



### EJERCICIO 3 INTERFASE DE USUARIO

Para mostrar el manejo de la interfase de CHEMCAD, se preparará una simulación básica paso a paso. La secuencia general de pasos que se seguirá en este ejercicio es la misma que se empleará en general para cualquier simulación,

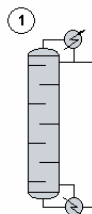
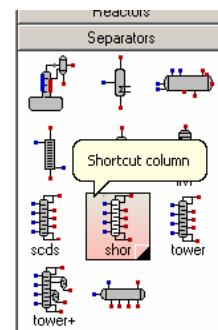
*Se desea preparar el balance de masa alrededor de una columna de destilación usada para separar una mezcla binaria. Se alimentan a la columna 1000 kmol/hr de una mezcla de metanol-agua a 25°C, 1.0 atm, conteniendo 2% mol de metanol. Se especificará que el 95.3% del metanol en la alimentación saldrá 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 número de platos y el plato de alimentación necesarios para obtener la separación.*

**Crear una nueva simulación:** Para comenzar con una nueva simulación, seleccionar File → New.

**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 métrico.

**Construir el diagrama de flujo del proceso:** Involucra crear corrientes de alimentación y productos, crear operaciones unitarias, y conectarlas con corrientes de proceso.

(A) De la paleta de operaciones unitarias (ubicada a la derecha), seleccionar el grupo de separadores, y localizar el tipo de columna marcada como "Shortcut" (éste es el modelo más simplificado para columnas de destilación, otros modelos se verán en ejercicios posteriores). El puntero del mouse cambia para indicar el tipo de operación unitaria seleccionada. Al hacer click en el área de trabajo, aparece la columna de destilación.

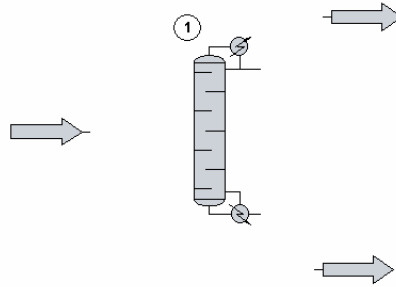


(B) Colocar una corriente de alimentación (Feed). El símbolo para la alimentación se encuentra en el panel "Piping and flow". De igual modo, colocar dos flechas para los productos (Products).

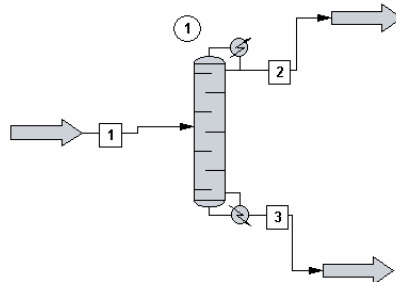




El diagrama debe quedar así:



(C) Buscar ahora en la misma paleta el botón para corrientes (Stream) y usar el mouse para conectar la entrada a la columna de destilación, y las salidas de la columna a las flechas de los productos. El diagrama queda entonces como sigue:



Estos son los pasos básicos 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.

**Seleccionar componentes:** Se identifican de antemano todos los compuestos químicos que van a aparecer en la simulación, en el menú Termophysical → Select Components. En la ventana que aparece, escribir "methanol" 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 metanol 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, 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) y presión (1.0 atm). Para los flujos de los componentes, proporcionar el flujo molar de cada componente por separado (20 kmol/hr de metanol 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: metanol, 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 → Run All) o simplemente usar el botón correspondiente de la barra de botones.

**Revisar los resultados:** Se puede obtener la información simplemente con colocar el mouse sobre una corriente o una operación unitaria.

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