

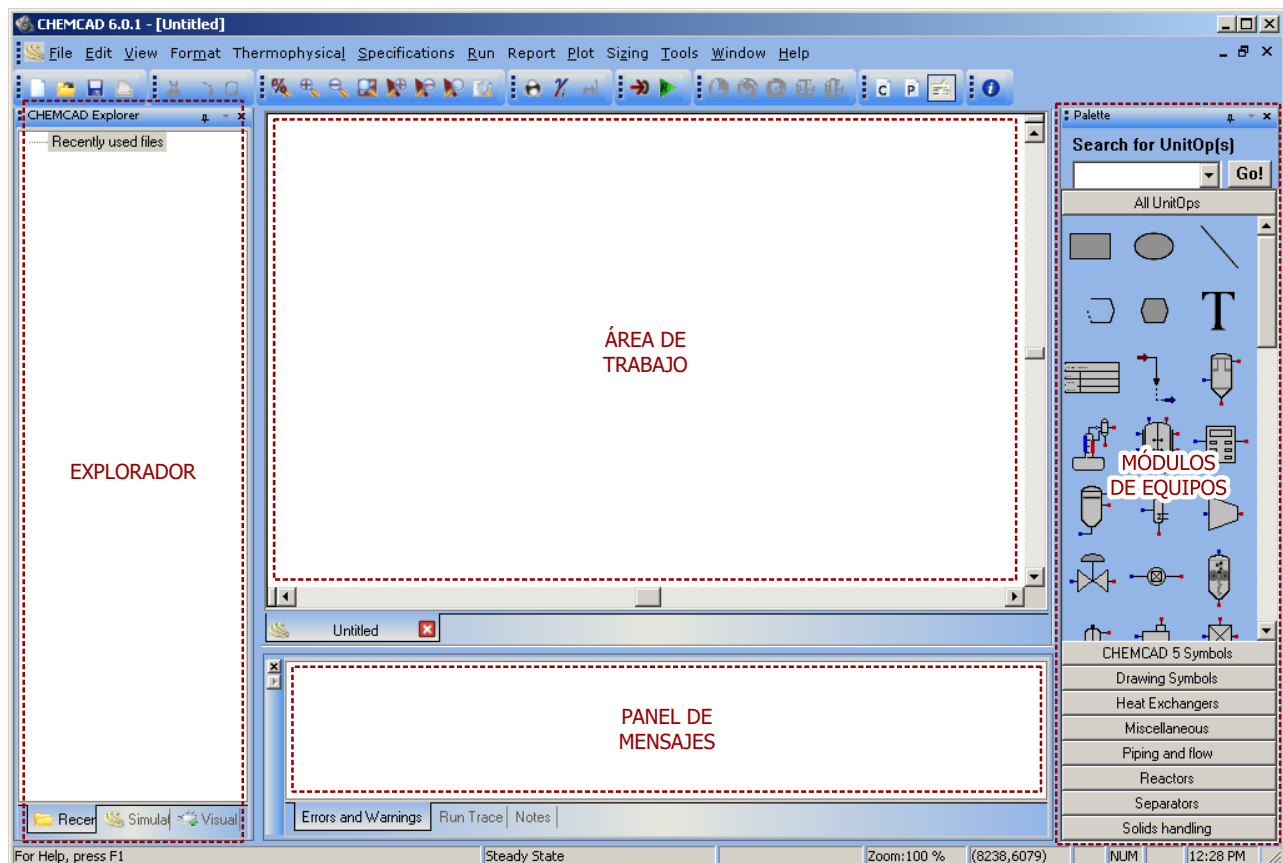


SIMULACIÓN MODULAR **INTRODUCCIÓN A CHEMCAD 6.2**

CHEMCAD (pronunciado /kemkad/) es un paquete de simulación de procesos ampliamente usado. Dado el diseño conceptual de un proceso químico, CHEMCAD emplea modelos matemáticos de equipos de proceso y propiedades físicas y termodinámicas para predecir el comportamiento del proceso. CHEMCAD puede manejar procesos de alta complejidad, incluyendo sistemas con múltiples columnas de separación, reactores químicos, destilación de mezclas reaccionantes, e incluso soluciones de electrolitos como soluciones de sales, ácidos o bases inorgánicas.

Es importante resaltar que CHEMCAD no efectúa el diseño del proceso. El usuario es el que debe proporcionar el proceso y algunas de las especificaciones de las corrientes y equipos. Con base en esa información, CHEMCAD simula el desempeño del proceso especificado en dicho diseño. Es necesario comprender los principios básicos de ingeniería química involucrados para que se puedan proporcionar valores razonables de los parámetros de entrada y para evaluar la validez de los resultados predichos. Por esta razón, el usuario debe tener un conocimiento básico sobre los equipos antes de emplear CHEMCAD.

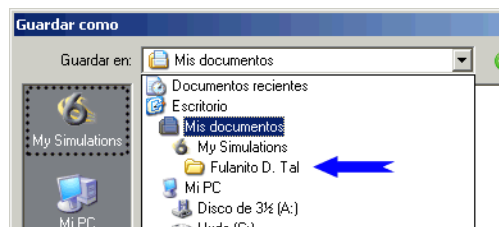
Acceso a CHEMCAD: CHEMCAD está instalado en las computadoras en la red del LIQ. Para acceder, basta con entrar en la cuenta de ESTUDIANTE y hacer doble click en el ícono de CHEMCAD que se encuentra en el escritorio. También puede ser accedido a través del menú de inicio. La ventana que aparece es la siguiente:



(La distribución y otros detalles de las ventanas puede variar de computadora en computadora)



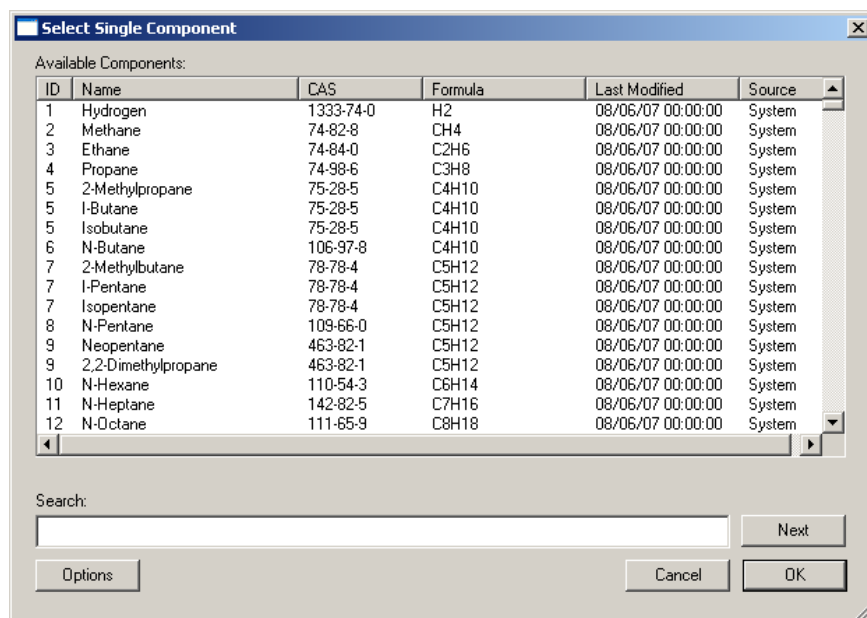
Guardar la simulación: De forma predeterminada, CHEMCAD guarda las simulaciones en una carpeta llamada "My Simulations" en "Mis Documentos". Ya que las computadoras del LIQ son de uso compartido, se recomienda crear una sub-carpeta con su nombre o (preferentemente) que guarden sus simulaciones en una memoria USB. Como ocurre con la mayoría de los programas, CHEMCAD no está exento de la ocasional falla irrecuperable, por lo que *es importante guardar frecuentemente el trabajo realizado*.



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 → Component Database → View/Edit Database Component. Aparece entonces la ventana donde se selecciona un compuesto:

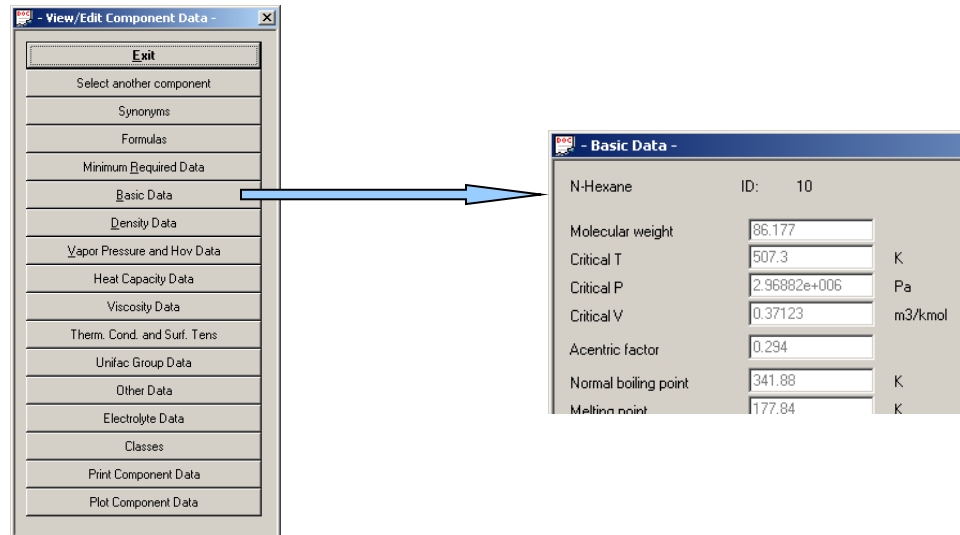


En el cuadro "Search" se puede teclear parte del nombre del compuesto buscado, parte de su fórmula química, o el número de compuesto en la base de datos. **Por ejemplo, para localizar el n-hexano, se puede teclear "hex", "C6H14" o el número 10, si ya se sabe que el n-hexano es el compuesto 10 en la base de datos.** Algunos compuestos aparecen también como sinónimos, se reconocen por tener el mismo número. Cuando hay más de un compuesto que concuerde con el criterio de búsqueda, se puede utilizar el botón "Next" para mostrar el siguiente compuesto.

CHEMCAD maneja los nombres de compuestos químicos en inglés.



Una vez seleccionado el compuesto de interés, aparece una ventana con una serie de botones (ver derecha) que permiten examinar la información en la base de datos sobre este compuesto, de acuerdo a las diferentes categorías. Por ejemplo, al usar el botón "Basic Data", aparece una ventana con información tal como peso molecular, punto crítico, puntos de fusión y ebullición, etcétera.



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.

Propiedades que dependen de la temperatura

Las siguientes propiedades incluidas en la base de datos son función de la temperatura, y CHEMCAD emplea una librería de ecuaciones ya incorporada para calcularlas:

Propiedad	Unidades
Densidad de sólido	
Densidad de líquido	kg/m ³
Presión de vapor	Pa
Calor de vaporización	J/kmol
Calor específico de sólido	
Calor específico de líquido	J/kmol·K
Calor específico de gas ideal	
Viscosidad de líquido	
Viscosidad de vapor	Pa·s
Conductividad térmica de líquido	
Conductividad térmica de vapor	W/m·K
Tensión superficial	N/m



Las ecuaciones de la librería se identifican por número, y se muestran en la siguiente tabla:

Núm	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

En estas ecuaciones, Y representa la propiedad que se va a calcular. La base de datos indica el número de ecuación que se debe emplear, los valores de los coeficientes, y el rango de temperatura en el cual se puede aplicar la ecuación. La temperatura siempre se maneja en Kelvin, y los coeficientes deben ser compatibles con las unidades del Sistema Internacional.

Es útil poder acceder a los valores de estos coeficientes, ya sea para incorporar estas propiedades en otro programa o para obtener información adicional. Por ejemplo, si se desea obtener una ecuación para la viscosidad cinemática del n-hexano líquido, se pueden obtener de la base de datos las ecuaciones para la viscosidad y la densidad y luego dividir una entre la otra ($\nu = \mu / \rho$).



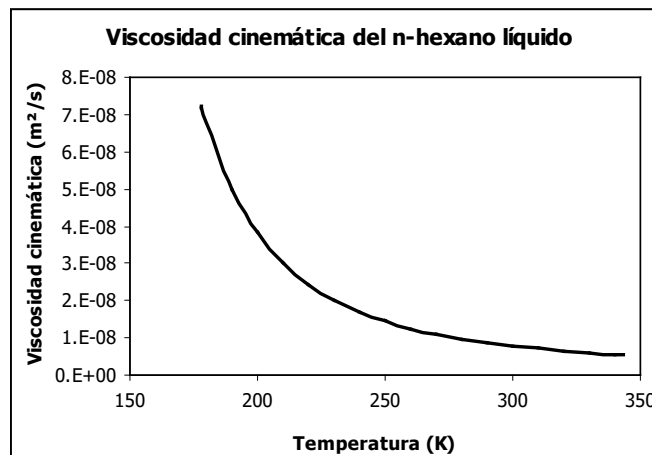
Propiedad	INFORMACIÓN DE LA BASE DE DATOS			Ecuación resultante
	Ec #	Constantes	Rango	
Densidad de líquido	105	$A = 0.7147$ $B = 0.265$ $C = 507.43$ $D = 0.2781$	$T_{\min} = 177.84 \text{ K}$ $T_{\max} = 507.43 \text{ K}$	$\rho_L = \frac{0.7147}{0.265 \left(1 + \left(1 - \frac{T}{507.43} \right)^{0.2781} \right)}$
Viscosidad de líquido	101	$A = -19.116$ $B = 1154.3$ $C = 1.2482$	$T_{\min} = 177.84 \text{ K}$ $T_{\max} = 343.15 \text{ K}$	$\mu_L = \exp \left[-19.116 + \frac{1154.3}{T} + 1.2482 \ln T \right]$

Hay que tener cuidado con las unidades, ya que la densidad está dada en kmol/m³ y hay que multiplicarla por el peso molecular (86.177 kg/kmol en este caso) para que las unidades se cancelen y la viscosidad cinemática quede en m²/s. De este modo, la viscosidad cinemática queda expresada como:

$$v_L = \frac{\mu_L}{\rho_L} = \frac{\exp \left[-19.116 + \frac{1154.3}{T} + 1.2482 \ln T \right]}{86.177 \left[\frac{0.7147}{0.265 \left(1 + \left(1 - \frac{T}{507.43} \right)^{0.2781} \right)} \right]}$$

Esta ecuación puede simplificarse y la ecuación resultante se puede emplear para cualquier propósito, incluyendo su graficación:

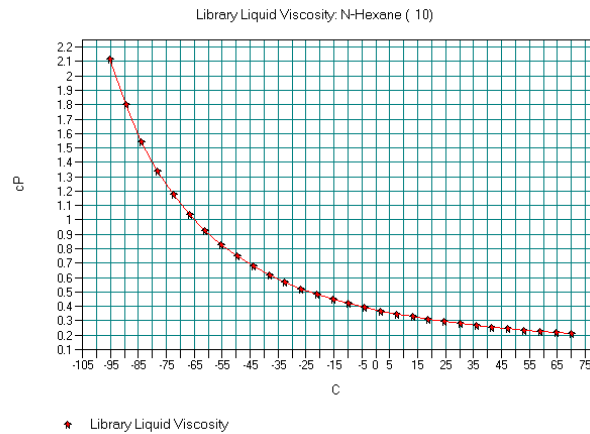
$$v_L = 0.01624 \left[0.265 \left(1 + \left(1 - \frac{T}{507.43} \right)^{0.2781} \right) \right] \exp \left[-19.116 + \frac{1154.3}{T} + 1.2482 \ln T \right]$$





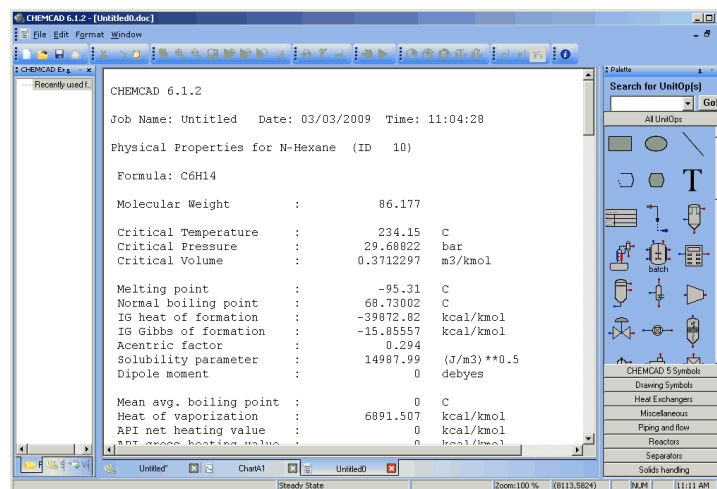
Graficación de propiedades

Las propiedades que dependen de la temperatura se pueden graficar directamente en CHEMCAD, usando el botón "Plot Component Data". El rango de temperaturas no se puede modificar, ya que corresponde a los valores mínimo y máximo para los cuales es aplicable esta ecuación, de acuerdo a la base de datos. Se puede seleccionar con el mouse un área para ampliarla. La siguiente gráfica muestra la viscosidad de líquido del hexano:



Datos impresos del componente

Si se selecciona la opción "Print component data" se genera un reporte de texto con toda la información de la base de datos sobre el compuesto seleccionado:



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. **Instrucciones detalladas de cómo definir la corriente se darán más adelante.**



EJERCICIO 1

Modelos de equilibrio líquido-vapor

OBJETIVO

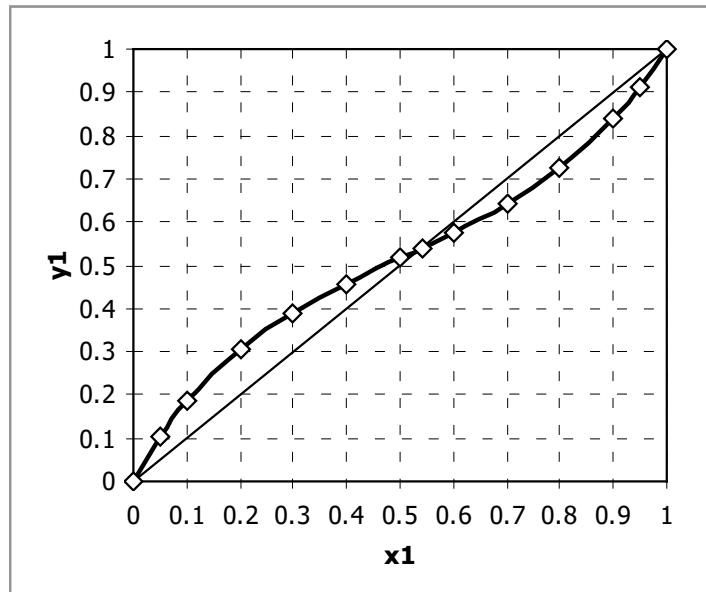
Familiarizarse con diferentes modelos de equilibrio líquido-vapor (K-value) disponibles en CHEMCAD y la importancia de seleccionar el modelo adecuadamente.

PLANTEAMIENTO

Los siguientes datos experimentales de equilibrio líquido-vapor corresponden al sistema acetato de etilo-etanol a una presión de 1 atm. El sistema forma un azeótropo con una composición de 54% mol de acetato de etilo.

T [°C]	x_1	y_1
78.3	0.0	0.0
76.6	0.050	0.102
75.5	0.100	0.187
73.9	0.200	0.305
72.8	0.300	0.389
72.1	0.400	0.457
71.8	0.500	0.516
71.8	0.540	0.540
71.9	0.600	0.576
72.2	0.700	0.644
73.0	0.800	0.726
74.7	0.900	0.837
76.0	0.950	0.914
77.1	1.000	1.000

1 = acetato de etilo, 2 = etanol
Referencia: Chu, Getty, Brennecke, and Paul, *Distillation Equilibrium Data*, New York, 1950. Citado en *Perry's Chemical Engineers Handbook*, edición internacional 1999, p. 13-12.



Se desea verificar los datos de equilibrio predichos para este sistema usando diversos modelos en CHEMCAD.

PROCEDIMIENTO

Para el propósito de este ejercicio no es necesario dibujar un diagrama de flujo. Estamos interesados únicamente en obtener datos de equilibrio líquido-vapor en forma numérica y gráfica.

Crear la lista de componentes (Termophysical → Select Components) y agregar el acetato de etilo (Ethyl Acetate) y el etanol (Ethanol). A continuación, el "sistema experto" nos preguntará si hay algún componente que se pueda ignorar al seleccionar el modelo termodinámico y los rangos de temperatura y presión que se esperan manejar en el proceso. Para este ejercicio no será necesario modificar ninguno de estos parámetros.



Con base en esta información y a los compuestos seleccionados, el sistema seleccionará un modelo para los cálculos de equilibrio líquido-vapor (K-value). Para este sistema, el modelo que recomienda el sistema es el NRTL (Non-Random Two Liquid). Aceptar el modelo propuesto ya que es uno de los que se verificarán. Luego, el sistema nos muestra las opciones para este modelo. En esta ventana también se podría cambiar el modelo termodinámico en caso de que el que se seleccionó automáticamente no se considere adecuado.

Si más adelante se desea volver a esta ventana para cambiar el modelo termodinámico, usar el menú Thermophysical → Thermodynamic settings.

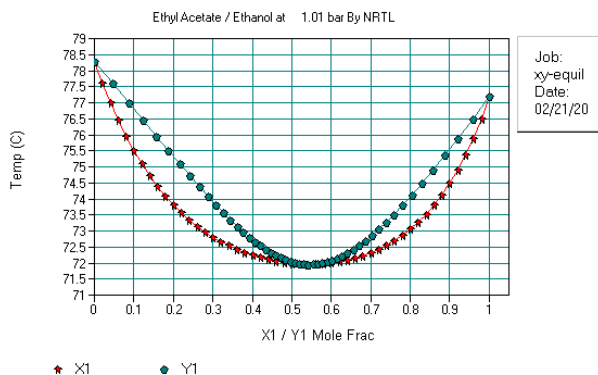
Finalmente, al cerrar esta ventana aparece otra donde se muestran los parámetros de interacción binaria (BIPs) de acuerdo a la base de datos. Los valores individuales de los parámetros de interacción también pueden ser modificados, aunque esto debe hacerse sólo en casos excepcionales y justificados. Normalmente, se aceptarán los valores que aparecen de la base de datos. Esta ventana puede ser accesada de nuevo en Thermophysical → Edit BIPs.

NRTL Parameters Set 1					
	I	J	Bij	Bji	Alpha
1	Ethyl Acetate	Ethanol	154.208	162.349	0.2987

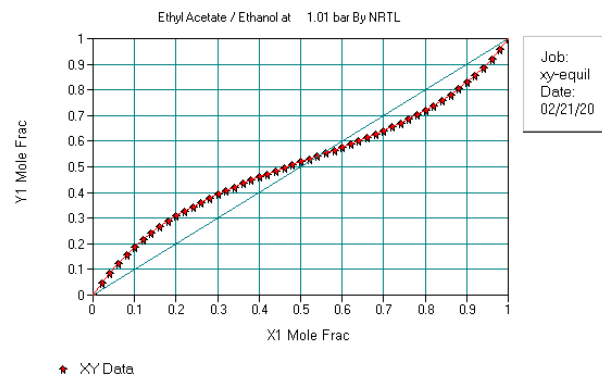


Para obtener los datos y las gráficas de equilibrio para el sistema, utilizar Plot → TPXY (Temperatura, Presión, X y Y). En la ventana que aparece, seleccionar los compuestos: el primer compuesto será el acetato de etilo y el segundo será el etanol. Seleccionar el modo de presión constante y proporcionar la presión (1 atm o su equivalente). Para obtener buenas gráficas, aumentar el número de puntos a 50.

Al hacer click en OK, aparece una nueva ventana con los datos de equilibrio en forma tabulada y dos gráficas (usar el menú Window o las pestañas en la parte inferior del área de trabajo para cambiar de una a otra).



Gráfica Txy



Gráfica xy



El azeótropo se identifica como el punto donde la temperatura es mínima o donde las composiciones del líquido y el vapor son iguales. Esta información es fácil de obtener de los datos tabulados. Se puede observar que el modelo NRTL predice la composición del azeótropo (54% mol) y su temperatura de ebullición (71.8 °C) con bastante exactitud.

El error en los datos de equilibrio, para cada valor de x_1 , se puede estimar como:

$$\text{Error} = \left| \frac{[y_1]_{\text{Modelo}} - [y_1]_{\text{Experimental}}}{[y_1]_{\text{Experimental}}} \right| \times 100\%$$

OBTENER LOS DATOS DE EQUILIBRIO PARA LOS SIGUIENTES MODELOS, Y COMPLETAR LAS TABLAS SIGUIENTES

- Peng-Robinson (PR)
- Regular Solution (REGU) o Scatchard-Hildebrand
- Margules (MARG)
- UNIFAC (UNIF)
- Non-Regular Two-Liquid (NRTL)

Comentar sobre la exactitud con la que cada modelo predice la formación del azeótropo y la composición de equilibrio para este sistema.

Comparación de modelos – Predicción del azeótropo.

Modelo	Temperatura azeótropo (°C)	Composición azeótropo (%mol)
Peng-Robinson		
Regular Solution		
Margules		
UNIFAC		
NRTL	71.96	0.540



Comparación de modelos – Error en la predicción de la composición de equilibrio.

Datos experimentales		Peng-Robinson		Regular Solution		Margules		UNIFAC		NRTL	
$[x_1]_{Exp}$	$[y_1]_{Exp}$	$[y_1]$	Error	$[y_1]$	Error	$[y_1]$	Error	$[y_1]$	Error	$[y_1]$	Error
0.050	0.102									0.1058	3.8%
0.100	0.187									0.1880	0.6%
0.200	0.305									0.3078	0.9%
0.300	0.389									0.3930	1.0%
0.400	0.457									0.4602	0.7%
0.500	0.516									0.5193	0.6%
0.600	0.576									0.5776	0.3%
0.700	0.644									0.6417	0.4%
0.800	0.726									0.7206	0.7%
0.900	0.837									0.8293	0.9%
0.950	0.914									0.9035	1.1%
Error Promedio:											1.0%

Para más información: El archivo de ayuda de CHEMCAD (menú Help → Help Topics) contiene descripciones breves de cada modelo y las condiciones en las que se recomienda (o no se recomienda) su uso. Buscar en Thermophysical → Thermodynamics → K-value Models.



EJERCICIO 2

Regresión de datos de equilibrio líquido-vapor

OBJETIVO

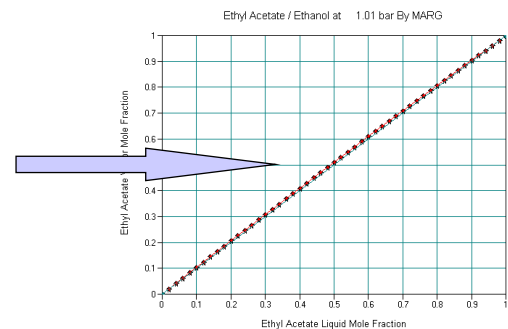
Conocer el procedimiento para generar parámetros de interacción binaria (BIP) para ajustar datos de equilibrio líquido-vapor.

PLANTEAMIENTO

En el ejercicio anterior, se probaron diversos modelos para equilibrio líquido-vapor y se verificó que las predicciones hechas por el modelo correspondieran con los datos experimentales reportados en la bibliografía. Se obtuvo mayor o menor exactitud, dependiendo de cuál modelo se probó.

En el caso particular del modelo de Margules, para las dos sustancias químicas en el sistema (acetato de etilo-etanol), la base de datos de CHEMCAD no disponía de dichos parámetros, por lo que aparecían ceros en la ventana correspondiente. El resultado fue que la composición de vapor predicha por el modelo era casi exactamente igual a la composición del líquido, y no se observaba la formación de un azeótropo.

	I	J	A _{ij}	A _{ji}	D _{ij}
1			0	0	0



CHEMCAD dispone de una herramienta para generar estos parámetros de interacción binaria para algunos de los modelos más comunes, incluyendo el de Margules. En este ejercicio se generarán dichos parámetros y se probará nuevamente el modelo para verificar que represente correctamente el equilibrio líquido-vapor.

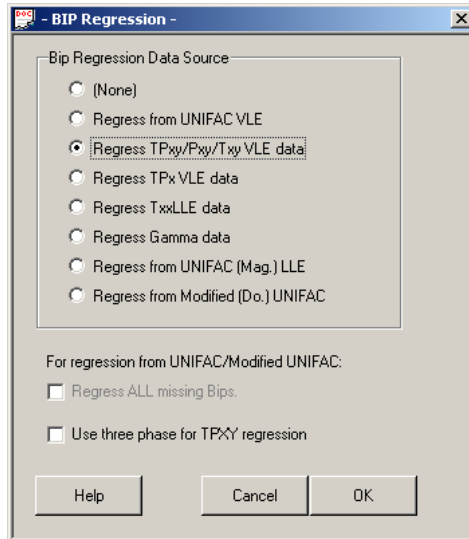
PROCEDIMIENTO

Para el propósito de este ejercicio no es necesario dibujar un diagrama de flujo. Estamos interesados únicamente en obtener datos de equilibrio líquido-vapor en forma numérica y gráfica.

Al igual que en el ejercicio anterior, crear la lista de componentes con el acetato de etilo (Ethyl Acetate) y el etanol (Ethanol). Cambiar el modelo termodinámico al modelo de Margules.



A continuación, acceder a la herramienta de regresión de BIPs (Termophysical → Regress BIPs). Aparece una ventana en la que se puede elegir el tipo de regresión dependiendo del tipo de datos disponibles. En el caso de este ejercicio, elegir la opción que incluye Txy, ya que se dispone de datos de temperatura (T) y composiciones en la fase líquida (x) y en la fase vapor (y).



En la siguiente ventana, se seleccionan los componentes (NOTA: contrario a lo habitual, en esta ventana se selecciona de la lista de la derecha para agregar a la lista de la izquierda). En este caso, como sólo se tienen los dos componentes de interés, se seleccionarán ambos. Es importante el orden en el que se seleccionen: las fracciones mol en el líquido y en el vapor se referirán al primer compuesto seleccionado.

A continuación aparecerá una ventana en la que se puede proporcionar una estimación inicial y límites superior e inferior para la búsqueda de los parámetros. A menos de que se tenga problemas de convergencia, generalmente se aceptarán los estimados que proporcione CHEMCAD. Luego aparece una ventana más donde se pueden ajustar parámetros para el sistema de regresión. Éstas son opciones que generalmente no se necesitará modificar.

Entonces aparece una ventana donde se introducen propiamente los datos de equilibrio. El factor de peso (weight) se emplea para dar más importancia a algunos datos. Generalmente se asignará el valor de 1 para que todos los datos tengan la misma importancia.

Al seleccionar OK, CHEMCAD lleva a cabo el proceso de optimización de los parámetros. Al terminar, CHEMCAD pregunta en cuál grupo de BIPs se desea almacenar el resultado. Aquí generalmente se elegirá "1" para que se almacenen en el grupo general de toda la simulación.

Reportar los valores de los parámetros obtenidos y volver a generar las gráficas xy y Txy para completar las tablas de la página siguiente.



**Parámetros obtenidos
Regresión de BIPs para el modelo de Margules
Sistema Acetato de Etilo/Etanol**

Aij	Aji	Dij

Predicción del azeótropo

Modelo	Temperatura azeótropo (°C)	Composición azeótropo (%mol)
Margules		

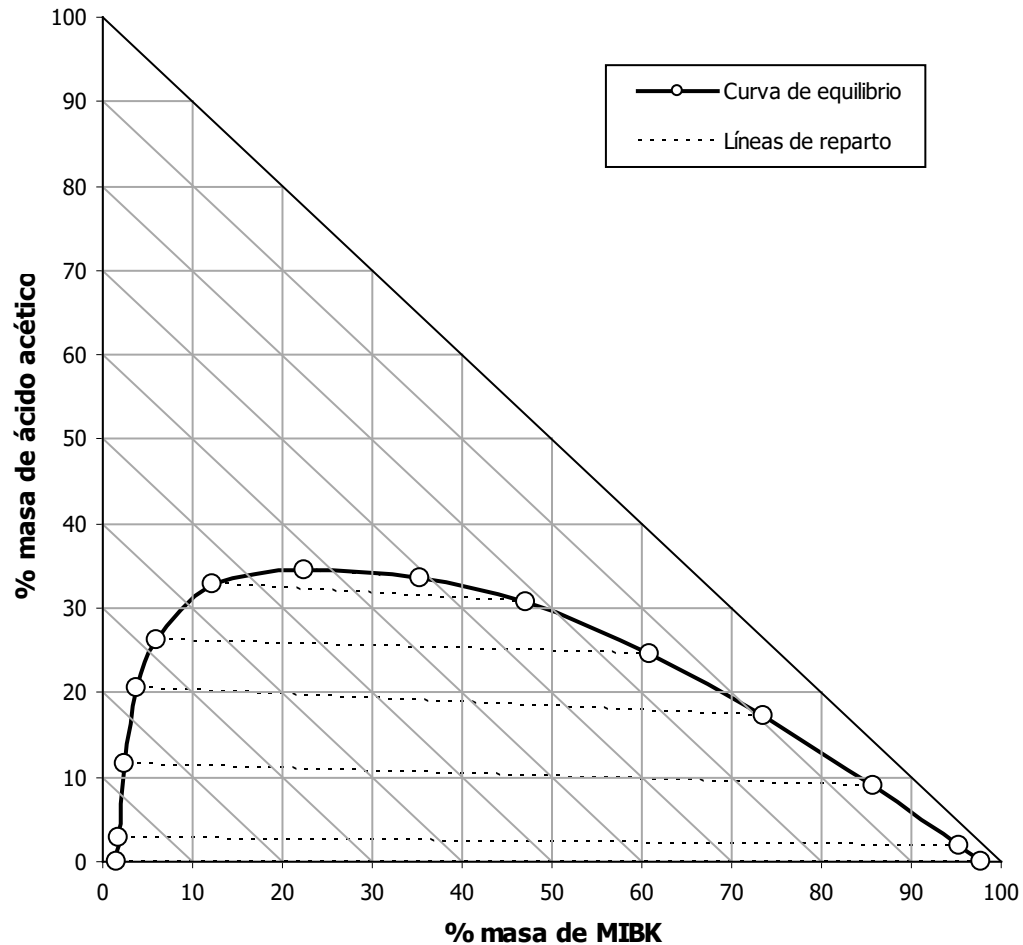
Error en la predicción de la composición de equilibrio

Datos experimentales		Margules	
$[x_1]_{Exp}$	$[y_1]_{Exp}$	$[y_1]$	Error
0.050	0.102		
0.100	0.187		
0.200	0.305		
0.300	0.389		
0.400	0.457		
0.500	0.516		
0.540	0.540		
0.600	0.576		
0.700	0.644		
0.800	0.726		
0.900	0.837		
0.950	0.914		
Error Promedio:			



EJERCICIO 3

Regresión de datos de equilibrio líquido-líquido



DATOS DE EQUILIBRIO LÍQUIDO – LÍQUIDO					
agua – ácido acético – metil isobutil cetona (MIBK) a 25°C					
% peso en el refinado			% peso en el extracto		
Agua	Ácido Acético	MIBK	Agua	Ácido Acético	MIBK
98.45	0.00	1.55	2.12	0.00	97.88
95.46	2.85	1.69	2.80	1.87	95.33
85.8	11.7	2.5	5.40	8.90	85.7
75.7	20.5	3.8	9.20	17.3	73.5
67.8	26.2	6.0	14.5	24.6	60.9
55.0	32.8	12.2	22.0	30.8	47.2
42.9	34.6	22.5	31.0	33.6	35.4

Fuente: Sherwood, Evans y Longcor, Ind. Eng. Chem 31: 599, citado en Perry, Manual del Ingeniero Químico, 7ª Edición, p. 15-7.

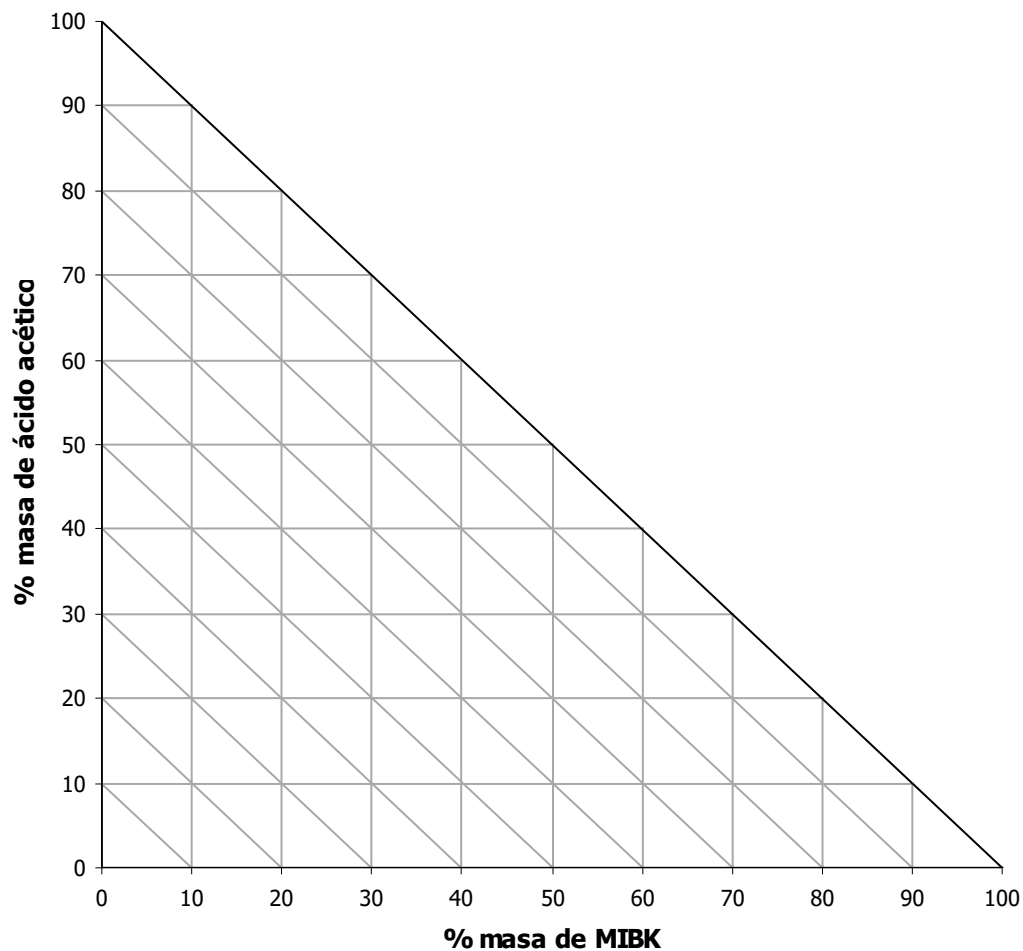


Para el sistema ternario líquido-líquido mostrado en la página anterior, verificar el equilibrio predicho por CHEMCAD empleando el modelo termodinámico seleccionado automáticamente. La gráfica de equilibrio se genera en Plot → Binodal plot. Si las predicciones de equilibrio no son satisfactorias, emplear regresión para generar un conjunto de parámetros de interacción más satisfactorios.

Reportar el modelo termodinámico empleado y sus parámetros de interacción, y trazar la curva de equilibrio en la gráfica siguiente.

RESULTADOS

MODELO Y PARÁMETROS DE INTERACCIÓN EMPLEADOS
--





AUTOEVALUACIÓN

SECCIÓN 1 *Completar la siguiente información consultando la base de datos de CHEMCAD.*

El punto crítico del hidrógeno es $T_c =$ _____ K y $P_c =$ _____ Pa.

El punto de fusión del ácido tartárico es _____ °F.

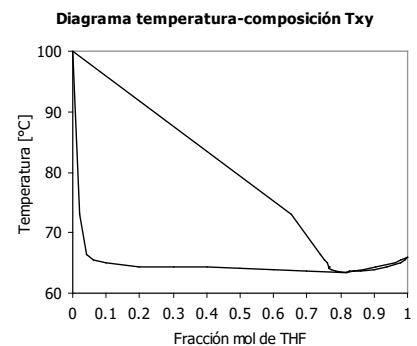
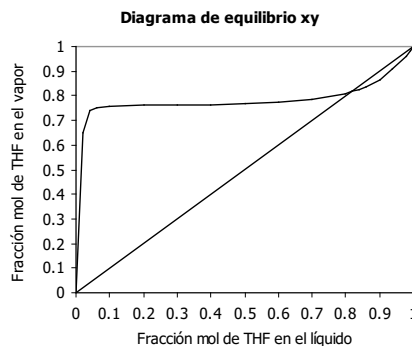
A 150°C, la presión de vapor del n-pentano es _____ bar, del n-hexano es _____ bar, del n-heptano es _____ bar, y del n-octano es _____ bar.

A 25°C, la densidad de la acetona es _____ kg/m³. La temperatura a la cual la metil-etil-cetona tiene esa misma densidad es _____ °C.

SECCIÓN 2

Los siguientes datos corresponden al equilibrio líquido-vapor del sistema tetrahidrofurano/agua a una presión constante de 101.3 kPa.

Temperatura [°C]	Fración mol de THF en el líquido	Fración mol de THF en el vapor
100.00	0	0
73.00	0.0200	0.6523
66.50	0.0400	0.7381
65.58	0.0600	0.7516
64.94	0.1000	0.7587
64.32	0.2000	0.7625
64.27	0.3000	0.7635
64.23	0.4000	0.7643
64.16	0.5000	0.7658
63.94	0.6000	0.7720
63.70	0.7000	0.7831
63.54	0.8000	0.8085
63.53	0.8180	0.8180
63.57	0.8400	0.8260
63.64	0.8600	0.8368
63.87	0.9000	0.8660
64.29	0.9400	0.9070
65.07	0.9800	0.9625
65.39	0.9900	0.9805
65.85	1.0000	1.0000



Hay un acalorado debate entre dos estudiantes de Ingeniería Química acerca de cuál modelo termodinámico en CHEMCAD es mejor para representar estos datos experimentales. El **estudiante A** afirma que el modelo seleccionado automáticamente por CHEMCAD (**NRTL**) es mejor porque es un modelo más complejo y por lo tanto debe poder representar mejor estas condiciones altamente no ideales. El **estudiante B** le hace notar que el NRTL muestra un comportamiento imposible: la línea de equilibrio sube y después baja, de tal forma que para una composición dada de vapor hay más de una composición de líquido, y esto simplemente no puede ser. El **estudiante B** afirma que un modelo más simple, como el de **Margules** o el de **Wilson** tal vez funcione mejor. Ambos estudiantes acuerdan aplicar la regresión para los parámetros de interacción binaria de sus respectivos modelos, y dejar que gane aquel que muestre un comportamiento realista y que tenga el menor error, en valor absoluto, tanto máximo como promedio. **¿Cuál es el mejor modelo para estos datos? ¿Cuál estudiante gana? Reportar los valores obtenidos de los parámetros de interacción y el error promedio para cada modelo.**



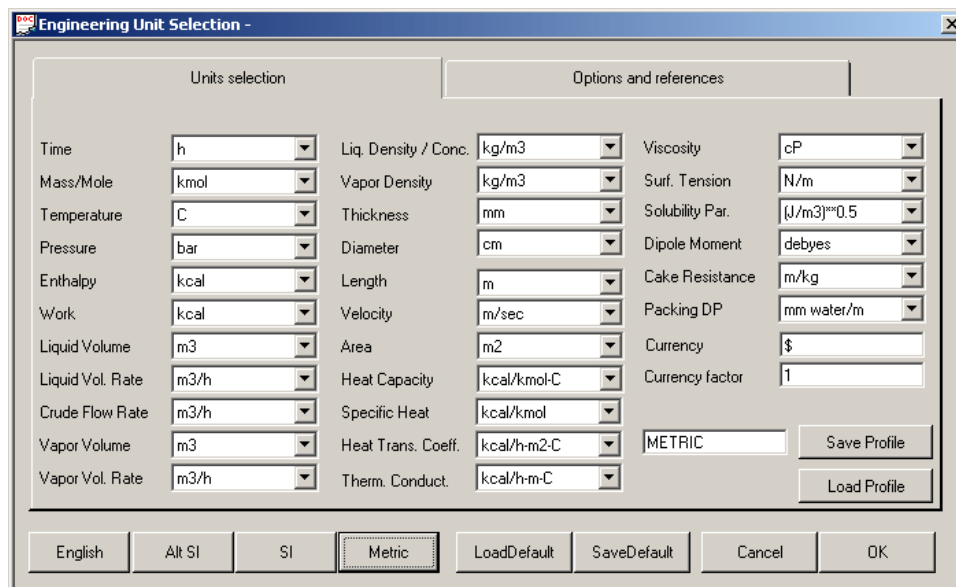
EJERCICIO 4 LA PRIMERA SIMULACIÓN COMPLETA

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.** Más adelante se verán más detalles sobre los módulos de equipos usados.

Se desea simular una columna de destilación usada para separar una mezcla binaria. Se alimentan a la columna 1000 kmol/h 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 la corriente del destilado, y 99.54% del agua en la alimentación saldrá en la corriente del 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, así como los requerimientos de calentamiento y enfriamiento para la columna.

PASO 1: Comenzar con una simulación en blanco: Ésta es creada automáticamente al iniciar CHEMCAD. Si no se tiene, seleccionar File → New.

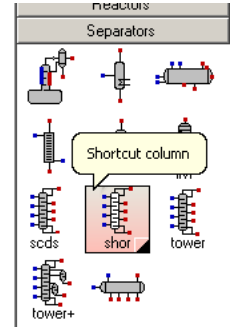
PASO 2: Seleccionar el sistema de unidades: En el menú Format, seleccionar Engineering Units. Empleando los botones de la parte inferior izquierda de la ventana que aparece, se puede seleccionar un sistema típico de unidades (English, Alt SI, SI, Metric). También se pueden seleccionar individualmente las unidades deseadas para cada cantidad física. Para este problema, seleccionar el sistema métrico, ya que es el que concuerda mejor con los datos proporcionados.



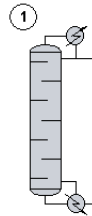


PASO 3: Construir el diagrama de flujo del proceso: Involucra agregar símbolos para las operaciones unitarias que se emplearán en la simulación, agregar símbolos para las corrientes de alimentación y productos, y conectar con corrientes de proceso los símbolos.

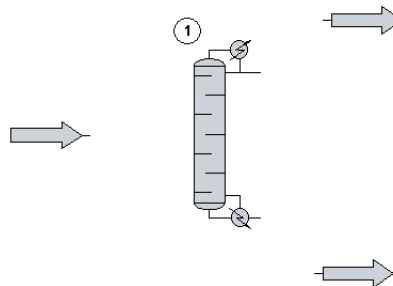
(A) De la paleta de operaciones unitarias (ubicada a la derecha), seleccionar el grupo de separadores, y localizar el tipo de columna marcada como "Shortcut" (éste es el modelo más simplificado para columnas de destilación, otros modelos se verán en ejercicios posteriores). El puntero del mouse cambia para indicar el tipo de operación unitaria seleccionada. Al hacer click en el área de trabajo, aparece la columna de destilación. Se pueden agregar así varias columnas; hacer click con el botón derecho para ya no agregar más columnas.



NOTA: Si no aparece la paleta de operaciones unitarias, puede estar oculta o inactiva. Mover el puntero del mouse al extremo derecho de la ventana. Si no aparece, entonces activarla con el menú View → Palette.

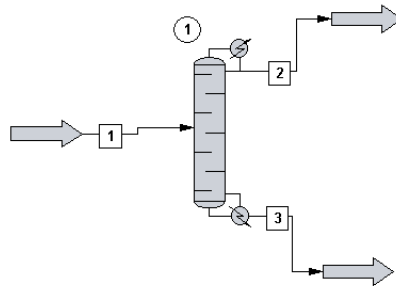


(B) Colocar una corriente de alimentación (Feed). El símbolo para la alimentación se encuentra en el panel "Piping and flow". De igual modo, colocar dos flechas para los productos (Products). Hasta este punto, el diagrama debe quedar así:



(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:





En estos diagramas, los equipos están numerados con círculos y las corrientes con cuadros. Estos números sirven como identificación, y se pueden mover a una posición más conveniente o incluso borrar (aunque no se recomienda)

TODOS LOS EQUIPOS DEBEN TENER AL MENOS UNA CORRIENTE DE ENTRADA Y UNA CORRIENTE DE SALIDA, a excepción de las flechas que identifican las entradas y salidas del proceso.

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.

PASO 4: 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". 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 ">" para incluir el metanol en la lista de componentes de la izquierda. Repetir para agregar el agua (water).

PASO 5: Opciones termodinámicas: Después de seleccionar los compuestos, el "sistema experto" de CHEMCAD tratará de seleccionar un modelo adecuado para el equilibrio líquido-vapor. Para ello, primero nos pregunta si hay algún componente que se desee ignorar en esta selección (normalmente no será necesario) y los rangos esperados de temperaturas y presiones que se espera manejar en la simulación (importante si se tienen temperaturas y/o presiones extremas). Para el propósito de este ejercicio, basta usar la opción que selecciona el sistema (modelo NRTL para equilibrio líquido-vapor y calor latente LATE para entalpías), así como los parámetros de interacción binaria (BIPs) proporcionados por el sistema.

PASO 6: 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 de entrada 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/h de metanol y 980 kmol/h de agua). El flujo total (1000 kmol/h) se va calculando automáticamente como la suma de los flujos de cada componente.



PASO 7: Proporcionar parámetros del equipo: También se puede hacer directamente con doble click en el equipo o a seleccionando a través del menú (Specifications → Edit UnitOps → Select UnitOps). Los datos que se deben proporcionar van a ser diferentes dependiendo del tipo de equipo. Para la columna de esta simulación, hay que seleccionar primero si se trata de un cálculo de diseño (Design) o de operación (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 es necesario especificar toda la información solicitada. 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).

Cuando se cierra la ventana de especificaciones de un equipo, si no toda la información proporcionada es "del agrado" de CHEMCAD, aparecerá una ventana indicando el problema. Aquí hay que distinguir entre una advertencia ("warning") y un error. Cuando hay errores, no se puede correr la simulación, y generalmente se trata de algún dato indispensable para CHEMCAD que no se haya proporcionado. En el caso de una advertencia, muchas veces sí se puede correr la simulación e incluso llegar a la respuesta correcta. Generalmente se presentan advertencias cuando faltan datos que se recomienda proporcionar pero que no son indispensables. En este caso, CHEMCAD trata de estimar los valores faltantes. La convergencia puede verse afectada si se proporcionan o no este tipo de datos.

En muchas ocasiones, aunque no siempre, CHEMCAD indica con otro color (verde generalmente) cuáles son los datos que son indispensables para cada equipo.

PASO 8: Correr la simulación: Una vez que se proporcionaron todos los datos necesarios para la simulación, se indica a CHEMCAD que lleve a cabo los cálculos. Para ejecutar la simulación de todos los equipos, usar el menú (Run → Run → Run All) o simplemente usar el botón con la flecha verde de la barra de botones. Si no existe error, al terminar los cálculos aparece la leyenda "Run finished" en la parte inferior izquierda de la ventana.

PASO 9: Revisar los resultados: Se puede obtener la información sobre los resultados haciendo doble click o simplemente colocando el mouse sobre una corriente o una operación unitaria.

RECOMENDACIONES

- Se puede dar nombre a las corrientes más importantes, para identificarlas fácilmente.
- Normalmente, sólo se especificarán datos en las corrientes de alimentación, pero no en las otras corrientes del proceso. Al correr la simulación, CHEMCAD aplica el método modular secuencial para calcular las corrientes de salida de cada equipo, en función de las corrientes de entrada y de los datos proporcionados.
- Es conveniente que siempre echar un vistazo a las diferentes opciones disponibles en cada ventana, para familiarizarse con las opciones de CHEMCAD y los datos que maneja cada tipo de módulo de simulación.
- Siempre volver a correr la simulación después de hacer algún cambio para asegurar que las corrientes y operaciones unitarias reflejen los cambios realizados.



RESULTADOS

Flujos (kmol/h)	Alimentación	Producto Destilado	Producto de Fondo
Metanol			
Agua			
Flujo molar total (kmol/h)			
Temperatura (°C)			
Relación de reflujo mínimo			
Relación de reflujo			
Número mínimo de etapas teóricas			
Número de etapas teóricas requeridas			
Etapa de alimentación			
Calor removido en el condensador (MJ/h)			
Calor requerido en el hervidor (MJ/h)			



¿CÓMO DEFINIR UNA CORRIENTE DE ALIMENTACIÓN?

Como se mostró en el ejercicio anterior, al preparar una simulación es necesario proporcionar información sobre las corrientes de entrada. Es necesario proporcionar información que establezca el estado termodinámico de la corriente, e información sobre el flujo total y la composición.

Stream No.	1
Stream Name	
Temp C	0
Pres bar	0
Vapor Fraction	0
Enthalpy kcal/h	0
Total flow	0
Total flow unit	kmol/h
Comp unit	kmol/h
Methanol	0
Ethanol	0
N-Propanol	0
Isopropanol	0
N-Butanol	0

Para definir el estado termodinámico, se debe especificar dos de los tres datos: temperatura, presión y fracción de vapor. Habitualmente serán la temperatura y presión las que se proporcionen. La fracción de vapor debe especificarse solamente cuando se trate de un líquido saturado (fracción 0), un vapor saturado (fracción 1) o una mezcla de líquido-vapor (fracción entre 0 y 1).

Para definir el flujo y composición hay básicamente dos alternativas:

Proporcionar los flujos de cada componente y dejar que CHEMCAD calcule el flujo total. Para esto, las unidades indicadas en "Comp unit" deben ser unidades de flujo (kmol/h, kg/hr, etcétera), y los valores especificados para cada componente estarán en esas unidades. Conforme se proporcionan estos valores, CHEMCAD va calculando el flujo total en las unidades dadas por "Total flow unit".

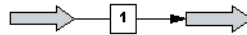
Proporcionar el flujo total y la composición de la corriente. En este caso, las unidades para los componentes ("Comp unit") deben ser de composición (fracción mol, fracción peso o fracción volumen). Los valores dados para los componentes corresponden entonces a la composición en esas unidades. Si no suman 1.0, CHEMCAD los normaliza. Además será necesario proporcionar el flujo total, en las unidades que se hayan seleccionado en "Total flow unit".

La entalpía de la corriente no puede ser proporcionada como dato, es calculada por CHEMCAD. El botón "Flash" emplea la información proporcionada para la corriente y calcula la propiedad que no se proporcionó de la terna temperatura-presión-fracción vapor, así como la entalpía.



PROPIEDADES DE MEZCLAS

Ya hemos visto anteriormente que CHEMCAD permite obtener propiedades de compuestos puros consultando la base de datos. Sin embargo, no posee herramientas para calcular fácilmente propiedades de mezclas. Una manera de generar este tipo de información consiste en crear una simulación con únicamente una entrada y una salida conectadas, emplear esa corriente para definir la mezcla y así poder obtener algunas de sus propiedades.



Es importante que la corriente definida no conste de una mezcla líquido – vapor, ya que entonces la composición de las fases líquida y vapor son las de equilibrio, y ninguna de las dos corresponde a la composición global definida.

Emplear Report → Stream properties → All streams para que CHEMCAD genere un reporte con las propiedades de todas las corrientes de la simulación. Alternativamente, se puede seleccionar una corriente y emplear Report → Stream properties → Select streams. Para seleccionar qué propiedades reportará CHEMCAD emplear Report → Stream properties → Select properties. Entre las propiedades que se pueden calcular de esta manera, se encuentran densidad, factor de compresibilidad, calor específico, entalpía, entropía, energía libre de Gibbs, viscosidad, conductividad térmica, y tensión superficial. En el caso de entalpía, entropía y energía de Gibbs, el valor reportado por CHEMCAD es el producto de la propiedad intensiva por el flujo que tenga la corriente.

También se pueden graficar algunas de las propiedades de la mezcla en función de la temperatura, empleando el menú Plot → Stream properties. Entre las propiedades que se pueden graficar están presión de vapor, densidad, viscosidad, conductividad térmica, tensión superficial de líquido, y calor específico. Es necesario proporcionar el rango de temperatura para la gráfica.

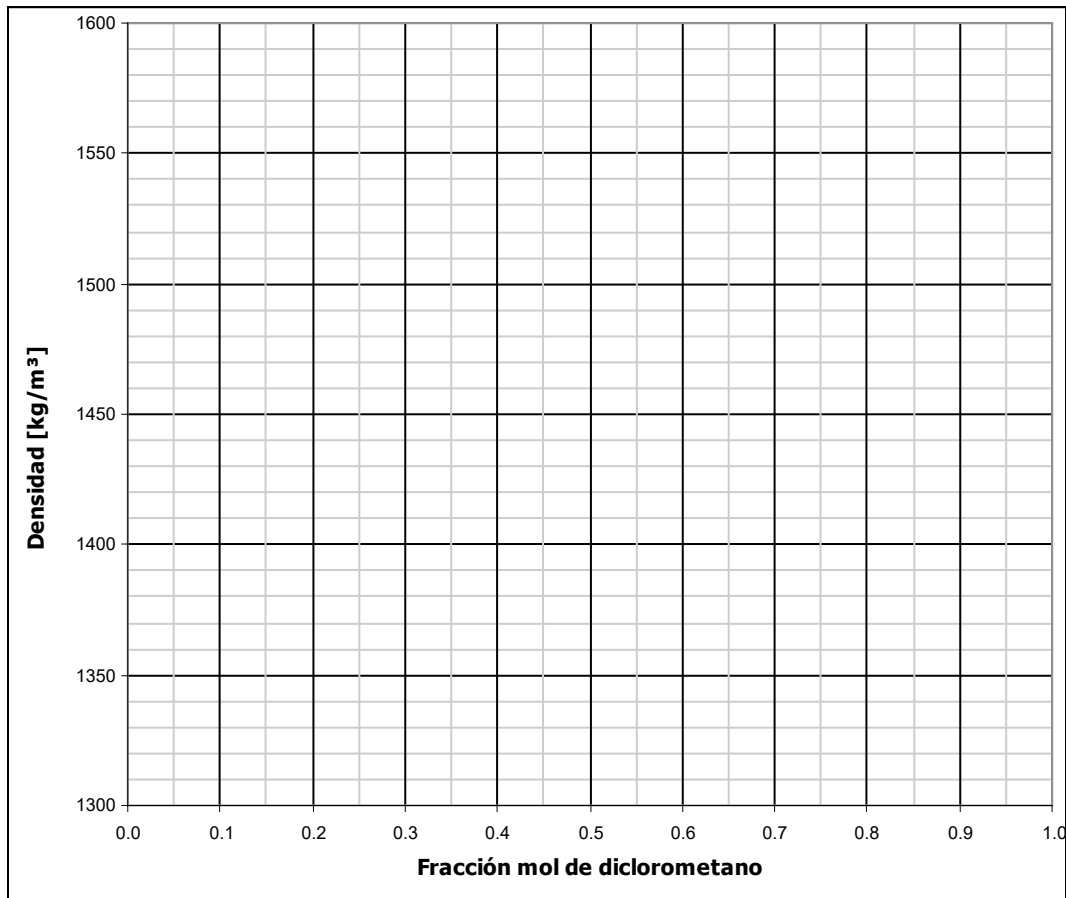
Hay que tener en mente que estas propiedades de mezclas son generalmente calculadas a partir de reglas de mezclado empíricas. No están respaldadas por datos experimentales y no hay manera de ajustarlas por regresión (a diferencia de los datos de equilibrio). Más aún, la documentación en el archivo de ayuda sobre estas reglas de mezclado es escasa o nula.

Generalmente las predicciones de propiedades de mezclas son buenas para moléculas no polares y compuestos simples, y tienen mayor incertidumbre para moléculas polares, compuestos complejos, o mezclas de sustancias de naturaleza química muy diferente.



EJERCICIO 5
DENSIDAD DE MEZCLAS LÍQUIDAS

Generar una gráfica de la densidad de líquido (en kg/m^3) de mezclas de diclorometano (CH_2Cl_2) y tetracloruro de carbono (CCl_4) a 20°C , en función de la fracción mol de diclorometano.

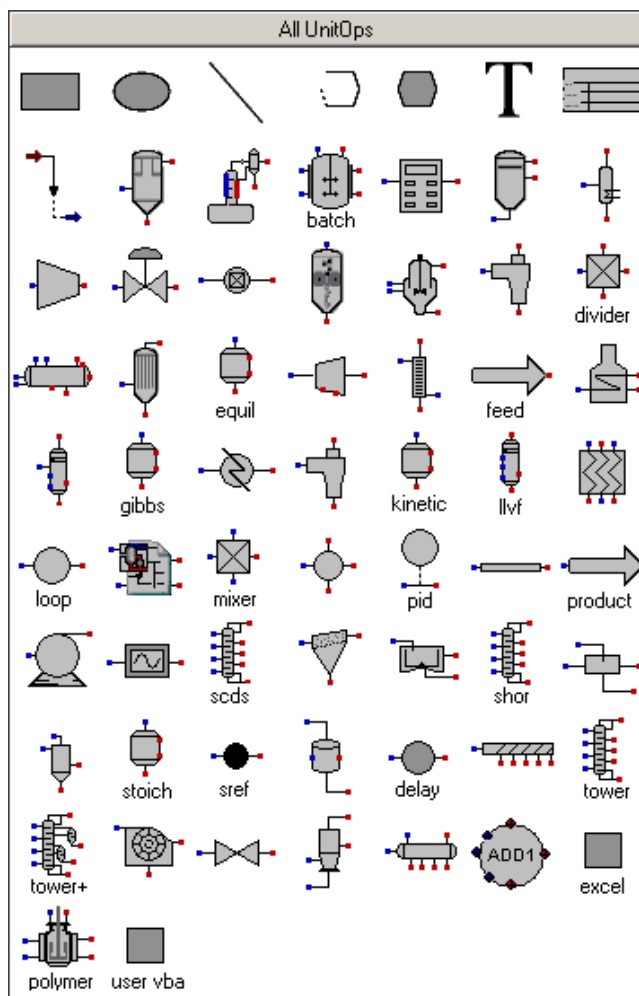




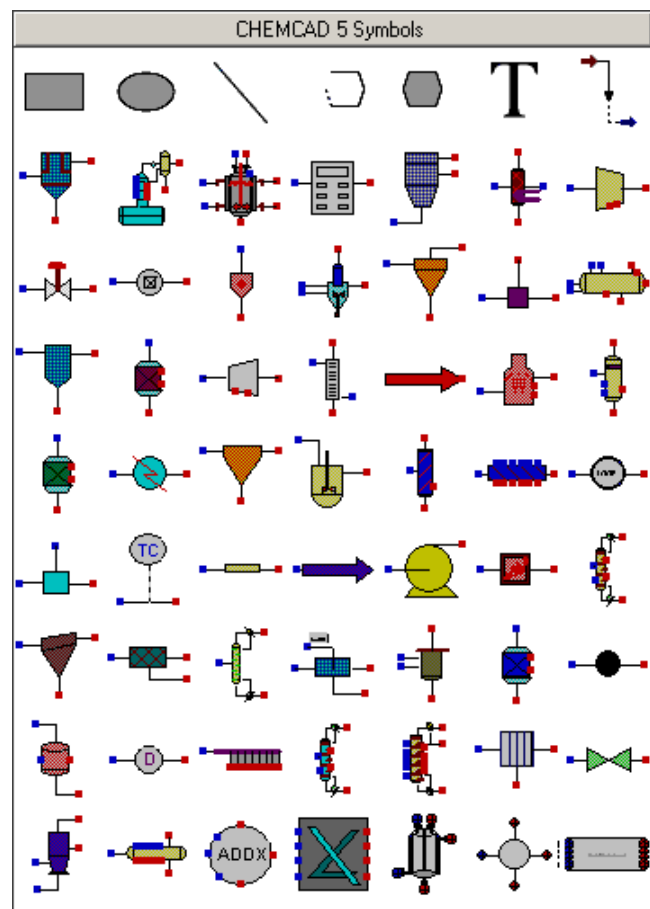
MÓDULOS DE EQUIPOS

CHEMCAD incluye módulos para simular diversas operaciones unitarias. La paleta con las operaciones unitarias aparece normalmente del lado derecho de la ventana. Todos los equipos se pueden encontrar en la pestaña "All UnitOps". Por compatibilidad con versiones anteriores de CHEMCAD, también se encuentra la pestaña "CHEMCAD 5 Symbols" con los símbolos empleados en la versión 5. Cada equipo tiene su símbolo en ambas pestañas y son completamente equivalentes. En las otras pestañas se encuentran los mismos equipos clasificados en grupos.

SÍMBOLOS DE CHEMCAD 6



SÍMBOLOS DE CHEMCAD 5

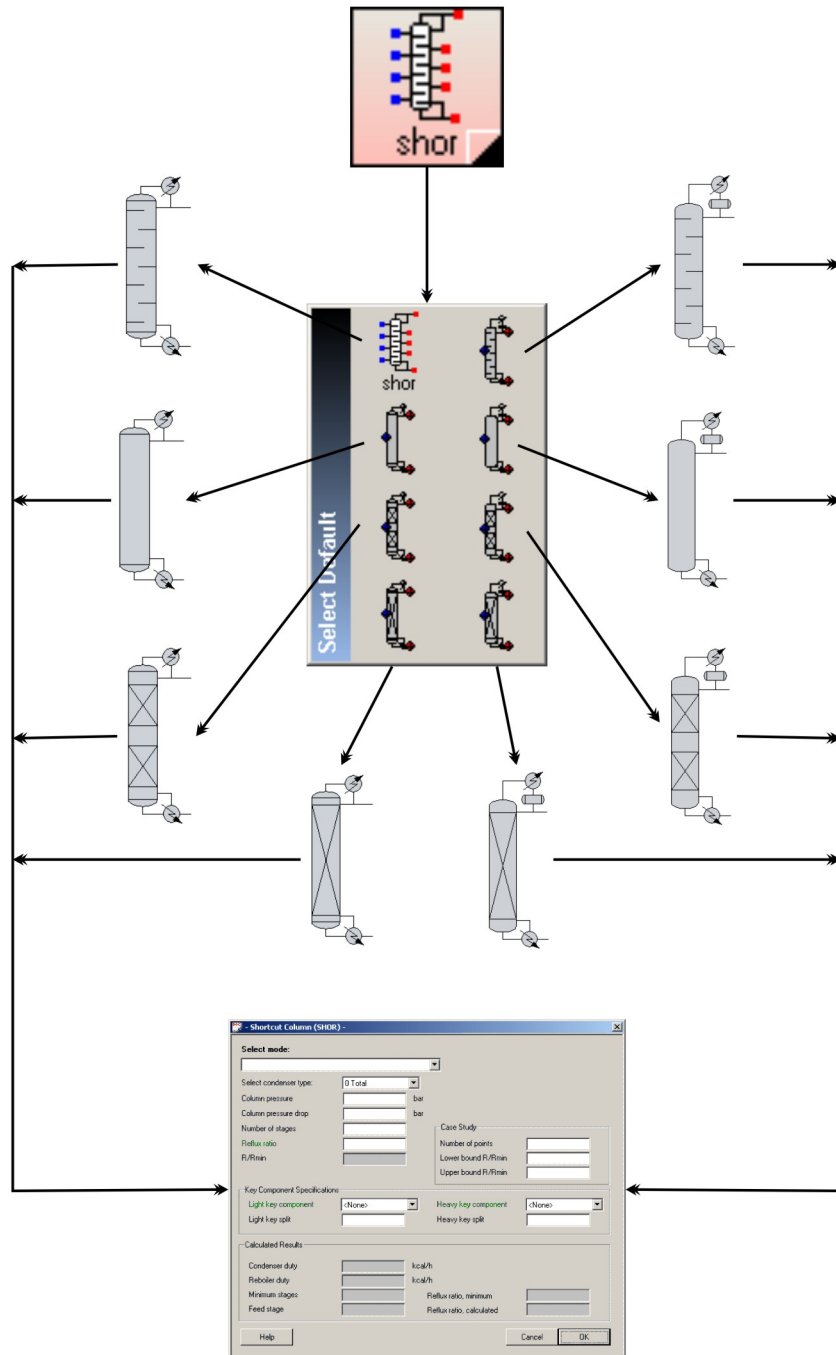


Las descripciones en este documento sólo son de la paleta de símbolos de CHEMCAD 6.
Para una lista de los símbolos de CHEMCAD 5 consultar:

<http://tecno.cruzfierro.com/cursos/2007a/procesos2/cc02-equipos>

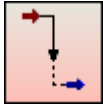


Algunos de los equipos se pueden representar con más de un símbolo, que se indica con una pestaña en la parte inferior derecha del botón del equipo. Por ejemplo, el módulo de columna de destilación "Shortcut column", empleado en el ejercicio anterior, se puede representar con cualquiera de 8 símbolos diferentes. Estos símbolos son diferentes sólo en apariencia y número de entradas o salidas, pero su funcionalidad es idéntica, todos abren la misma ventana de parámetros.





Los primeros símbolos de la paleta no representan equipos sino que se emplean únicamente para dibujar elementos simples, generalmente para complementar el diagrama de flujo del proceso con anotaciones.

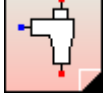
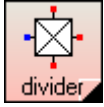



El siguiente símbolo, que se usó en el ejercicio anterior, se emplea para conectar los diferentes equipos, es decir, para dibujar las corrientes del proceso.

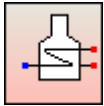
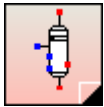

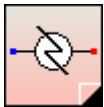
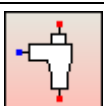
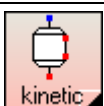
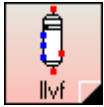
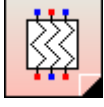
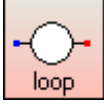
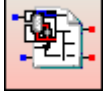
Los demás símbolos se listan a continuación, junto con la descripción tomada del archivo de ayuda.

SÍMBOLO	DESCRIPCIÓN
	BAGHOUSE FILTER Simula la operación de un filtro recolector de bolsa para polvos. El módulo calcula la eficiencia de recolección y la caída de presión o el flujo a través de la torta de polvo y la tela del filtro.
	BATCH COLUMN Simula una columna de destilación por lotes para la cual se puede definir una secuencia de condiciones de operación más o menos independientes.
	BATCH REACTOR Simula reactores de tanque agitado de operación batch, semi-batch y continuos con un número ilimitado de reacciones químicas simultáneas y con cualquier combinación de chaquetas, serpentines externos y/o internos.
	CALCULATOR Este símbolo se emplea para representar operaciones unitarias programadas por el usuario mediante el uso de un archivo en C.
	CENTRIFUGE Diseña o simula el comportamiento promedio de filtros centrífugos de canasta. El equipo puede ser batch o semi-batch, dependiendo de la carga de sólidos. Con excepción de la geometría del sistema y la consideración de la aceleración centrífuga, este módulo se maneja de forma similar a la mayoría de los otros filtros. El módulo toma en cuenta la resistencia de la torta y el medio filtrante, así como la compresibilidad de la torta.
	COMPONENT SEPARATOR El separador de componentes se emplea como una caja negra que separa una corriente en dos corrientes de salida de diferente composición y condición térmica. Al especificar el flujo o la fracción de separación para cada componente, prácticamente se puede lograr cualquier separación.
	COMPRESSOR Simula una operación de compresión isentrópica o politrópica.

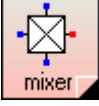
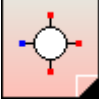
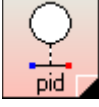
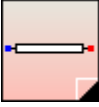
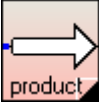
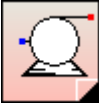
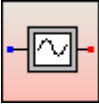
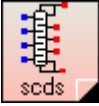
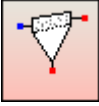
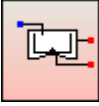


SÍMBOLO	DESCRIPCIÓN
	CONTROL VALVE La válvula de control calcula el flujo que pasa a través de la válvula basado en la señal que recibe de un controlador. Por lo tanto, cada válvula de control debe tener el número de un controlador designado como parte de los datos de entrada. El módulo puede manejar flujo compresible e incompresible, así como flujos críticos y subcríticos.
	CONTROLLER Esta unidad es un controlador numérico. Se comporta de forma similar a un solver. Se coloca en el diagrama de flujo entre otras operaciones unitarias y puede emplearse para control hacia adelante (feed forward) o retroalimentado (feedback).
	CRUSHER GRINDER El triturador calcula el trabajo requerido y la reducción de tamaño de partícula para tres tipos diferentes de trituradores.
	CRYSTALLIZER Este módulo puede simular procesos de cristalización por calentamiento o enfriamiento. También se puede emplear para simular disolución de partículas sólidas en la que una segunda corriente (solvente) se agrega para mantener la corriente de salida a la concentración deseada.
	CYCLONE Simula o evalúa separadores ciclónicos gas-sólido..
	DIVIDER El divisor separa una corriente de entrada en varias corrientes de salida de idéntica composición y propiedades intensivas. Se puede especificar la división especificando flujos de salida o fracciones del flujo de entrada.
	DYNAMIC VESSEL El tanque dinámico es un separador de fases dinámico y/o un acumulador. Básicamente es un tanque flash dinámico con retención.
	ELECTRO PRECIPITATOR Simula o diseña un precipitador electrostático, que emplea placas cargadas para energizar y recolectar pequeñas partículas de polvo de una corriente gaseosa.
	EQUILIBRIUM REACTOR El REACTOR DE EQUILIBRIO da al usuario la capacidad de simular reactores con múltiples reacciones definidas por relaciones de equilibrio.
	EXPANDER Simula una operación de expansión isentrópica o politrópica.
	LIQUID-LIQUID EXTRACTOR Calcula los balances de masa para el contacto por etapas de dos corrientes líquidas inmiscibles.
	FEED Pseudo-operación unitaria para indicar corrientes de alimentación. La información sobre la corriente no es definida en este símbolo, sino en la corriente que conecta este símbolo con la siguiente operación unitaria.


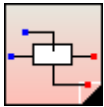
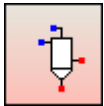
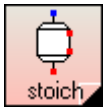
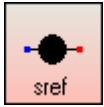
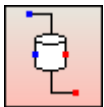
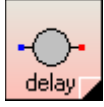
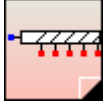
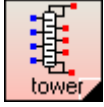
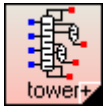


SÍMBOLO	DESCRIPCIÓN
	FIRED HEATER Calcula el requerimiento de combustible para calentar una corriente del proceso hasta la temperatura especificada.
	FLASH Es un modelo generalizado que puede simular diversos tipos de operación flash, incluyendo isotérmico, adiabático, isentrópico, así como especificando la fracción de vapor bajo diferentes condiciones de temperatura y presión.
	GIBBS REACTOR El REACTOR DE GIBBS puede ser empleado para simular ciertas reacciones químicas. El flujo, composición y condición térmica de las salidas se calculan minimizando la energía libre de Gibbs, cumpliendo además con el balance de masa. Todos los componentes en la simulación se toman en cuenta en el proceso de minimización, excepto aquéllos específicamente excluidos (indicados como inertes).
	HEAT EXCHANGER El intercambiador de calor se puede emplear para simular un intercambiador con una o dos entradas. Si sólo se define una entrada, el intercambiador actúa como calentador o enfriador. Cuando se definen dos entradas se puede emplear otros modos operacionales más complejos.
	HYDROCYCLONE El hidrociclón simula o diseña la separación de sólidos de una corriente líquida. El hidrociclón emplea fuerzas centrífugas generadas internamente para separar partículas en grupos según su tamaño.
	KINETIC REACTOR El REACTOR CINÉTICO da al usuario la capacidad de simular o diseñar reactores de flujo tapón (PFR) o reactores continuos tipo tanque agitado (CSTR). Se puede tener hasta 20 reacciones químicas simultáneas. En el modo de diseño, el usuario especifica la conversión deseada del componente clave y CHEMCAD calcula el volumen requerido del reactor. En el modo de evaluación, el usuario especifica el volumen del reactor, y CHEMCAD calcula la composición y condición de la corriente de salida. El reactor puede manejar fase líquida o fase gaseosa. Se permiten reactores con mezclas líquido-vapor pero las reacciones deben ocurrir en sólo una de las fases.
	LIQUID-LIQUID-VAPOR FLASH El módulo de flash de tres fases realiza cálculos rigurosos de equilibrio líquido-líquido-vapor. Requiere tres corrientes de salida independientemente de si las tres fases se formarán o no. La primera salida es la fase vapor. La segunda contiene el líquido de menor densidad, mientras que la tercera salida será la fase líquida más densa, que normalmente es la acuosa si uno de los componentes es el agua.
	LNG HEAT EXCHANGER (MULTI-STREAM EXCHANGER) Simula el intercambio de calor entre varias corrientes calientes y frías (máximo 7 corrientes).
	LOOP El módulo de ciclo se emplea para obligar a CHEMCAD a ejecutar una secuencia particular de operaciones unitarias hasta que se logre una cierta tolerancia de convergencia. Empleando este módulo, es posible correr una simulación muy grande con una tolerancia de convergencia más relajada, mientras que al mismo tiempo se corre un subconjunto pequeño del diagrama con una tolerancia más estricta.
	META (EXTERNAL FLOWSHEET LINK) Se emplea para ejecutar cálculos en otro diagrama de CHEMCAD, como un subconjunto del diagrama de flujo actual.











SÍMBOLO	DESCRIPCIÓN
	MIXER El mezclador combina varias corrientes de entrada y realiza un cálculo de flash adiabático a la presión del mezclador. Si se especifica más de una corriente de salida, el mezclador también funciona como un separador de fases (ver FLASH).
	NODE Se emplea para especificar o calcular la presión en un punto dado en el diagrama.
	PID CONTROLLER El controlador PID mide continuamente una variable especificada por el usuario y, con base en el valor especificado por el usuario (setpoint) envía una señal de control (en miliamperes) a una válvula de control. El controlador puede incluir acciones proporcional, derivativa y/o integral. Se permiten controladores en cascada.
	PIPE SIMULATOR Calcula el tamaño de un segmento particular de tubería o la caída de presión a través de dicho segmento.
	PRODUCT Pseudo-operación unitaria para indicar corrientes de producto.
	PUMP Bomba para líquidos para aumentar la presión de una corriente líquida.
	RAMP CONTROL Controlador de rampa. Se emplea en simulaciones dinámicas para cambiar varios parámetros de operación con respecto al tiempo.
	SCDS COLUMN La columna SCDS (Rigorous Simultaneous Correction Distillation) es un módulo riguroso de equilibrio líquido-vapor en múltiples etapas que puede simular cualquier columna incluyendo columnas de destilación, absorbedores, absorbedores con hervidor y desorbedores, hasta con cinco corrientes de alimentación. El módulo también simula corrientes laterales de producto y calentadores/enfriadores laterales. También puede manejar eficiencias de plato de Murphree.
	SCREEN Simula un proceso de tamizado mediante una fórmula de separación o una tabla de eficiencias.
	SEDIMENTATOR (Centrifugal Sedimentator) Describe el comportamiento típico de una centrífuga de pared sólida separando sólidos de una suspensión líquida. Los sólidos deben ser más densos que el líquido.



SÍMBOLO	DESCRIPCIÓN
	SHORTCUT COLUMN La columna de destilación SHORTCUT emplea el método de Fenske-Underwood-Gilliland para simular una columna de destilación simple con una corriente de entrada y dos corrientes de producto (destilado y fondos). El módulo puede emplearse para diseño o evaluación. La ubicación del plato de alimentación se calcula por la ecuación de Fenske o la ecuación de Kirkbridge. <i>Los métodos abreviados de diseño de columnas de destilación pueden dar resultados erróneos para sistemas con azeótropos. Se recomienda que se emplee un método riguroso como el Tower, Tower Plus o el SCDS para confirmar los resultados del método SHORTCUT.</i>
	SOLID WASHER Simula los balances de masa y energía relacionados con el lavado de partículas sólidas.
	SOLID DRYER Simula los balances de materia y energía asociados con un proceso general de secado.
	STOICHIOMETRIC REACTOR El REACTOR ESTEQUIOMÉTRICO simula una reacción química, dado un conjunto de coeficientes estequiométricos, componentes clave y la fracción de conversión. El reactor puede ser adiabático, isotérmico o tener una entrada o salida específica de calor.
	STREAM REFERENCE Este módulo puede emplearse para transferir información de una corriente del proceso a otra corriente. Las corrientes internas y externas de una columna TOWER PLUS también se pueden transferir para simular procesos con integración de calor. Este modelo es un bloque abstracto en el diagrama, ya que su salida es exactamente igual a su entrada.
	TANK Esta unidad se emplea sólo para simulaciones batch. Para simulaciones en estado estable, emplear los módulos VESSEL o FLASH para representar tanques de almacenamiento. Para modelos dinámicos, emplear mejor la operación DYNAMIC VESSEL.
	TIME DELAY Se emplea para simular tiempos muertos en simulaciones dinámicas, tales como los ocasionados por tuberías.
	TIME SWITCH Gestiona el tráfico de flujo en una simulación dinámica. Dirige la corriente de entrada a una de varias salidas dependiendo de una asignación de tiempos.
	TOWER El módulo TOWER es un módulo riguroso de equilibrio líquido-vapor en múltiples etapas que simula cálculos de una columna incluyendo destiladores, absorbedores y desorbedores. El módulo también maneja productos laterales e intercambiadores de calor laterales. Se puede tener un máximo de cinco corrientes de alimentación y cuatro productos laterales.
	TOWER PLUS El módulo TOWER PLUS es un módulo riguroso de columna que maneja torres con desorbedores laterales, bombeo de plato a plato, intercambiadores de calor laterales y productos laterales. Los desorbedores e intercambiadores laterales, así como el bombeo de plato a plato son tratados como parte del módulo TOWER PLUS y se resuelven simultáneamente con la columna principal sin tener que llevar a cabo cálculos de reciclo.



SÍMBOLO	DESCRIPCIÓN
	VACUUM FILTER Simula o diseña un filtro a vacío o a presión constante.
	VALVE Este módulo especifica una caída de presión en una corriente. Se puede especificar la presión de salida, la caída de presión, el punto de rocío o el punto de burbuja de la corriente de salida. Sirve también como separador de fases si se especifica más de una corriente de salida.
	VENTURI SCRUBBER Simula o diseña un lavador venturi. Los lavadores venturi se emplean para precipitar partículas, nieblas o vapores condensables de corrientes gaseosas. El módulo particiona las partículas entre las fases líquida y vapor, pero trata el contacto líquido-vapor como un sistema en equilibrio.
	VESSEL Este módulo se emplea cuando se desea combinar un tanque flash con un divisor. Permite separar una fase vapor de una fase líquida, y el líquido se puede separar en varias corrientes.
	USER ADDED MODULE Permite emplear una operación unitaria definida por el usuario.
	EXCEL UNIT Con el módulo de Excel, CHEMCAD es capaz de enlazar la simulación con hojas de cálculo de Excel como operaciones unitarias. Al incluir el módulo de Excel en el diagrama, especificar la ubicación del archivo de Excel y corriendo la simulación, CHEMCAD activará el documento de Excel y ejecutará las macros de VBA especificadas para el documento.
	POLYMER REACTOR Módulo de reactor con el propósito específico de simular reactores de polimerización.
	VISUAL BASIC UNITOP Permite el uso de un módulo de Visual Basic para realizar cálculos definidos por el usuario.



MODELOS DE COLUMNAS DE DESTILACIÓN

CHEMCAD proporciona varios módulos para simular torres de destilación operando continuamente en estado estable. El más simple, denominado "Shortcut column", es el único que no efectúa cálculos rigurosos etapa por etapa. Los tres métodos rigurosos se denominan "Tower", "Tower Plus", y "SCDS" (Simultaneous Correction Distillation).

- **Shortcut column:** Usa el método de Fenske-Underwood-Gilliland para simular una columna de destilación simple con una entrada y dos salidas (destilado y fondos). Es el único método que puede efectuar cálculos de diseño (Design) y de operación (Rating). En modo de diseño, se especifican condiciones de las corrientes de producto y el módulo estima el número de platos y el plato de alimentación necesarios para alcanzar dicha separación. En el modo de operación, el número de platos y el plato de alimentación deben ser especificados, y las composiciones y flujos de los productos serán calculadas. El módulo se basa en la volatilidad relativa de los componentes, por lo que no se debe usar para sistemas altamente ideales o que formen azeótropos.
- **Tower:** Método riguroso "de adentro hacia afuera" (inside-out). Este módulo proporciona algunas configuraciones habituales de columnas de destilación, con un máximo de 5 entradas de alimentación y 4 productos laterales. También puede simular otros equipos de separación líquido-vapor por etapas, como columnas de absorción y de desorción. La convergencia se alcanza más rápidamente que con el método SCDS.
- **Tower Plus:** Básicamente el mismo que "Tower", pero permite simular configuraciones más complejas como columnas que incluyen intercambiadores de calor laterales, bombeo de líquido de un plato a otro, y columnas laterales de rectificación.
- **SCDS:** Método riguroso de correcciones simultáneas. Es el único que puede manejar eficiencias de Murphree menores al 100%, pero también es el que requiere mayor tiempo de computación y es el más difícil de converger. Puede simular destilación con dos o tres fases; si existen tres fases, el usuario tiene la opción de decantar una de las fases líquidas en el condensador y recircular la otra fase líquida. Es también el único que puede manejar adecuadamente mezclas reaccionantes en la columna.

Condiciones especiales que requieren el uso de un modelo en particular	Modelo requerido
Rectificadores laterales y/o bombeo de líquido de un plato a otro	Tower Plus
Especificación de las condiciones en un plato	Tower, Tower Plus
Eficiencia de plato menor al 100%	SCDS
Uso de un modelo de transferencia de masa (columna de platos o empacada)	SCDS
Destilación reactiva	SCDS

NOTA: En la especificación del condensador para los modelos rigurosos, la opción de especificar la relación de reflujo aparece incorrectamente como R/D. Lo correcto sería L/D o simplemente R.



GENERAL GUIDELINES FOR DISTILLATION

ADAPTED FROM THE CHEMCAD ONLINE HELP

A. Degrees of freedom

All CHEMCAD rigorous distillation models require that you specify the number of trays, pressure profile, and all input streams. These specifications are enough to completely define all outputs from a simple absorber or stripper with no external heat loads and no side draws. In other words, the algorithm contains as many independent equations as there are unknowns, such that there are no remaining DEGREES OF FREEDOM. Each degree of freedom allows the user to specify an independent variable such as reflux ratio, heat load or component flow or fraction.

Each reboiler, condenser or side exchanger adds one degree of freedom to the column. Each side draw adds one degree of freedom. Each pumparound adds two degrees of freedom because the draw and return trays are different and the pumparound heat exchanger modifies the thermal condition of the return stream. A side stripper adds two degrees of freedom but CHEMCAD requires the user to define the stripper heat source, leaving one degree of freedom for the user.

B. Choosing specifications

As a general rule, the preferred specifications are those with the widest possible range. With such specs, the user is less likely to violate acceptable limits. For example, reflux ratios may theoretically vary from zero (no reflux) to infinity (total reflux). On the other hand, the temperature of a pure component can take one and only one value at a given pressure. Both experience and intuition indicate that ease of convergence is proportional to the range of the specification chosen. Unfortunately, the acceptable spec range is not always obvious and may vary with column configuration and pressure.

When the goals of the simulation demand the use of a narrow-range specification, it is possible to define the acceptable range by varying reflux ratio and noting the change in the desired specification. If the desired spec cannot be achieved within the envelope of a very low and very high reflux ratio, it may be necessary to reconfigure the column, change the pressure or look for errors in the thermodynamic models.

C. Initializing difficult columns

Difficult columns can usually be initialized by arbitrarily choosing wide-range variables that are more likely to converge, providing a feasible path to the required solution. To start from a converged solution, select Initialization option "1 Reload column profile" in the Convergence tab. In this way, it is much more likely that the column will converge to the required specifications. For example, a standard column with reboiler and condenser can usually be converged by setting the reflux ratio, R/D, and bottoms flow. R/D is a preferred spec because most values are acceptable and a fixed value stabilizes the vapor-liquid traffic in the column, which, in turn, stabilizes the temperature profile and K values. Similarly, bottoms flow is easily estimated from feed flow and purity requirements and stabilizes the overall material balance. Restarting from the converged "startup" profile, the column can usually be converged to component purity or other legitimate specs.

D. Estimations

Suitable estimations will often provide a better starting profile than the algorithm itself. However, since the algorithm always preferentially uses input estimates to initialize its profile, they should be well considered in advance. In general, no estimates are better than poor estimates. The following may be helpful:

- Temperatures may be estimated by synthesizing the expected overhead and bottom products and calculating bubble points.
- Overhead flow may be estimated from the expected product flow.
- Reflux flow may be estimated from the expected reflux ratio and product flow.

E. Damping factor

In the TOWR (inside-out) program, the damping factor may be used to minimize the effect of strong variations in the K-factor calculations. The default value is 1.0 and may be varied between 0.0 and 1.0. Low damping factors (0.2-0.5) minimize K-value oscillation but cannot make up for unrealistic or out-of-bounds specifications.

A similar damping effect can be achieved in SCDS by arbitrarily reducing the stage efficiency. This has the effect of minimizing K-value changes, allowing the material balance and concentration profiles to converge. This approach should not be used with concentration specifications since an inefficient column is less likely to be able to comply with such specs. With the concentration profile stabilized, the column can usually be "relaxed" to the required efficiency in one or more steps. This procedure is built into the SCDS damping factor.



EJERCICIO 6

1000 kmol/h de una mezcla de xilenos y otros compuestos aromáticos se va a separar por destilación a una presión de 1.5 bar (medido en el condensador) y con una caída de presión en la columna de 0.25 bar. Las condiciones de alimentación son 150°C y 2.5 bar, con composición que se muestra en la siguiente tabla:

Componente	T_B [°C]	x_F	% deseado de recuperación en destilado
etilbenceno	136.2	0.054	
p-xileno	138.5	0.221	
(clave ligero) m-xileno	139.1	0.488	99.0
(clave pesado) o-xileno	144.4	0.212	3.8
n-propilbenceno	159.3	0.025	

Referencia: McCabe, Smith, and Harriott, *Unit Operations of Chemical Engineering*, 5th Edition, McGraw-Hill, p. 612.

PARTE 1: DISEÑO PRELIMINAR USANDO EL MÉTODO CORTO

1. Usando una columna "Shortcut", estimar por prueba y error la relación de reflujo R/Rmin necesaria para que se requieran 100 etapas ideales para lograr la separación, de acuerdo a las especificaciones mostradas en la tabla de arriba. La información obtenida de esta simulación se utilizará para la segunda parte del ejercicio.

PARTE 2: EVALUACIÓN DE LA OPERACIÓN DE UNA COLUMNA USANDO MÉTODOS RIGUROSOS

Ya que la información de la simulación anterior va a ser necesaria para esta segunda parte, es conveniente iniciar una segunda sesión con CHEMCAD.

1. En otra simulación, usar una columna "Tower" y especificar 100 platos, usando el plato de alimentación de acuerdo a la información obtenida en la parte 1 del ejercicio. Para fijar los balances de masa, especificar la relación de reflujo (para el condensador) y el flujo total molar (para el hervidor) de acuerdo también a las especificaciones obtenidas en la parte 1. Datos adicionales que sean necesarios como aproximaciones iniciales pueden ser proporcionados también a partir de la información de la parte 1.
2. Correr la simulación y obtener la composición molar tanto del destilado como de los fondos. Calcular también la fracción de los componentes clave ligero y pesado que sale en el destilado.
3. Repetir en otra simulación, usando en este caso una columna "SCDS". Especificar el modelo de simulación de transferencia de masa en columnas de platos ("Tray column mass transfer") y una eficiencia de plato de Murphee de 65% (constante en la columna). Aparecerá luego una segunda ventana para especificar las características de los platos. Especificar platos de campana de burbujas de un solo paso, usando el modelo de Chan-Fair, y con una sola sección en la columna de 0.75 m de diámetro.

Con la información obtenida en estas dos partes, llenar las tablas de la página siguiente.



SHORTCUT COLUMN		
Composición (mol %)	Producto Destilado	Producto de Fondo
Etilbenceno		
p-xileno		
m-xileno (CL)		
o-xileno (CP)		
n-propilbenceno		
Temperatura (°C)		
Flujo molar total (kmol/h)		
Calor removido en el condensador (MJ/h)		
Calor requerido en el hevador (MJ/h)		
Fracción recuperada de componente clave ligero en destilado (moles de CL en D / moles de CL en F)		
Fracción recuperada de componente clave pesado en destilado (moles de CP en D / moles de CP en F)		

TOWER COLUMN		
Composición (mol %)	Producto Destilado	Producto de Fondo
Etilbenceno		
p-xileno		
m-xileno (CL)		
o-xileno (CP)		
n-propilbenceno		
Temperatura (°C)		
Flujo molar total (kmol/h)		
Calor removido en el condensador (MJ/h)		
Calor requerido en el hevador (MJ/h)		
Fracción recuperada de componente clave ligero en destilado (moles de CL en D / moles de CL en F)		
Fracción recuperada de componente clave pesado en destilado (moles de CP en D / moles de CP en F)		

SCDS COLUMN		
Composición (mol %)	Producto Destilado	Producto de Fondo
Etilbenceno		
p-xileno		
m-xileno (CL)		
o-xileno (CP)		
n-propilbenceno		
Temperatura (°C)		
Flujo molar total (kmol/h)		
Calor removido en el condensador (MJ/h)		
Calor requerido en el hevador (MJ/h)		
Fracción recuperada de componente clave ligero en destilado (moles de CL en D / moles de CL en F)		
Fracción recuperada de componente clave pesado en destilado (moles de CP en D / moles de CP en F)		



EJERCICIO 7 Producción de Éter Dimetílico

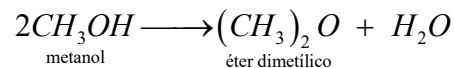
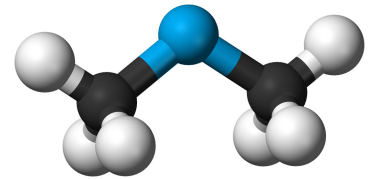
Objetivo

Preparar un diagrama de flujo preliminar del proceso para producir éter dimetílico a partir de metanol. Este ejercicio introduce el uso de las operaciones unitarias: mezclado, reactor estequiométrico, intercambiador de calor, bomba, válvula.

Antecedentes

Adaptado de: Turton et al., "Analysis, Synthesis, and Design of Chemical Processes", 2nd Ed., Prentice Hall, 2003.

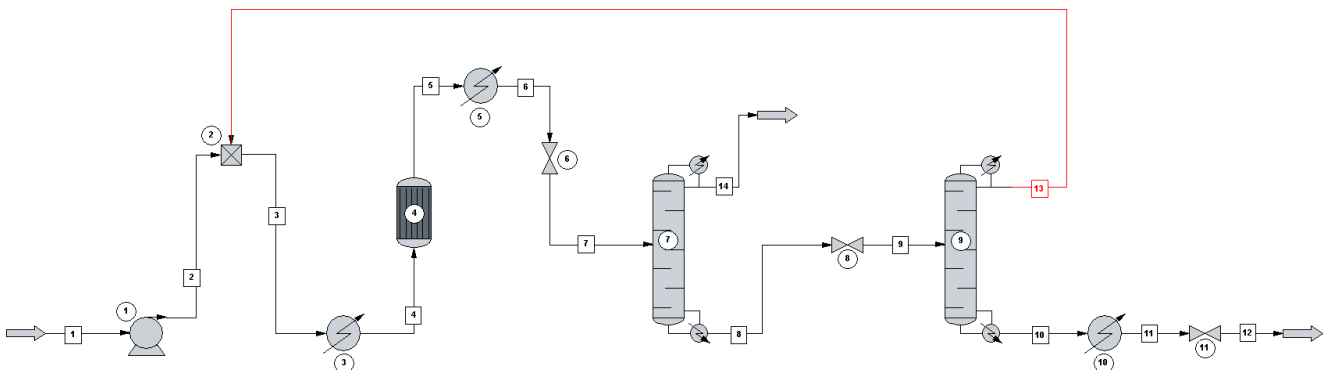
El éter dimetílico (dimethyl ether, DME) se usa principalmente como propelente. Es miscible con la mayoría de los solventes orgánicos, tiene alta solubilidad en agua, y es completamente miscible en agua con 6% de etanol. Recientemente, se ha investigado el uso de DME como aditivo para motores a diesel debido a su alta volatilidad y alto octanaje. DME se produce mediante deshidratación catalítica sobre un catalizador de zeolita ácida. La reacción principal es:



En el rango de temperatura normalmente usado, no se presentan reacciones secundarias de importancia.

Descripción general del proceso

262.2 kmol/h de alimentación (metanol fresco a 25°C y 1 bar, conteniendo 0.95% mol de agua) se mezcla con la corriente de reciclaje de metanol. La corriente resultante es vaporizada y sobrecalentada a 350°C antes de entrar un reactor adiabático empacado de flujo tapón. La conversión a la salida del reactor debe ser 80%. La corriente de salida del reactor es enfriada a 100°C antes de entrar a la primera columna de destilación, donde se separa el éter dimetílico como producto destilado. Los fondos pasan a una segunda columna donde se separan el metanol y el agua. El metanol es reciclado y el agua es enfriada hasta 50°C antes de descartarse.





Información adicional sobre los módulos usados

REACTOR ESTEQUIOMÉTRICO

CHEMCAD tiene módulos para diversos tipos de reactores. El reactor estequiométrico (*Stoichiometric Reactor*) es el más indicado cuando se tiene sólo una reacción y la conversión es conocida. Es el modelo más simple de reactor y no requiere información sobre la cinética de la reacción. No efectúa ningún cálculo de diseño con relación al volumen del reactor. El reactor puede operar de forma adiabática, isotérmica, o con una entrada (o salida) de calor constante.

INTERCAMBIADOR DE CALOR

Los intercambiadores de calor de un solo lado pueden usarse en modo de diseño (Design) o en modo de operación (Rating). En el modo de diseño, debe especificarse sólo un dato que permita especificar la condición térmica de la corriente de salida, por ejemplo: temperatura de salida, fracción de vapor, cantidad de calor transferido, etc. En el modo de operación, se debe especificar las temperaturas de entrada y salida de la segunda corriente, el coeficiente global de transferencia de calor, y el área de transferencia de calor.

VÁLVULA

Básicamente calculan una caída de presión en una corriente. También se puede cerrar completamente una válvula. Para especificar las válvulas, hay que proporcionar uno de los siguientes datos: presión de salida, caída de presión a través de la válvula, o punto de rocío o de burbuja de la corriente al salir de la válvula.

BOMBA

Las bombas básicamente aumentan la presión de una corriente líquida. Para especificar una bomba, es necesario indicar la presión de descarga o el aumento de presión entre la entre succión y descarga, o bien datos que describan el funcionamiento de la bomba (por ejemplo, la ecuación de operación que relaciona el aumento de presión con el flujo).

Especificaciones del equipo

NOTA: Los números se refieren al diagrama de flujo mostrado en la página anterior.

- (1) Bomba: Presión de salida 15.5 bar, eficiencia 60%.
- (2) Mezclador: Presión de salida 15.2 bar.
- (3) Intercambiador de calor: Caída de presión 0.5 bar, temperatura de salida 350°C.
- (4) Reactor estequiométrico: Adiabático, 80% conversión de metanol.
- (5) Intercambiador de calor: Caída de presión 0.5 bar, temperatura de salida 100°C.
- (6) Válvula: Presión de salida 10.4 bar.
- (7) Columna de destilación (Tower): 22 platos, alimentación en plato 12, relación de reflujo 2.75, flujo molar de fondos 198.6 kmol/h, presión en la parte superior 10.3 bar, caída de presión en la columna 0.2 bar.
- (8) Válvula: Presión de salida 7.5 bar.
- (9) Columna de destilación (Tower): 26 platos, alimentación en plato 14, relación de reflujo 1.7, flujo molar de fondos 132.3 kmol/h, presión en la parte superior 7.3 bar, caída de presión en la columna 0.3 bar.
- (10) Intercambiador de calor: Caída de presión 0.5 bar, temperatura de salida 50°C.
- (11) Válvula: Presión de salida 1.2 bar.

NOTA IMPORTANTE

Algunas de las especificaciones indicadas no son las más correctas para los equipos usados. Esto es intencional. En el ejercicio siguiente, se plantearán algunas modificaciones para que el proceso esté especificado adecuadamente.



RESULTADOS

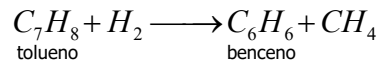
Calor intercambiado en (3)	MJ/h
Calor intercambiado en (5)	MJ/h
Calor intercambiado en (10)	MJ/h
Temperatura de entrada al reactor (4)	°C
Temperatura de salida del reactor (4)	°C
Calor requerido en el hervidor de la columna (7)	MJ/h
Calor requerido en el hervidor de la columna (9)	MJ/h
Composición del producto (% mol)	Éter dimetílico: Metanol: Agua:



**EJERCICIO 8
PRODUCCIÓN DE BENCENO POR HIDRO-DESALQUILACIÓN**

Planteamiento del problema

Un proceso industrial para producir benceno a partir de tolueno es la reacción de desalquilación en fase gaseosa con hidrógeno:



Se desea procesar tolueno líquido puro usando una corriente de hidrógeno (metano también presente) proveniente de otra parte del proceso:

	Hidrógeno de alimentación	Tolueno de alimentación
Hidrógeno	286.0 kmol/h	—
Metano	15.0 kmol/h	—
Tolueno	—	108.7 kmol/h
Temperatura	25°C	25°C
Presión	25.5 bar	0.9 bar

El tolueno se bombea a 27 bar a un intercambiador de calor donde se vaporiza totalmente y luego se mezcla con la corriente de hidrógeno. La mezcla resultante se calienta hasta 600°C antes de entrar al reactor, donde se obtiene una conversión de tolueno de 75%.

El producto de la reacción se separa por destilación flash a 38°C y 2.8 bar. La fase vapor que consiste principalmente de hidrógeno y metano se obtiene como subproducto. Este subproducto se podría aprovechar como fuente de energía térmica *in situ*. (Pregunta para reflexionar: ¿Por qué no se recircula esta corriente para aprovechar el hidrógeno que no ha reaccionado?)

El producto líquido del flash se destila para separar el benceno (producto destilado) del tolueno (producto de fondo). La columna de destilación se debe diseñar para recuperar 98% del benceno de alimentación en el producto destilado y 99.5% del tolueno de alimentación en el producto de fondo. Otras especificaciones para la columna son: presión de operación 4.5 bar, caída de presión de 0.3 bar y R/Rmin = 1.5. El tolueno recuperado se recircula y el benceno obtenido como producto se enfría a 38°C.

PREPARAR UN DIAGRAMA DE FLUJO Y LLEVAR A CABO LA SIMULACIÓN DEL PROCESO



Resultados

DESTILACIÓN FLASH	VAPOR	LÍQUIDO
Flujo (kmol/h)		
Composición (mol%)		

COLUMNA DE DESTILACIÓN	DESTILADO	FONDO
Temperatura (°C)		
Presión (bar)		
Flujo (kmol/h)		
Composición (mol%)		
Número de platos		
Plato de alimentación		

Pérdidas de benceno con la corriente de hidrógeno		(kmol benceno perdido)/(kmol benceno en producto)
Pérdidas de tolueno con la corriente de hidrógeno		(kmol tolueno perdido)/(kmol tolueno en alimentación)

¿Por qué no se puede recircular (totalmente) la corriente de hidrógeno?



EJERCICIO 9
SIMULACIÓN DE UN REACTOR CATALÍTICO DE LECHO FLUIDIZADO
MEDIANTE EL USO DEL REACTOR CINÉTICO

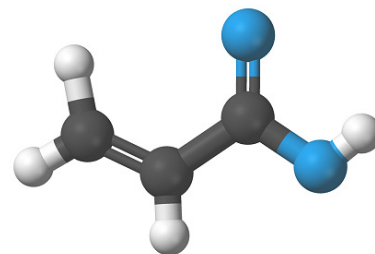
Objetivo

Familiarizarse el uso del reactor cinético para modelar reacciones controladas por la velocidad de reacción y/o múltiples reacciones.

Producción de ácido acrílico por oxidación catalítica parcial de propileno

El ácido acrílico (AA) se usa como precursor de una amplia variedad de químicos en la industria de los polímeros y en la industria textil. Hay varias rutas para producir AA, pero la más común es la oxidación parcial del propileno.

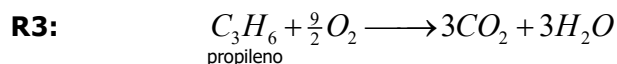
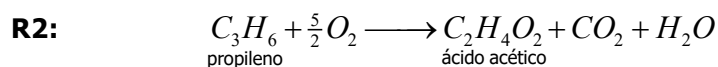
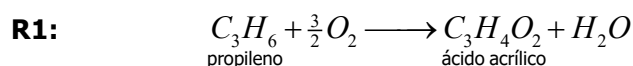
El mecanismo usual para producir AA emplea un proceso en dos etapas en el cual el propileno es oxidado primero a acroleína y luego vuelto a oxidar para producir AA. Varias reacciones secundarias pueden ocurrir, principalmente oxidaciones de reactivos y productos, siendo ácido acético uno de los productos secundarios principales.



Típicamente el proceso involucra un sistema de dos reactores cada uno conteniendo un catalizador diferente y operando en condiciones tales que se maximice la producción de AA. Para el propósito de este ejercicio, asumiremos que se emplea un solo reactor catalítico de lecho fluidizado y no se analizará la parte de separación del efluente.

Cinética

Las reacciones que ocurren en el sistema están controladas por la cinética química (es decir, están lejos del equilibrio). Las tres siguientes reacciones tienen lugar:





Todas las reacciones obedecen el mismo tipo de ecuación de velocidad:

$$-r_i = k_i P_{C_3H_6} P_{O_2} \quad \text{donde } k_i = k_{0,i} \exp\left[-\frac{E_i}{RT}\right]$$

Las constantes de cada reacción se listan en la tabla siguiente:

	$k_{0,i}$ [kmol/m ³ ·h·(kPa) ²]	E_i [kcal/kmol]
Reacción 1	1.59×10^5	15,000
Reacción 2	8.83×10^5	20,000
Reacción 3	1.80×10^8	25,000

Es importante señalar que al especificar los parámetros del reactor se puede (y generalmente es necesario) especificar un conjunto diferente de unidades para las cantidades involucradas en la ecuación de velocidad, en particular si la ecuación está basada en concentración o en presión parcial.

Reaction Engineering Units

Concentration option

Partial pressure

Activation energy

Molar flow

Volume

Mass flow

Time

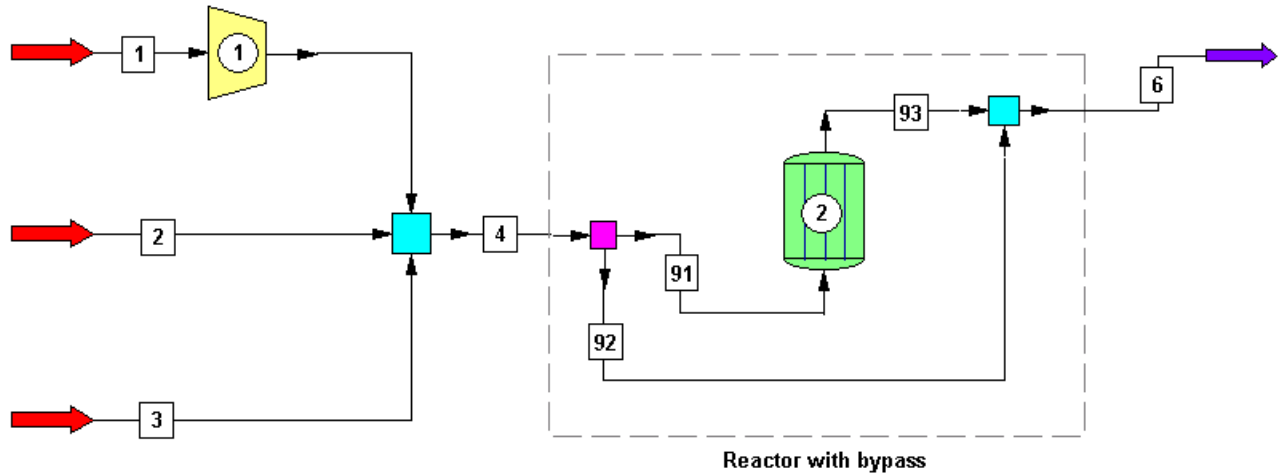
Información adicional del proceso

	CORRIENTES DE ALIMENTACIÓN		
	1 – Aire	2 – Vapor	3 – Propileno
Temperatura	25.0°C	159.0°C	25.0°C
Presión	1.0 bar	6.0 bar	11.5 bar
Propileno	—	—	127.0 kmol/h
Nitrógeno	1056.7 kmol/h	—	—
Oxígeno	280.9 kmol/h	—	—
Agua	25.3 kmol/h	992.3 kmol/h	—

El aire alimentado se comprime a 5 bar antes de ser mezclado con el vapor y el propileno. La presión de salida del mezclador se asume a 4.3 bar. El reactor tiene un volumen de 100 m³ y opera isotérmicamente a 310°C y 3.5 bar.



Diagrama de flujo del proceso



Las reacciones tienen lugar en un reactor catalítico de lecho fluidizado. Dependiendo de las condiciones de fluidización, los sistemas gas-sólido presentan formación de burbujas que ocasionan que no todo el gas entre en contacto con el catalizador sólido. CHEMCAD no tiene un método directo para modelar este tipo de reactores, por lo que se emplea un reactor de flujo tapón y la corriente de alimentación al reactor se separa para que una parte (10% en este caso) no pase por el reactor. De este modo, incluso si el volumen del reactor fuese infinito, la máxima conversión sería del 90%.



ECUACIÓN GENERAL DE CINÉTICA DE REACCIÓN EN CHEMCAD

CHEMCAD calcula la velocidad de reacción de cada componente con base en una ecuación cinética general:

$$r_i = \sum_{j=1}^{nrx} \left[\frac{N_{ij} A_j e^{-(E_j/RT)} * \prod_{k=1}^n (C_k)^{\alpha_{kj}}}{\left(1 + \sum_{k=1}^n \phi_{kj} e^{-(E_{kj}/RT)} * (C_{kj})^{b_{kj}} \right)^{\beta_j}} \right]$$

Los términos del denominador representan efectos de adsorción en reacciones catalíticas heterogéneas. Para los casos de ecuaciones simples de velocidad de reacción (primer orden, segundo orden, etcétera) no existen estos efectos. Al ignorar esos términos, la ecuación toma la forma estequiométrica tradicional dependiente de la concentración con dependencia en la temperatura en forma de la ecuación de Arrhenius:

$$r_i = \sum_{j=1}^{nrx} \left[N_{ij} A_j e^{-(E_j/RT)} * \prod_{k=1}^n (C_k)^{\alpha_{kj}} \right]$$

Símbolo	Nombre en el programa	Descripción
r_i		Velocidad de formación del componente i
i		Subíndice para componente i
j		Subíndice para reacción j
k		Subíndice para reactivo k
N_{ij}	STOICHIOMETRIC COEFFICIENT	Coefficiente estequiométrico para componente i en reacción j
A_j	FREQUENCY FACTOR	Factor de frecuencia (factor pre-exponencial) en la reacción j
E_j	ACTIVATION ENERGY	Energía de activación en la reacción j
R		Constante universal de los gases
T		Temperatura absoluta
C_k		Concentración (mol/volumen) o presión parcial del reactivo k
α_{kj}	EXPONENTIAL FACTOR	Exponente de la concentración del reactivo k en la reacción j
n		Número de reactivos
nrx		Número de reacciones
ϕ_{kj}	ADSORPTION FACTOR	Factor de frecuencia de adsorción para el componente k
E_{kj}	ADSORPTION ENERGY	Factor de energía de adsorción para el componente k en la reacción j
b_{kj}	ADSORPTION EXPONENT	Exponente de la concentración en adsorción del reactivo k en la reacción j
β_j	BETA FACTOR	Exponente del término de sitios de adsorción para reacción j



VENTANA PARA ESPECIFICAR LA VELOCIDAD DE REACCIÓN

Component	Stoichiometric coefficient	Exponential factor	Adsorption factor	Adsorption energy	Adsorption exponent
1 Propylene	1	1			
3 Oxygen	-1.5	1			
7 Acrylic Acid	1				
5 Water	1				
<None>					
<None>					
<None>					
<None>					
<None>					
<None>					

En esta ventana se define la estequiometría y cinética de una reacción. Dependiendo del número de reacciones que se haya especificado, será el número de ventanas de este tipo que aparezcan, una a la vez. Cuando se termina de proporcionar la información y se cierra esta ventana, la siguiente aparece automáticamente hasta que todas las reacciones han sido especificadas. Los campos que aparecen en esta ventana son:

- Factor de frecuencia (A_j): Para reacciones isotérmicas, este valor es la constante de velocidad. Las unidades de A_j dependen del orden de la reacción.
- Energía de activación (E_j): Tiene unidades de energía/mol.
- Exponente beta (β_j): Exponente adimensional para los términos de adsorción.
- Calor de reacción: A la temperatura y presión del sistema, que puede ser especificado por el usuario. Si no se proporciona, CHEMCAD lo estima a partir del calor de formación de los reactivos y productos. Un valor negativo indica reacción exotérmica, y un valor positivo indica reacción endotérmica.

Para cada componente que participe en la reacción se necesita también especificar:

- Componente: Seleccionar el componente de la lista. Proporcionar la información disponible para cada componente en el renglón que le corresponde.
- Coeficiente estequiométrico (N_{ij}): Negativo para reactivos, positivo para productos.
- Exponente (factor exponencial, α_{kj}): Éste es el orden de la reacción con respecto a este componente. Si no se especifica para un reactivo, CHEMCAD lo asume igual al valor absoluto del coeficiente estequiométrico. Si no se especifica para un producto, CHEMCAD lo asume cero.
- Factor de adsorción (ϕ_{kj}): Factor de frecuencia para adsorción de Langmuir-Hinshelwood. Si no se proporciona, CHEMCAD lo asume igual a cero y no se incluye resistencia por adsorción en la ecuación de velocidad.
- Energía de adsorción (E_{kj}): Energía de adsorción de Langmuir-Hinshelwood. Si no se proporciona, CHEMCAD asume cero.
- Exponente de adsorción (b_{kj}): Exponente de adsorción de Langmuir-Hinshelwood. Si no se especifica CHEMCAD asume cero.



**INSTITUTO TECNOLÓGICO
de Durango**

DEPARTAMENTO DE INGENIERÍAS
QUÍMICA Y BIOQUÍMICA

Diseño de Procesos 2

VERANO 2010

Docente: Dr. Carlos Francisco Cruz Fierro

CHEMCAD

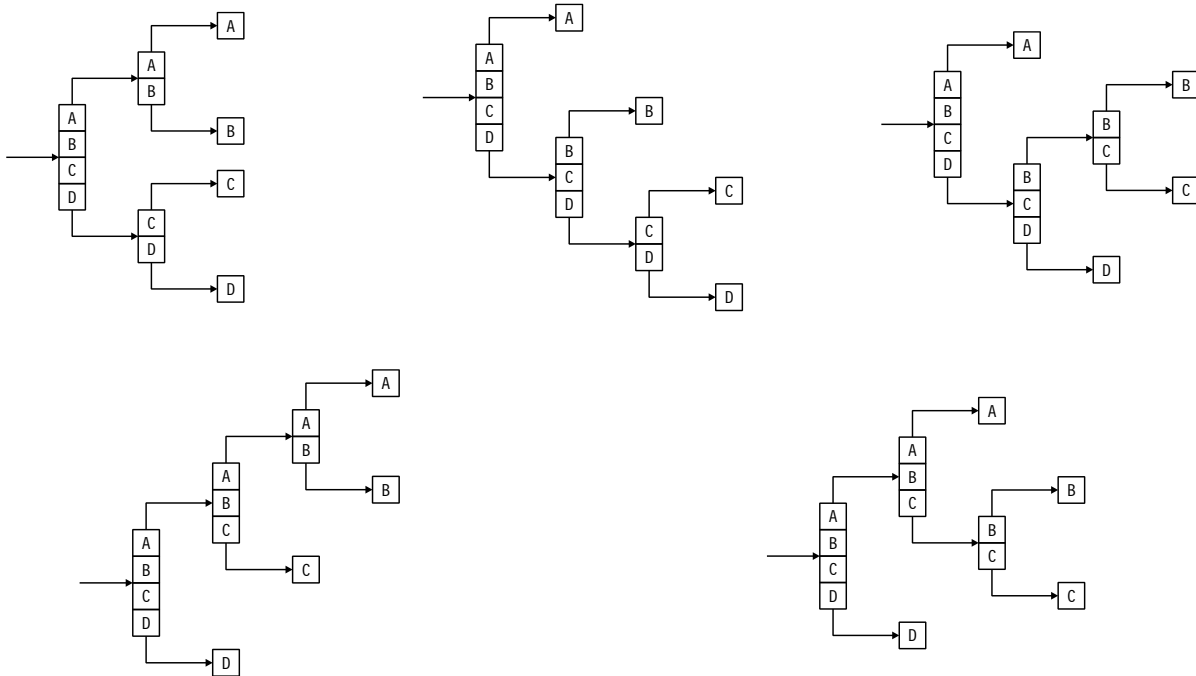
HOJA PARA RESPUESTAS DE ESTE EJERCICIO



EJERCICIO 10

SECUENCIAS ALTERNATIVAS DE DESTILACIÓN MULTICOMPONENTE

Si se tiene una mezcla de cuatro componentes (**A, B, C** y **D**) que se desea separar en componentes prácticamente puros por destilación, se puede realizar empleando 3 columnas de destilación en uno de los siguientes arreglos:



NOTA: Los componentes A, B, C y D se asignan en orden decreciente de volatilidad

La corriente a separar consiste en 1730 kmol/h de una mezcla de clorofenoles en benceno, a 40°C y 1.3 atm, conteniendo un 30.47% de para-clorofenol, 4.30% de orto-clorofenol y 1.29% de meta-clorofenol (el resto es benceno). Esta corriente se debe alimentar a la primer columna como vapor saturado a 8 atm.

La presión de operación en cada columna (medida en la parte superior) es 2 atm menor que la presión de su corriente de alimentación respectiva, y las caídas de presión en las columnas no se pueden despreciar. Se desea una recuperación del 99.9% de los componentes clave en todas las columnas.

Componente	A	B	C	D
Nombre				
Punto de ebullición (°C)				
Flujo en alimentación (kmol/h)				

Con base en las reglas heurísticas (Rules of Thumb) para destilación, seleccionar uno de los cinco esquemas de destilación (señalar en la figura). Detallar por qué se seleccionó ese esquema en particular.



Simular el proceso completo de separación empleando columnas Shortcut para determinar el número de etapas y la etapa de alimentación para cada una de las tres columnas. Emplear las guías generales para destilación para calcular las caídas de presión y fijar la relación del reflujo al reflujo mínimo (R/R_{min}). Usar UNIFAC como modelo termodinámico para los cálculos de equilibrio.

	Columna 1	Columna 2	Columna 3
Presión en la parte superior (atm)			
Caída de presión (atm)			
Número de etapas			
Etapas de alimentación			
Componente clave ligero			
Componente clave pesado			
Relación de reflujo mínimo			
Relación de reflujo			
Reflujo (kmol/h)			
Calor removido en condensador (MJ/h)			
Calor suministrado en rehedidor (MJ/h)			

	Producto A	Producto B	Producto C	Producto D
Temperatura (°C)				
Presión (atm)				
Flujo (kmol/h)				
Composición (mol%) Benceno o-clorofenol m-clorofenol p-clorofenol				



EXAMEN

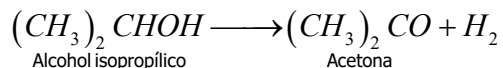
PRODUCCIÓN DE ACETONA A PARTIR DE ALCOHOL ISOPROPÍLICO

INDICACIONES

Simular el proceso descrito a continuación. Donde sea necesario, asumir caídas de presión razonables y cualquier otro dato de diseño no proporcionado. Buscar las condiciones del proceso que reduzcan costos o mejoren la producción. Con base en su simulación, completar la información pedida al final del examen. Se entregará el examen y copia de los archivos producidos con CHEMCAD.

INFORMACIÓN GENERAL

El proceso más empleado actualmente para la producción de acetona es como sub-producto de la producción de fenol, donde el benceno es alquilado a cumeno, que es oxidado a hidroperóxido de cumeno, y finalmente descompuesto para dar fenol y acetona. Sin embargo, el proceso presentado aquí usa alcohol isopropílico (AIP) como materia prima.



Ésta es una alternativa comercialmente viable y varias plantas químicas producen acetona de este modo. La principal ventaja de este proceso es que la acetona producida es libre de trazas de compuestos aromáticos, en particular benceno, por lo que es preferida por la industria farmacéutica debido a las fuertes restricciones impuestas sobre el uso de solventes en la producción de medicamentos para consumo humano.

DESCRIPCIÓN DEL PROCESO

Una mezcla de alcohol isopropílico y agua (88% en peso de AIP, a 25°C y 1.01 bar, flujo total de 52 kmol/h) se mezcla con el alcohol isopropílico recirculado. La corriente resultante se bombea a 2.3 bar, se vaporiza y se precalienta a 350°C antes de entrar al reactor, que opera isotérmicamente a 450°C y 2 bar. La corriente de salida del reactor, conteniendo acetona, hidrógeno, agua y AIP se enfría a 20°C antes de bombearse a un flash adiabático para separar el hidrógeno formado. Los tres componentes del producto de fondo del flash se separan por destilación. La(s) columna(s) de destilación se deben diseñar para que la acetona producto tenga una pureza de 99.9%, el alcohol isopropílico recuperado debe ser por lo menos 70% puro, y el agua debe contener menos del 2% de compuestos orgánicos para que se pueda descartar (todos estos porcentajes en base peso).



CINÉTICA DE LA REACCIÓN

La reacción para formar acetona a partir de alcohol isopropílico (isopropanol) es endotérmica con un calor estándar de reacción de 62.9 kJ/mol. La reacción es controlada por la cinética y ocurre en fase vapor sobre un catalizador. La reacción es de primer orden con respecto a la concentración de alcohol y se representa adecuadamente con la siguiente ecuación de velocidad:

$$-r_{AIP} = k_0 \exp\left[-\frac{E_a}{RT}\right] C_{IPA} \quad [\text{kmol/m}^3 \cdot \text{s}]$$

con $E_a = 72.38$ MJ/kmol, $k_0 = 3.51 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$, y con C_{IPA} dado en kmol/m³.

El reactor está formado por tubos de 2 plg (50.4 mm) de diámetro y 20 pies (6.096 m) de longitud. Se desea obtener una conversión de 90% de AIP en el reactor, por lo que se necesita determinar el volumen del reactor.

EQUILIBRIO LÍQUIDO-VAPOR

El sistema alcohol isopropílico-agua forma un azeótropo de punto de ebullición mínimo con una composición de 88% en peso de AIP y 12% en peso de agua. El modelo termodinámico seleccionado deberá reflejar correctamente la composición del azeótropo. Verificar las predicciones de equilibrio con los datos de equilibrio para los sistemas acetona-agua e isopropanol-agua reportados en el Manual del Ingeniero Químico de Perry (en el capítulo sobre destilación).

DISEÑO DEL PROCESO

El sistema alcohol isopropílico-agua forma un azeótropo de punto de ebullición mínimo con una composición de 88% en peso de AIP y 12% en peso de agua. El modelo termodinámico seleccionado deberá reflejar correctamente la composición del azeótropo. Verificar las predicciones de equilibrio con los datos de equilibrio para los sistemas acetona-agua e isopropanol-agua reportados en el Manual del Ingeniero Químico de Perry (en el capítulo sobre destilación).



RESULTADOS

Modelo termodinámico seleccionado para equilibrio L-V	
Volumen requerido del reactor para 90% conversión (m ³)	
Calor requerido en el reactor (MJ/h)	
Columna de destilación 1: Número de platos	
Plato de alimentación	
Relación de reflujo	
Caída de presión	
Calor requerido en el hervidor (MJ/h)	
Columna de destilación 2: Número de platos teóricos	
Plato de alimentación	
Relación de reflujo	
Calor requerido en el hervidor (MJ/h)	
Caída de presión	
Cantidad de acetona perdida junto con el hidrógeno (kmol/h)	