Integración IV

Introducción a DWSIM

2018

Profesor: Dr. Nicolás J. Scenna
JTP: Dr. Néstor H. Rodríguez
Aux. 1ra: Dr. Juan I. Manassaldi

DWSIM Wiki

- DWSIM is an open-source CAPE-OPEN compliant chemical process simulator for Windows and Linux.
- DWSIM is built on top of the Microsoft .NET and Mono Platforms and features a Graphical User Interface (GUI), advanced thermodynamics calculations, reactions support and petroleum characterization / hypothetical component generation tools.
- DWSIM is able to simulate steady-state, vapor–liquid, vapor–liquid-liquid, solid–liquid and aqueous electrolyte equilibrium processes.

DWSIM Wiki

- Thermodynamic models:
  - PC-SAFT, FPROPS
  - CoolProp
  - Peng–Robinson
  - Peng–Robinson-Stryjek-Vera (PRSV2)
  - Soave–Redlich–Kwong
  - Lee-Kesler
  - Lee-Kesler-Plöcker
  - UNIFAC(-LL)
  - Modified UNIFAC (Dortmund)
  - Modified UNIFAC (NIST)
  - UNIQUAC
  - NRTL
  - COSMO-SAC
  - Chao-Seader
  - Grayson-Streed
  - Extended UNIQUAC
  - Raoult's Law
  - IAPWS-IF97 Steam Tables
  - IAPWS-08 Seawater
  - Black-Oil
  - Sour Water

DWSIM Wiki

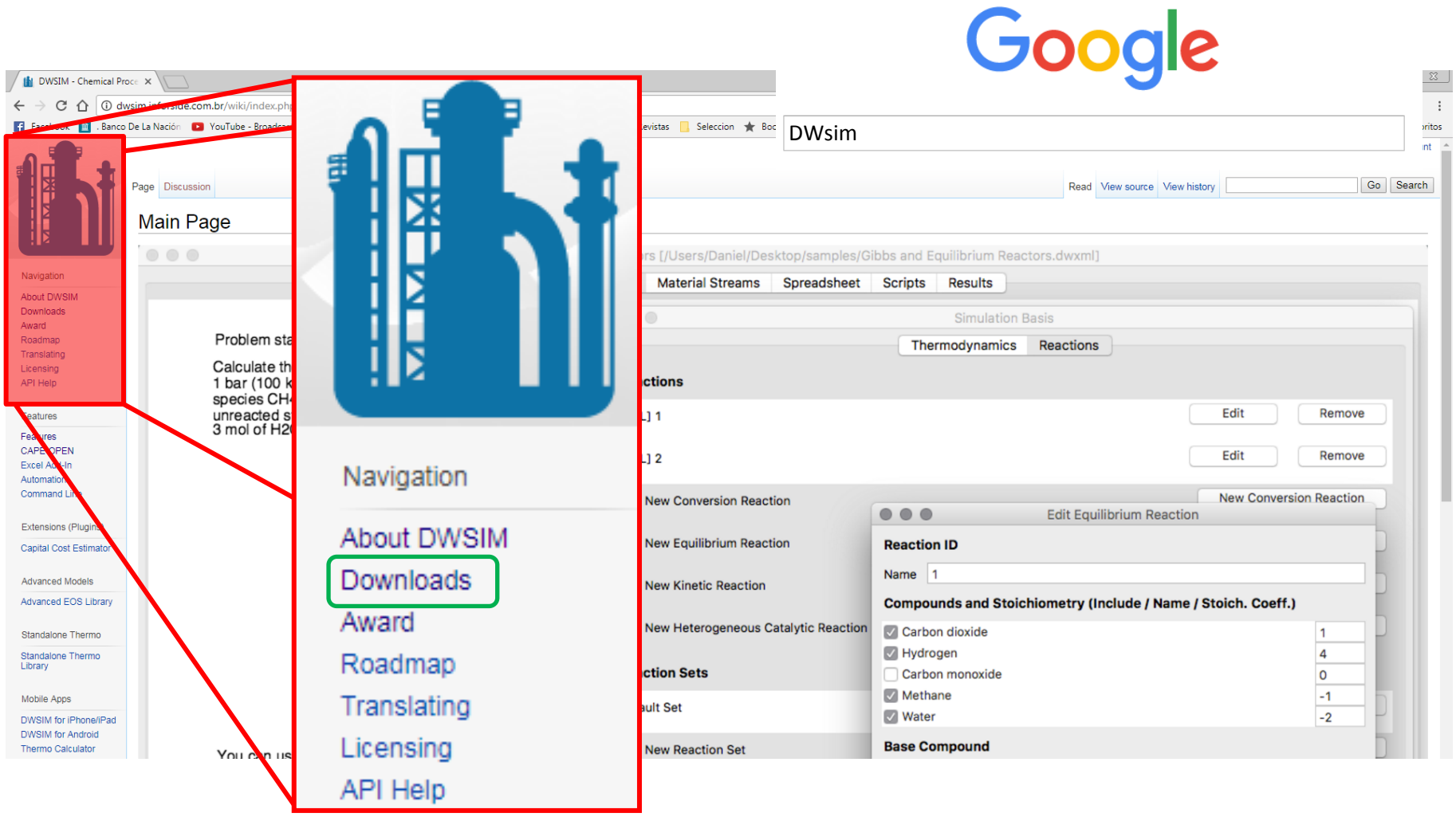
- Unit operations:
  - Mixer
  - Splitter
  - Separator
  - Pump
  - Compressor
  - Expander
  - Heater
  - Cooler
  - Valve
  - Pipe Segment
  - Shortcut Column
  - Heat Exchanger
  - Reactors
  - Component Separator
  - Orifice Plate
  - Distillation/Absorption Columns
  - Solids Separator
  - Cake Filter

DWSIM Wiki

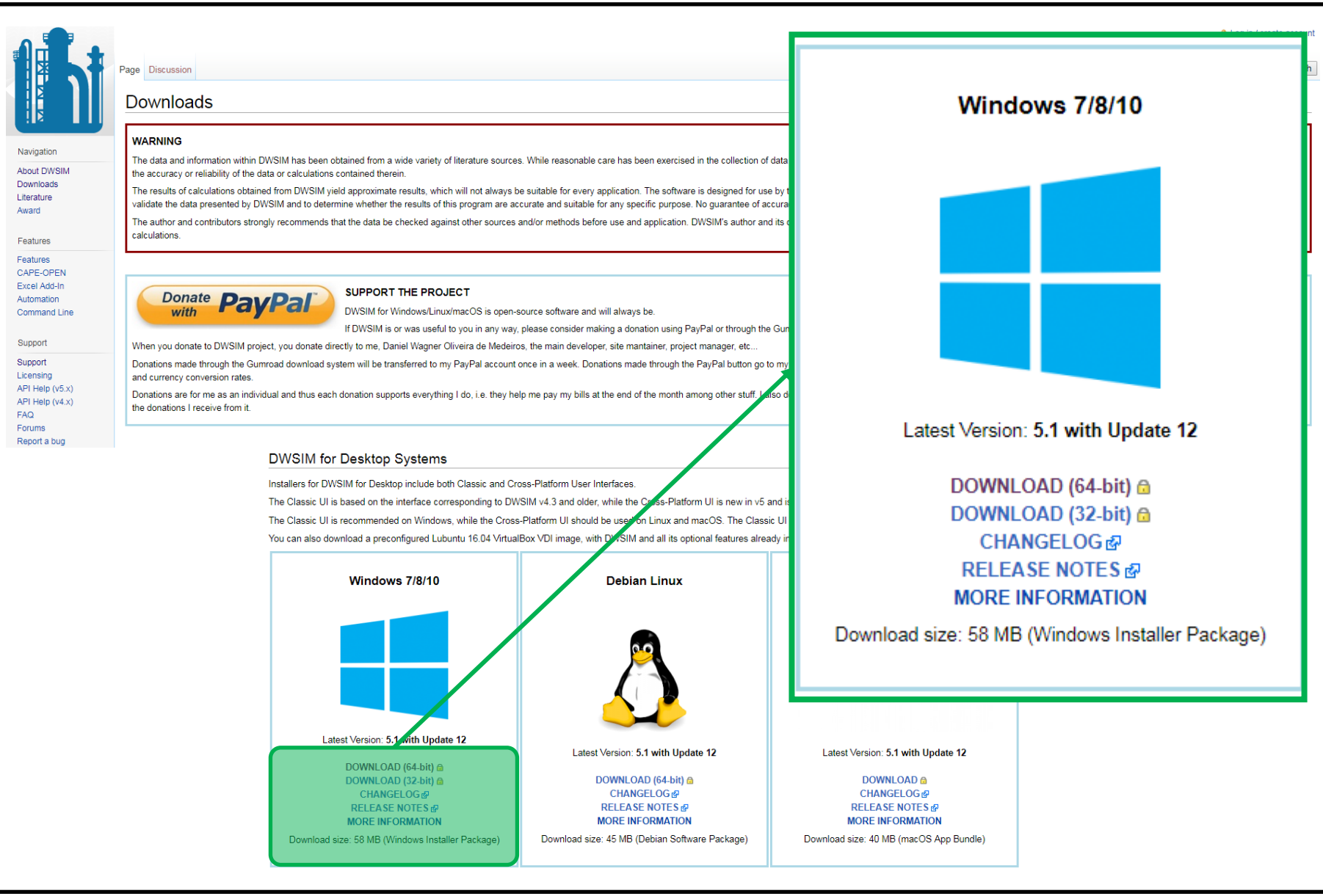
- Utilities:
  - Binary Data Regression
  - Phase Envelope
  - Natural Gas Hydrates
  - Pure Component Properties
  - True Critical Point
  - PSV Sizing
  - Vessel Sizing
  - Spreadsheet and Petroleum Cold Flow Properties
- Tools:
  - Hypothetical Component Generator
  - Bulk C7+/Distillation Curves Petroleum Characterization
  - Petroleum Assay Manager
  - Reactions Manager and Compound Creator;
  - Process Analysis and Optimization:
  - Sensitivity Analysis Utility
  - Multivariate Optimizer with bound constraints;
- Extras:
  - Support for Runtime Scripts
  - Plugins and CAPE-OPEN Flowsheet Monitoring Objects.

Descarga e Instalación

http://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=Main_Page

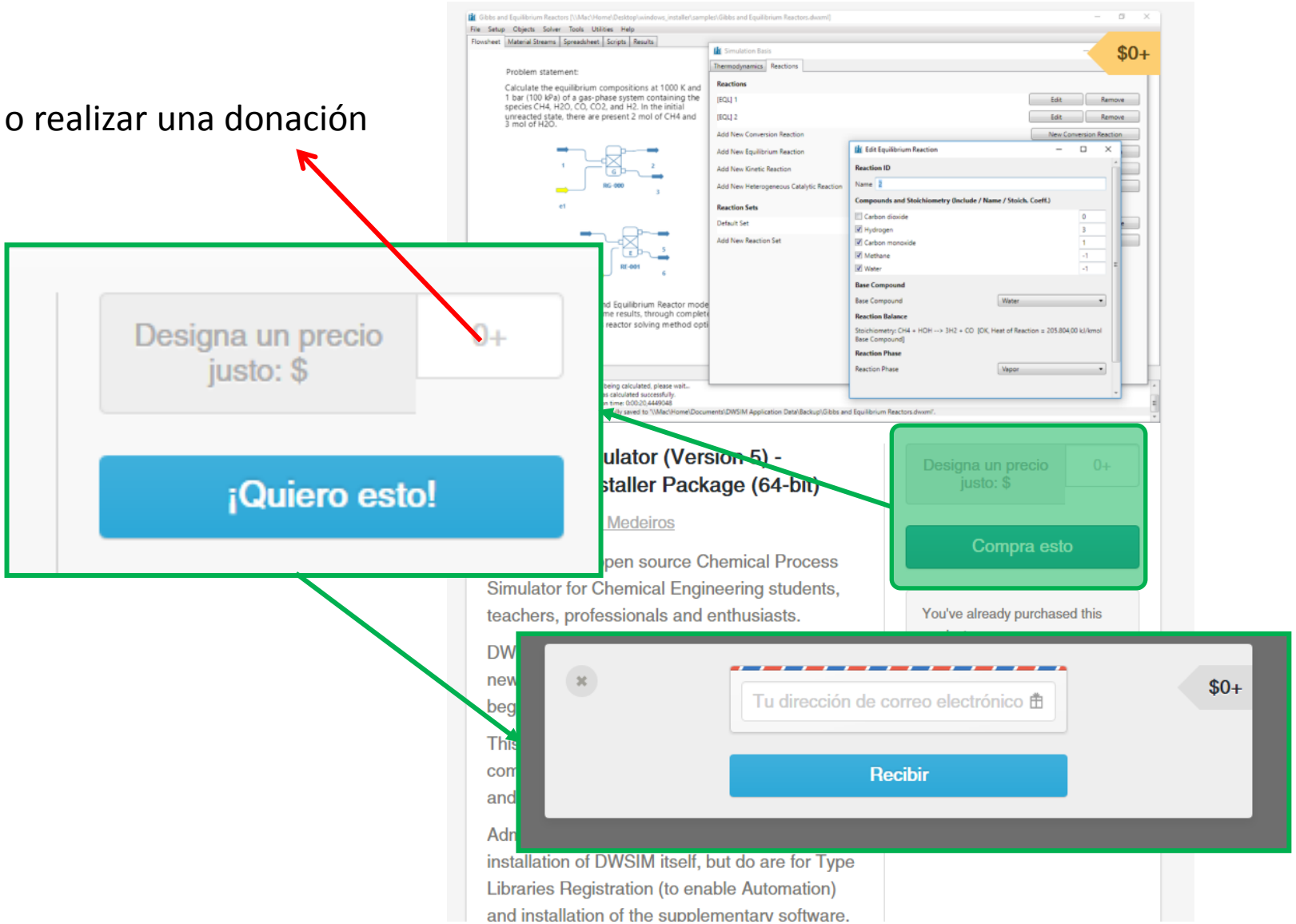


Descarga e Instalación



Descarga e Instalación

0 o realizar una donación



Descarga e Instalación

DWSIM Simulator (Version 5) - Windows Installer Package (64-bit) $0

Ver producto

Abrir en la aplicación

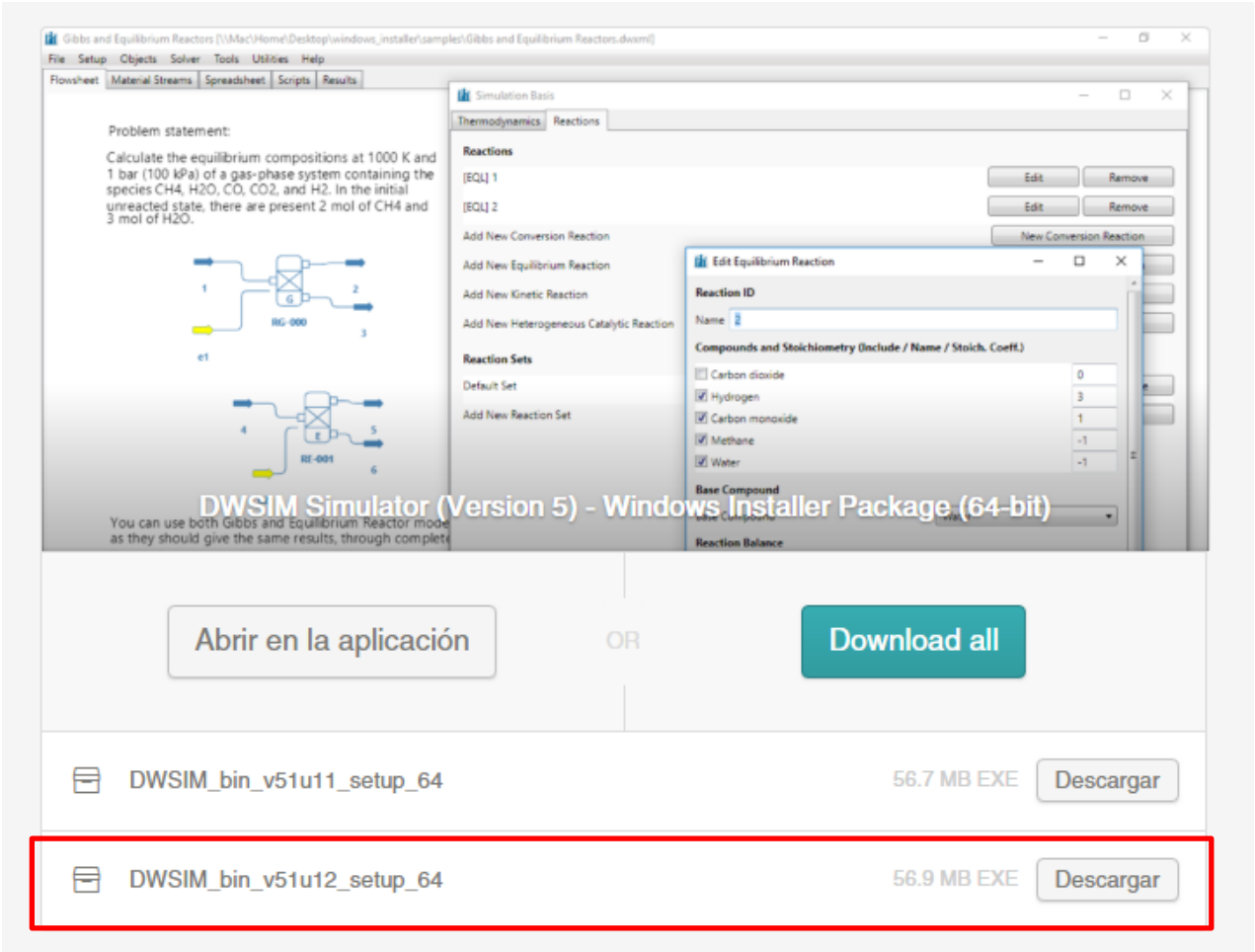
View your receipt by clicking here. We have also sent a copy to jmanassaldi@gmail.com.

Introduce una contraseña y te recordaremos tus compras.

Contraseña Registrarse

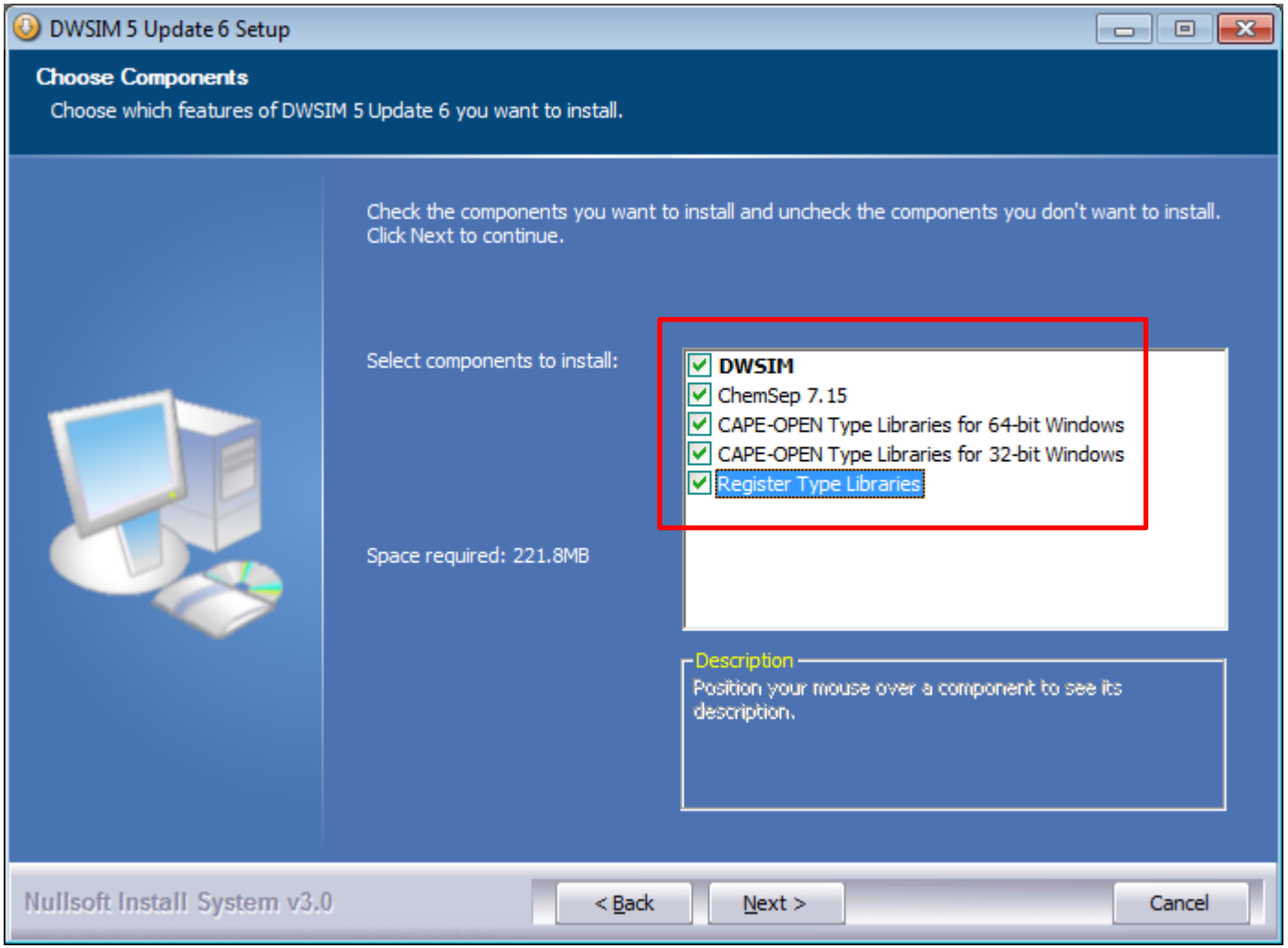
Aceptas nuestras Condiciones de uso.

Tweet Share



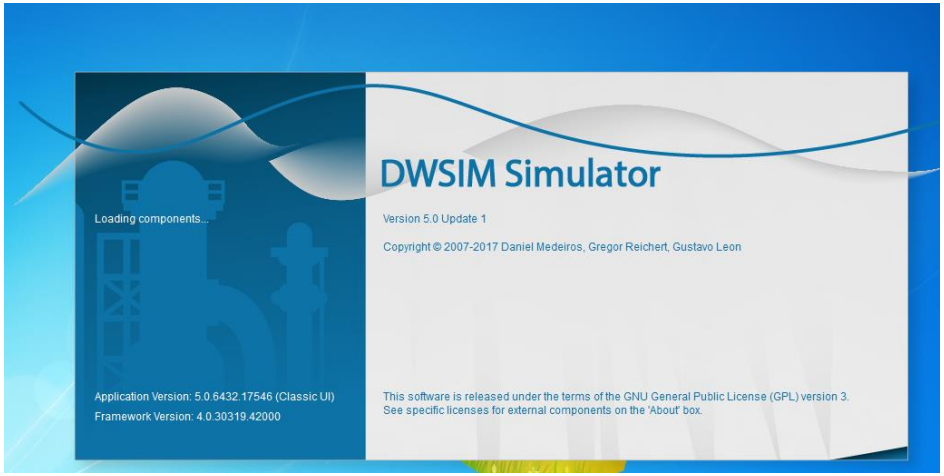
Siempre descargar la ultima versión

Instalación del software

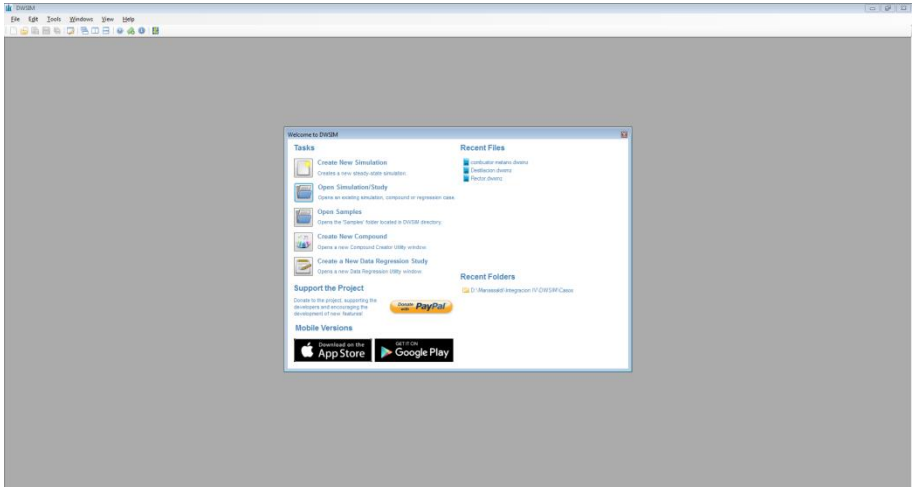


Tildar todas las opciones

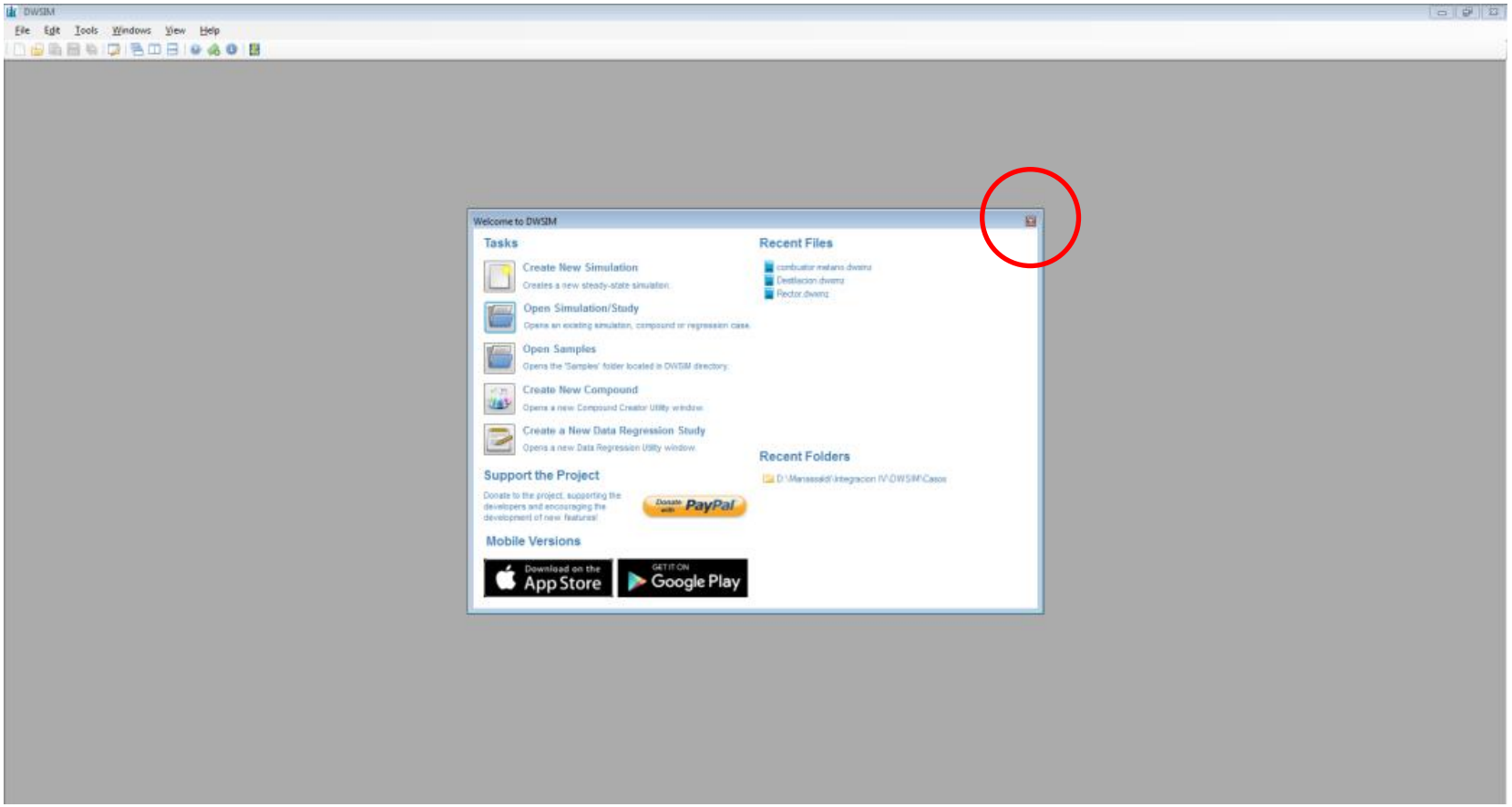
Inicio del software



DWSIM (Classic UI)

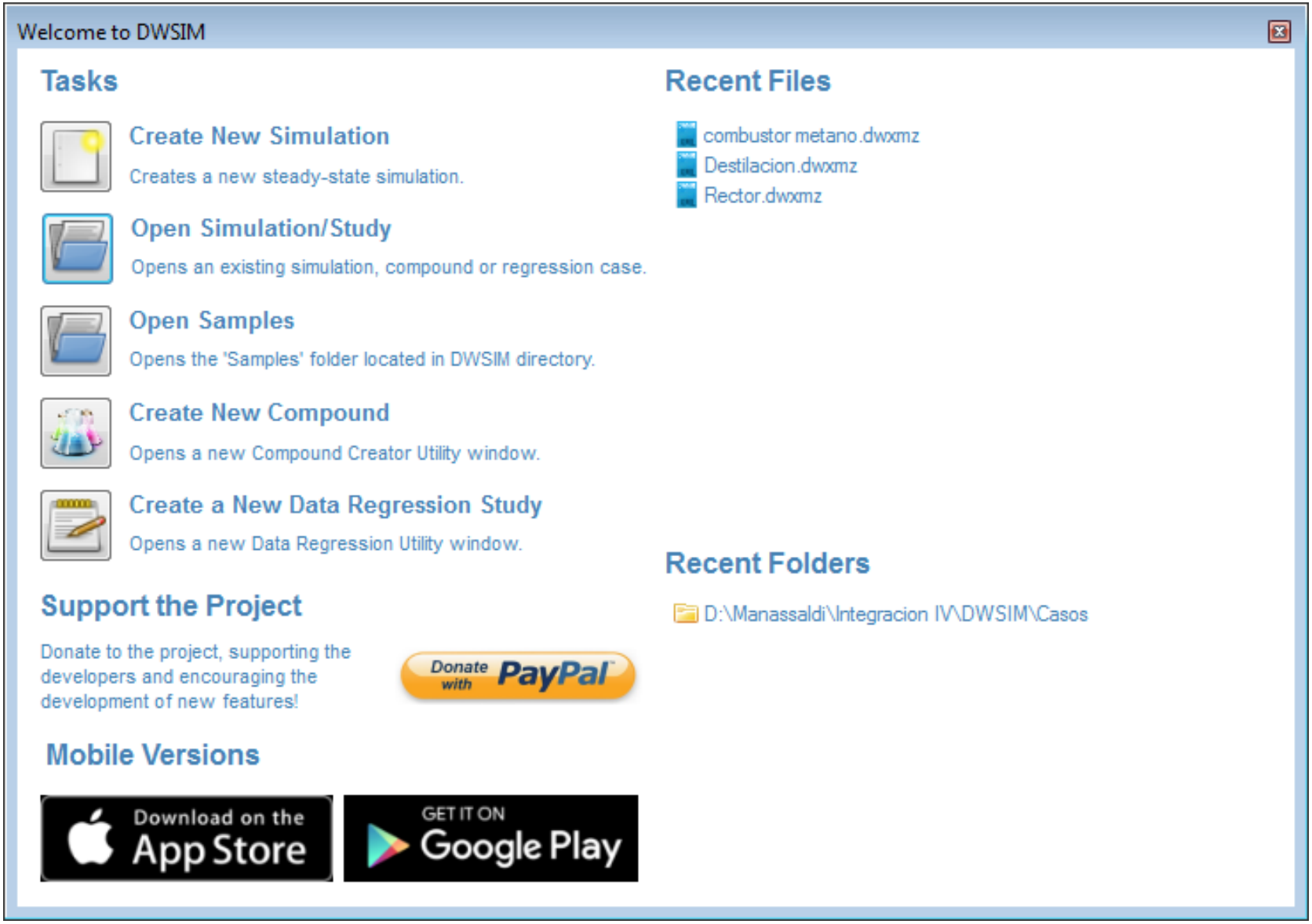


Inicio del software

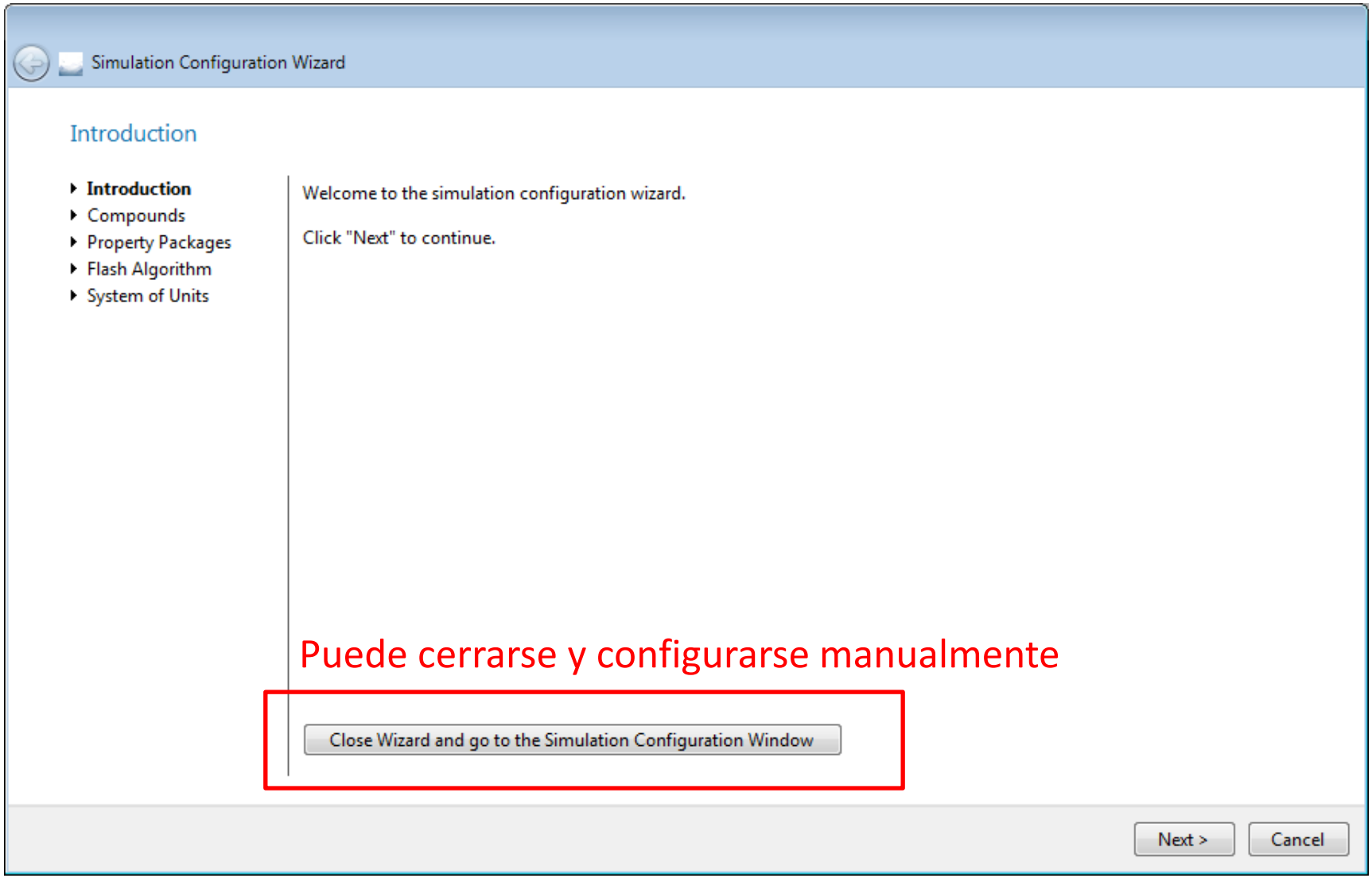


La primera vez es conveniente cerrar la ventana de bienvenida para permitir que el software descargue actualizaciones

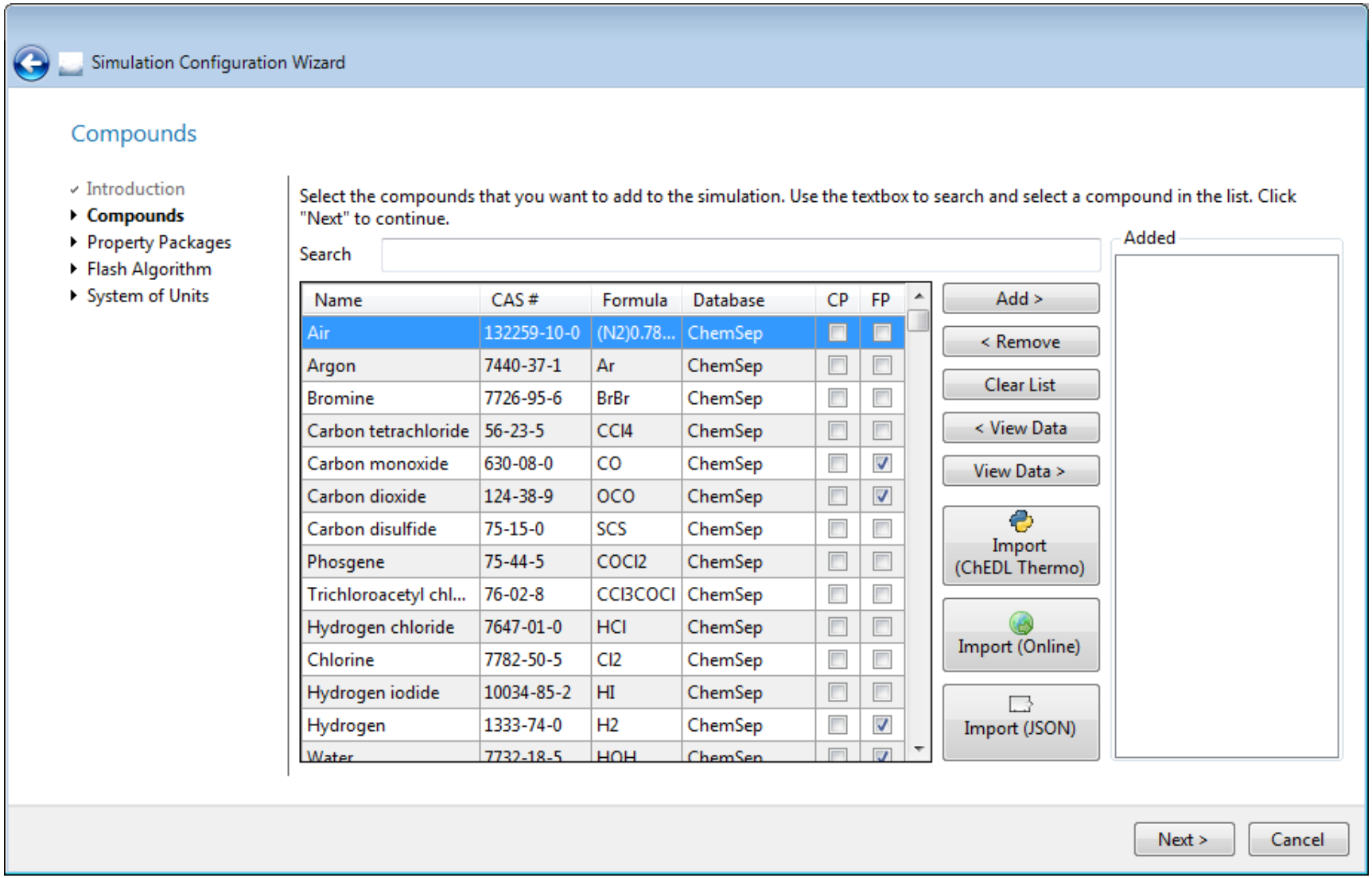
Ventana de bienvenida



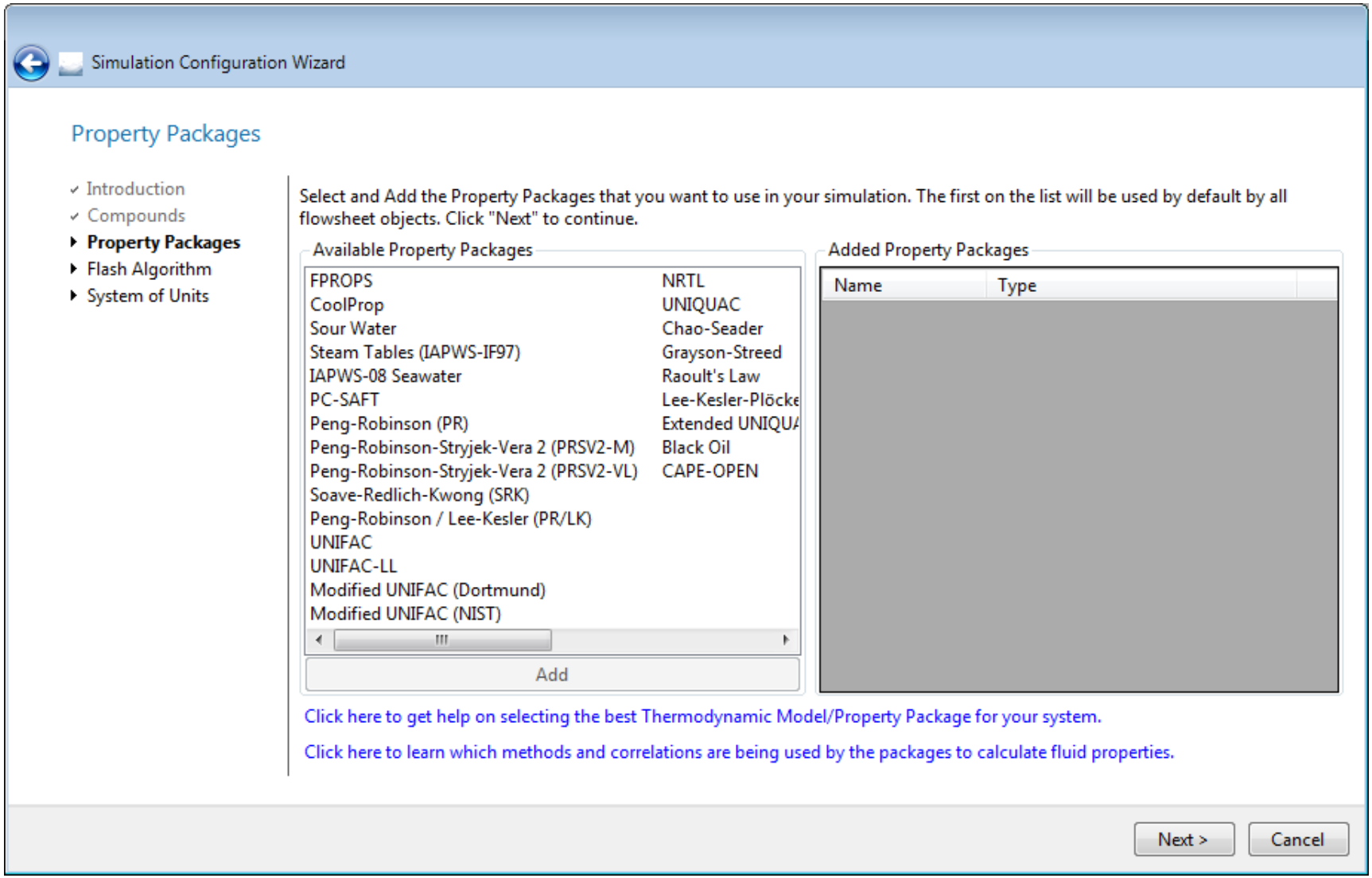
Asistente de configuración



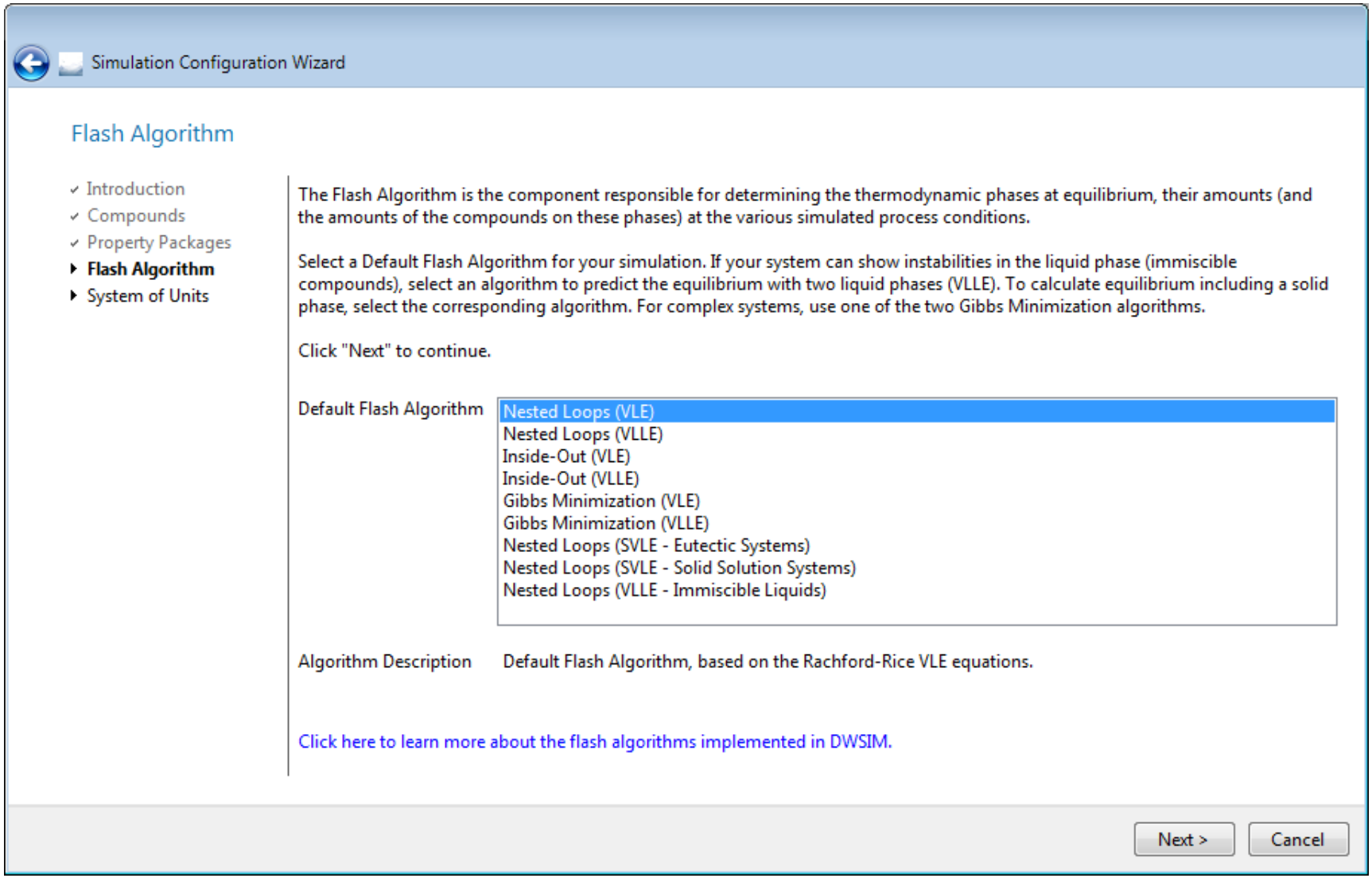
Selección de compuestos



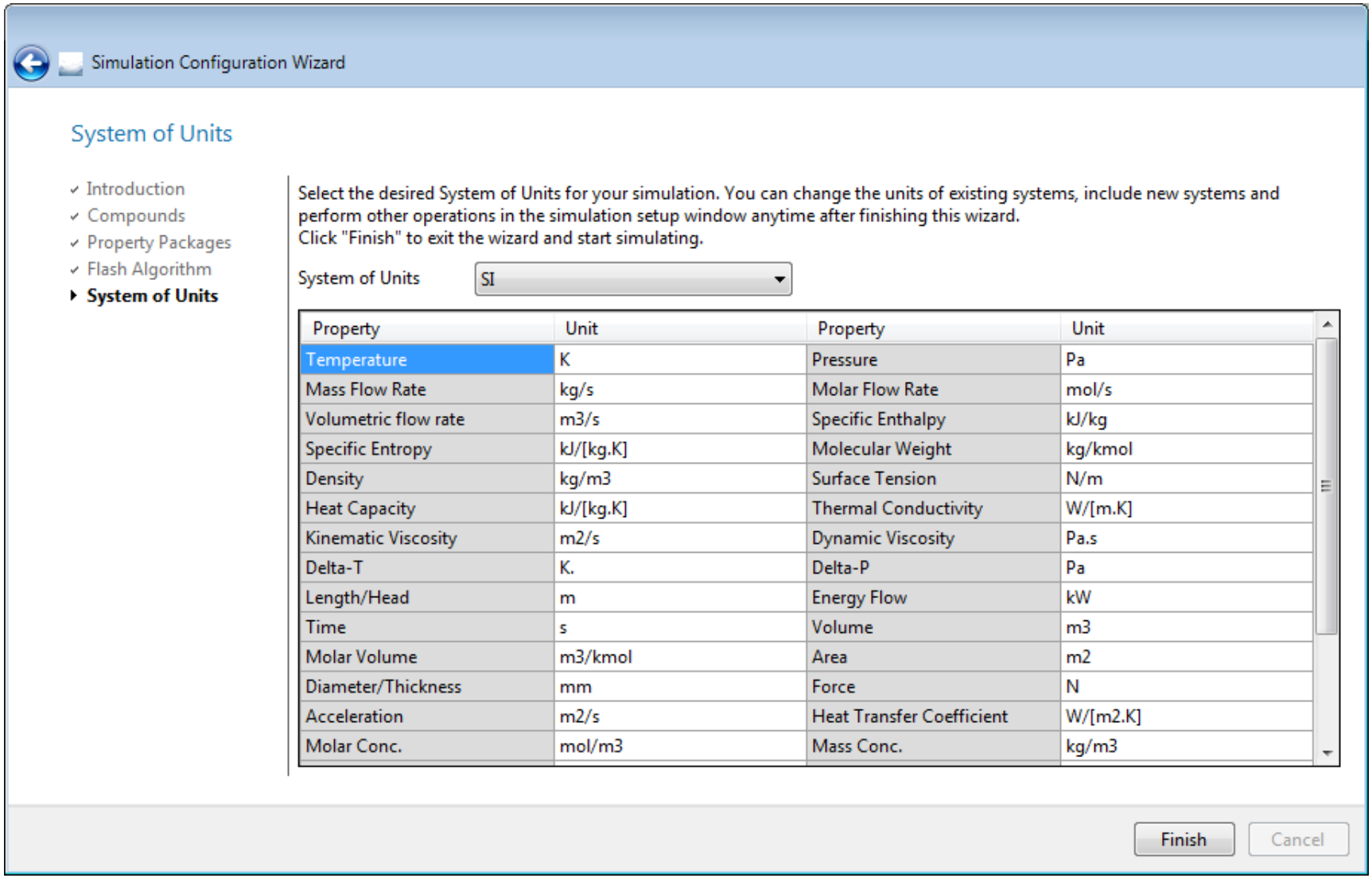
Selección de paquetes de propiedades fisicoquímicas



Selección del algoritmo por defecto para el calculo de flash

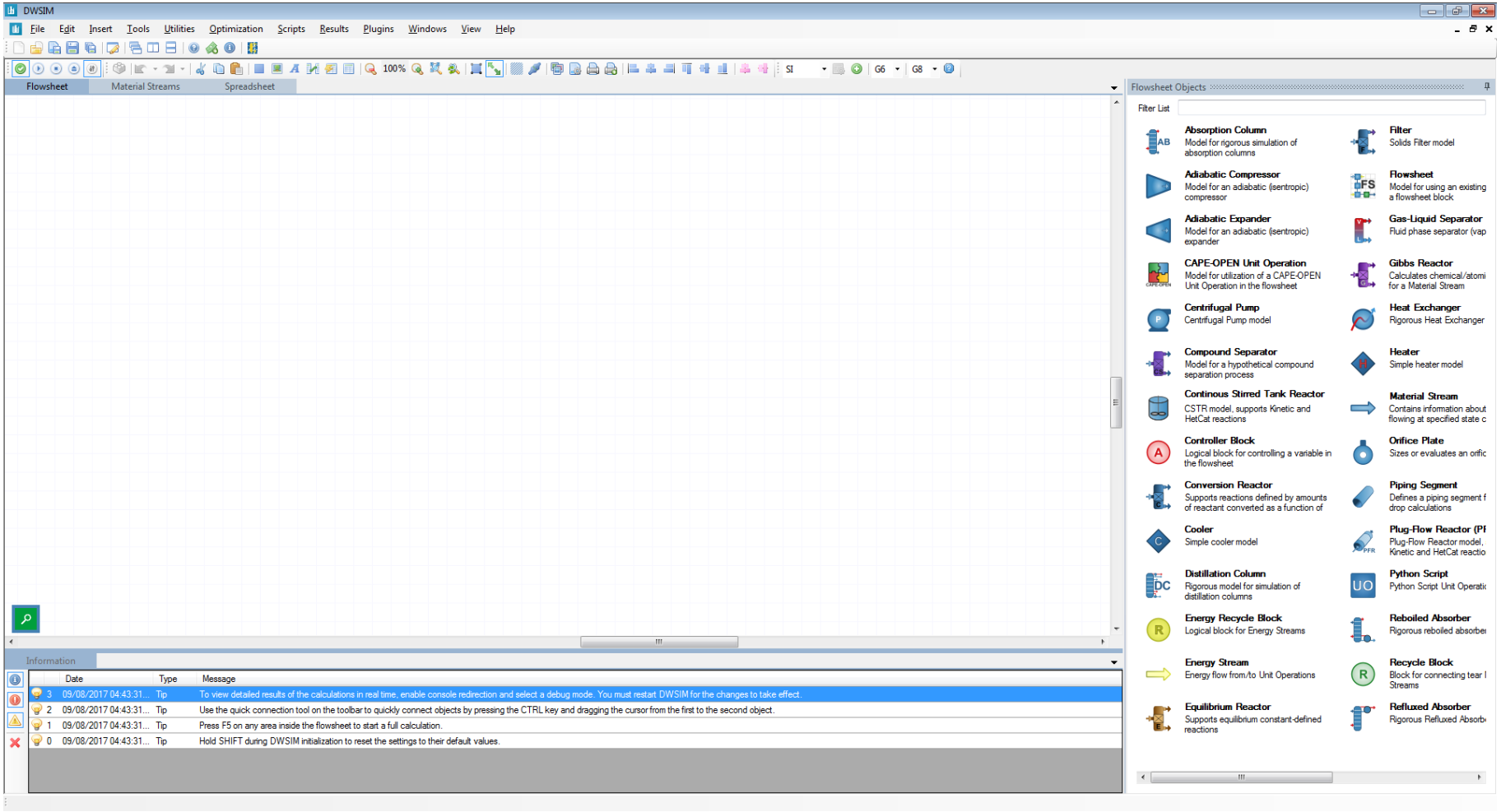


Selección de las unidades por defecto



Property	Unit	Property	Unit
Temperature	K	Pressure	Pa
Mass Flow Rate	kg/s	Molar Flow Rate	mol/s
Volumetric flow rate	m3/s	Specific Enthalpy	kJ/kg
Specific Entropy	kJ/[kg.K]	Molecular Weight	kg/kmol
Density	kg/m3	Surface Tension	N/m
Heat Capacity	kJ/[kg.K]	Thermal Conductivity	W/[m.K]
Kinematic Viscosity	m2/s	Dynamic Viscosity	Pa.s
Delta-T	K.	Delta-P	Pa
Length/Head	m	Energy Flow	kW
Time	s	Volume	m3
Molar Volume	m3/kmol	Area	m2
Diameter/Thickness	mm	Force	N
Acceleration	m2/s	Heat Transfer Coefficient	W/[m2.K]
Molar Conc.	mol/m3	Mass Conc.	kg/m3

Entorno del software



Listado de objetos disponibles para agregar al flowsheet

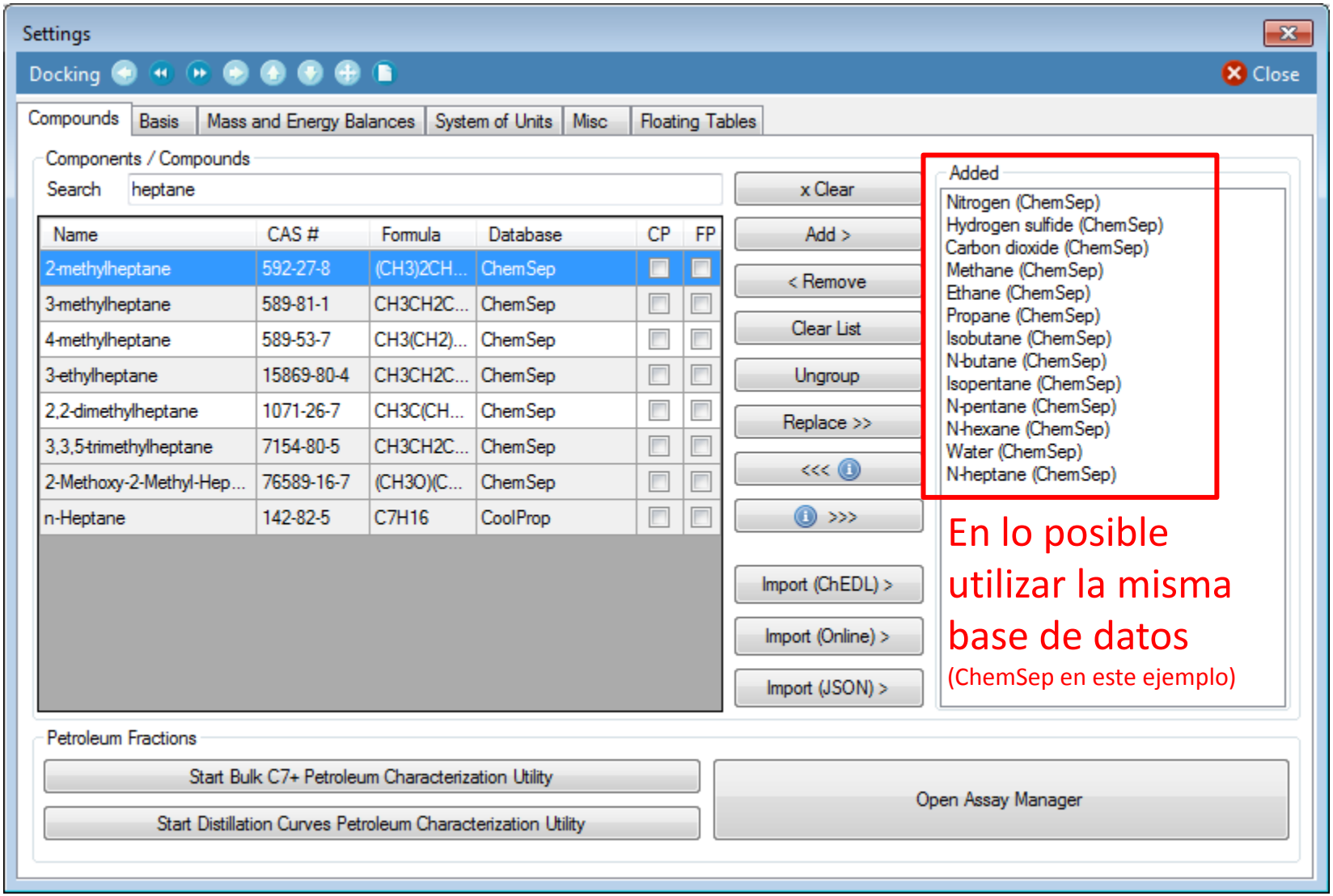
Ejercicio de aprendizaje propuesto

Dada de la corriente de gas cuyo Flujo es de 100 kg/h, y de composición:

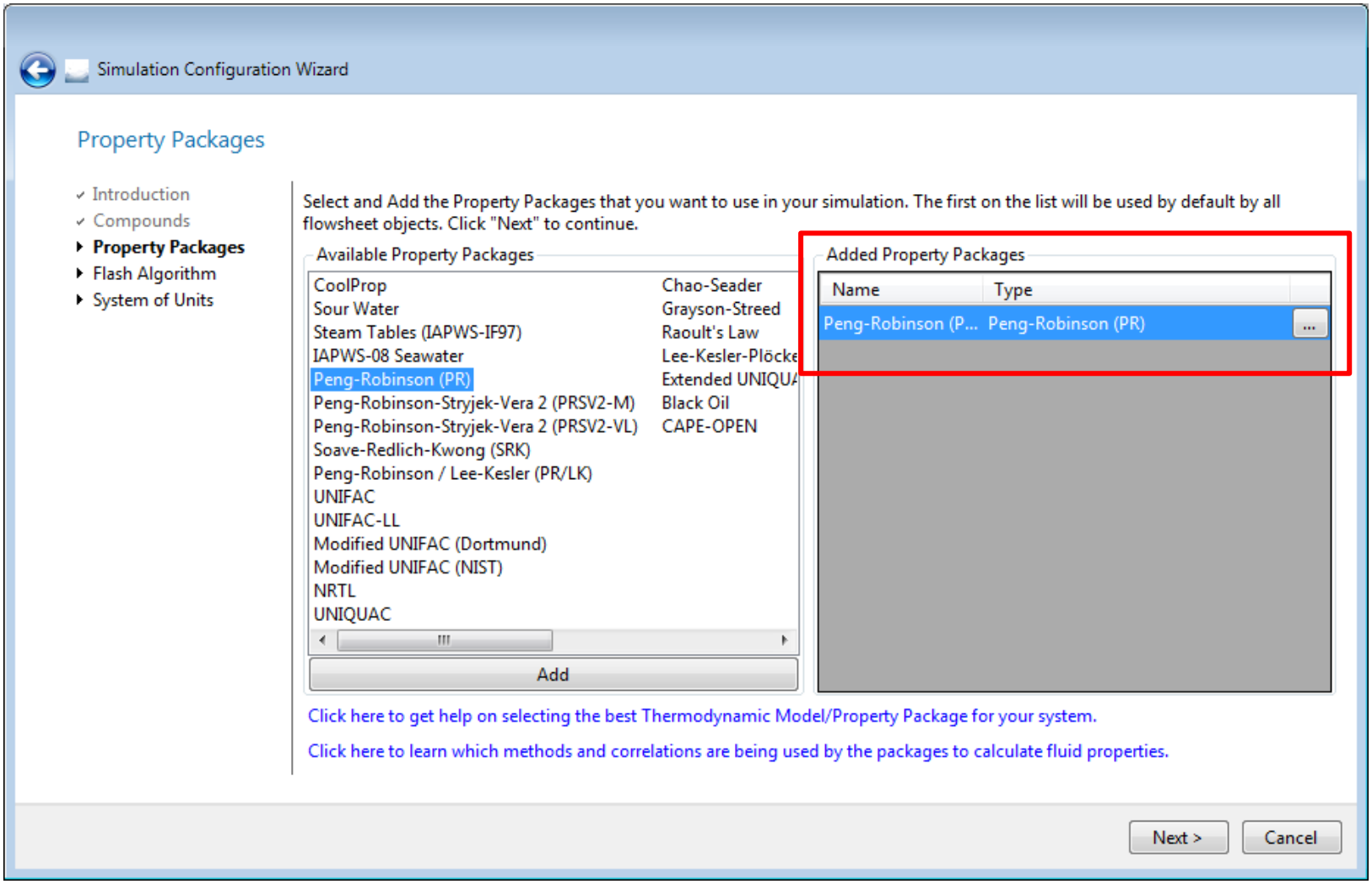
N2	H2S	CO2	C1	C2	C3	i-C4	n-C4	i-C5	n-C5	C6	H2O	C7+
0.0025	0.0237	0.0048	0.68	0.192	0.071	0.0115	0.0085	0.0036	0.0021	0.0003	0	0

- Utilizar el paquete termodinámico Peng-Robinson.
- Ajuste una presión de 7500 kPa y una temperatura de 10º C. ¿Cuál es la fracción de vapor?
- Realice el cálculo de punto de rocío a esta corriente. Fije una presión de 7500 kPa. ¿Cual es la temperatura de rocío?

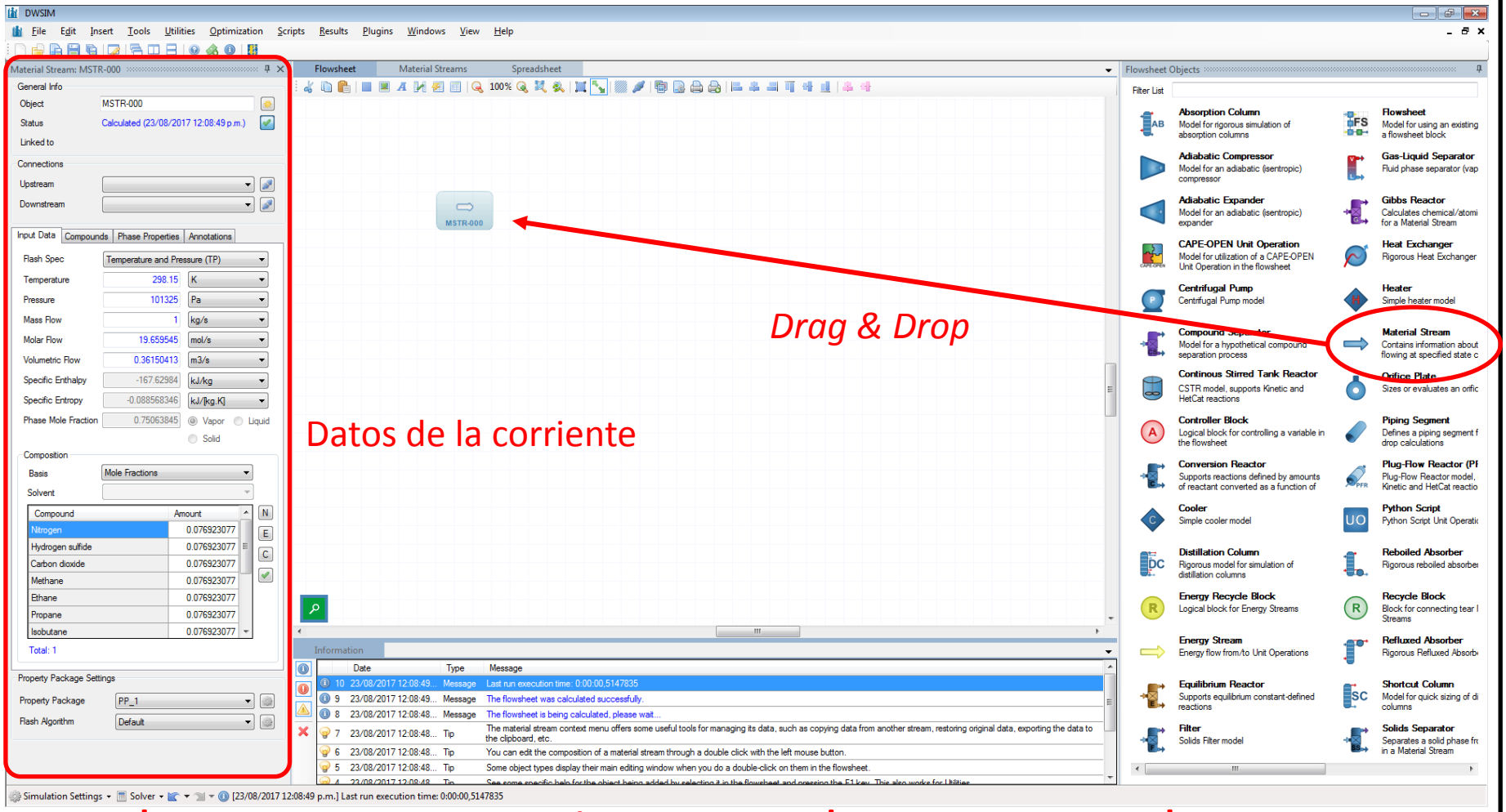
Selección de los compuesto intervinientes



Selección del paquete fisicoquímico

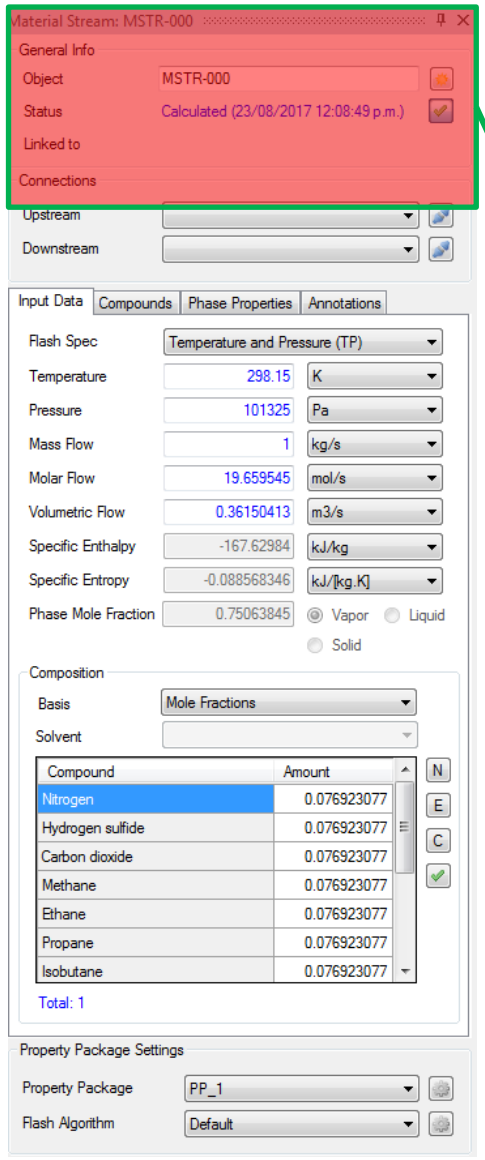


Modulo “Material Stream” (corriente de materia)

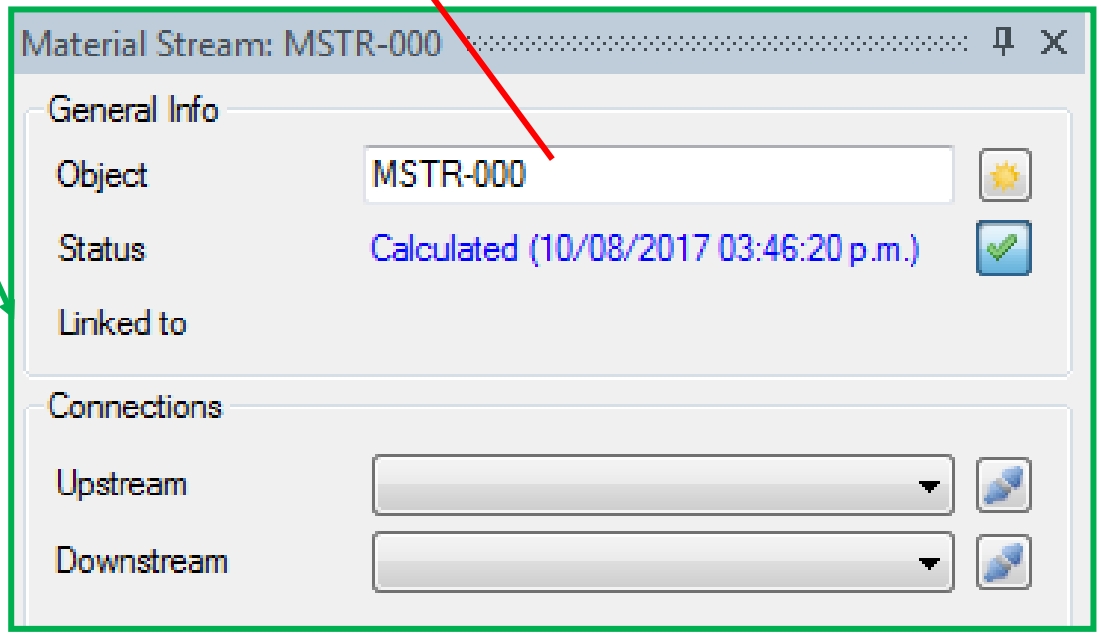


Al agregar una corriente sus datos se completan con valores por defecto

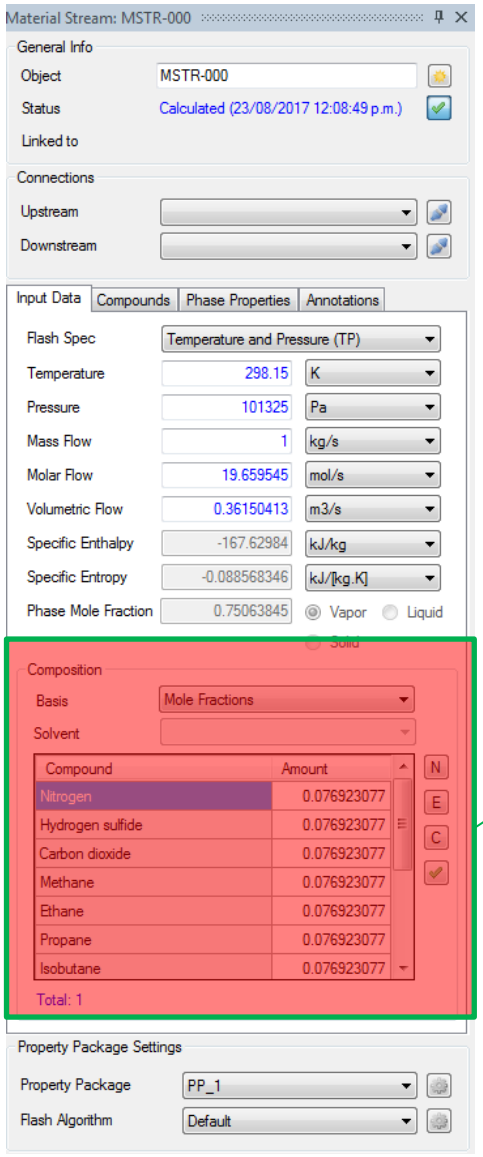
Propiedades de las corrientes de materia



Se puede cambiar el nombre de la corriente

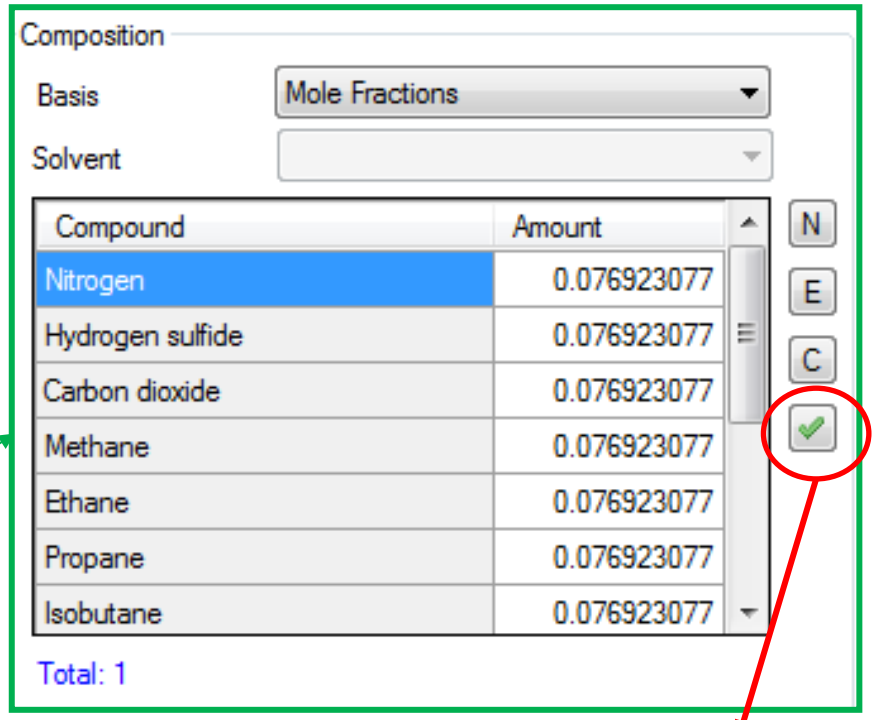


Propiedades de las corrientes de materia



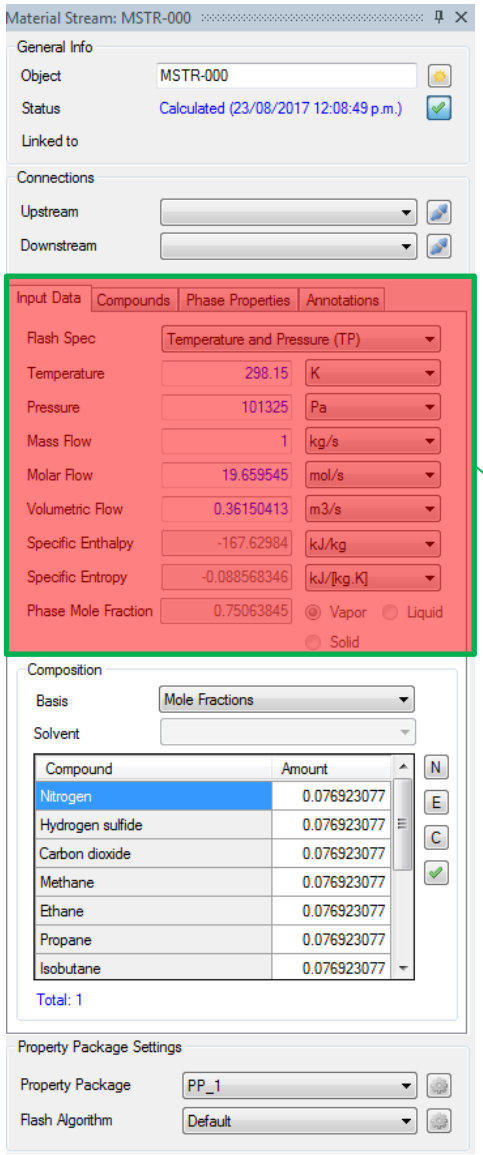
Es conveniente comenzar definiendo la composición de la corriente.

Por defecto, una nueva corriente es una mezcla equimolar de todos los compuestos.

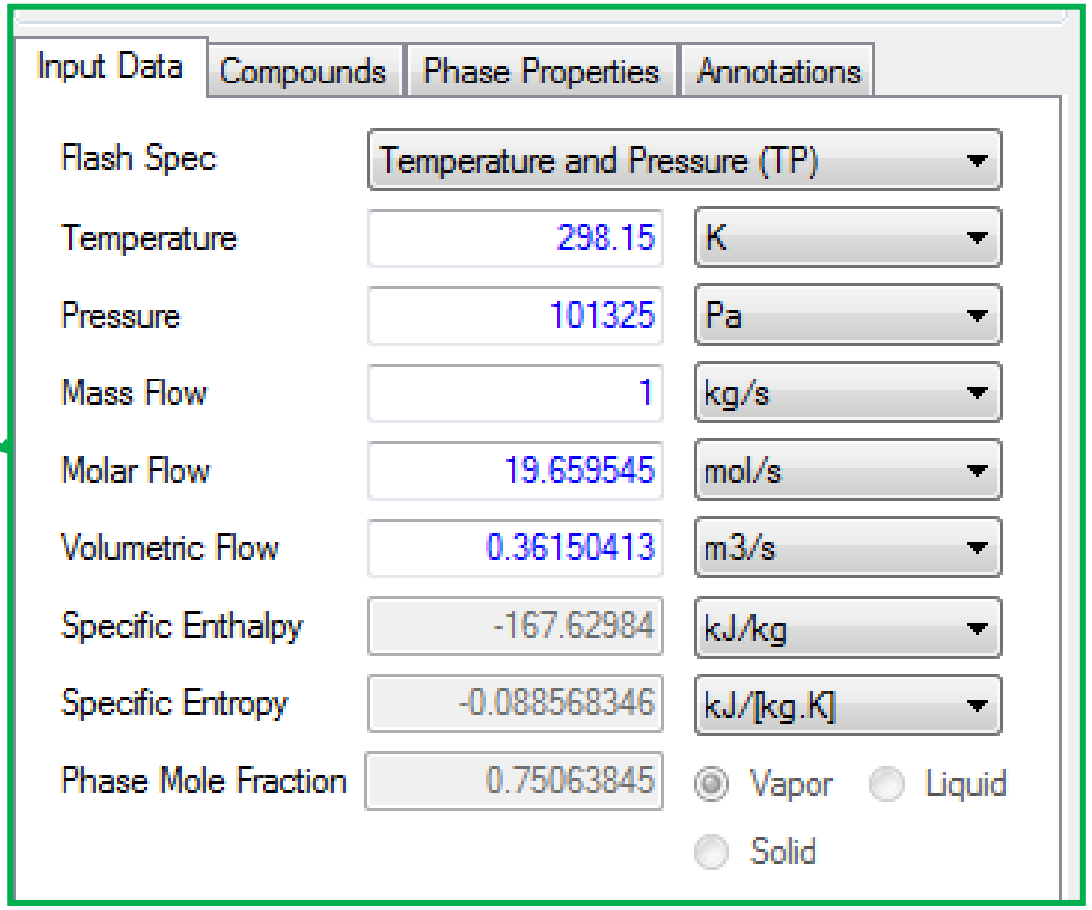


Se ingresa la composición y se acepan los cambios con el tilde verde

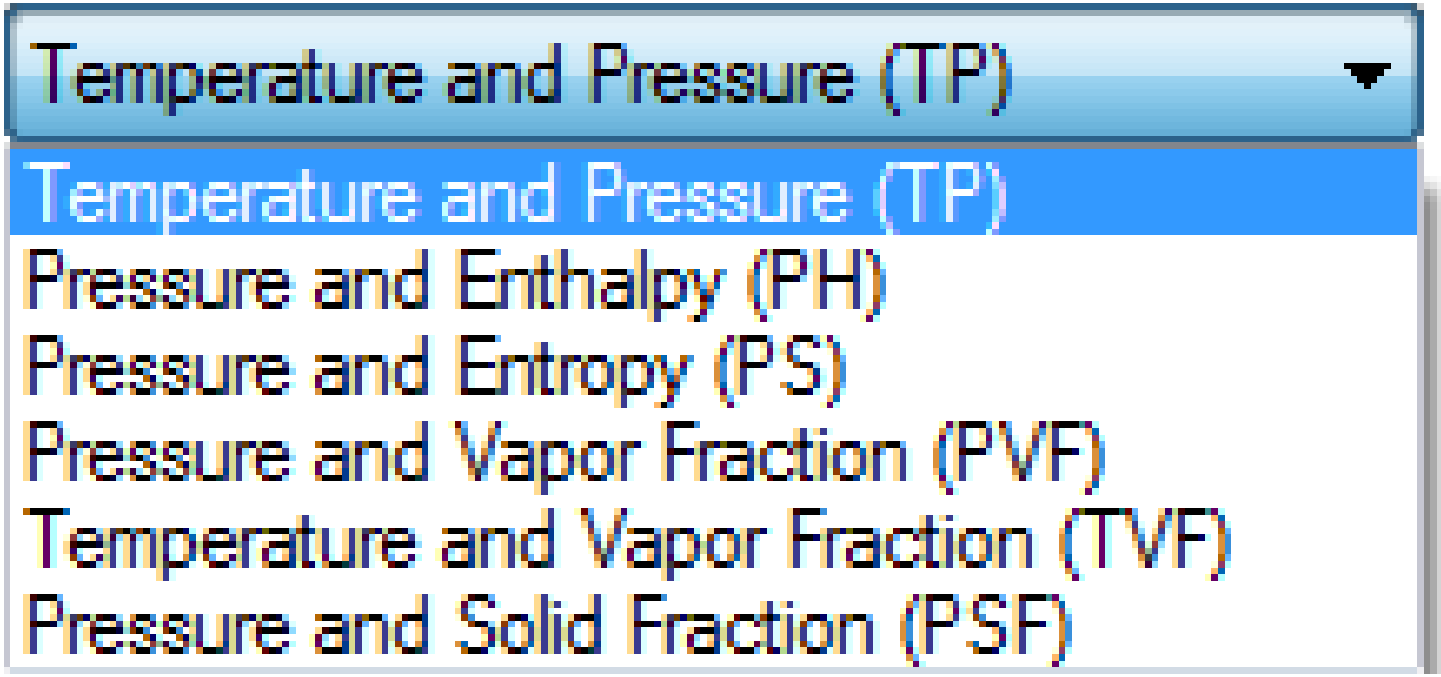
Propiedades de las corrientes de materia



Propiedades principales de la corriente (valores por defecto)

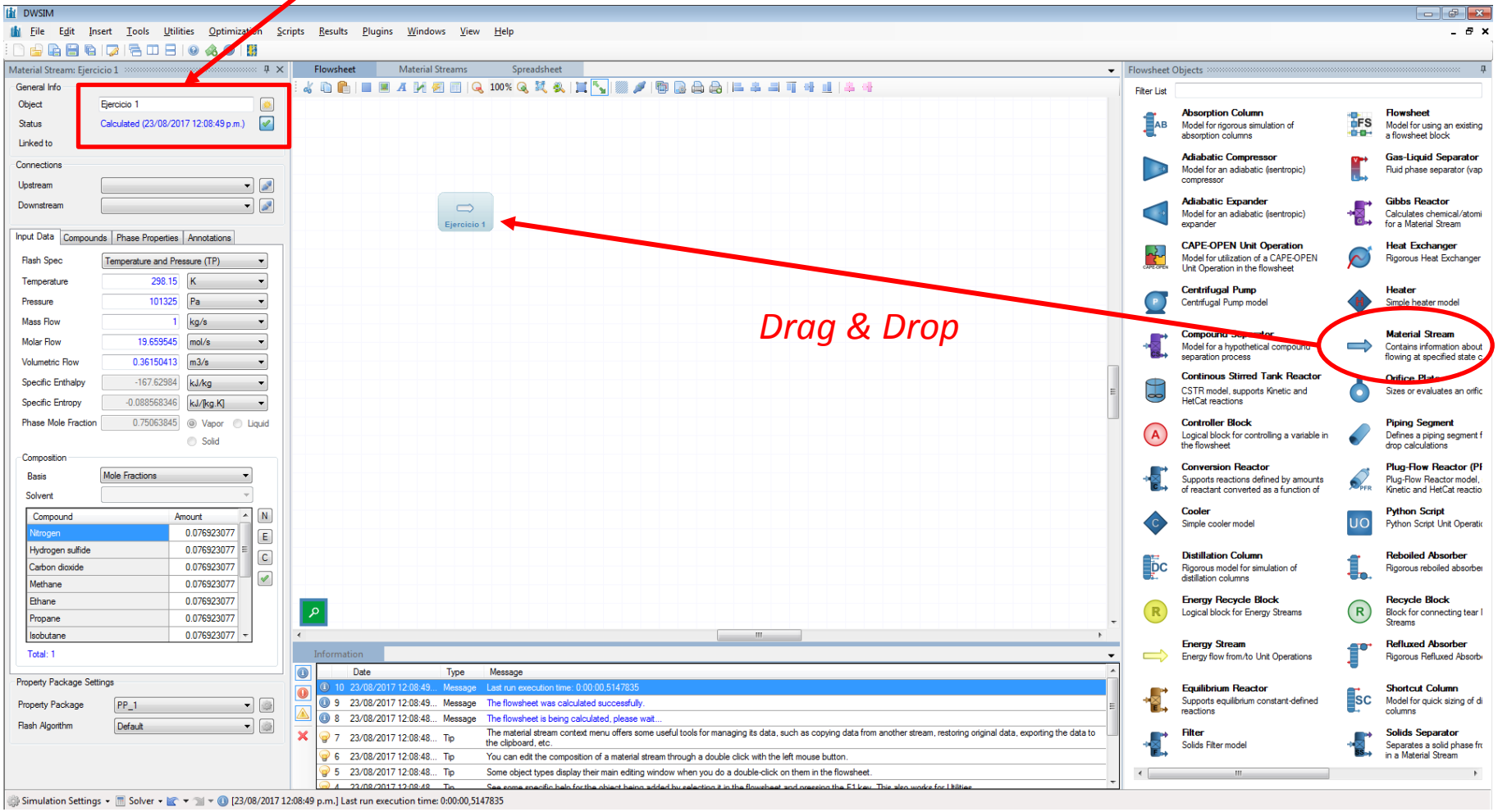


FLASH Spec
(Especificaciones para el calculo del flash)

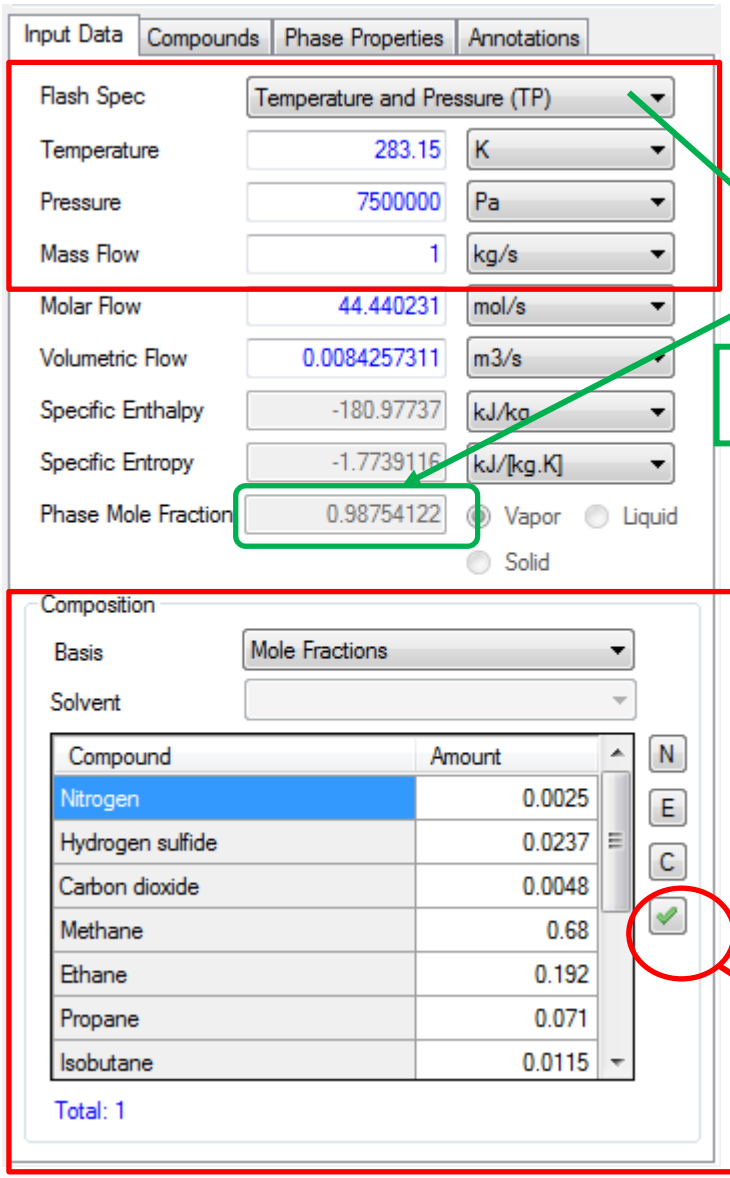


Resolución del ejercicio propuesto

Cambiamos el nombre a Ejercicio 1

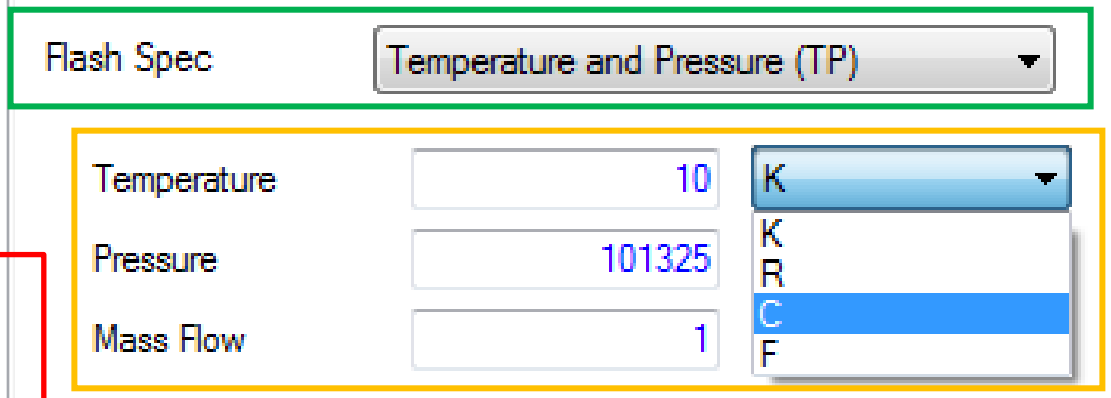


Resolución del ejercicio propuesto



Ajuste una presión de 7500 kPa y una temperatura de 10º C

¿Cuál es la fracción de vapor?



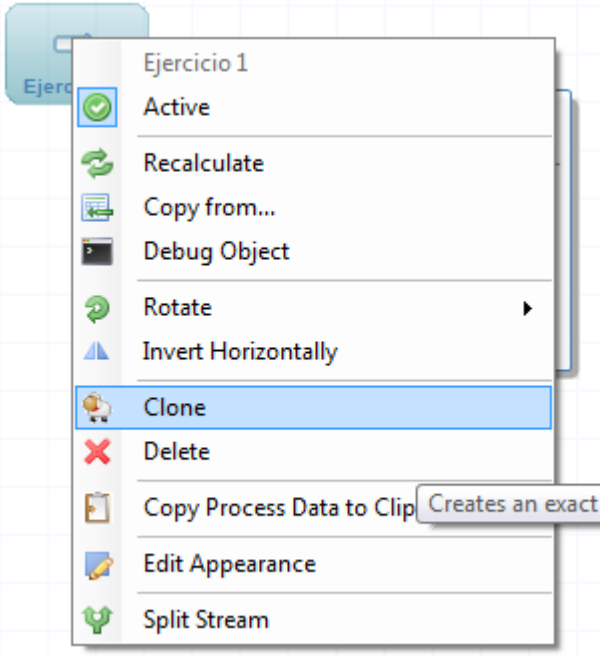
Los datos pueden ingresarse en unidades diferentes a las seleccionadas por defecto pero señalando su correspondiente unidad.

Se ingresa la composición y se acepan los cambios con el tilde verde

Resolución del ejercicio propuesto

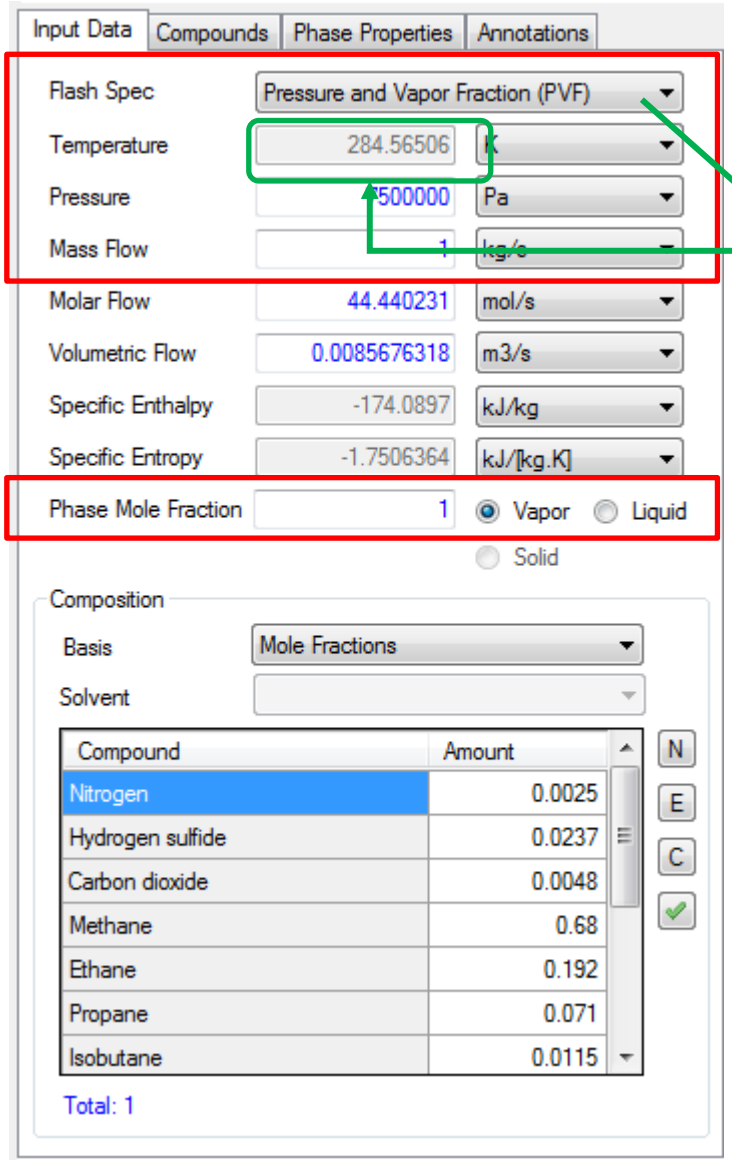
Realice el cálculo de punto de rocío a esta corriente. Fije una presión de 7500 kPa ¿Cual es la temperatura de rocío?

Clonamos la corriente para no volver a definir la composición

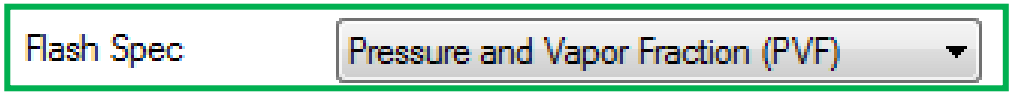


Renombramos la corriente como Ejercicio 2

Resolución del ejercicio propuesto



Realice el cálculo de punto de rocío a esta corriente. Fije una presión de 7500 kPa ¿Cual es la temperatura de rocío?



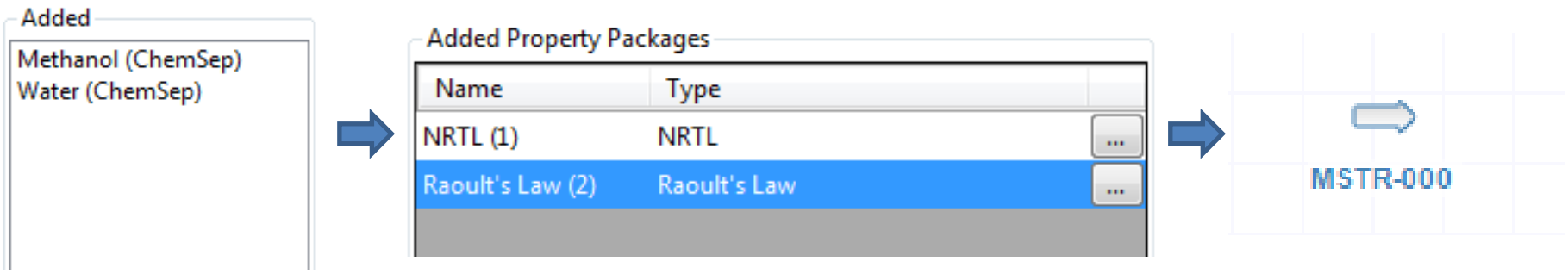
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Pasos:

1. Crear un nuevo caso de simulación definiendo los compuestos intervinientes y los paquetes termodinámicos que se desean comparar.
2. En el flowsheet crear una nueva corriente de materia.

Ejemplo:

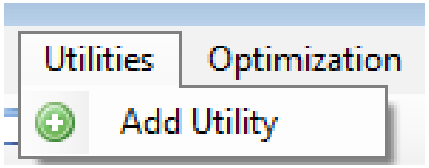
Metanol (1) y Agua(2) usando NRTL y Ley de Raoult.

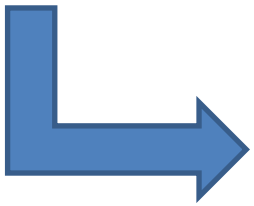


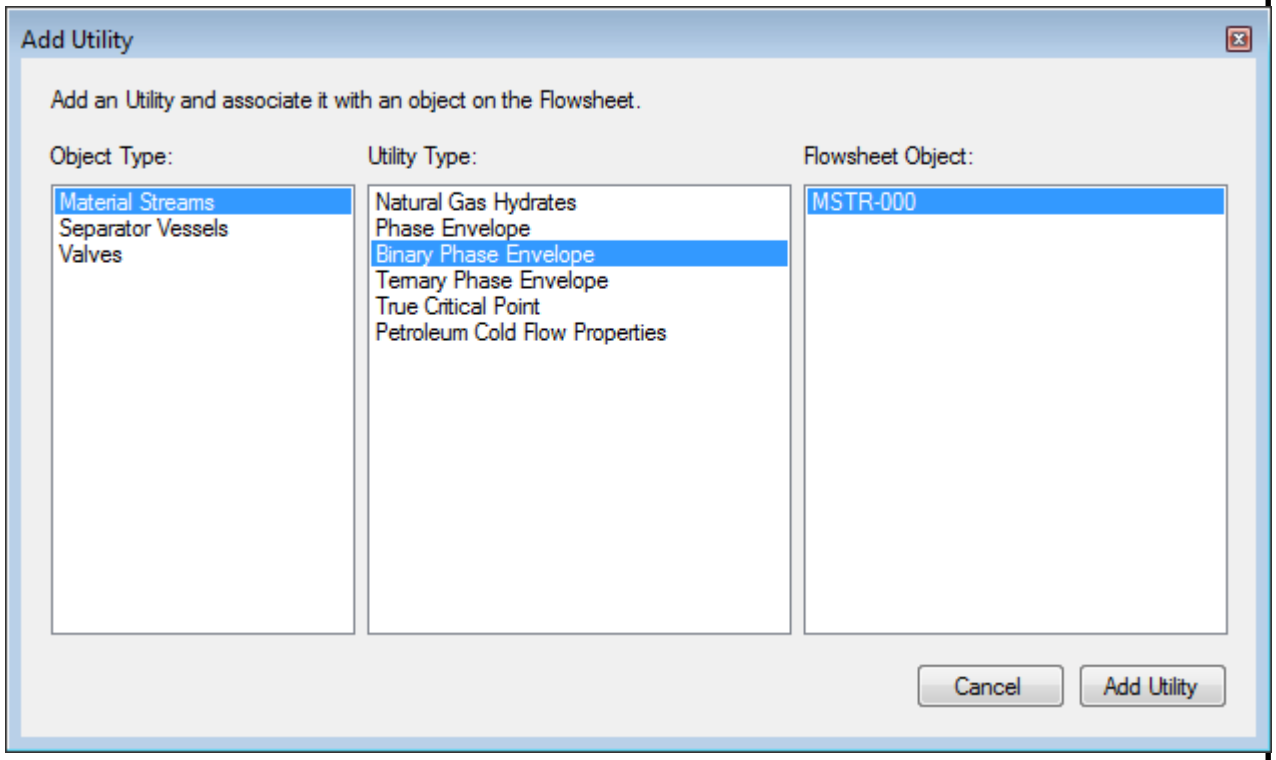
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

3. Seleccionar la corriente de materia creada y agregar una “utility”.
4. Seleccionar las siguientes opciones:

   Material Stream > Binary Phase Envelope > MSTR-000 (nombre de la corriente creada)

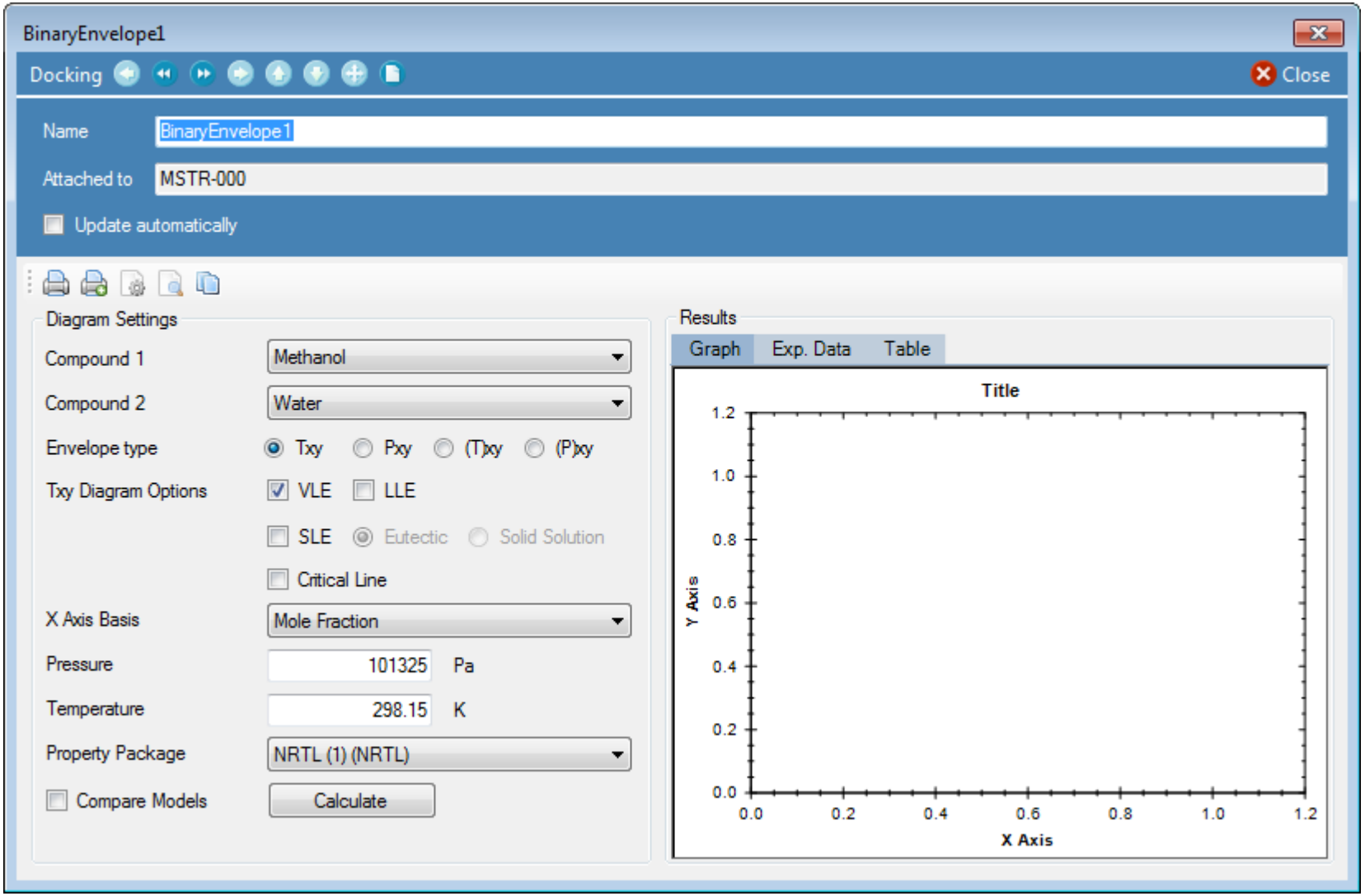






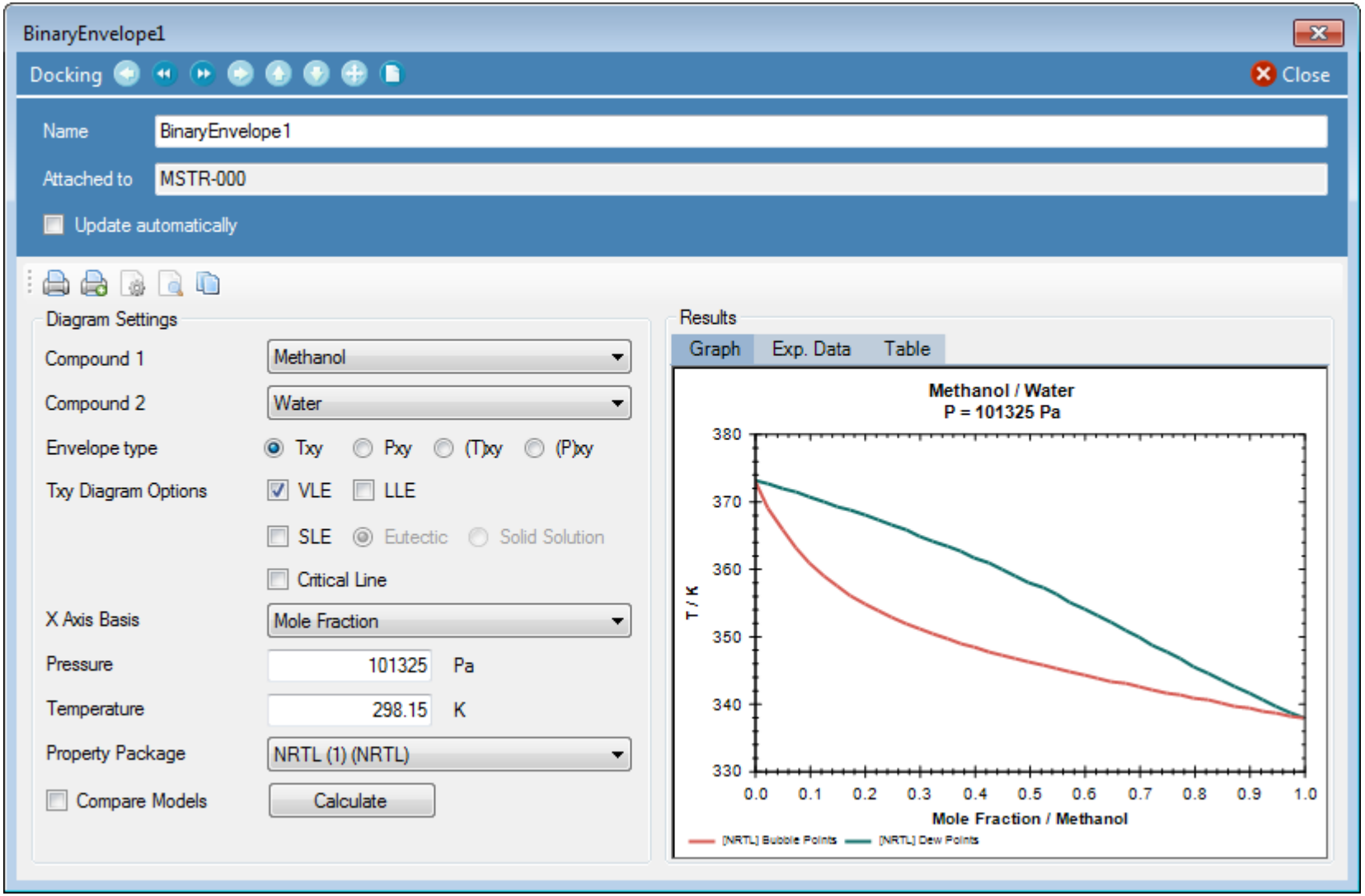
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

5. En la ventana principal se deben seleccionar las opciones del diagrama



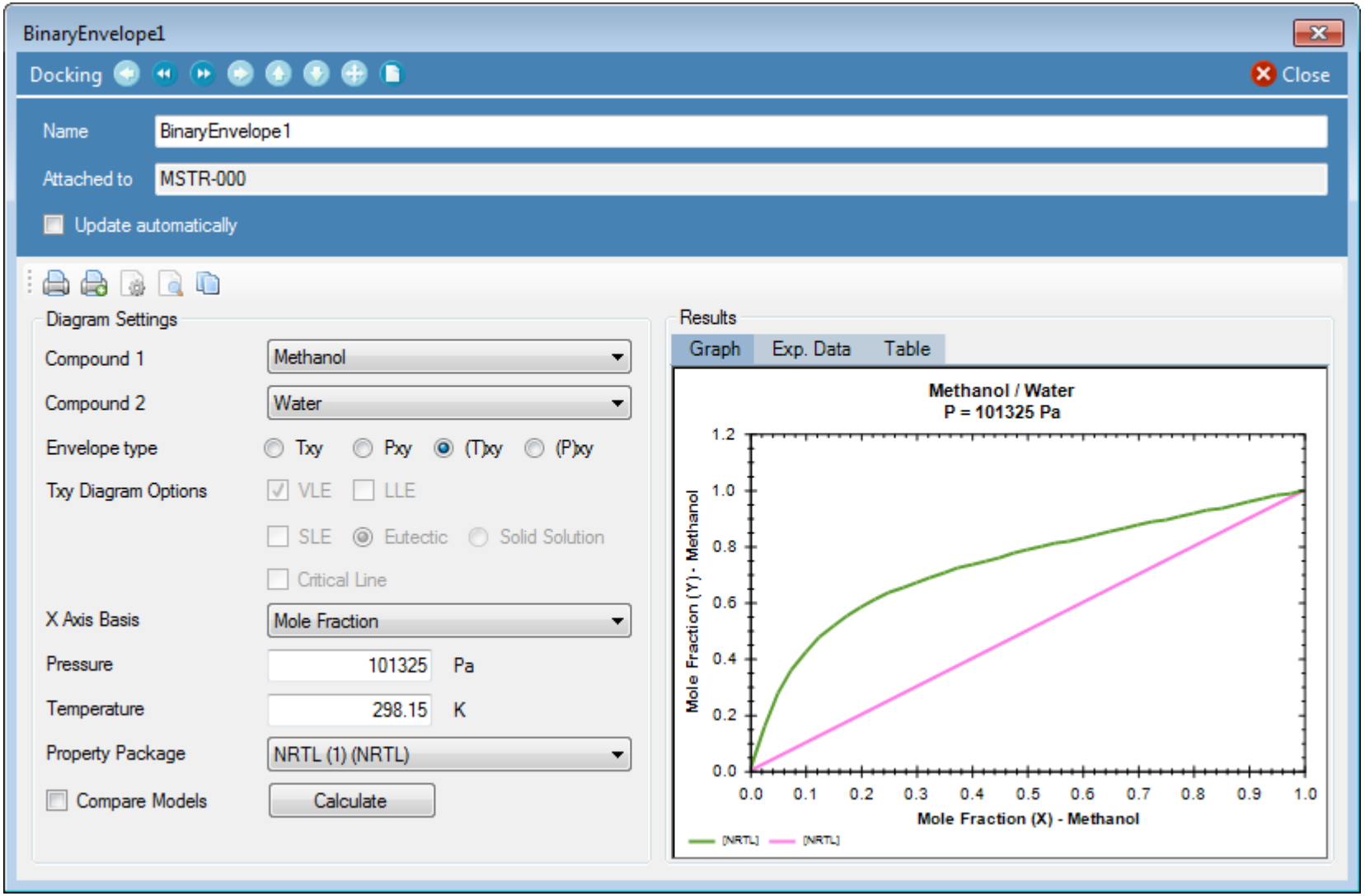
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagrama *T* vs *x/y* a 1 atm utilizando NRTL



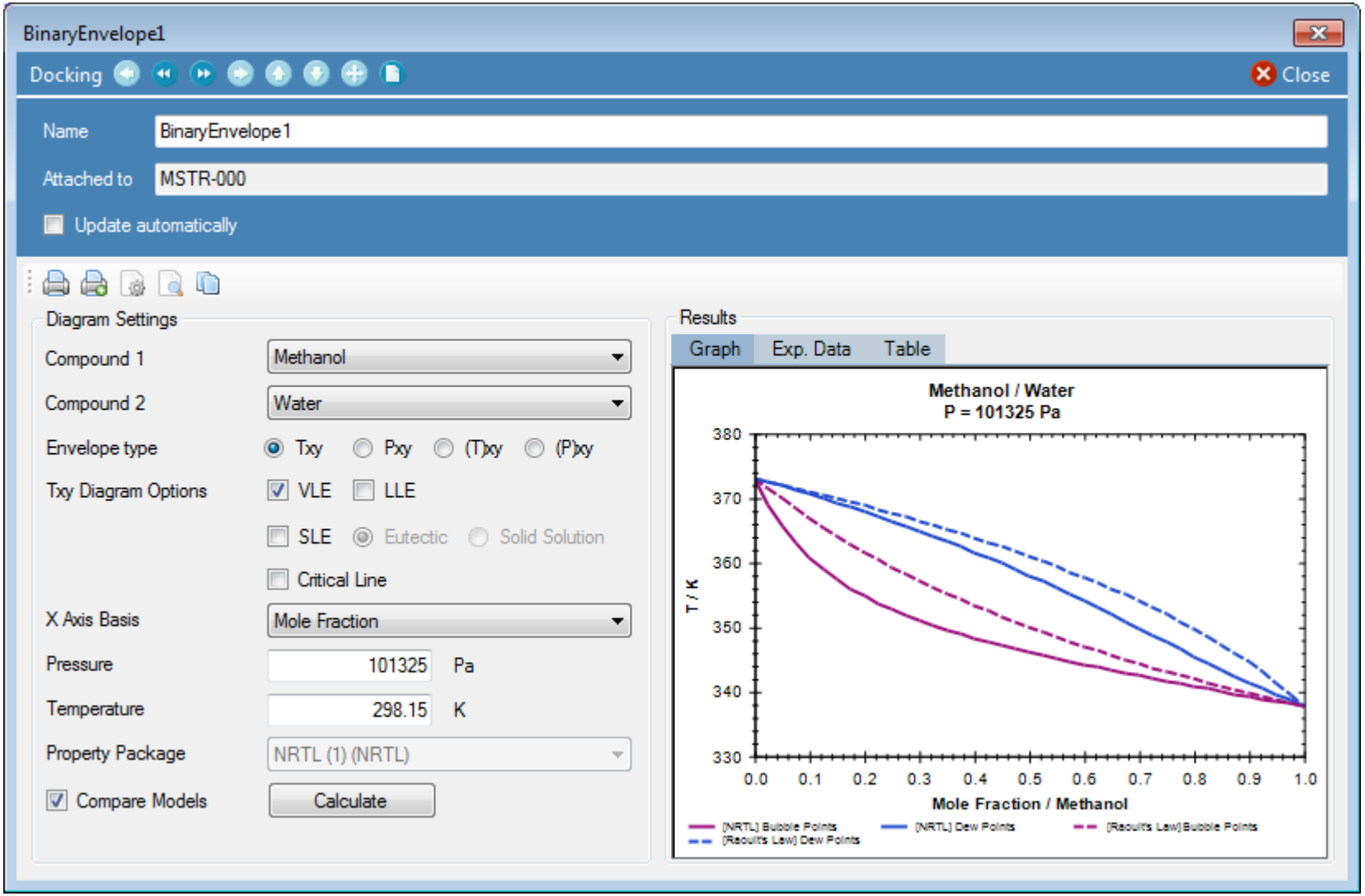
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagrama *y* vs *x* a 1 atm utilizando NRTL



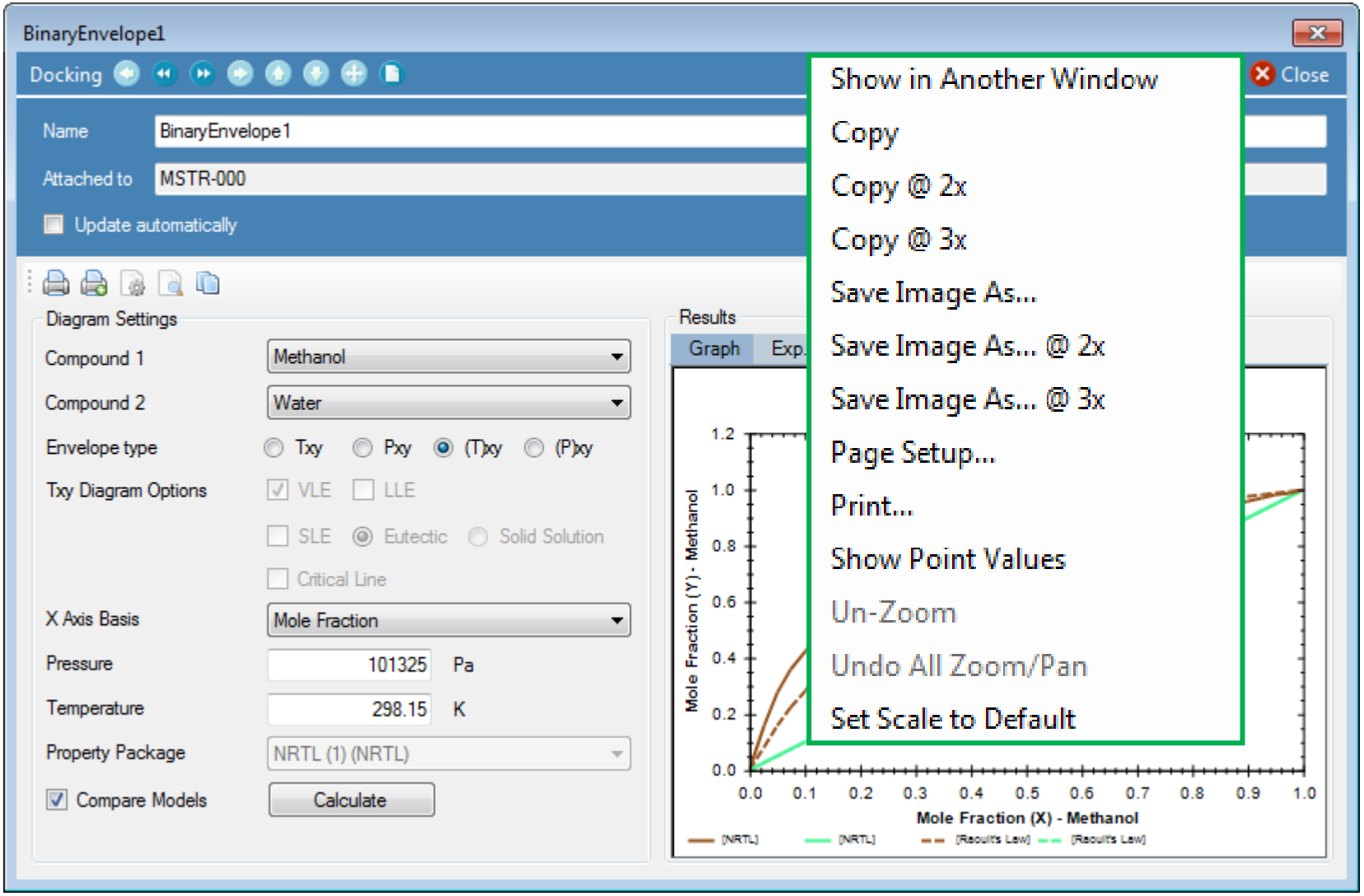
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagramas *T* vs *x/y* a 1 atm comparando los modelos fisicoquímicos.



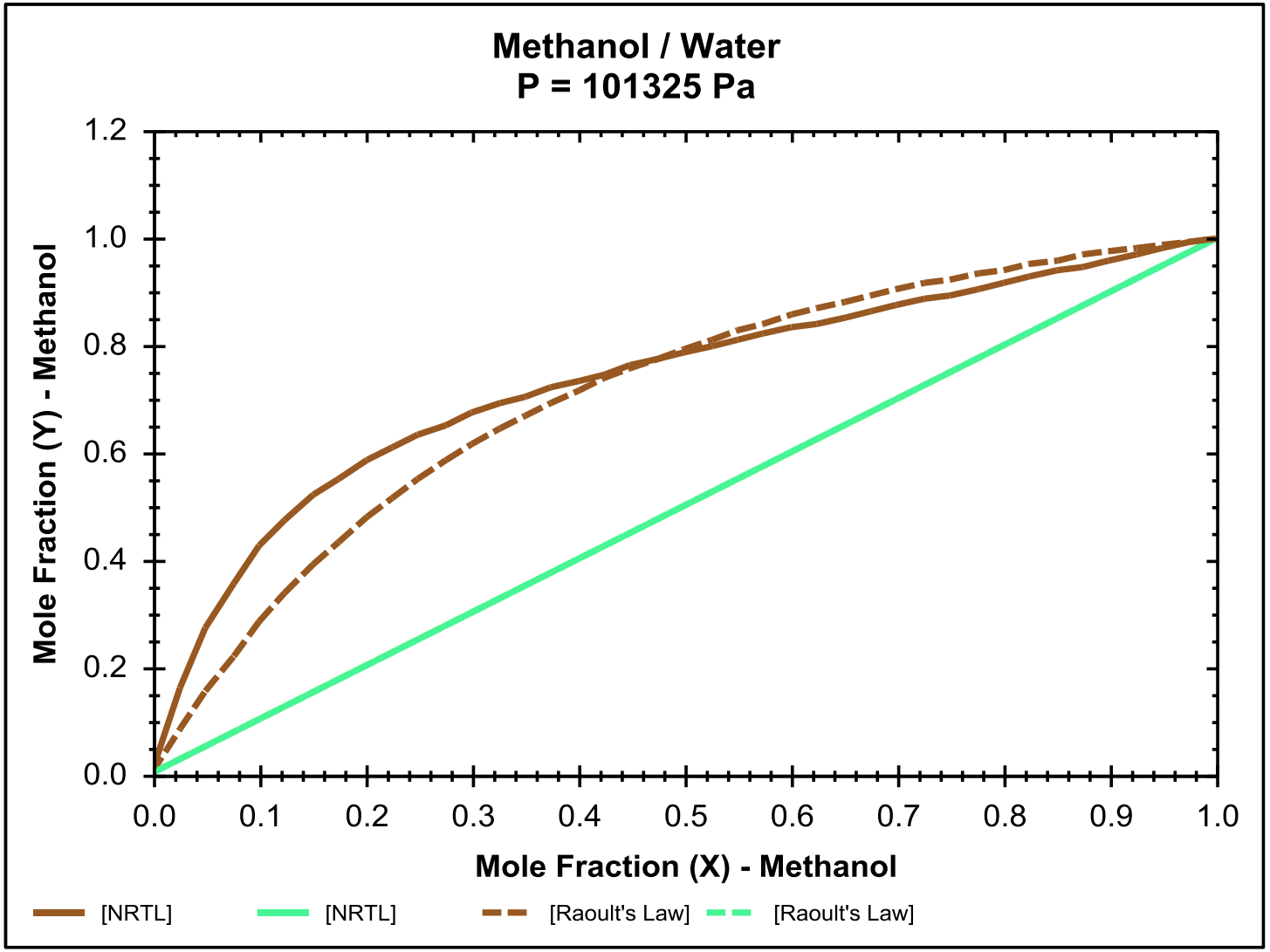
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagramas *y* vs *x* a 1 atm comparando los modelos fisicoquímicos.



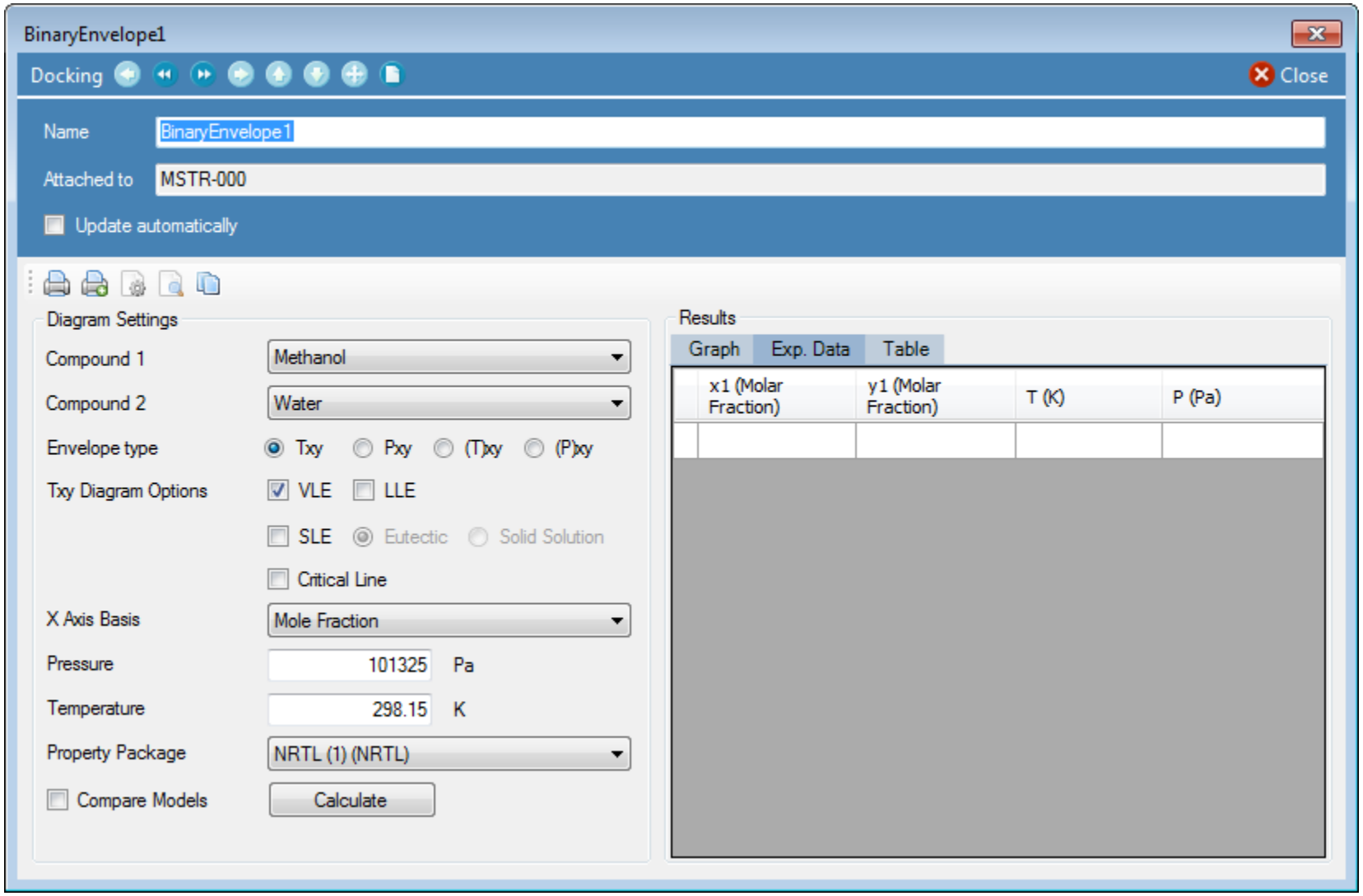
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagramas *y* vs *x* a 1 atm comparando los modelos fisicoquímicos.



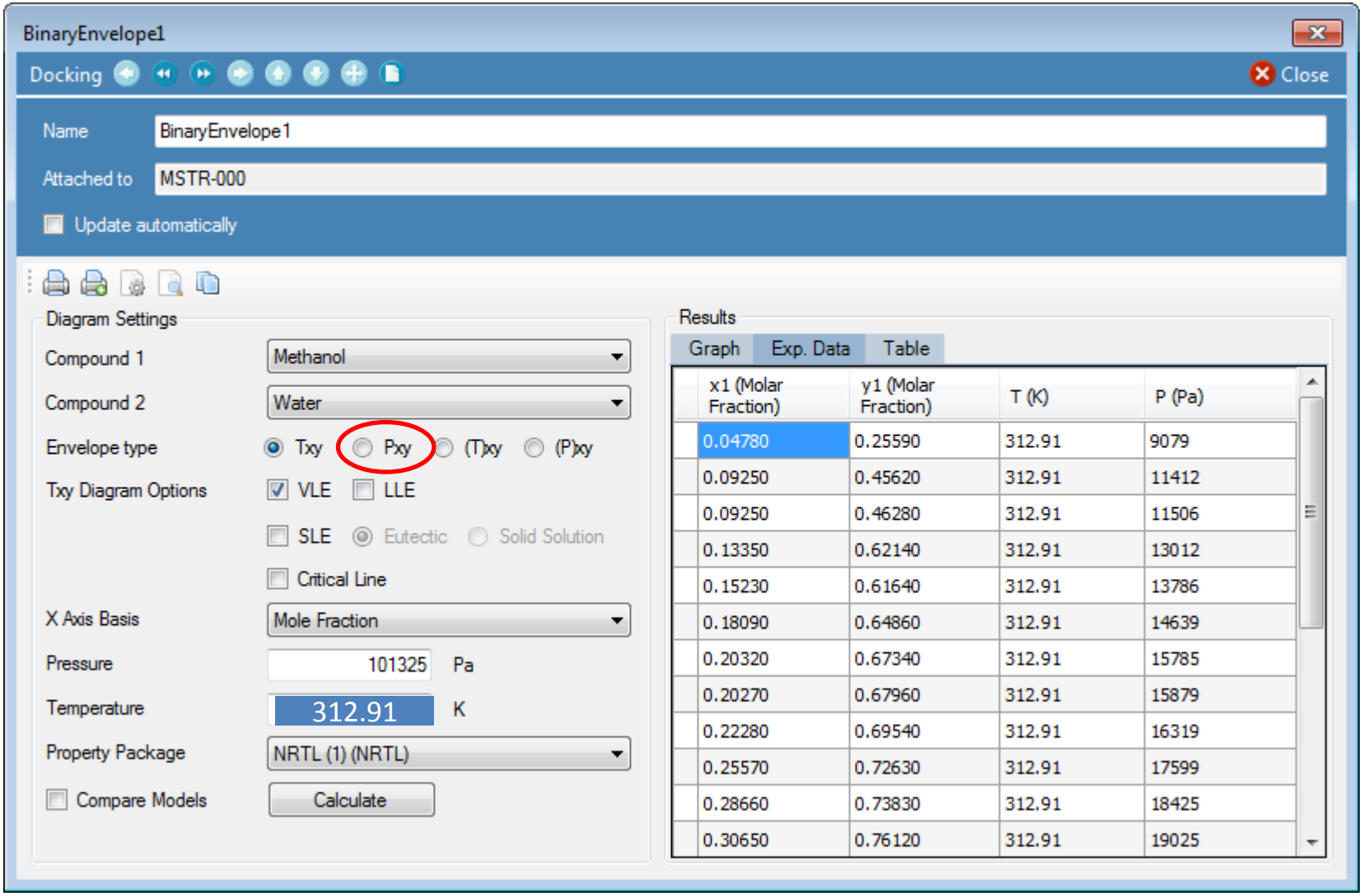
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Inclusión de datos experimentales



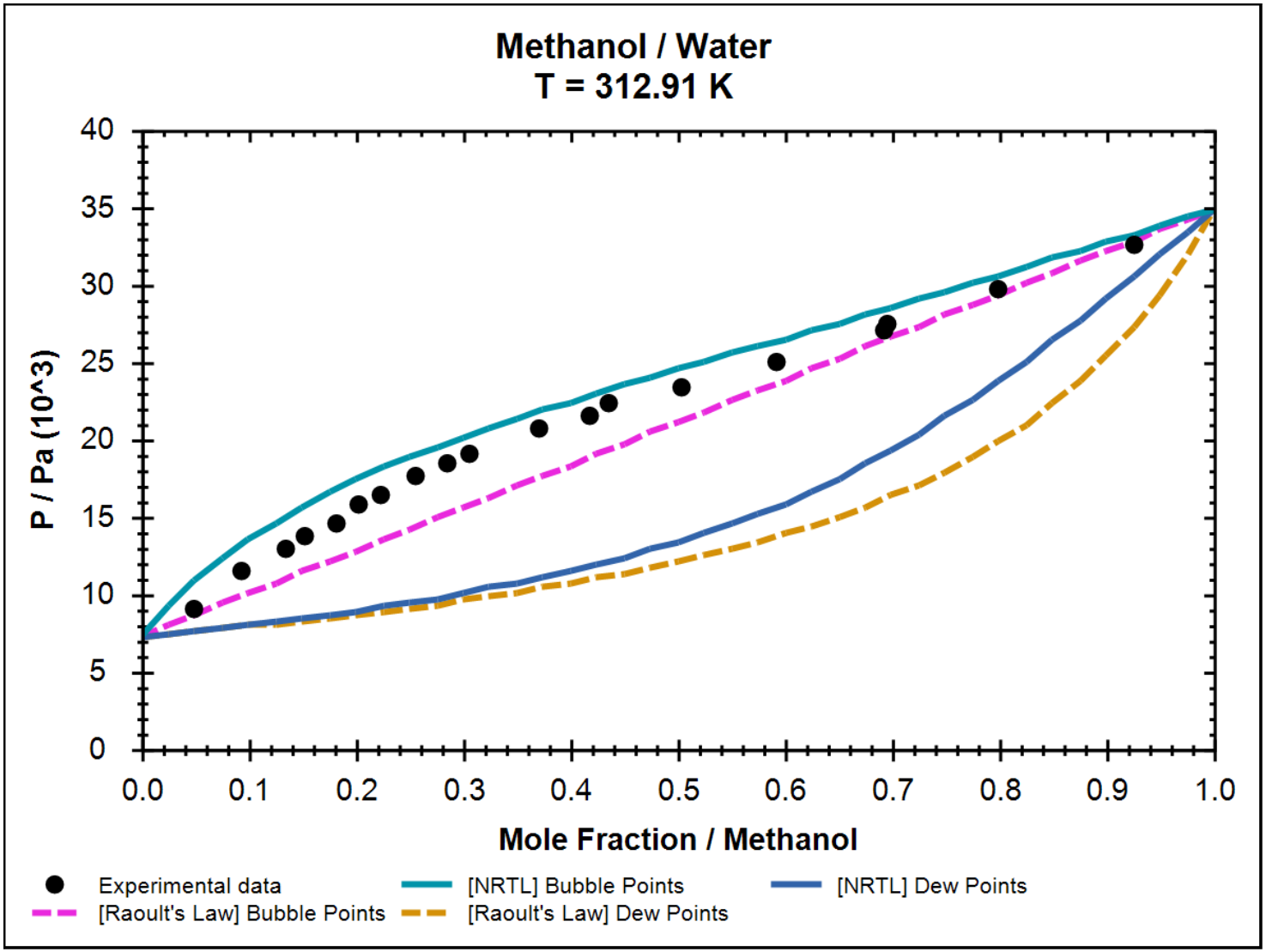
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Inclusión de datos experimentales



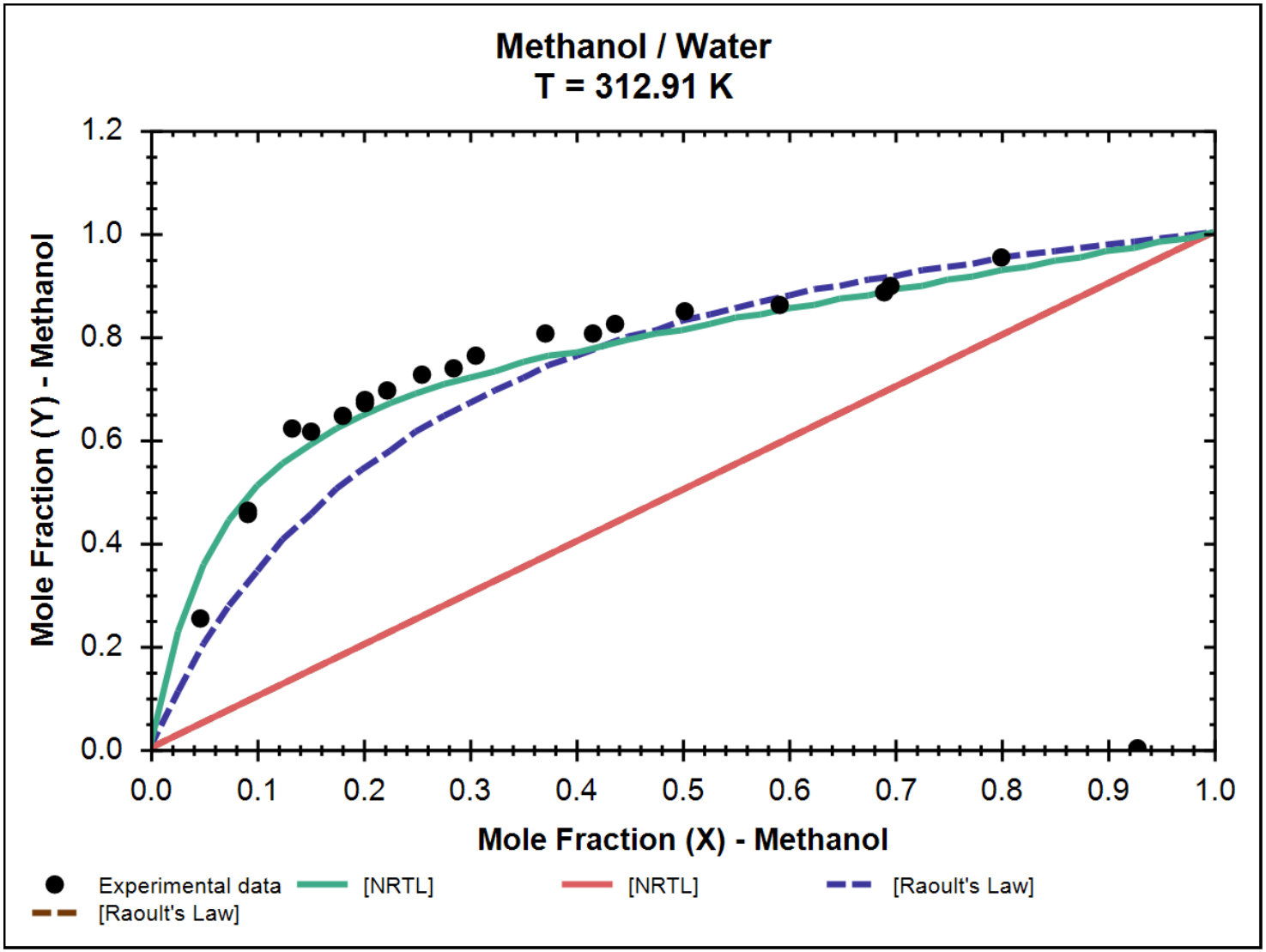
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagramas *P* vs *x/y* a 312.91 K comparando NRTL, RL y datos experimentales



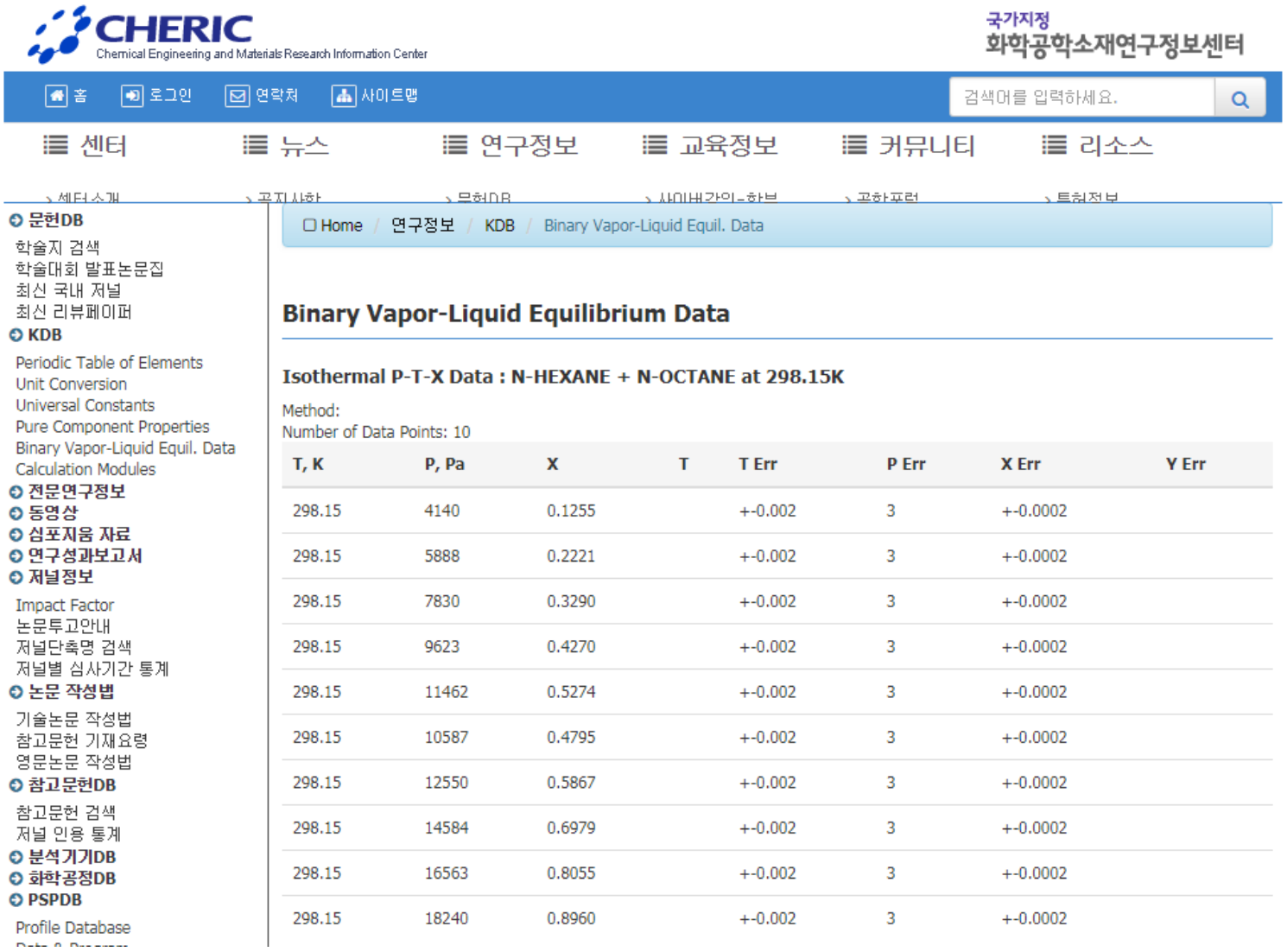
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

Diagramas *y* vs *x* a 312.91 K comparando NRTL, RL y datos experimentales



Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

n-Hexano (1) y n-Octano (2) a 298.15 K



Binary Vapor-Liquid Equilibrium Data

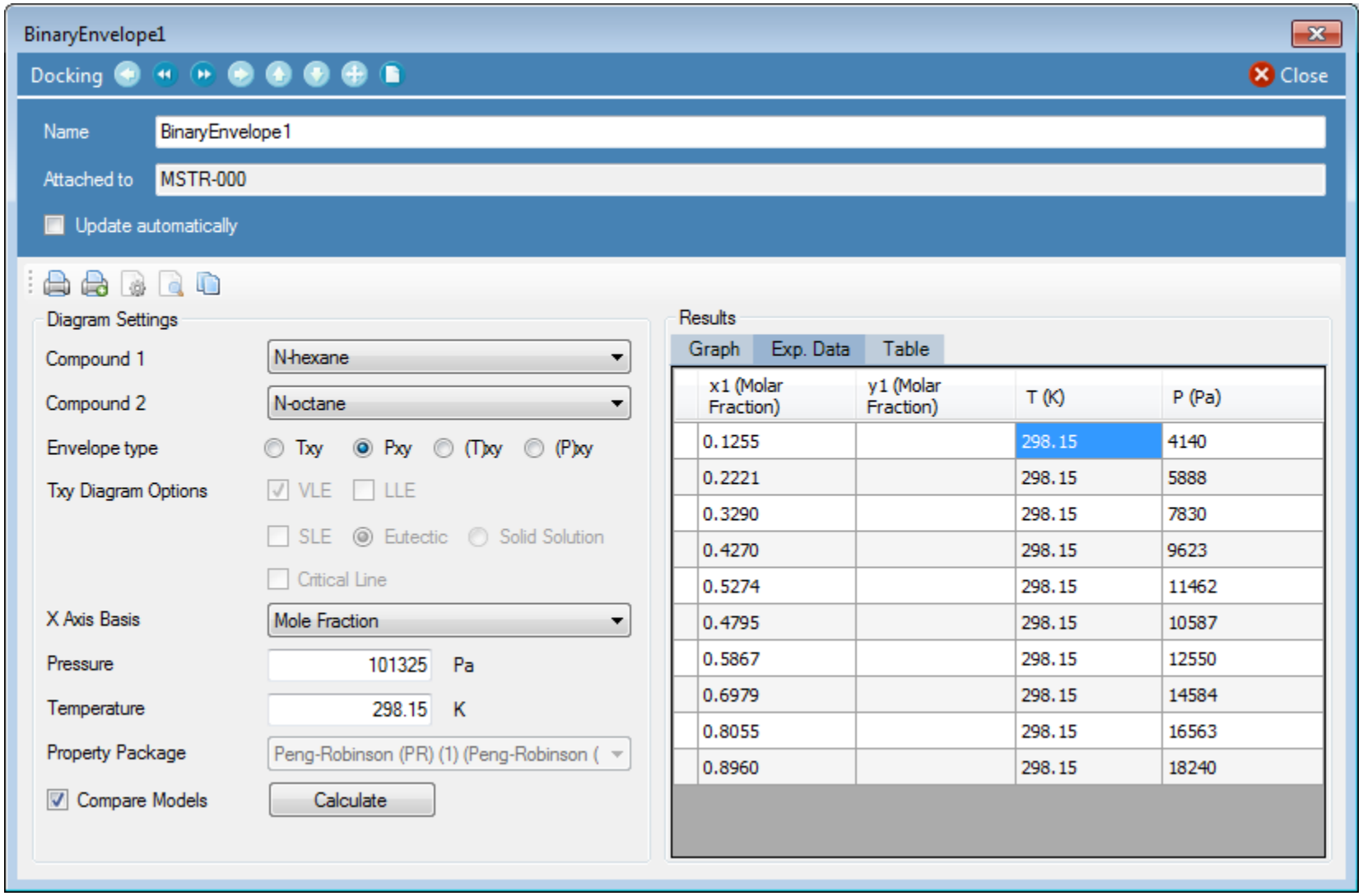
Isothermal P-T-X Data : N-HEXANE + N-OCTANE at 298.15K

Method:
Number of Data Points: 10

T, K	P, Pa	X	T	T Err	P Err	X Err	Y Err
298.15	4140	0.1255		+-0.002	3	+-0.0002	
298.15	5888	0.2221		+-0.002	3	+-0.0002	
298.15	7830	0.3290		+-0.002	3	+-0.0002	
298.15	9623	0.4270		+-0.002	3	+-0.0002	
298.15	11462	0.5274		+-0.002	3	+-0.0002	
298.15	10587	0.4795		+-0.002	3	+-0.0002	
298.15	12550	0.5867		+-0.002	3	+-0.0002	
298.15	14584	0.6979		+-0.002	3	+-0.0002	
298.15	16563	0.8055		+-0.002	3	+-0.0002	
298.15	18240	0.8960		+-0.002	3	+-0.0002	

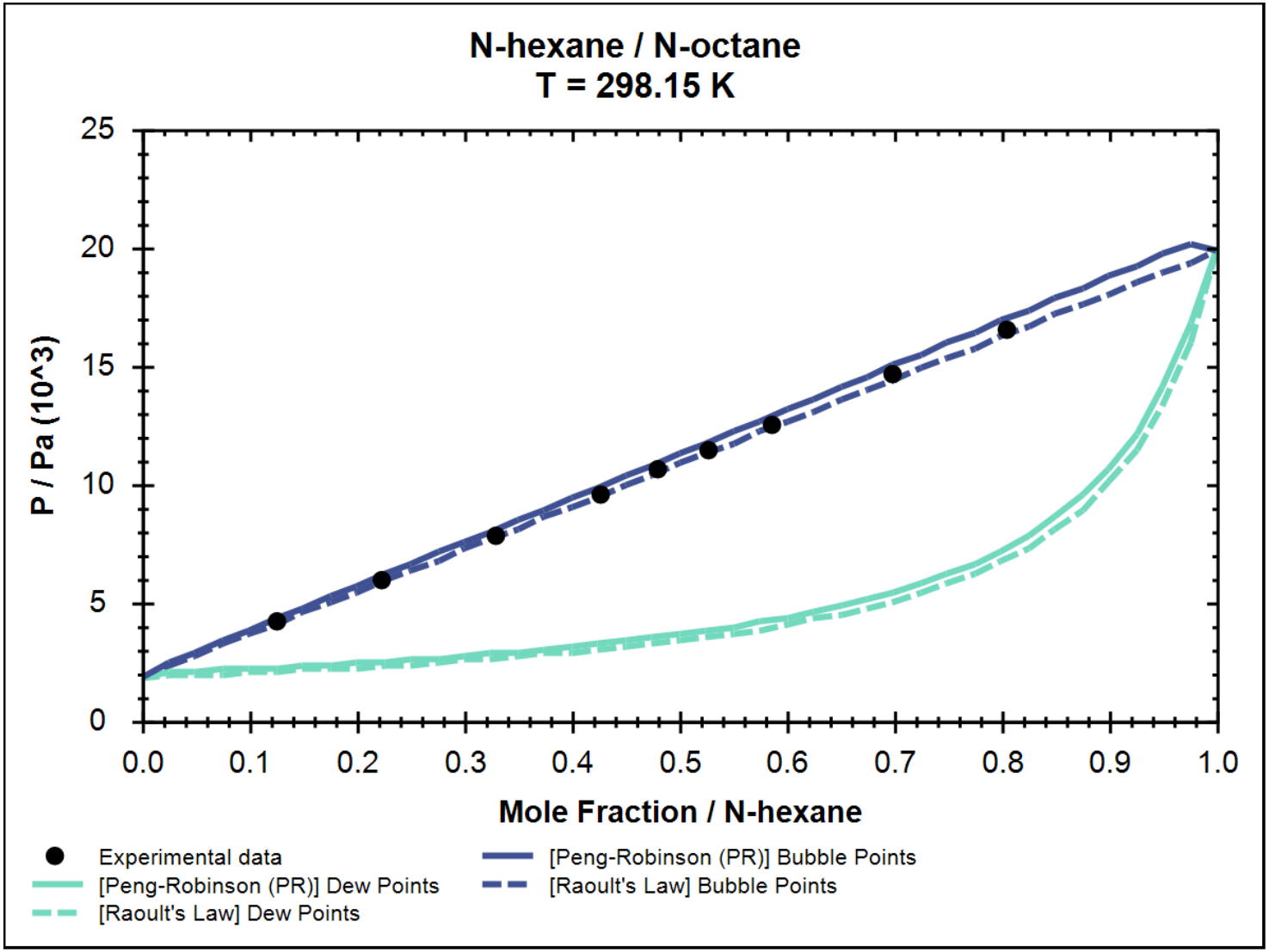
Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

N-Hexano (1) y n-octano (2) a 298.15 K

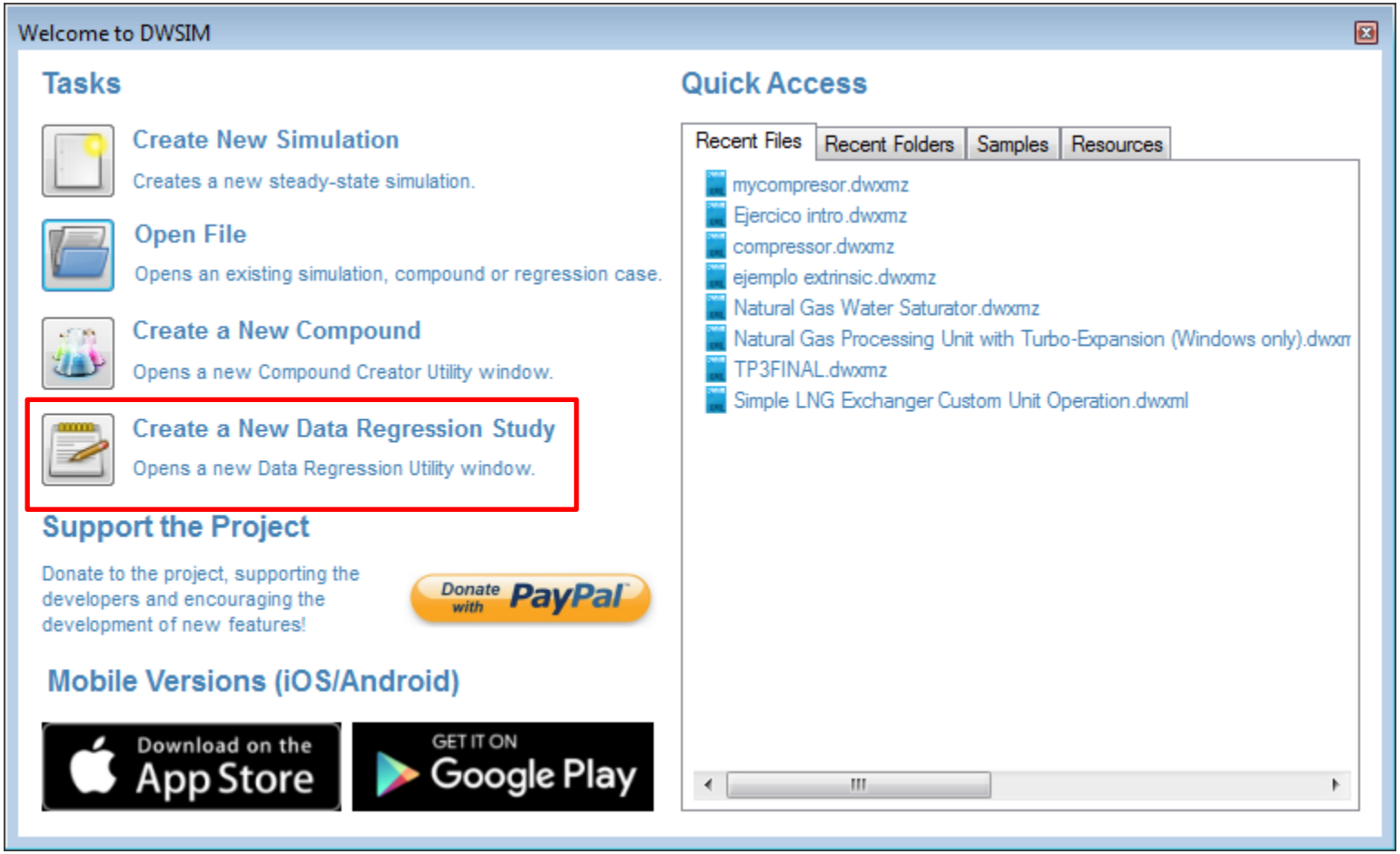


Diagramas de equilibrio líquido-vapor para mezclas binarias

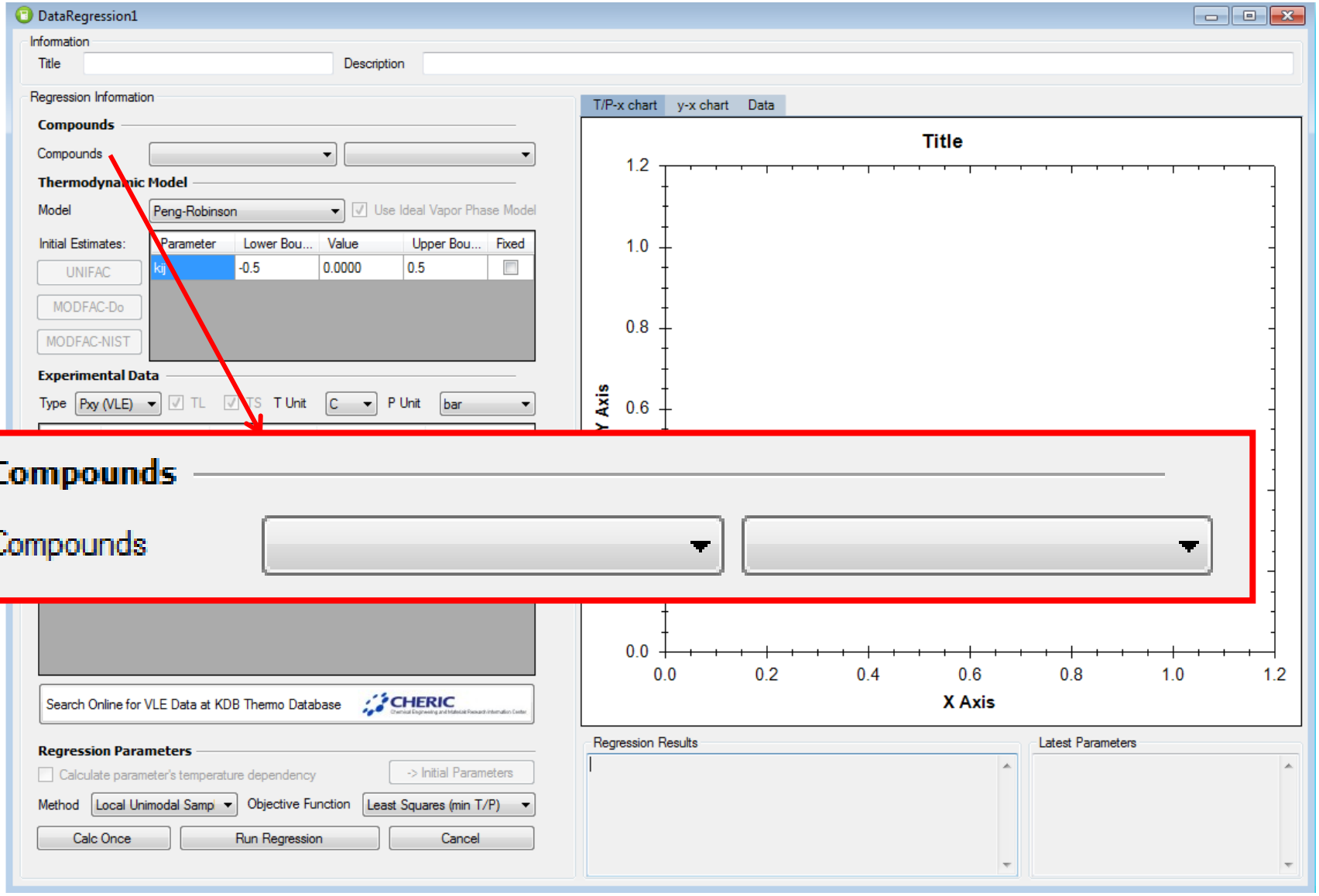
N-Hexano (1) y n-octano (2) a 298.15 K, diagrama *P* vs *x* (PR y RL)



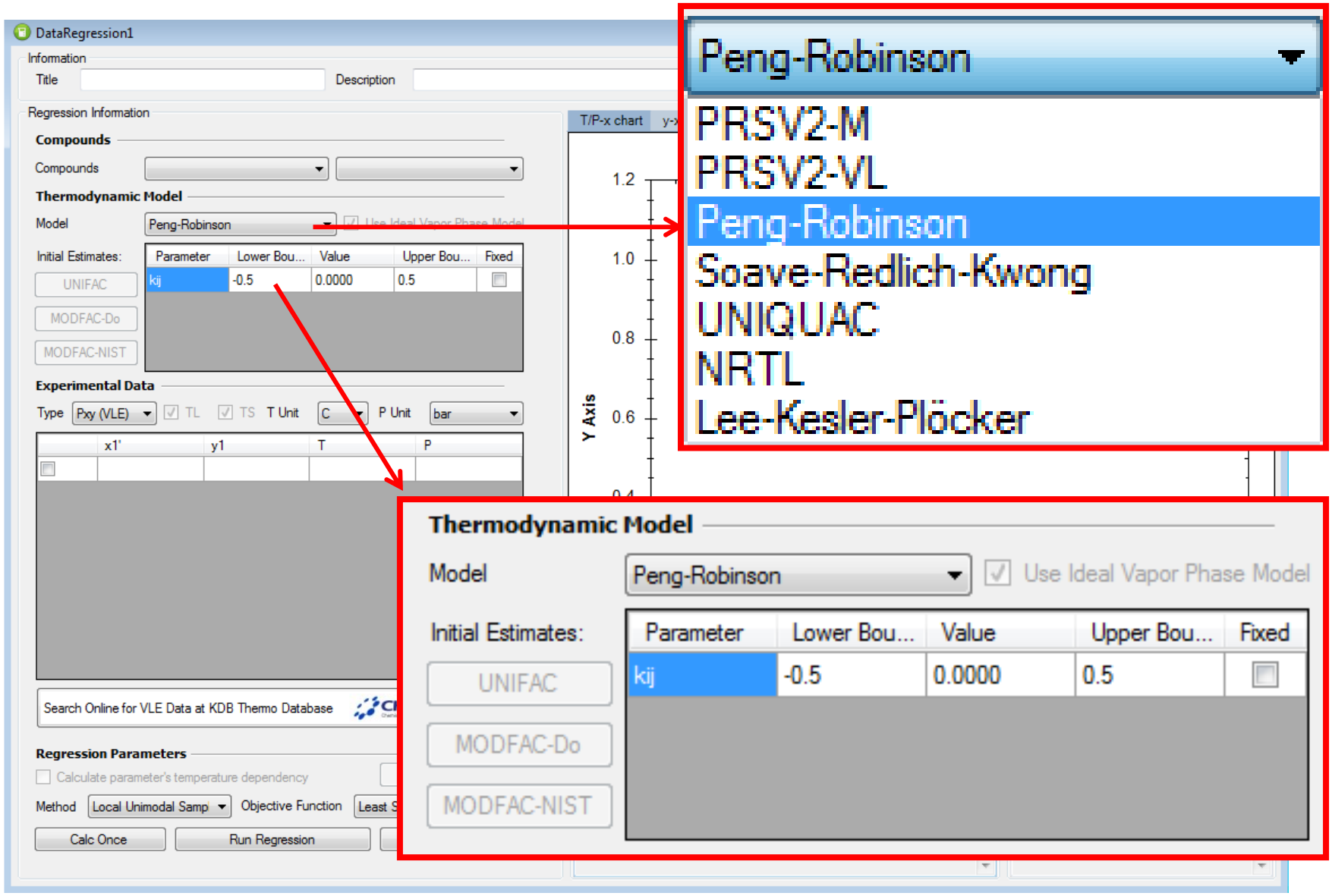
Regresión a partir de datos experimentales



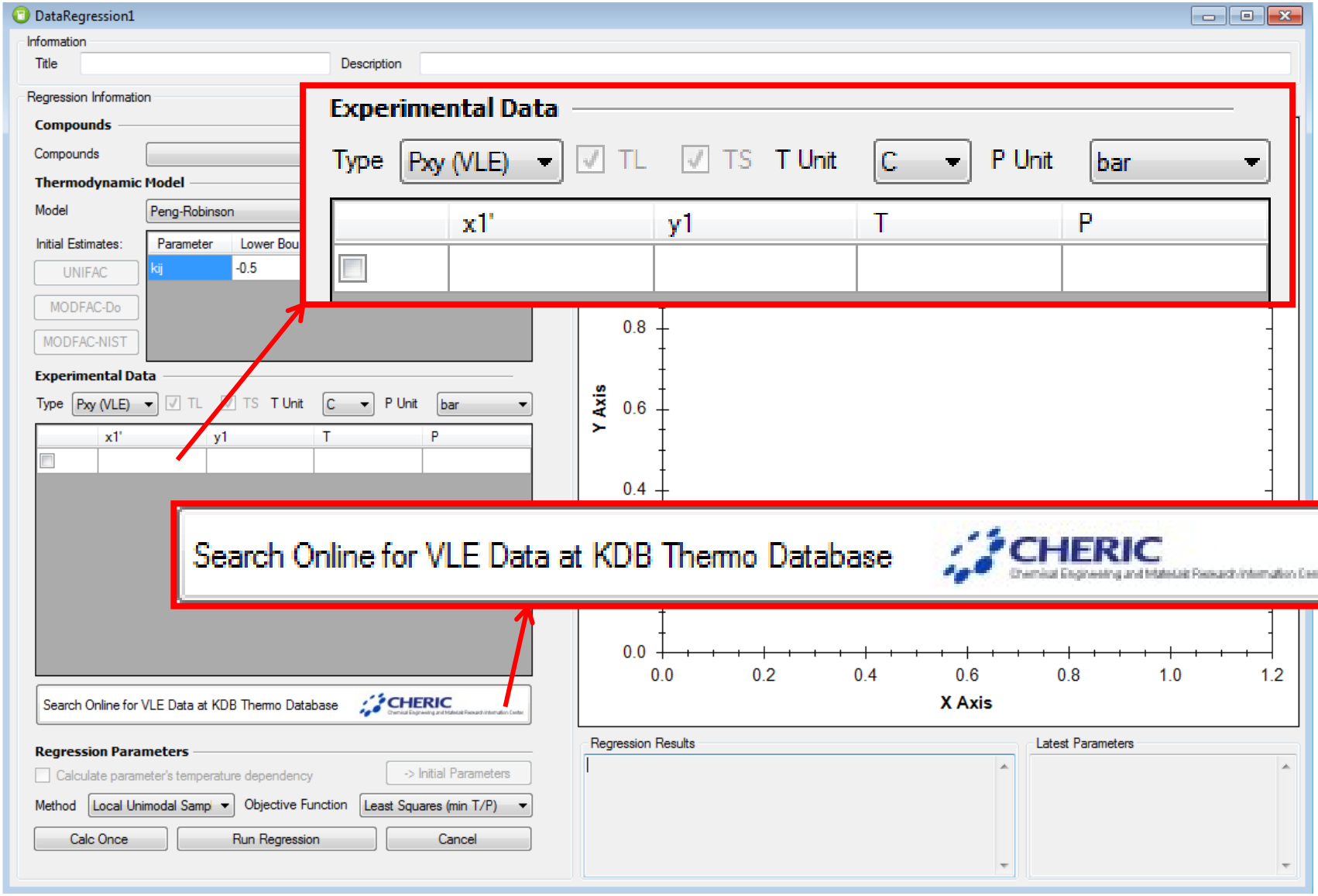
Regresión a partir de datos experimentales



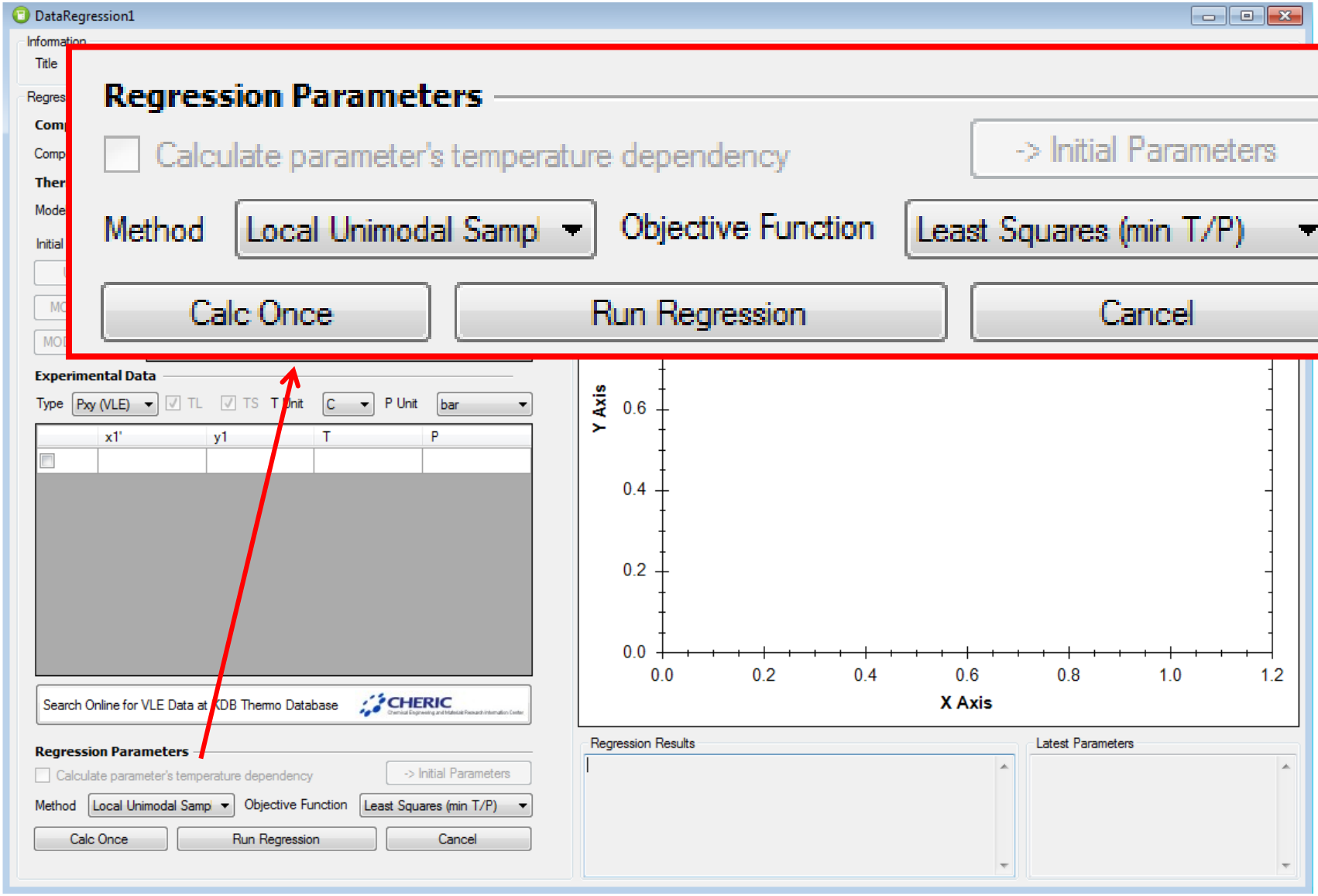
Regresión a partir de datos experimentales



Regresión a partir de datos experimentales



Regresión a partir de datos experimentales



Regresión a partir de datos experimentales

Regression Information

Compounds

Compounds: Methanol | Water

Thermodynamic Model

Model: NRTL — Use Ideal Vapor Phase Model

Initial Estimates: UNIFAC | MODFAC-Do | MODFAC-NIST

Parameter	Lower Bou...	Value	Upper Bou...	Fixed
A12 (cal/mol)	-5000	58.1899	5000	☐
A21 (cal/mol)	-5000	246.4148	5000	☐
alpha12	0	0.2661	0.8	☑

Experimental Data

Type: Pxy (VLE) — TL — TS — T Unit: K — P Unit: kPa

	x1'	y1	T	P
☑	0.0478	0.2559	312.91	9.079
☑	0.0925	0.4562	312.91	11.412
☑	0.0925	0.4628	312.91	11.506
☑	0.1335	0.6214	312.91	13.012
☑	0.1523	0.6164	312.91	13.786
☑	0.1809	0.6486	312.91	14.639
☑	0.2032	0.6734	312.91	15.785
☑	0.2027	0.6796	312.91	15.879
☑	0.2228	0.6954	312.91	16.319

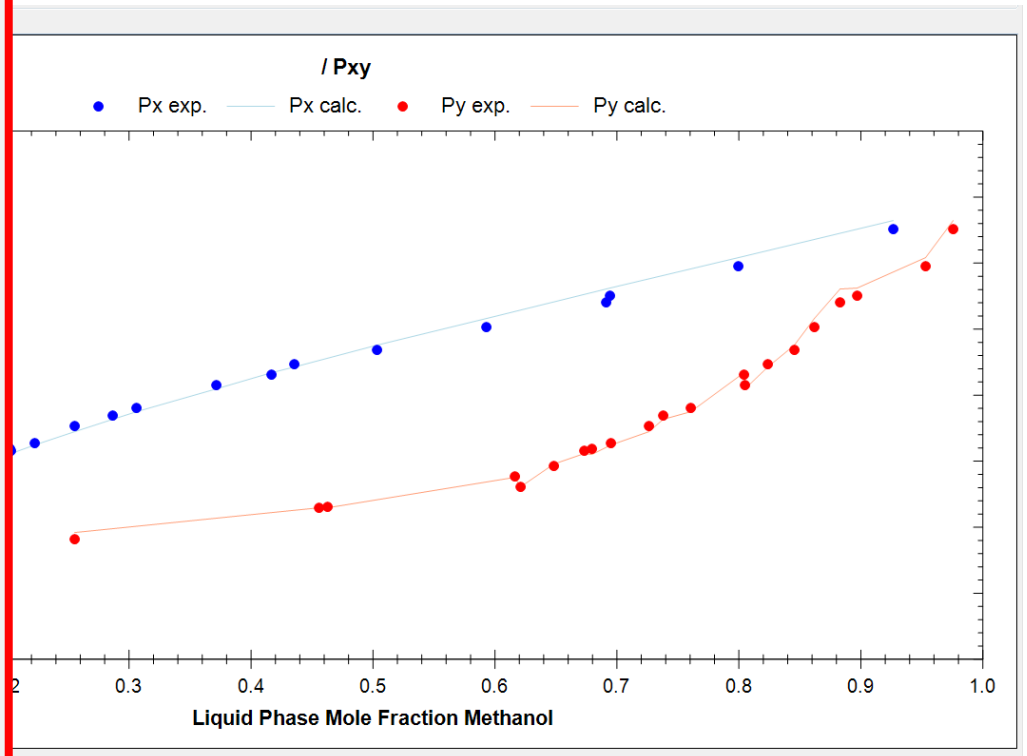
Search Online for VLE Data at KDB Thermo Database — CHERIC

Regression Parameters

☐ Calculate parameter's temperature dependency — -> Initial Parameters

Method: Local Unimodal Samp — Objective Function: Least Squares (min T/P)

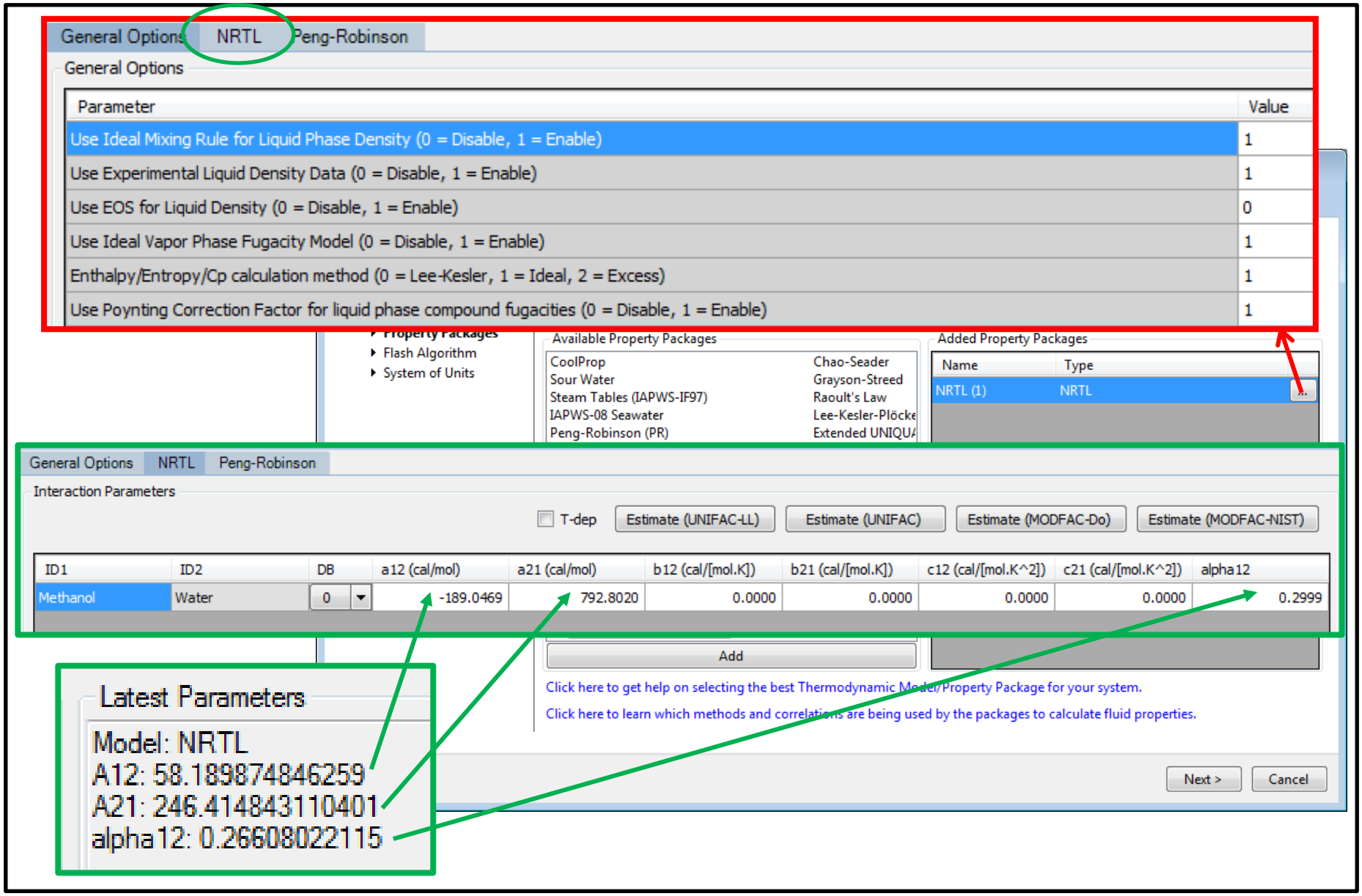
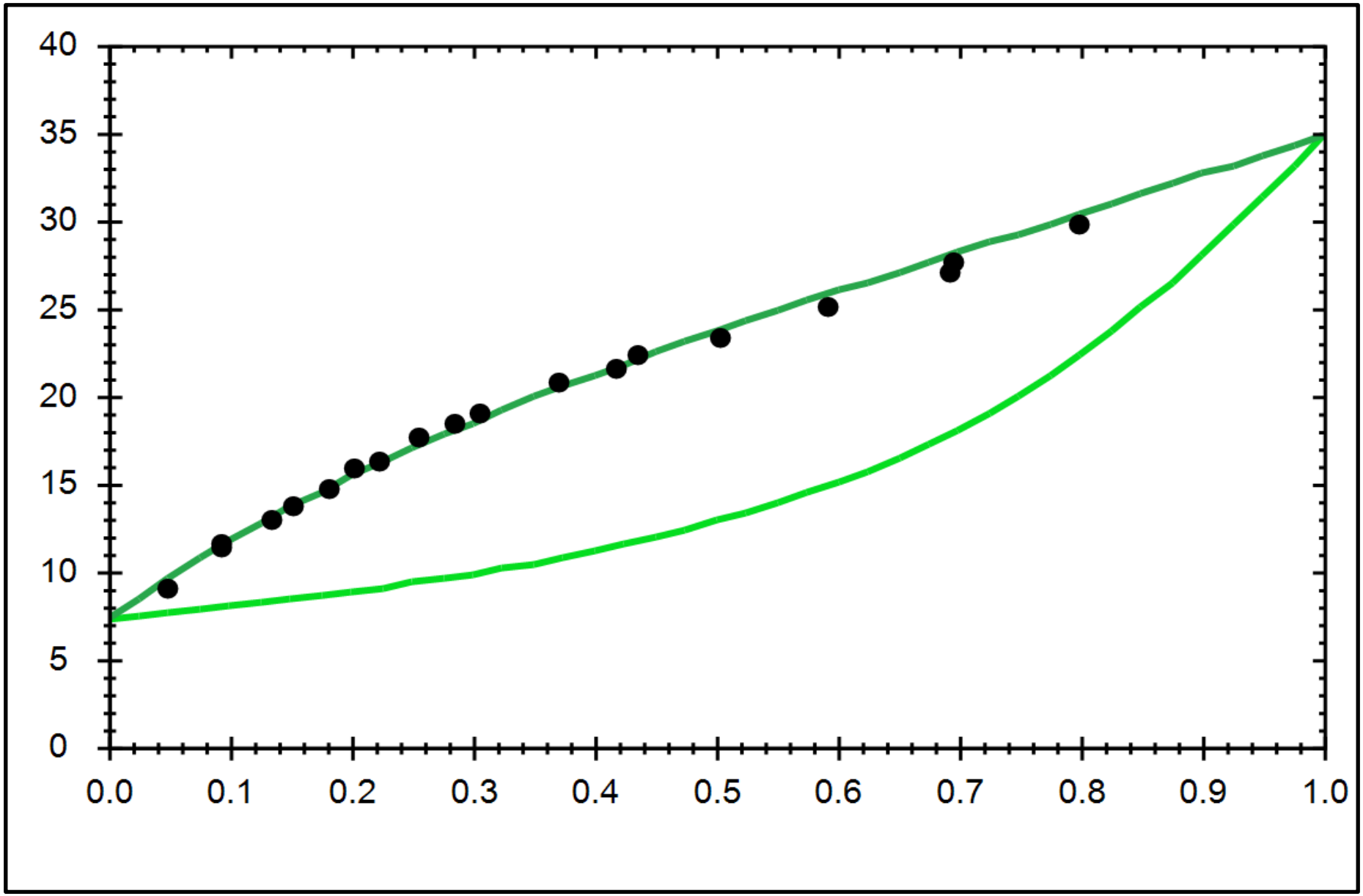
Calc Once | Run Regression | Cancel



Latest Parameters

Model: NRTL
A12: 58.189874846259
A21: 246.414843110401
alpha12: 0.26608022115

Regresión a partir de datos experimentales (utilización de resultados)



Regresión a partir de datos experimentales (comparación)