



UNIDAD 2 SIMULACIÓN MODULAR

Existen diferentes estrategias generales en simulación aplicada en ingeniería, dependiendo de la naturaleza del fenómeno o caso a simular. En muchos casos, la simulación está enfocada únicamente a un caso específico o a variaciones de un caso. En otros casos, el programa de simulación es muy genérico y el usuario debe construir un modelo que corresponde con lo que se quiere simular (por ejemplo, programas de elemento finito para cálculos de flujo de fluidos y transferencia de calor y masa).

Otra estrategia de simulación, particularmente útil para simulaciones de procesos químicos, es la simulación modular. En este caso, el programa está conformado por una serie de subrutinas que llevan a cabo acciones específicas, y corresponde al usuario seleccionar el orden en el cual se llevan a cabo esas operaciones. El programa de simulación tiene módulos que corresponden a las diferentes operaciones unitarias básicas, y corresponde al usuario el seleccionar los que sean adecuados al caso que se va a simular y (lo más importante) cómo se conectan los módulos entre sí.

INTRODUCCIÓN A CHEMCAD 5.5

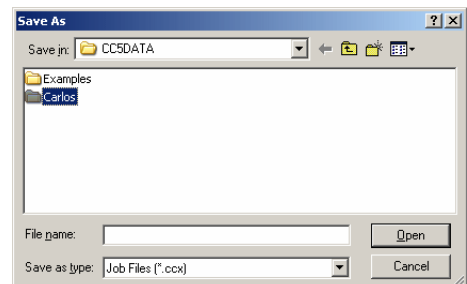
CHEMCAD (Chemstations, Inc.) es un paquete de software de simulación de procesos ampliamente usado en la industria. Dado el diseño conceptual de un proceso químico, CHEMCAD usa modelos matemáticos de equipos de proceso y propiedades físicas y termodinámicas para predecir el comportamiento del proceso. 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.



Acceso a CHEMCAD: CHEMCAD está instalado en algunas de las computadoras en la red del LIQ. 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 de uso compartido, y no existe garantía de la seguridad de los archivos. También es conveniente salvar frecuentemente su simulación mientras se trabaja.

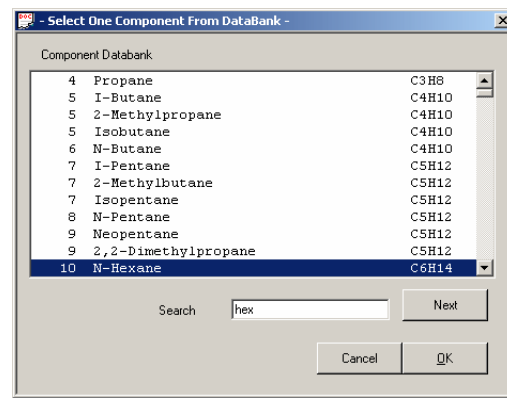
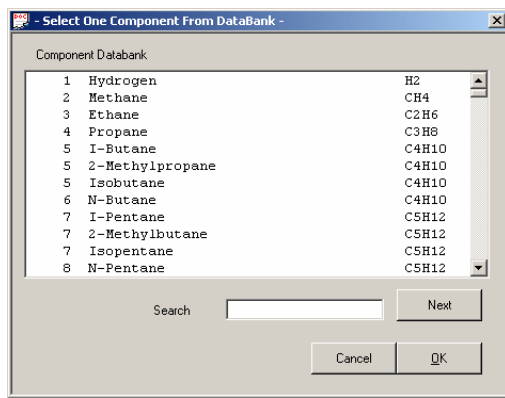




2.1 Módulos de propiedades termodinámicas

Propiedades de sustancias puras

Desde el punto de vista más simple CHEMCAD se puede utilizar como referencia de datos termodinámicos y de transporte de sustancias puras y mezclas. CHEMCAD cuenta con una base de datos que puede ser examinada usando el menú ThermoPhysical → Databank → View/Edit. Aparece entonces la ventana donde se selecciona un compuesto:

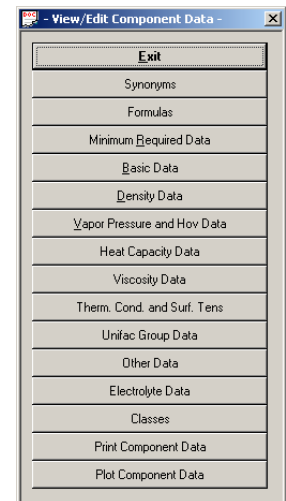


En el cuadro "Search" se puede teclear parte del nombre del compuesto buscado, parte de su fórmula química, o el número de compuesto en la base de datos. Por ejemplo, para localizar el n-hexano, se puede teclear "hex", "C6H14" o el número 10, si ya se conoce. Cuando hay más de un compuesto que corresponde a ese criterio de búsqueda, se puede utilizar el botón "Next" para buscar el siguiente compuesto que corresponda.

Una vez seleccionado el compuesto de interés, aparece una ventana con una serie de botones que permiten examinar la información en la base de datos sobre este compuesto, de acuerdo a las diferentes categorías. Obsérvese que no se puede modificar la información de la base de datos. Si se necesita cambiar algún dato de un compuesto en particular, se necesita crear una copia de ese compuesto y modificar la copia. Esto es necesario para asegurar que todas las simulaciones utilicen los mismos valores de los datos básicos.

Algunas de las propiedades incluidas en la base de datos son función de la temperatura. Por ejemplo, la viscosidad de líquido del hexano aparece como:

Liquid Viscosity (Pascal-sec)	Equation No. 101	Coefficients: A	-19.116
		B	1154.3
		C	1.2482
		D	
		E	
Low T (K)	177.84	Low value	0.00211531
High T (K)	343.15	High value	0.000210724

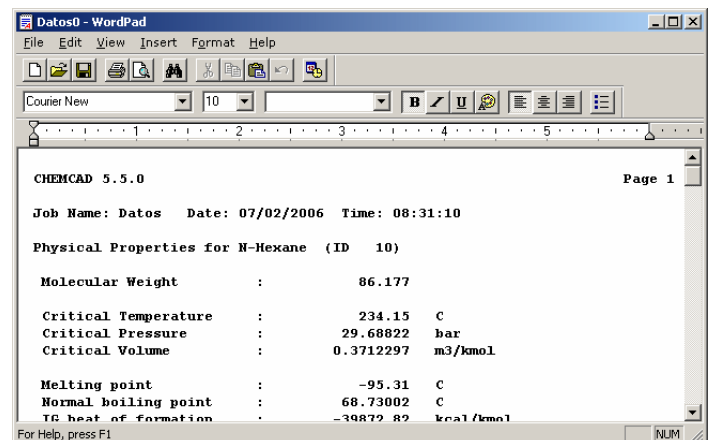


El número de ecuación (101 en este caso) indica la forma de la ecuación para esta propiedad, como función de la temperatura, mientras que las constantes A-E son los valores de los parámetros de esa ecuación. Dependiendo de la ecuación, no todos los 5 parámetros pueden ser necesarios. Las ecuaciones función de la temperatura se muestran en la tabla siguiente, donde Y es la propiedad que se va a calcular. T siempre está en Kelvin, y las unidades de las otras propiedades siempre corresponden al SI.



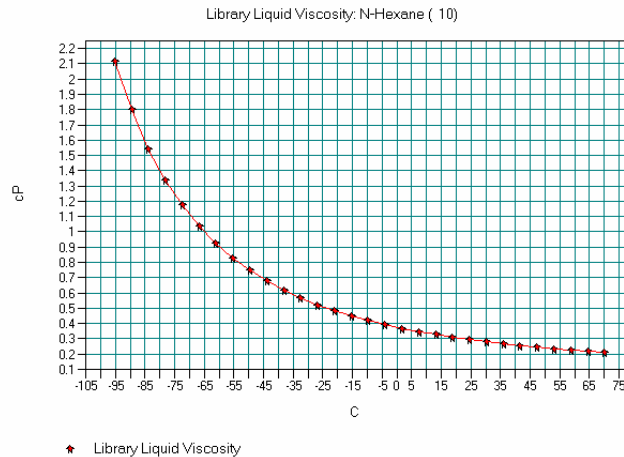
Ec #	Ecuación	Número de parámetros que se deben especificar
100	$Y = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4$	1, 2, 3, 4 ó 5
101	$Y = \exp\left[A + \frac{B}{T} + C \ln T + DT^E\right]$	2, 3 ó 5
102	$Y = \frac{AT^B}{\left(1 + \frac{C}{T} + \frac{D}{T^2}\right)}$	2, 3 ó 4
103	$Y = A + B \exp\left(-\frac{C}{T^D}\right)$	4
104	$Y = A + \frac{B}{T} + \frac{C}{T^3} + \frac{D}{T^8} + \frac{E}{T^9}$	2, 3, 4 ó 5
105	$Y = \frac{A}{B \left(1 + \left(\frac{T}{C}\right)^D\right)}$	4
106	$Y = A(1 - T_r)^{(B + CT_r + DT_r^2 + ET_r^3)}$ donde $T_r = T/T_c$	2,3,4 ó 5 y T_c
107	$Y = A + B \left[\frac{(C/T)}{\sinh(C/T)} \right]^2 + D \left[\frac{(E/T)}{\cosh(E/T)} \right]^2$	3 ó 5
114	$Y = \frac{A^2}{T_r} + B - 2ACT_r - ADT_r^2 - \frac{1}{3}C^2T_r^3 - \frac{1}{2}CDT_r^4 - \frac{1}{5}D^2T_r^5$ donde $T_r = T/T_c$	2, 3 ó 4 y T_c

Si se selecciona la opción "Print component data" se genera un reporte con toda la información de la base de datos sobre el compuesto seleccionado, que aparece en una ventana de WordPad:





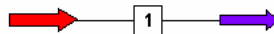
Muchas de las propiedades también se pueden graficar como función de la temperatura, usando el botón "Plot Component Data". Por ejemplo, la viscosidad de líquido del hexano:



El rango de temperaturas no se puede modificar, corresponde a los valores mínimo y máximo para los cuales es aplicable esta ecuación, de acuerdo a la base de datos.

Propiedades de mezclas

Las propiedades termodinámicas y de transporte de mezclas sólo se pueden obtener a partir de una corriente ya definida en la simulación. En el caso más simple, se puede crear una única entrada y salida, con una corriente que las una:



Al hacer click con el botón derecho sobre la corriente, se puede seleccionar las opciones "View Properties" para listar las propiedades de esta corriente a la temperatura que tiene, o "Plot Properties" para graficar una propiedad como función de la temperatura.

Instrucciones detalladas de cómo definir la corriente se darán por separado.