INSTITUTO TECNOLÓGICO DE DURANGO
DEPARTAMENTO DE INGENIERÍAS QUÍMICA Y BIOQUÍMICA
SEMESTRE ENERO-JUNIO 2006

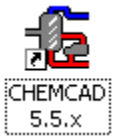
Diseño de Procesos 2 – Grupo 8X
Titular: Dr. Carlos Francisco Cruz Fierro

INTRODUCCIÓN A CHEMCAD 5.5.0

CHEMCAD (Chemstations, Inc.) es un paquete de software de simulación de procesos ampliamente usado en la industria. Dado el diseño conceptual de un proceso químico, CHEMCAD usa modelos matemáticos de equipos de proceso y propiedades físicas y termodinámicas para predecir el comportamiento del proceso. Esta información puede entonces ser usada en forma iterativa para la optimización del diseño del proceso. CHEMCAD puede manejar sistemas de alta complejidad, incluyendo sistemas con múltiples columnas de separación, reactores químicos, destilación de mezclas reaccionantes, e incluso soluciones electrolíticas como soluciones de ácidos o bases inorgánicas.

Es importante resaltar que CHEMCAD no efectúa el diseño del proceso. Toma un diseño proporcionado por el usuario y simula el desempeño del proceso especificado en dicho diseño. Es necesario comprender los principios básicos de ingeniería química involucrados, de tal forma que se puedan proporcionar valores razonables de los parámetros de entrada y para evaluar la validez de los resultados predichos. Por ejemplo, el usuario debe tener idea del comportamiento del equipo antes de usar CHEMCAD.

Para demostrar el uso de CHEMCAD, se preparará un balance de masa simple alreadedor de una columna de destilación usada para separar una mezcla binaria. Se alimentan a la columna 1000 kmol/hr de una mezcla de etanol-agua a 25°C, 1.0 atm, conteniendo 2% mol de etanol. Se especificará que el 95.3% del etanol en la alimentación saldrá en el destilado, y 99.54% del agua en la alimentación saldrá en el producto de fondo. CHEMCAD completará el balance de masa para la columna y ayudará a determinar el tamaño de columna necesario para obtener la separación.



Acceso a CHEMCAD: CHEMCAD está instalado en todas las computadoras en el salón LIQ1. Para acceder, basta con entrar en la cuenta de ESTUDIANTE y hacer doble click en el ícono de CHEMCAD que se encuentra en el escritorio. También puede ser accedido a través del menú de inicio.

Crear una nueva simulación: Para comenzar con una nueva simulación, seleccionar File/New Job. Aparecerá una ventana donde se elige en qué carpeta se guardará la simulación. La carpeta predeterminada es `C:\CC5DATA`. Es aconsejable que cada estudiante cree una carpeta con su nombre en `CC5DATA` y luego una subcarpeta para cada simulación. Es responsabilidad del alumno tomar las precauciones necesarias para salvaguardar sus archivos. Estas computadoras son para uso de todos los alumnos de la carrera, y no existe garantía de la seguridad de los archivos. También es conveniente salvar frecuentemente su simulación mientras se trabaja.

En la pantalla, aparece una paleta con varias operaciones unitarias. Para la mayoría de las operaciones unitarias, al hacer click con el botón secundario (derecho) aparece una sub-paleta que muestra diferentes iconos de la misma operación unitaria.

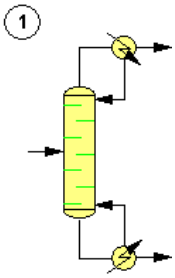
Seleccionar el sistema de unidades: En el menú *Format*, seleccionar Engineering Units. En la ventana que aparece, se puede seleccionar un sistema típico de unidades (English, Alt SI, SI, Metric) o asignar unidades específicas a cada cantidad física. Para este problema, seleccionar el sistema SI.

Construir el diagrama de flujo del proceso: Involucra crear corrientes de alimentación y productos, crear operaciones unitarias, y conectarlas con corrientes de proceso. Para crear o modificar el diagrama de flujo, CC debe estar en modo "Flowsheet" (en el menú Mode → Flowsheet, o en la lista desplegable que se encuentra en la barra de botones)

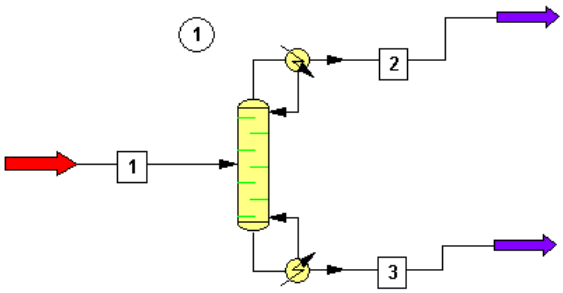
(**A**) Colocar una corriente de alimentación (Feed). Para hacerlo, seleccionar en la paleta la flecha roja, mover el mouse a la parte izquierda del área de trabajo, y hacer click. La flecha roja representando la corriente de alimentación debe aparecer en el campo de trabajo.

(**B**) Colocar dos corrientes de salida (Product). Seleccionar la flecha morada y colocar una flecha de producto en la parte superior derecha del diagrama. Repetir y colocar otra salida en la parte inferior derecha.

(**C**) Buscar ahora en la paleta el ícono para columna de destilación marcada como "Shorcut column". Esta operación unitaria efectúa cálculos de columnas de destilación empleando métodos simplificados y menos rigurosos, pero es la única que puede emplearse para estimar el número de platos y la ubicación del plato de alimentación. Colocar una columna en el centro del área de trabajo.



(**D**) Ahora se pueden añadir corrientes para conectar la alimentación, productos y la columna. Localizar el ícono "Streams" y hacer click en él. El cursor del mouse se convierte en cruz. Moverlo hasta la punta de la flecha roja (alimentación), donde el cursor se convierte en flecha negra. Hacer click para comenzar a dibujar la corriente. Luego, mover el cursor hasta la entrada de la columna. Cuando cambie a flecha, hacer click para completar la corriente. Repetir para crear corrientes uniendo cada salida de la columna con una de las flechas de productos. Al terminar, hacer click con el botón secundario y elegir "Stop drawing stream".



Estos son todos los pasos necesarios para preparar el diagrama de flujo para este ejemplo. Hay muchas otras opciones disponibles en la construcción del diagrama de flujo, algunas son cubiertas en el tutorial, y otras se van descubriendo con la práctica.

Hay que cambiar de modo de simulación (Mode → Simulation) para introducir el resto de la información. La paleta de operaciones unitarias desaparecerá.

Seleccionar componentes: Se identifican de antemano todos los compuestos químicos que van a aparecer en la simulación, en el menú Termophysical → Component List. En la ventana que aparece, escribir "ethanol" en el cuadro marcado como "Search for". Si el compuesto que se selecciona automáticamente no es el deseado, usar el botón "Next". Cuando se tenga seleccionado el compuesto deseado, usar el botón "Add" para incluir el etanol en la lista de componentes de la izquierda. Repetir para agregar el agua (water).

Opciones termodinámicas: Después de seleccionar los compuestos, el "sistema experto" de CHEMCAD tratará de seleccionar un modelo adecuado para el equilibrio líquido-vapor. Para el propósito de este ejercicio, basta usar la opción que selecciona el sistema (NRTL para el valor de K con coeficientes dados por UNIFAC VLE). Echar un vistazo a las diferentes opciones disponibles en cada cuadro de diálogo que se presente, para familiarizarse con las capacidades de CHEMCAD.

Definir la(s) corrientes de alimentación: Directamente haciendo doble click sobre la corriente (no en la flecha roja, sino en la línea que conecta la flecha roja con la columna) o usando el menú (Specifications → Feed Streams). Proporcionar valores para temperatura (25°C, convertir a Kelvin) y presión (1.0 atm, convertir a Pascales). Para los flujos de los componentes, proporcionar el flujo molar de cada componente por separado (20 kmol/hr de etanol y 980 kmol/hr de agua). El flujo total se calcula automáticamente (1000 kmol/hr).

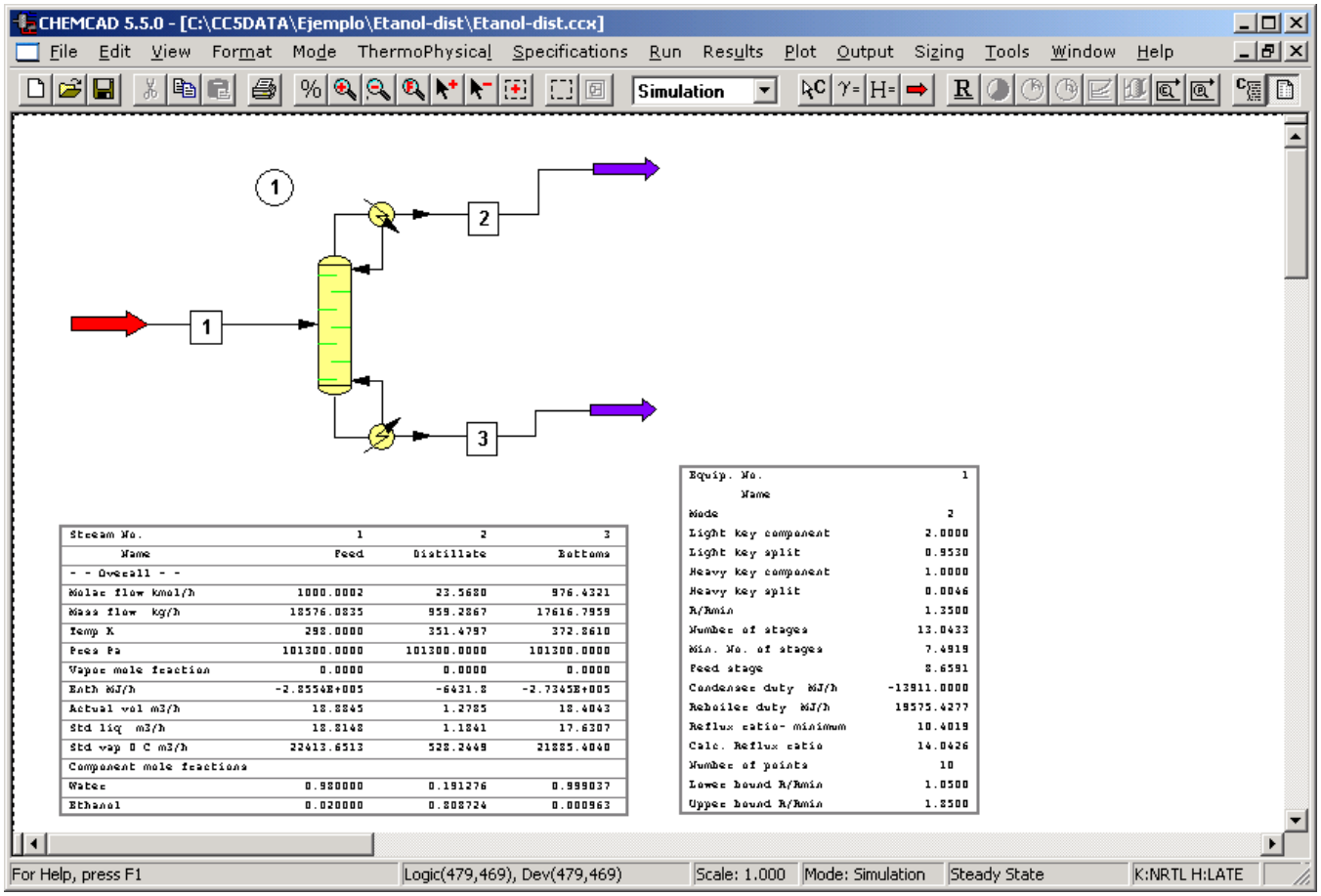
Proporcionar parámetros del equipo: También se puede hacer directamente en el equipo o a través del menú (Specifications → Select Unit Ops). Para la columna en cuestión, hay que seleccionar primero si se trata de un cálculo de diseño (Design) o de funcionamiento (Rating). En el cálculo de diseño, CHEMCAD calculará el número de etapas y la etapa óptima de alimentación para cumplir con ciertas especificaciones de las corrientes de salida. En el cálculo de funcionamiento, el usuario debe proporcionar el número de etapas y el plato de alimentación, y CHEMCAD calculará las composiciones de salida. Para este problema, seleccionar "Design; FUG with Fenske feed tray location".

Al especificar el equipo, no toda la información solicitada es necesario especificarla. De hecho, al proporcionar demasiados datos, es posible que se dé información contradictoria que dificulte el proceso de convergencia. De no estar seguros, es mejor no dar un dato; CHEMCAD indicará si realmente es indispensable. Para esta columna, especificar condensador total, una razón de reflujo/reflujo mínimo de 1.5, y las especificaciones de los componentes clave (ligero: etanol, split=0.953; pesado: agua, split=0.0046)

Correr la simulación: Ya se proporcionaron todos los datos necesarios para la simulación. Para simular, usar el menú (Run → Run All) o simplemente usar el botón R en la barra de botones.

Revisar los resultados: Bastante información se puede obtener de primera mano simplemente con colocar el mouse sobre una corriente o una operación unitaria. Si las unidades usadas para los flujos en los resultados no son adecuadas, se pueden cambiar con el menú (Results → Set Flow Units). Información más detallada se obtiene al hacer doble click en la corriente u operación. Para obtener información sobre las corrientes u operaciones unitarias directamente en el diagrama, hay que cambiar al modo de diagrama principal de flujo de proceso "Main PFD" (Mode → Main PFD) y agregar un listado de las corrientes (Format → Add Stream Box) o de operaciones unitarias (Format → Add Unit Op Box).

Al terminar, se debe tener un diagrama similar a éste:



Stream No.	1	2	3
Name	Feed	Distillate	Bottoms
- - Overall - -			
Molar flow kmol/h	1000.0002	23.5680	976.4321
Mass flow kg/h	18576.0835	959.2867	17616.7959
Temp K	298.0000	351.4797	372.8610
Pres Pa	101300.0000	101300.0000	101300.0000
Vapor mole fraction	0.0000	0.0000	0.0000
Enth MJ/h	-2.8554E+005	-6431.8	-2.7345E+005
Actual vol m3/h	18.8845	1.2785	18.4043
Std liq m3/h	18.8148	1.1841	17.6307
Std vap 0 C m3/h	22413.6513	528.2449	21885.4040
Component mole fractions			
Water	0.980000	0.191276	0.999037
Ethanol	0.020000	0.808724	0.000963

Equip. No.	1
Name	
Mode	2
Light key component	2.0000
Light key split	0.9530
Heavy key component	1.0000
Heavy key split	0.0046
R/Rmin	1.3500
Number of stages	13.0433
Min. No. of stages	7.4919
Feed stage	8.6591
Condenser duty MJ/h	-13911.0000
Reboiler duty MJ/h	19575.4277
Reflux ratio- minimum	10.4019
Calc. Reflux ratio	14.0426
Number of points	10
Lower bound R/Rmin	1.0500
Upper bound R/Rmin	1.2500

Recomendación: Siempre volver a correr la simulación (botón R) después de hacer algún cambio para asegurar que las corrientes y operaciones unitarias reflejen los cambios.