

Combinación de diversas aplicaciones de software de libre distribución para la simulación y diseño de equipos de Operaciones de Separación.

M^a Isabel Aguilar*, Víctor Meseguer, Juan F. Ortuño

(*maguilar@um.es)

Universidad de Murcia, Departamento de Ingeniería Química, Facultad de Química, Campus de Espinardo 30100, Murcia, España

Palabras clave: (simulación; separación; COCO; ChemSep; KG-TOWER).

Resumen

En la actualidad es fundamental para un ingeniero químico conocer herramientas de cálculo y simulación que puedan servir para resolver de forma eficaz un determinado problema. Actualmente hay más de 50 simuladores de procesos disponibles, entre los que cabe destacar Aspen y CHEMCAD. Estos últimos tienen un elevado coste de adquisición, por lo que resulta de gran interés disponer de herramientas de libre distribución que puedan ser utilizadas por los estudiantes fuera del entorno universitario.

En este trabajo se presenta las ventajas que aporta el uso combinado del simulador COCO (Cape Open to Cape Open) con las herramientas ChemSep y KG-TOWER, todos ellos disponibles de forma gratuita.

El simulador COCO es un software gratuito y de libre distribución desarrollado y mantenido por AmsterCHEM [1]. Es compatible con CAPE OPEN (Computer-Aided Process Engineering), conjunto de estándares que permite la comunicación entre diversas herramientas y aplicaciones de software de ingeniería química.

Integra varias aplicaciones: un entorno para diagramas de flujo de proceso (COFE), un paquete de unidades de operaciones unitarias (COUSCOUS), bases de datos de propiedades termodinámicas (TEA) y una aplicación que permite especificar diversas cinéticas de reacción o de equilibrio, así como reactores simples (CORN).

COCO es compatible con ChemSep [2] y permite insertar unidades desde dicho programa, aprovechando las ventajas que ofrece este último. ChemSep realiza la simulación y análisis de unidades individuales de separación (columnas de destilación, absorción, etc.), con un análisis más detallado. La integración de los resultados obtenidos con ChemSep en un proceso global se logra combinándolo con COCO.

Una vez realizada la simulación con éxito, ChemSep presenta una serie de pestañas que muestran los resultados mediante una gran variedad de tablas y gráficos, entre ellos el del método de McCabe-Thiele. Dichos resultados se pueden exportar a una hoja de cálculo. Además, en el simulador ChemSep es posible realizar un análisis simplificado de una columna de rectificación aplicando el método de Fenske-Underwood-Gilliland (método FUG). Por otra parte, ChemSep permite estimar los principales parámetros para el diseño de columnas de contacto vapor-líquido tanto de platos (de campanas de borbotado, de orificio y de válvula) como de relleno (al azar y estructurado).

ChemSep también realiza una estimación sencilla de costes generales utilizando las correlaciones para columnas de platos de Economopoulos, 1978 [3], y las correlaciones de costes de Douglas [4].

Los resultados preliminares de diseño de columna proporcionados por ChemSep se pueden utilizar como valores iniciales en software de proveedores de columnas a nivel industrial. Estos programas permiten un diseño más detallado y con elementos internos ya disponibles comercialmente. Por ejemplo, ChemSep permite la exportación directa de los resultados obtenidos al software KG-TOWER, de Koch-Glitsch [5].

La combinación de estos tres programas se ha aplicado al diseño preliminar de diversos procesos de separación tales como separación de mezclas benceno-tolueno-xileno, recuperación de dimetilformamida de una corriente acuosa, etc.

Referencias

- [1] COCO. COCO-the CAPE-OPEN to CAPE-OPEN simulator <https://www.cocosimulator.org/> (accessed 2022-04-11).
- [2] Kooijman, H. A.; Taylor, R. ChemSep: Program - Overview <http://www.chemsep.com/> (accessed 2021-02-08).
- [3] Economopoulos, A. P. Computer Design of Sieve Trays and Tray Columns. *Chem. Eng. (New York)* **1978**, *85* (27), 109-120.
- [4] Kooijman, H. A.; Taylor, R. *The ChemSep Book Second Edition*; 2000.
- [5] Koch-Glitsch. Koch-Glitsch <https://www.koch-glitsch.com/> (accessed 2022-02-08).