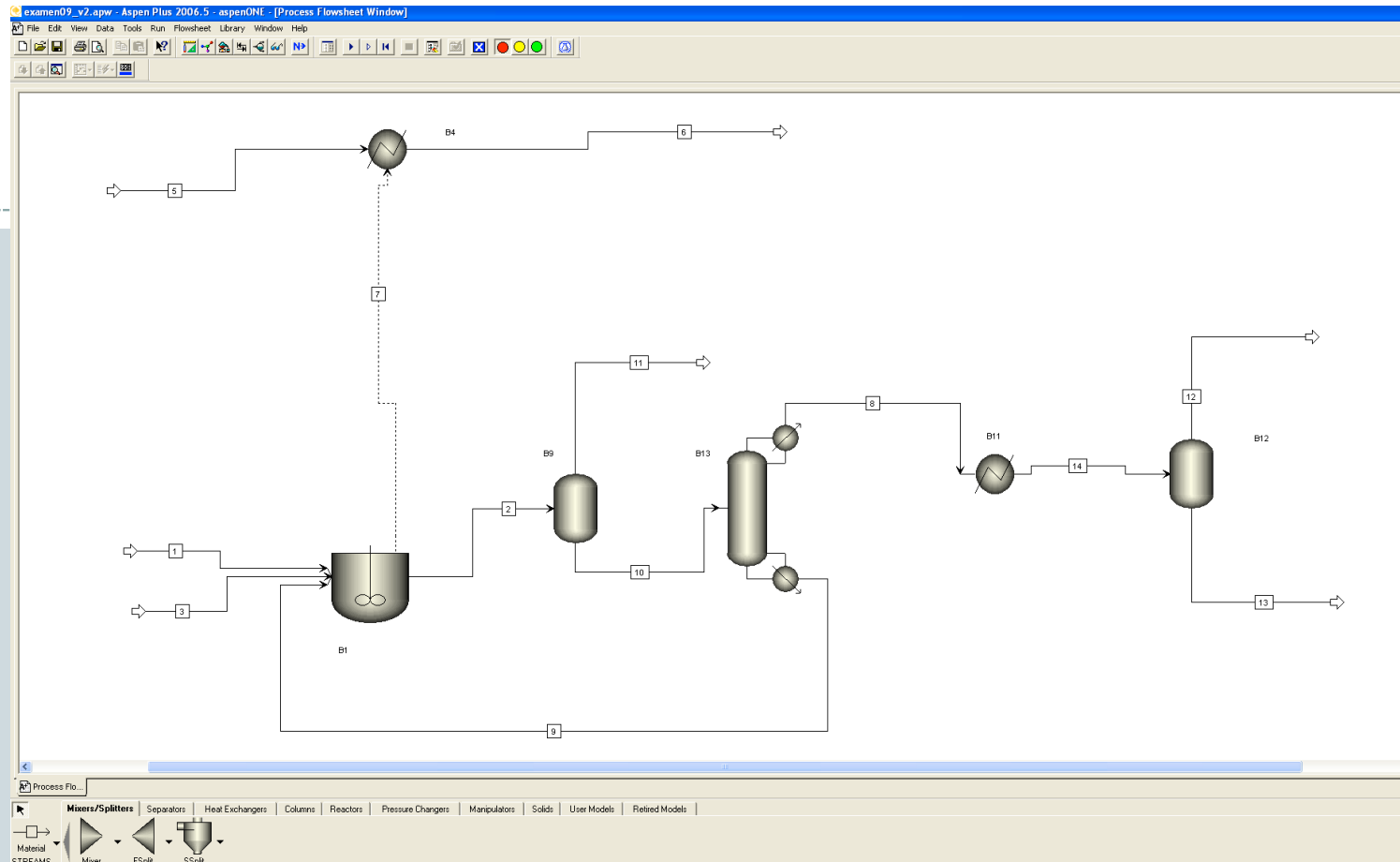


Examen de Simulación estacionaria Abril 2009



Especificar componentes y propiedades físicas.

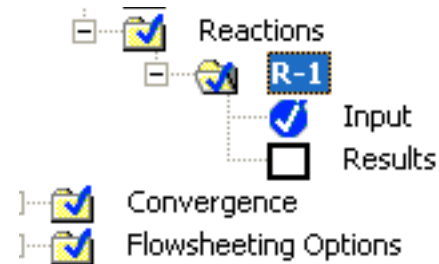
Selection | Petroleum | Nonconventional | Databanks

Define components

	Component ID	Type	Component name	Formula
▶	ANILINA	Conventional	ANILINE	C6H7N-1
	HIDROGEN	Conventional	HYDROGEN	H2
	CYCLOHEX	Conventional	CYCLOHEXYLAMINE	C6H13N-D1
	WATER	Conventional	WATER	H2O
*				

✓Stoichiometry ✓Kinetic Equilibrium Activity

Rxn No.	Reaction type	Stoichiometry
1	Kinetic	ANILINA + 3 HIDROGEN -> CYCLOHEX



✓Stoichiometry ✓Kinetic Equilibrium Activity

1) ANILINA + 3 HIDROGEN -> CYCLOHEX

Reacting phase: Liquid Rate basis: Reac (vol)

Power Law kinetic expression
 Kinetic factor= $k(T/T_0)^n e^{-E/R} [1/T - 1/T_0]$

k: 20000
 n: 0
 E: 11111 cal/mol
 To: F
 [C] basis: Molarity

Edit reactions
 Solids

Especificar la reacción. No olvidar:

- La/s fases en que tiene lugar la reacción
- Poner el orden de la reacción

Edit Reaction

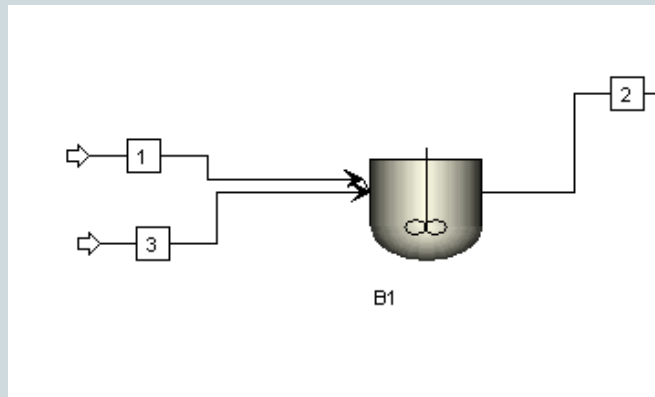
Reaction No.: 1 Reaction type: Kinetic

Reactants			Products		
Component	Coefficient	Exponent	Component	Coefficient	Exponent
ANILINA	-1	1	CYCLOHEX	1	
HIDROGEN	-3	1	*		
*					

Next Close

Lets you select the reaction type.

Especificar el reactor, indicando las reacciones (R-1) que tienen lugar.
Mirar también las fases que se indican como válidas (ante la duda dejar L-V)



Specifications | Streams | **Reactions** | PSD | Component Attr. | Utility | Catalyst

Operating conditions:
Pressure: 595 psi
Temperature: 250 F

Holdup:
Valid phases: Vapor-Liquid
Specification type: Reactor volume

Reactor:
Volume: 1100 cuft
Res. time: hr

Phase:
Phase: Condensed phase
Volume: 960 cuft
Volume frac:
Residence time: hr

Specifications | Streams | **Reactions** | PSD | Component Attr. | Utility | Catalyst

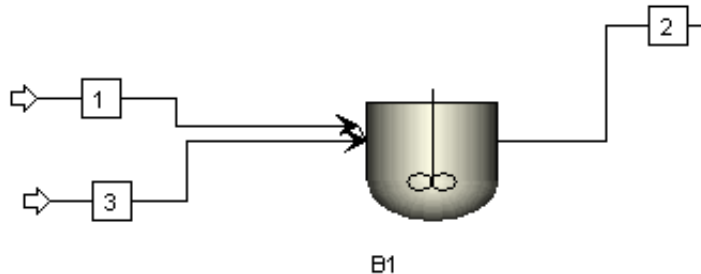
Select reaction sets to be included in the model

Available reaction sets

Selected reaction sets:
R-1

Realizar análisis de sensibilidad:

- Definir alguna variable característica del reactor
- Variar la temperatura de reacción
- Tabular las variables de las que se quiera ver la evolución.



Define

Vary

Tabulate

Fortran

Declarations

Optional

Cases

Flowsheet variable	Definition
SCHA	Mole-Flow Stream=13 Substream=MIXED Component=CYCLOHEX Units=lbmol/hr
XCHA	Mole-Frac Stream=13 Substream=MIXED Component=CYCLOHEX
SH2	Stream-Var Stream=12 Substream=MIXED Variable=MOLE-FLOW Units=lbmol/hr
S2	Stream-Var Stream=2 Substream=MIXED Variable=MOLE-FLOW Units=lbmol/hr
S9	Stream-Var Stream=9 Substream=MIXED Variable=MOLE-FLOW Units=lbmol/hr
X9CHA	Mole-Frac Stream=9 Substream=MIXED Component=CYCLOHEX
DF	Block-Var Block=B13 Variable=D:F Sentence=COL-SPECS
*	

Define	✓ Vary	✓ Tabulate	Fortran	Declarations	Optional	Cases
Cases: ☐ Variable no: v ☐ Disable variable						
Manipulated variable Type: Block-Var Block: B1 Variable: TEMP Sentence: PARAM Units: F				Values for varied variable ☐ List of values ☒ Overall range Lower: 250 Upper: 450 #Point: 6 Incr: Report labels Line 1: Line 2: Line 3: Line 4:		

✓ Define

✓ Vary

✓ **Tabulate**

Fortran

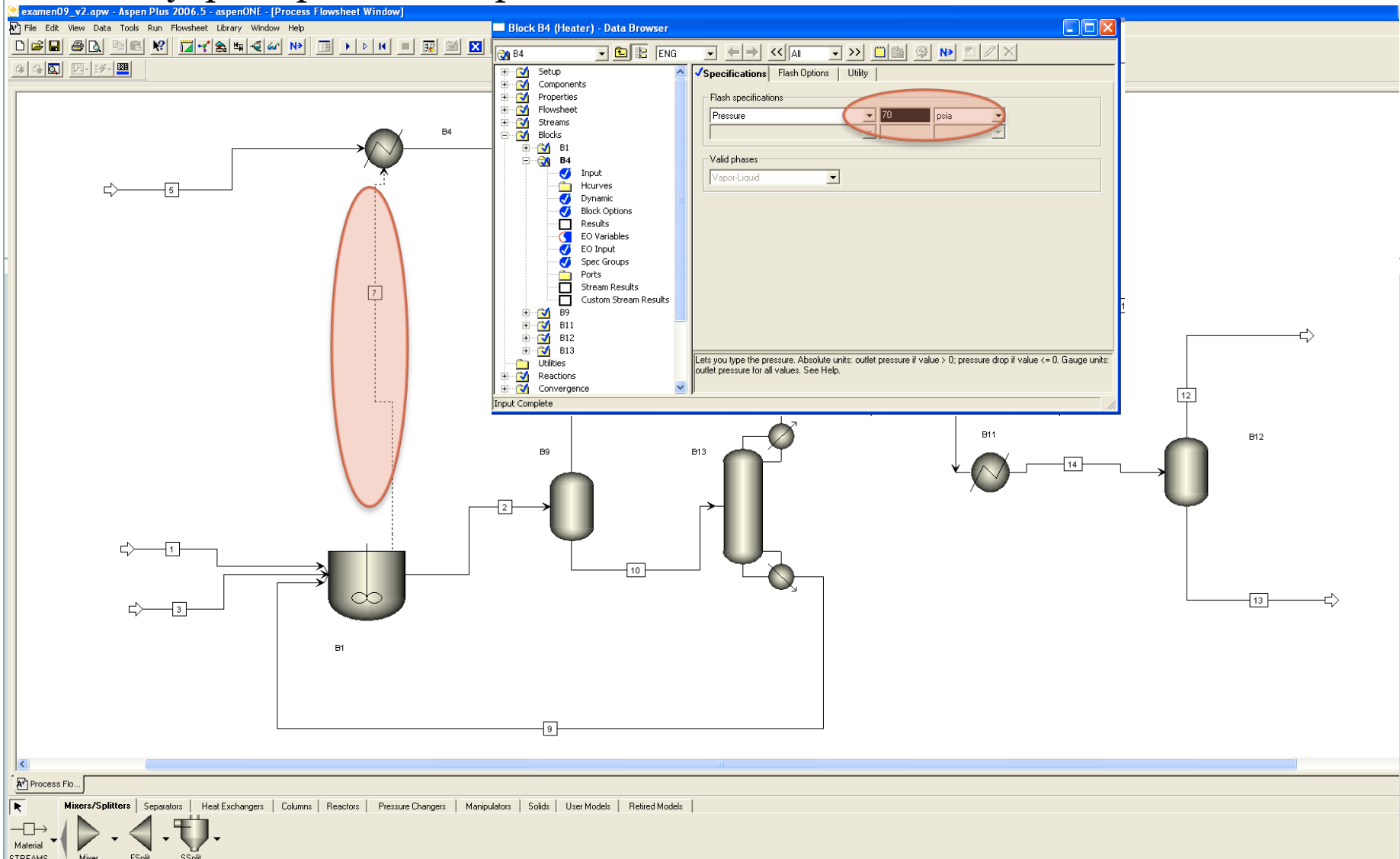
Declarations

Optional

Cases

Column No.	Tabulated variable or expression
1	SCHA
2	XCHA
3	SH2
4	S2
5	S9
6	X9CHA
7	DF
*	

El calor del reactor se aprovecha en el cambiador, luego sólo hay que especificar un parámetro de este.



Define Spec Vary Fortran Declarations EO Options

Flowsheet variable	Definition
TOUT	Stream-Var Stream=6 Substream=MIXED Variable=TEMP Units=F
*	

Se realiza un diseño de especificación:

Define Spec Vary Fortran Declarations EO Options

Design specification expressions

Spec: TOUT

Target: 170

Tolerance: 0,01

•Objetivo: temperatura de salida 170°

•Variando la cantidad de agua de refrigeración alimentada al cambiador.

Define Spec Vary Fortran Declarations EO Options

Manipulated variable

Type: Stream-Var

Stream: 5

Substream: MIXED

Variable: MOLE-FLOW

Units: lbmol/hr

Manipulated variable limits

Lower: 500

Upper: 8000

Step size:

Maximum step size:

Report labels

Line 1: Line 2: Line 3: Line 4:

EO input

Open variable:

Description:

Diseño de la columna de destilación

•Tener en cuenta que es multicomponente.

•Al calcular el recovery tener en cuenta que todo el H₂ se va por cabeza.

•Componente clave ligero: ciclohexilamina.

•Realizar el balance de materia suponiendo que no sale nada de anilina por cabeza. Esto nos los moles de ciclohexilamina en cabeza. Teniendo en cuenta estos y el hidrógeno tenemos la concentración máxima que se puede obtener por cabeza de ciclohexilamina (0,979).

•Escoger un bloque Sep2, poner los datos de separación. Se obtienen los moles de salida de cada corriente.

Specifications | Feed Flash | Outlet Flash | Utility

Substream: MIXED Outlet stream: 8

Stream spec: Split fraction

Component ID	1st Spec			2nd Spec	
ANILINA	Split fraction			Mole frac	
HIDROGEN	Split fraction	1		Mole frac	
► CYCLOHEX	Split fraction			Mole frac	0.979
WATER	Split fraction			Mole frac	

Specifications | Feed Flash | Outlet Flash | Utility

Substream: MIXED Outlet stream: 9

Stream spec: Split fraction

Component ID	1st Spec			2nd Spec	
ANILINA	Split fraction			Mole frac	0.998
HIDROGEN	Split fraction			Mole frac	
CYCLOHEX	Split fraction			Mole frac	
WATER	Split fraction	1		Mole frac	

Material | Vol. % Curves | Wt. % Curves | Petro. Curves | Poly. Curves

Display: Streams Format: GEN_E Stream Table

	10	8	9
Temperature F	250,0	250,0	250,0
Pressure psia	595,00	595,00	595,00
Vapor Frac	0,000	0,001	0,000
Mole Flow lbmol/hr	118,867	100,545	18,323
Mass Flow lb/hr	11473,136	9766,621	1706,629
Volume Flow cuft/hr	221,352	194,916	28,621
Enthalpy MMBtu/hr	-5,037	-5,444	0,400
Mole Flow lbmol/hr			
ANILINA	18,287	0,001	18,287
HIDROGEN	2,110	2,110	TRACE
CYCLOHEX	98,470	98,434	0,037
WATER			
Mole Frac			
ANILINA	0,154	14 PPM	0,998
HIDROGEN	0,018	0,021	TRACE
CYCLOHEX	0,828	0,979	0,002
► WATER			

Diseño de la columna de destilación

• Si se quiere tener (después de eliminar el hidrógeno) un 99% m en cabeza, se puede añadir algo de anilina, (máximo 0,01* moles de ciclohexilamina/0,99). Con esto se puede poner una concentración más baja en el Sep2.

• Ejecutar el Sep2 con los nuevos datos y los resultados se emplean para poner el recovery que pide el módulo DSTWU (seguir los pasos indicados en el ejercicio de modelado de una columna de destilación).

Specifications | Feed Flash | Outlet Flash | Utility

Substream: MIXED Outlet stream: 8

Stream spec: Split fraction

Component ID	1st Spec			2nd Spec	
ANILINA	Split fraction			Mole frac	
HIDROGEN	Split fraction		1	Mole frac	
▶ CYCLOHEX	Split fraction			Mole frac	0,964
WATER	Split fraction			Mole frac	

Nota

• Sabiendo el porcentaje de anilina respecto a la ciclohexilamina se puede hacer un balance que proporciona directamente la concentración de ciclohexilamina (96,4%)

$$F = B + D$$

$$F x_{F,C} = B * 0,002 + n_{D,C}$$

$$F x_{F,A} = B * 0,998 + n_{D,A}$$

$$n_{D,A} = 0,01 * n_{D,C} / 0,99$$

4 ecs, para 4 incógnitas ($n_{D,A}$, $n_{D,C}$, B, D)

Una vez resuelto calculamos la concentración:

$x_{D,C} = n_{D,C} / (n_{D,C} + n_{D,A} + n_{D,H})$ donde $n_{D,H}$ moles de hidrógeno es un dato conocido

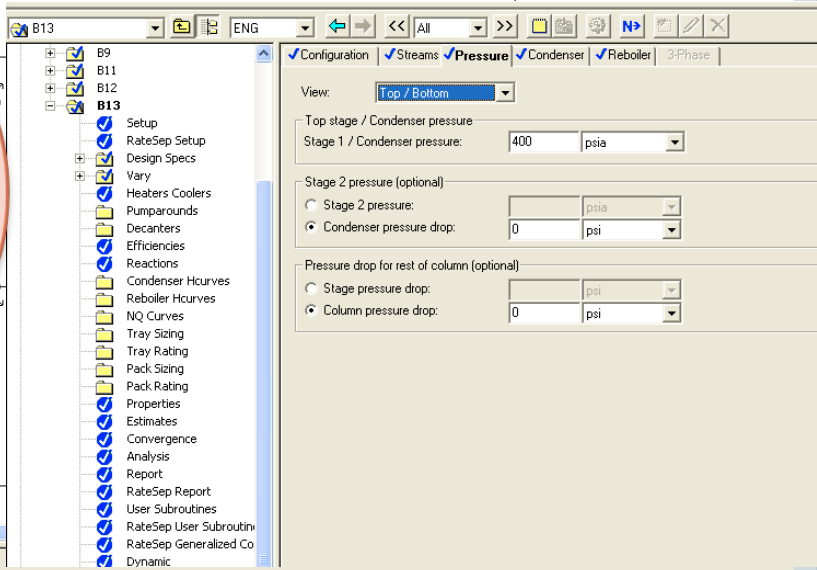
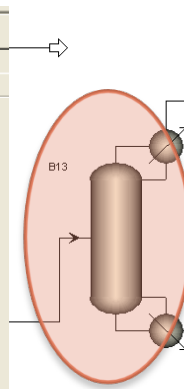
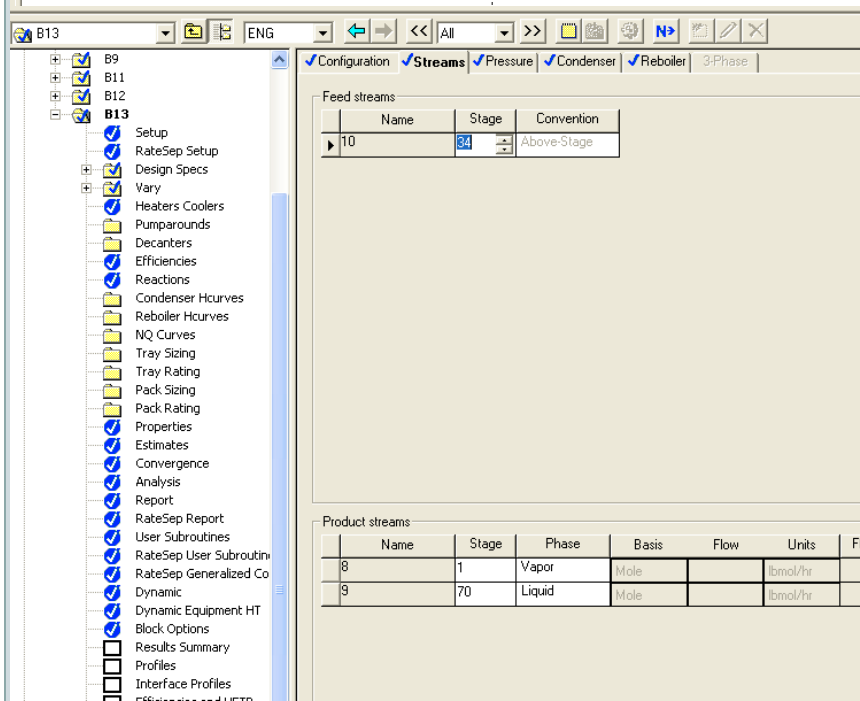
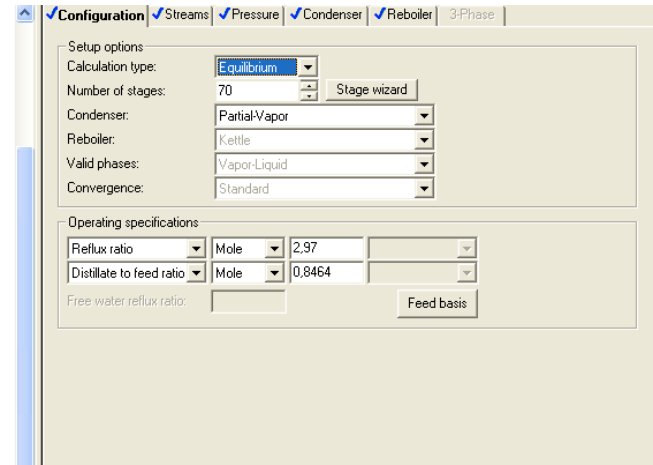
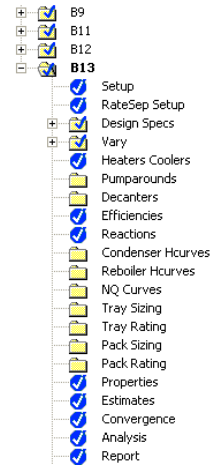
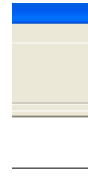
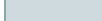
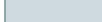
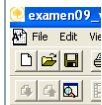
Material | Vol. % Curves | Wt. % Curves | Petro. Curves | Poly. Curves

Display: Streams Format: GEN_E Stream Table

	10	8	9
Temperature F	250,0	250,0	250,0
Pressure psia	595,00	595,00	595,00
Vapor Frac	0,000	0,001	0,000
Mole Flow lbmol/hr	117,699	100,447	17,250
Mass Flow lb/hr	11357,275	9750,423	1606,708
Volume Flow cuft/hr	218,924	194,035	26,946
Enthalpy MMBtu/hr	-4,938	-5,321	0,377
Mole Flow lbmol/hr			
ANILINA	18,752	1,534	17,216
HIDROGEN	2,082	2,082	TRACE
CYCLOHEX	96,866	96,831	0,035
WATER			
Mole Frac			
ANILINA	0,159	0,015	0,998
HIDROGEN	0,018	0,021	TRACE
CYCLOHEX	0,823	0,964	0,002
▶ WATER			

Condiciones de la columna de destilación

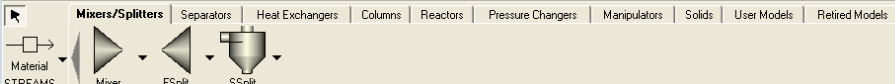
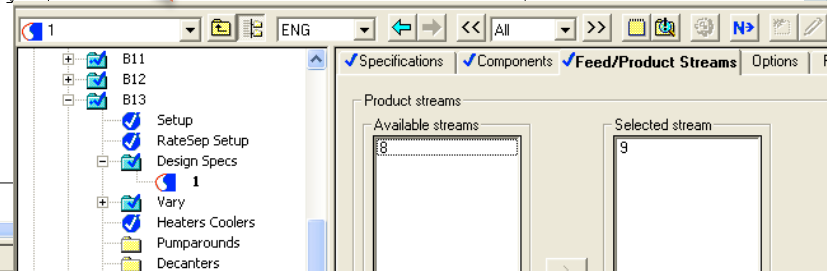
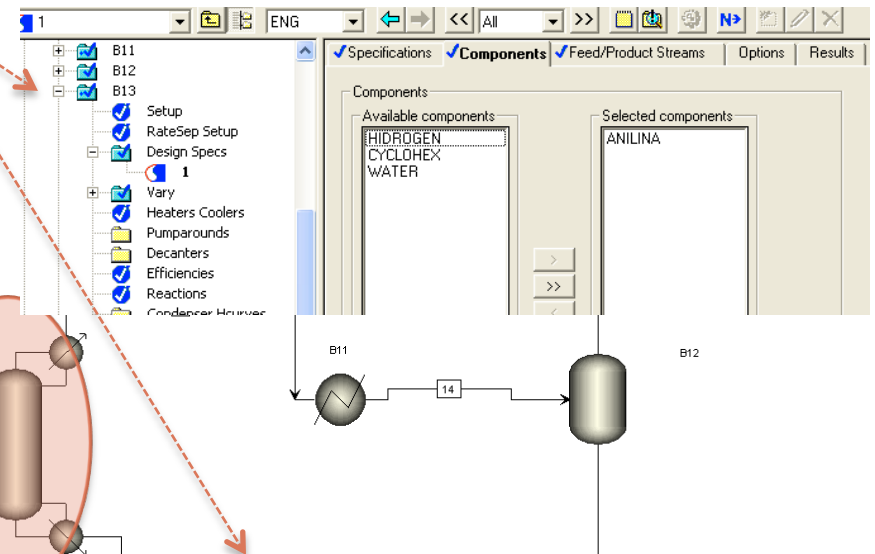
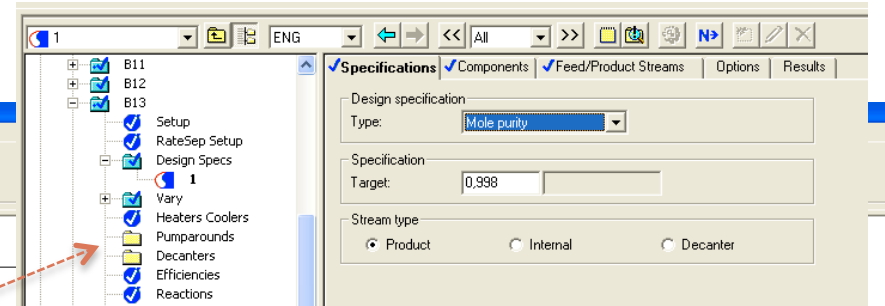
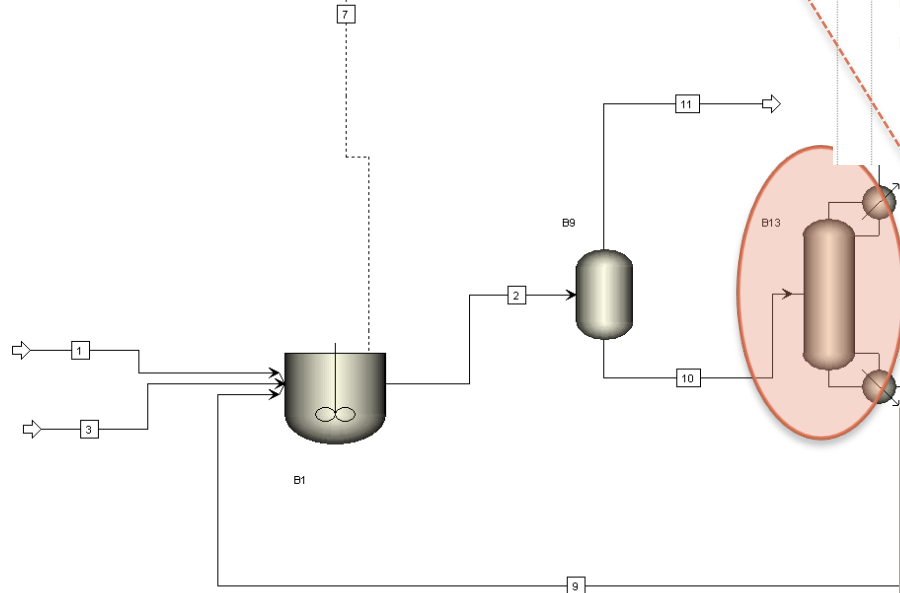
- Diseñada previamente con el bloque DSTWU.
- El destilado es vapor (hay incondensables)



models

Condiciones de la columna de destilación

- Hacer un diseño de especificación (dentro del menú de la columna) para obligar a la pureza del 98% en el fondo de anilina.



Define Spec Vary Fortran Declarations EO Options

Flowsheet variable	Definition
CHA	Mole-Frac Stream=13 Substream=MIXED Component=CYCLOHEX
*	

Design specification expressions

Spec: CHA

Target: 0.99

Tolerance: 0.0001

Define Spec Vary Fortran Declarations EO Options

Manipulated variable

Type: Block-Var

Block: B11

Variable: VFRAC

Sentence: PARAM

Manipulated variable limits

Lower: 0.01

Upper: 0.9

Step size:

Maximum step size:

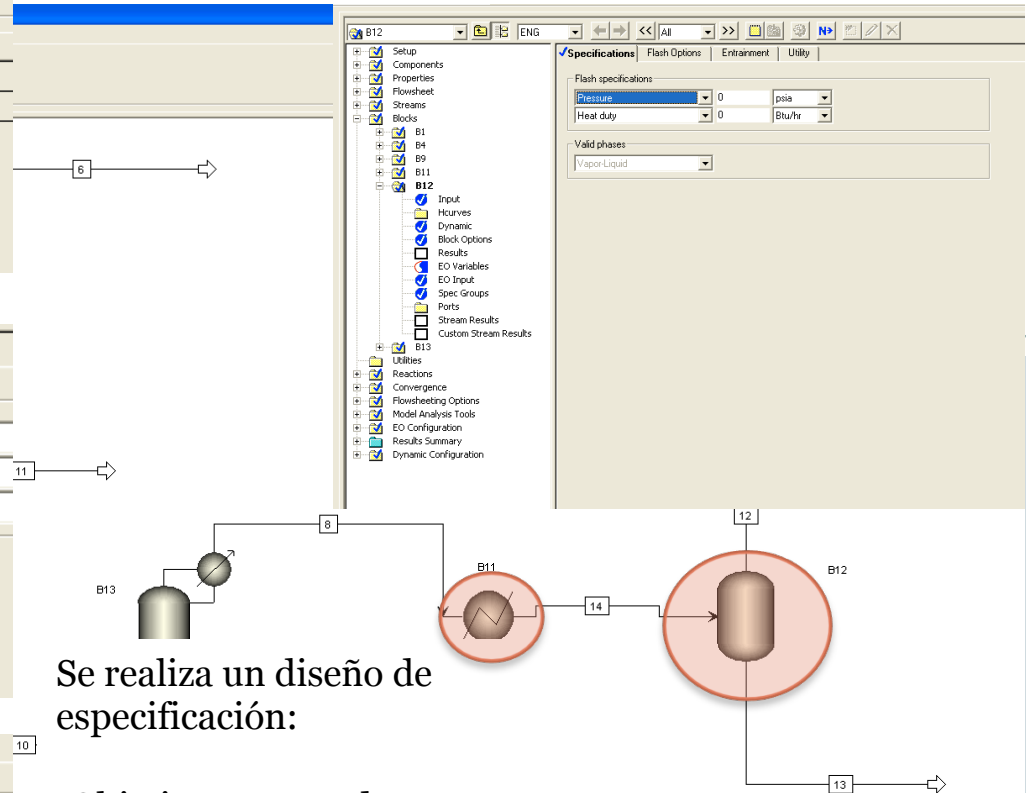
Report labels

Line 1: Line 2: Line 3: Line 4:

EO input

Open variable:

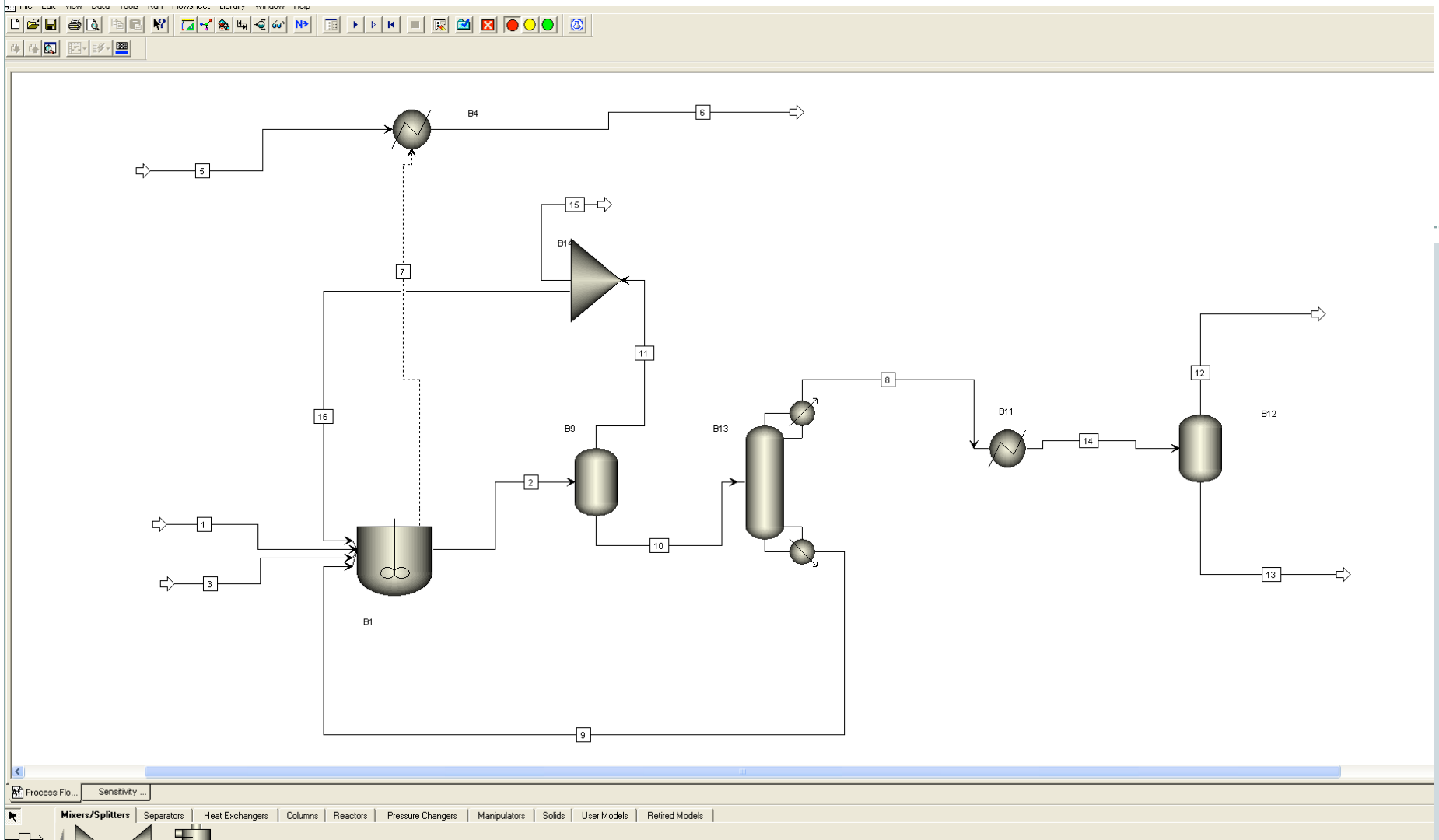
Description:



Se realiza un diseño de especificación:

- Objetivo: pureza de ciclohexilamina 99%_m
- Variando la temperatura o fracción de vapor del cambiador.
- No olvidar poner en el flash la especificación de Heat Duty (no temperatura)

Incluir el reciclo de una parte del H₂ separado



Flowsheet variable	Definition
S13	Stream-Var Stream=13 Substream=MIXED Variable=MOLE-FLOW Units=lbmol/hr
S12	Stream-Var Stream=12 Substream=MIXED Variable=MOLE-FLOW Units=lbmol/hr
S15	Stream-Var Stream=15 Substream=MIXED Variable=MOLE-FLOW Units=lbmol/hr
*	

☒ Define ☒ Vary ☒ Tabulate Fortran Declarations Optional Cases

Cases: ☐ Variable no: ☐ Disable variable

Manipulated variable
 Type:
 Block:
 Variable:
 Sentence:
 ID1:

Values for varied variable
☐ List of values
☒ Overall range
 Lower:
 Upper:
 #Point: Incr:

Report labels
 Line 1: Line 2:
 Line 3: Line 4:

Hacer un análisis de sensibilidad variando parte del H2 reciclado.

Column No.	Tabulated variable or expression
1	S13
2	S12
3	S15
*	

