

SIMULACIÓN Y DISEÑO DE PROCESOS INDUSTRIALES POR ORDENADOR

TEMA 1. INTRODUCCIÓN AL MANEJO DEL SIMULADOR CHEMCAD 5.1.0

1. INTRODUCCIÓN

La preparación, ejecución y presentación de los resultados de la simulación de un proceso con Chemcad implica los diez pasos o etapas siguientes:

1. Inicio de un nuevo trabajo
2. Selección de las unidades a utilizar
3. Creación del diagrama de flujo
4. Selección de los componentes del sistema
5. Selección de las opciones termodinámicas
6. Introducción de los datos de las corrientes de alimentación y de las corrientes de corte
7. Introducción de las especificaciones para las unidades del diagrama de flujo
8. Ejecución de la simulación
9. Revisión de los resultados
10. Preparación de informes

Las distintas acciones a realizar con Chemcad se pueden llevar a cabo mediante el ratón o mediante el teclado. Las distintas especificaciones, selección de opciones, etc., se realizan mediante diferentes cuadros de diálogo. En cualquier momento se puede acceder a la ayuda del programa (F1).

Las acciones del programa se organizan en ventanas específicas:

- Ventana principal
- Ventana para la simulación del diagrama de flujo
- Ventana para la edición del diagrama de flujo
- Ventana de gráficos
- Ventana de PFD
- Ventanas de tablas de resultados

2. LOS FICHEROS DE CHEMCAD

CHEMCAD genera los siguientes tipos de ficheros:

- Ficheros de trabajo (Job Files)

- Ficheros de usuario (User Files) conteniendo iconos y/o componentes añadidos por el usuario
- Ficheros de salida (Output Files)
- Ficheros DXF

Además, CHEMCAD puede leer ficheros ASCII conteniendo cierto tipo de información (datos o propiedades físicas de compuestos).

Los ficheros se guardan en tres tipos de directorios:

1. El directorio de CHEMCAD, donde se guardan los ficheros del programa (incluye todos los ficheros .SF).
2. El directorio de trabajo de CHEMCAD. Se genera cuando se instala CHEMCAD (CC5DATA), aunque los usuarios pueden crearse sus propios directorios.

Los directorios de trabajo contienen todos los subdirectorios para los distintos diagramas de flujo o trabajos. También pueden contener algunos ficheros .UF comunes a todos los trabajos.

3. Subdirectorios de trabajo. Los datos para cada diagrama de flujo se guardan en una serie de ficheros como los descritos previamente, que se almacenan en un subdirectorio con el nombre que se haya dado al trabajo en cuestión. Estos subdirectorios de trabajo se encuentran en uno de los directorios de trabajo de CHEMCAD (normalmente CC5DATA).

3. IMPORTAR Y EXPORTAR TRABAJOS DE CHEMCAD 5.0

El procedimiento para importar es el siguiente:

1. Seleccionar el comando File de la barra de menús.
2. Hacer Click sobre la opción Import job.
3. Seleccionar la dirección del trabajo a importar hasta llegar al fichero <Jobname>.CCX y hacer doble Click sobre el nombre. Se abre el cuadro de diálogo "Guardar".
4. Identificar el nombre y la dirección para el trabajo a importar.

Todos los ficheros asociados con el trabajo importado se transferirán a la dirección especificada.

El procedimiento para exportar trabajos es similar, haciendo Click en la opción Export Job del menú del comando File.

4. CÓMO UTILIZAR EL TECLADO EN CHEMCAD

[F1]	Ayuda del sistema referente al parámetro, comando, opción, etc. seleccionado
[Ctrl + F4]	Cierra la ventana actual
[Alt + F4]	Cierra Chemcad.
[F6]	Permite acceder al convertidor de unidades
[F7]	Abre la calculadora de Chemcad.
[Ctrl + C]	Copiar en el “portapapeles” de WINDOWS
[Ctrl + N]	Abre el cuadro de diálogo para un nuevo trabajo
[Ctrl + O]	Abre el cuadro de diálogo para abrir trabajos ya existentes
[Ctrl + P]	Imprimir

Se puede acceder a los menús mediante [ALT] y presionando la letra subrayada del correspondiente comando o desplazándose hacia éste. Una vez que se ha desplegado un menú, se puede recorrer también presionando la letra subrayada o mediante las teclas ↑ y ↓. Para activar una opción, presionar [ENTER].

En un cuadro de diálogo, [ENTER] permite aceptar datos y moverse al siguiente campo mientras que [TAB] se utiliza para cambiar de campo.

[PgUp] y [PgDn] permiten “pasar de página” o avanzar en tablas o listas.

[SHIFT + TAB] hace retroceder un campo.

[ESC] permite rechazar los datos introducidos y abandonar el cuadro de diálogo.

5. UTILIZACIÓN DE LOS CUADROS DE DIÁLOGO

- Para moverse de un campo a otro: [TAB] o haciendo un Click con el ratón
- “Cajas de selección”: las opciones se presentan como etiquetas con círculos a la izquierda. El punto negro en el interior del círculo indica la selección actual, que puede cambiarse haciendo Click con el ratón.
- “Listas de selección”: el conjunto de opciones disponibles se presenta en una lista, en la que está resaltada la selección actual, que puede cambiarse mediante el ratón. Si el contenido de la lista es demasiado largo, ésta será desplegable, y una vez resaltada la opción deseada, se aceptará mediante [ENTER].
- Los “campos de caracteres” son cajas en blanco, en las que se tecleará el carácter adecuado.

- Un cuadro de diálogo se cierra mediante la caja [OK] o presionando [CTRL + ENTER]
- Para salir de un cuadro de diálogo sin guardar su contenido: [CANCEL] ó [ESC].

6. CÓMO IMPRIMIR EN CHEMCAD

1. Los comandos Results, Output, y Plot permiten obtener distintas versiones de tablas de resultados
2. Hacer Click en el botón de impresión
3. Aparece un cuadro de diálogo: comprobar las opciones de impresión y pulsar [OK]
4. Se imprimirá el informe seleccionado

Hay distintas formas de imprimir en Chemcad:

- Utilizando los botones de impresión
- Utilizando [CTRL + P]
- Utilizando los comandos Print y Print Preview del menú de Ctrl presentes en las barras de menú

7. USO DE LOS DOCUMENTOS DE WORD CREADOS POR CHEMCAD (Ventanas de resultados y ventana de PFD)

Cuando CHEMCAD genera un informe se abre una ventana de Word y los datos aparecen en la pantalla como un nuevo documento con el mismo nombre que el trabajo de CHEMCAD y un número que va cambiando en función del número de informes que se van generando. Por defecto estos informes no se guardan, aunque existen las opciones File/Guardar y File/Guardar como... Estos documentos pueden editarse, imprimirse y gestionarse igual que cualquier otro documento de Word.

Los informes no se actualizan automáticamente. Cuando cambian los valores calculados por CHEMCAD, si se desea, se debe generar un nuevo informe.

8. LAS VENTANAS DE CHEMCAD

Las ventanas de CHEMCAD están compuestas por cinco partes:

1. La barra de título, que muestra el logotipo de Chemcad y los botones de Minimizar, Maximizar y cerrar
2. La barra de menús de la ventana.
3. La barra de herramientas.
4. El área activa.

5. La barra de estado, que muestra los mensajes de ayuda y datos sobre los ficheros de trabajo.

8.1. La ventana principal

Al abrir Chemcad, se entra directamente en la **ventana principal** del programa (Top Level Window) que permite la gestión y mantenimiento del programa. Sus funciones son:

1. Permitir la elección del trabajo o del diagrama de flujo de trabajo.
2. Permitir el comienzo de un nuevo trabajo.
3. Permitir importar y exportar trabajos a o desde otros directorios o localizaciones.

La elección del trabajo (trabajo nuevo o recuperación de un trabajo previo) se realiza mediante el comando **File** y seleccionando la opción deseada o mediante los iconos correspondientes. A continuación el programa pasa directamente a la ventana de simulación, si se trata de un trabajo ya existente, o a la de edición, si se trata de un trabajo nuevo.

8.2. La ventana de simulación del diagrama de flujo

La ventana de simulación es el lugar donde el usuario especifica, ejecuta y analiza un diagrama de flujo correspondiente a un proceso.

La barra de menús contiene 16 comandos (además del de la ayuda):

File Gestión e impresión de ficheros
Edit Modificación de diversos aspectos del diagrama de flujo
Redraw
Undo
Redo
Cut
Copy
Paste
Delete

...

View: Modificación de aspectos de la presentación de la ventana.

Format: Selección de las unidades y especificación del formato para gráficos.

ThermoPhysical: Selección de componentes, opciones termodinámicas, edición de la base de datos, etc.

Specifications: Introducción, edición y manipulación de las especificaciones de corrientes y de operaciones unitarias. Equivale a hacer doble Click en la corriente o en el icono de la operación correspondiente directamente en el diagrama de flujo.

Run: Ejecución de la simulación, realización de estudios de sensibilidad y definición del orden de cálculo.

Results: Visualización de propiedades o de los resultados de un cálculo.

Plot: Representación gráfica de resultados.

Output: Preparación de informes y diagramas de flujo del proceso (PFD's).

Sizing: Dimensionado de equipos.

Tools: Permite llevar a cabo ciertas actividades asociadas con la simulación (regresión de datos, predicción de formación de $\text{CO}_{2(s)}$ e hidratos, cálculo de TOD/COD, etc.

Window

Help

Debajo de la barra de menús aparece la correspondiente barra de herramientas con iconos (cuya descripción aparece al desplazar el cursor sobre ellos).

8.3. Ventana de edición del diagrama de flujo

Es la ventana disponible para la construcción gráfica del diagrama de flujo. Cuando se accede a la ventana de edición, aparece visible la paleta principal. Cuando se inicia un problema nuevo el programa comienza en modo de edición del diagrama de flujo.

La paleta de gráficos se utiliza para seleccionar iconos correspondientes a operaciones unitarias, dibujar corrientes, introducir texto en los dibujos y, en general, para construir el diagrama de flujo. Esta formada por una serie de cuadrados dispuestos en un bloque de forma contigua. Cada cuadrado contiene un símbolo indicando su función; la mayoría corresponde a operaciones unitarias pero además hay iconos que permiten:

- Dibujar corrientes
- Introducir texto
- Dibujar objetos (rectángulos, círculos, líneas, etc.)
- Rotar objetos
- Crear vínculos con una hoja de cálculo

Los iconos se seleccionan mediante el cursor, haciendo Click en el botón izquierdo y llevándolos a la ventana. El botón derecho del ratón permite desplegar una subpaleta correspondiente a más iconos alternativos para la misma operación unitaria. Se pueden visualizar varias subpaletas simultáneamente, que se hacen desaparecer haciendo Click (botón derecho) de nuevo en el cuadrado correspondiente en la paleta principal.

La paleta principal se hace aparecer/desaparecer mediante el comando View/Main Palette. También desaparece al pasar a la ventana de simulación

(cambiando de modo mediante los comandos Run Simulation/Edit Simulation, o mediante el icono S/G).

El tamaño y la forma de la paleta principal se puede modificar mediante el comando View/Palette Settings.

8.4. La ventana de representaciones gráficas

Las funciones de gráficos en CHEMCAD se utilizan para dibujar diagramas de flujo (ventana de edición), representar resultados o cálculos (ventana de representaciones gráficas) y crear diagramas de flujo del proceso (ventana de PFD). Hay algunos comandos que son comunes para todos ellos y además otros comandos específicos

La **ventana de representaciones gráficas** (Plot Window) es la utilizada por Chemcad para mostrar y editar las representaciones gráficas. Evidentemente, el tipo y contenido del gráfico variará en cada situación, pero la apariencia de la ventana será la misma. Presenta los siguientes comandos:

File para abrir, cerrar o imprimir trabajos.
Edit Undo, Cut, Copy y Paste a la memoria.
View
Graph Para editar el gráfico (texto, color, escala, etc.). Permite exportar los datos que se han utilizado para construir un gráfico directamente a Excel (Data to Excel CSV file) o como fichero separado por comas.
Window Para manipular las diferentes ventanas abiertas.
Help

Cada gráfico generado automáticamente contiene un programa que genera el título, leyenda, etc., que son tratados con objetos y que pueden editarse para cambiar su aspecto mediante el **explorador de mapas** (Chart Explorer) al que se accede mediante la opción Edit del menú de Graph.

8.5. La ventana de PFD

Las principales características de la ventana de PFD son las siguientes:

1. El diagrama de flujo del proceso se construye a partir del diagrama de flujo existente en la ventana de simulación.
2. El diagrama de flujo en la ventana de PFD se trata como una colección de objetos que pueden moverse, estirarse o rotarse de forma individual.
3. Existen funciones especiales que permiten crear “cajas” de corrientes y de operaciones unitarias (en el comando Data Box de la barra de menús). Se trata de cuadros con formato de tabla que contienen los

- datos acerca de las corrientes o del proceso que el usuario ha seleccionado para ser mostrados.
4. Existe una paleta especial de PFD para escribir texto en el PFD (accesible bajo el comando Data Box).
 5. El comando Edit permite las funciones Redraw, Undo, Redo, Cut, Copy, Paste, y Delete.
 6. Haciendo click en el botón derecho del ratón sobre un objeto del PFD se accede a menú de edición del objeto, igual que en la ventana de simulación en el modo de ejecución (Run).

Los PFD se gestionan desde el comando output de la barra de menús. Las cajas de corrientes y de operaciones unitarias se introducen mediante el comando Format (add Stream/Unit Op box): una vez generado el documento con la información a incluir en la caja, ésta se incorpora al PFD simplemente cerrando la ventana del documento.

La obtención de PFDs se describe con detalle más adelante.

9. RESOLUCIÓN DE UN PROBLEMA CON CHEMCAD

9.1. Comienzo de un trabajo

Se debe seleccionar la función New Job (u Open Job) del menú del comando File (o hacer Click sobre los iconos correspondientes) y proceder del modo habitual para dar nombre al fichero o para seleccionar el nombre del fichero que se desea abrir.

Si se trata de un fichero nuevo, aparece la paleta principal para comenzar con la construcción del diagrama de flujo. Si se trata de un fichero existente se entra en la ventana de simulación en el modo de ejecución.

9.2. Selección de unidades

La función Engineering Units del comando Format de la barra de menús de la ventana de simulación permite seleccionar las unidades a utilizar en nuestro problema. Se puede crear un perfil personalizado al que se puede acceder en otros problemas posteriores.

9.3. Creación del diagrama de flujo

El diagrama de flujo se construye mediante la unión de iconos representativos de operaciones unitarias (entre éstas se incluyen los alimentos y los productos) mediante líneas representativas de corrientes. Se debe seleccionar la opción Edit Flowsheet de la barra de menús de la ventana de simulación, con lo que se accede en la ventana de edición. En

ésta, se construye gráficamente el diagrama de flujo: las unidades y las corrientes se añaden desde el icono correspondiente o desde la barra de menús, estando disponibles todas las opciones descritas con anterioridad.

9.4. Selección de los componentes del sistema

La opción **Component List** del comando **ThermoPhysical** de la barra de menús de la ventana de simulación permite acceder a la lista de compuestos de Chemcad, de donde se pueden seleccionar los componentes del sistema. Se puede realizar la selección de componentes de entre una lista que contiene sólo electrolitos, o restringir el tipo de componentes que Chemcad va a mostrar para realizar la selección de componentes del sistema. Además, la base de datos de chemcad (**Databank**) permite acceder al banco de datos para modificar, visionar o introducir datos, introducir nuevos componentes, copiar componentes (de la misma base de datos, cambiándole el número de identificación, o de otra distinta) o borrarlos de la lista, examinar qué parámetros de interacción binaria contiene la base de datos (**BIP's / UNIFAC BIP's**), etc.

9.5. Selección de modelos termodinámicos

La opción **K-value Options** del comando **ThermoPhysical** de la barra de menús de la ventana de simulación permite seleccionar las opciones termodinámicas a utilizar en el problema. Se puede definir el tipo de correlación para el cálculo del equilibrio líquido-vapor, los valores de las constantes de equilibrio, entalpía, propiedades de transporte, etc. También pueden visualizarse los parámetros de interacciones binarias para mezclas en problemas que usen determinados modelos para el cálculo de los coeficientes de actividad.

El comando **K-value Wizard** de este menú examina los componentes y las condiciones de operación de la simulación, y selecciona, en función del contenido de la base de datos, el procedimiento óptimo para la resolución del problema. No obstante, y a pesar de la utilidad de este comando, no hay que olvidar que el usuario es el que tiene el control sobre el programa y los conocimientos necesarios para enjuiciar de manera crítica el modelo seleccionado por el programa.

9.5.1. Modelos para el cálculo de la constante de equilibrio (K)

El cuadro de diálogo para las opciones de K presenta las siguientes opciones:

Global K-value Options: se muestra una lista de los modelos que ofrece Chemcad con el fin de realizar la selección básica del modelo a aplicar en la hoja activa.

Ethane/Ethylene, Propane/Propylene: permite decidir si se desea utilizar los BIPs estándar, u otros ajustados especialmente para los pares binarios etano/etileno y propano/propileno cuando se usan las ecuaciones de estado SRK o Peng-Robinson. Normalmente, los BIPs especiales proporcionan mejores resultados en las proximidades de los puntos críticos.

Vapor Phase Association: Cuando se activa esta opción, Chemcad considera la tendencia a dimerizar o polimerizar que presentan ciertos compuestos (especialmente los ácidos carboxílicos) en fase vapor.

Vapor Fugacity/Poynting Correction: La opción por defecto (No Correction) suprime la corrección de Poynting para la fugacidad de la fase vapor cuando se utilizan modelos de coeficientes de actividad. En estos casos, la fugacidad del vapor se calcula mediante la ecuación de estado SRK. Esta corrección se suele omitir a presiones de operación bajas.

Alpha Function: Para los modelos SRK y Peng-Robinson EOS, se puede elegir la función alpha estándar o la de Boston-Mathias. La opción por defecto es la estándar.

Global Phase Option: La opción por defecto (vapor/liquid/solid) no contempla la posibilidad de formación de dos fases líquidas. Si se desea el cálculo del equilibrio líquido-líquido, se debe seleccionar la opción vapor/liquid/liquid/solid. En este caso debe utilizarse un modelo capaz de predecir la formación de dos fases líquidas.

Water/Hydrocarbon Solubility: En la opción por defecto, el agua se considera como inmisible (para SRK, PR, API SRK, ESSO, y Grayson-Streed). En este caso, los valores de K para todos los hidrocarburos presentes se calcula por el método seleccionado, mientras que para el agua, se calcula por una rutina especial que tiene en cuenta la solubilidad del agua en los hidrocarburos. Para todos los demás modelos, se considera que el agua es miscible.

Salt Position for Wilson Model: posición en la lista de componentes del compuesto considerado como sal para el modelo de Wilson.

No. of BIP Sets: Chemcad permite manejar hasta diez conjuntos de BIPs para cada método de coeficiente de actividad. Esto permite utilizar un conjunto de BIPs en una sección del diagrama de flujo y otro diferente en otra. Un ejemplo típico es el caso en que se conoce la existencia de dos fases líquidas en el condensador de una columna de destilación: se pueden utilizar BIPs para NRTL LLE en el condensador y NRTL VLE para el resto de la columna.

Default BIP Set: Define el conjunto de BIPs a utilizar globalmente por el programa.

Clear Local K Model?. [Y] si se desea asignar el modelo global en lugar de los modelos locales para el cálculo de K.

Set Local K/BIP Model?. [Y] conduce a la selección del equipo para el que se va a definir un modelo de K o un conjunto de BIPs en particular.

Set Tray BIP?. [Y] conduce a la selección de una o más torres de destilación del diagrama de flujo para seleccionar el intervalo (número de pisos) en los que se desea aplicar un determinado conjunto de BIPs.

Set Henry's comp?. Permite seleccionar para qué componentes se va a calcular K de acuerdo con la ley de Henry. Todos los demás se calcularán con el modelo de K seleccionado globalmente.

La ayuda del programa muestra las recomendaciones para la selección del modelo termodinámico más adecuado así como la descripción de los distintos modelos disponibles. A continuación se muestran los modelos recomendados para cada caso particular.

Recomendaciones para la selección del modelo para el cálculo de las relaciones de equilibrio (K-VALUE OPTIONS - Recommendations for applications)

Hidrocarburos

- | | |
|--------------------------------|----------------------------|
| • Soave-Redlich-Kwong | P y T alta – moderada. |
| • API Soave General HC | P y T alta – moderada. |
| • Peng-Robinson | P y T alta – moderada. |
| • Benedict-Webb-Ruben-Starling | P y T alta – moderada. |
| • Grayson-Streed | P y T moderada. |
| • Maxwell-Bonnell K-charts | P baja, materials pesados. |
| • ESD | HC-agua;HC-gases |
| • SAFT | HC-agua;HC-gases. |

Otros compuestos

- | | |
|--------------------|---|
| • UNIFAC | T = 275K - 475K; P = 0-4 atm.; 2 fases líquidas.
No ideal, contribución de grupos; predictivo. |
| • Wilson | Sistemas altamente no ideales. |
| • Vapor Pressure | Soluciones ideales. |
| • NRTL | Sistemas altamente no ideales; 2 fases líquidas. |
| • UNIQUAC | Sistemas altamente no ideales; 2 fases líquidas. |
| • Margules | Sistemas altamente no ideales; 2 fases líquidas.
(4 suffix) |
| • T. K. Wilson | Sistemas altamente no ideales; 2 fases líquidas. |
| • Hiranuma (HRNM) | Sistemas altamente no ideales; 2 fases líquidas. |
| • Regular Solution | Sistemas moderadamente no ideales
(predictivo). |
| • Van Laar | Sistemas moderadamente no ideales |
| • Modified SRK | (4 parámetros). Compuestos polares en
soluciones regulares. |
| • Predictive SRK | Compuestos polares en soluciones no ideales.
Mejor que UNIFAC a P elevadas. |
| • Wilson Salt | Soluciones no ideales con sales disueltas. |

Técnicas especiales

- Henry's Gas Law Gases disueltos en agua.
- Amine (MEA DEA) Absorción de CO₂ y H₂S con etanolaminas.
- Sour Water Gases ácidos y NH₃ disueltos en H₂O
- K Tables Valores de K introducidos por el usuario.
- Polynomial Valores de K introducidos por el usuario.
- User-Added Subroutine Valores de K introducidos por el usuario.
- TSRK Sistemas conteniendo methanol, particularmente con gases ligeros.
- PPAQ General, aunque su aplicación más común es para sistemas conteniendo electrolitos.
- TEG Deshidratación de corrientes de hidrocarburos con tri-ethylene-glycol
- FLOR Método de Flory-Huggins para polímeros
- UPLM Método de UNIFAC para polímeros .
- ACTX coeficientes de actividad introducidos por el usuario.
- ESD Enlaces de hidrógeno, enlaces de hidrógeno a P elevada.
- SAFT Enlaces de hidrógeno, enlaces de hidrógeno a P elevada.

9.5.2. Modelo para el cálculo de la entalpía

La selección del modelo adecuado para el cálculo de la entalpía depende del modelo seleccionado para K. Para realizar dicha selección se puede consultar la ayuda del sistema. En el cuadro de diálogo correspondiente existen campos para definir o eliminar modelos locales, o para calcular calores de mezcla utilizando coeficientes de actividad, etc. De acuerdo con la ayuda de Chemcad:

Si el modelo para el cálculo de K es

Utiliza este para el cálculo de la entalpía

PR
 BWRS
 SRK, APIS, MSRK, VAP
 REGU, SOUR, TEG, TSRK
 ESD, SAFT
 Grayson-Streed, ESSO
 NRTL, UNIF, UNIQ, WILS,
 VANL, MARG, HRNM,
 T. K. Wilson, PSRK, FLOR,
 UPLM, ACTX
 AMIN
 PPAQ

PR
 BWRS
 SRK
 SRK
 SRK
 Lee-Kesler
 LATE
 LATE
 LATE
 LATE
 AMIN
 SRK or LATE w/HTSL

9.6. Introducción de datos de las corrientes

La composición y las condiciones térmicas de las corrientes se pueden introducir en el cuadro de diálogo correspondiente al que se accede haciendo doble Click sobre la corriente en cuestión o mediante el comando **specifications**.

Una corriente está especificada cuando se da su caudal, composición y dos propiedades más, por ejemplo su temperatura y presión. El cuadro de diálogo de corrientes presenta las siguientes características:

- Permite modificar las unidades para las composiciones y los caudales (picar con el ratón sobre la flecha que indica la existencia del menú desplegable correspondiente).
- Si se desea que los valores de la composición se actualicen cada vez que se cambien las unidades, se debe hacer la selección correspondiente en el cuadro de diálogo de unidades (Format/Eng Units).
- Si la composición se expresa en fracciones, molares o másicas, hay que introducir el valor del caudal. Si se omite, el programa asigna un valor por defecto que es muy pequeño y que puede ocasionar problemas en algunos cálculos por aproximarse demasiado a 0.
- Si la composición se expresa como caudales de componente, el programa no permite introducir el dato de caudal de la corriente, asignándole automáticamente el valor que resulta al sumar los correspondientes caudales individuales.
- De las cuatro propiedades termodinámicas: T, P, fracción vaporizada, H, el programa sólo permite introducir valores para dos de ellas: si se elige especificar la fracción vaporizada, el programa interpreta que:
 - fracción vaporizada = 1 indica vapor saturado (en el punto de rocío)
 - fracción vaporizada = 0 indica líquido saturado (en el punto de burbuja)
 - $0 < \text{fracción vaporizada} < 1$ indica mezcla parcialmente vaporizada

por el contrario, cuando no se especifica la fracción vaporizada, sino que ésta es calculada por el programa, un valor de 0 puede indicar tanto un líquido subenfriado como un líquido saturado y un valor de 1 puede indicar tanto un vapor sobrecalentado como un vapor saturado

- Cuando se ejecuta el botón Flash, se hace un cálculo de equilibrio de la corriente en las condiciones especificadas, y se asignan valores a las no especificadas. Este mismo cálculo se realiza también en el momento en que se aceptan los valores introducidos y se cierra el cuadro de diálogo.

9.7. Definición de parámetros de las operaciones unitarias

El comando **specifications** de la barra de menús de la ventana de simulación (o doble Click sobre la operación unitaria correspondiente) permite seleccionar los datos de entrada, que van a definir las condiciones en que se va a resolver el problema de simulación, para todas/cada una de las operaciones del diagrama de flujo.

9.8. Ejecución de la simulación

CHEMCAD permite cuatro categorías de ejecución de la simulación: simulación en estado estacionario, optimización, análisis de sensibilidad y simulación dinámica. Los cuatro se llevan a cabo mediante el comando Run.

La opción "Optimization" minimiza or maximiza una función objetivo. Los análisis de sensibilidad hacen estudios paramétricos de las simulaciones.

9.8.1. Ejecución en estado estacionario

Se debe seleccionar el comando RUN de la barra de comandos. Se despliega el menú correspondiente, con las siguientes opciones:

Convergence
Run All
Run selected Units
Recycles
Calc sequence
Optimization
Sensitivity
Dynamics

Run All ejecuta todo el diagrama de flujo

Run Select UnitOps permite especificar las operaciones unitarias ejecutar. Se ejecutan en el orden especificado.

Recycles permite especificar el orden de calculo en diagramas de flujo con recirculación.

Calculation Sequence permite especificar secuencias de cálculo.

Al hacer Click en uno de los comandos de "run":

1. El programa chequea y saca una lista de los errores y/o avisos en un cuadro de diálogo. Los errores indican especificaciones que deben corregirse para poder comenzar el cálculo. Los avisos indican sólo cuestiones a tener en cuenta, pero no impiden la ejecución.

2. Si la opción "Display trace window" no está activada, el programa comienza los cálculos y cuando concluye muestra el mensaje acerca de la convergencia en la barra de estado (inferior). La opción "Display trace window" se activa/desactiva desde el cuadro de diálogo de **Convergence** del menú de **Run**. Cuando está activada, durante el cálculo aparece una ventana en la que se presenta un resumen de los resultados en cada iteración y además permite detener la simulación.

9.8.2. Análisis de sensibilidad

Se debe seleccionar la opción **Sensitivity** del comando RUN de la barra de comandos. Aparece entonces el menú correspondiente, donde se debe seleccionar la opción New Analysis: se despliega el cuadro de diálogo correspondiente:

- Introducir un nombre para el análisis de selectividad
- Especificar los parámetros a variar (Edit Independent Variable o Edit Independent Parameters si se van a variar dos variables independientes)
- Especificar las variables a registrar (Edit Recorded Variables)
- Seleccionar Run o Run Selected Units: se inicia la secuencia normal de cálculo
- Si no se han producido errores, se vuelve al menú del análisis de sensibilidad y selecciona "Plot Results" para visualizar los resultados.

La variable independiente es el parámetro que se va a ir variando dentro de un intervalo especificado por el usuario, y es la que conduce el análisis de sensibilidad. Las variables dependientes son las que se calculan y registran cada vez que cambia la variable independiente.

9.8.3 Optimización

Permite maximizar o minimizar una variable de una corriente o de una operación unitaria dadas unas ciertas variables independientes y restricciones.

NOTA IMPORTANTE: Siempre se debe hacer una copia de seguridad del trabajo antes de realizar una optimización, ya que si aparece alguna inestabilidad o provoca una falta de convergencia, se habrá perdido la versión funcional del trabajo.

Cuando se selecciona la opción **Optimization** aparece un cuadro con las siguientes opciones:

Exit – Para abandonar el menú y volver a CHEMCAD sin realizar la optimización.

Define Objective Function – Permite especificar que variable se va a optimizar.

Independent Variables – Permite especificar que variables se van a ajustar durante la optimización.

Constraints – Permite especificar restricciones para ciertas variables (hasta 10).

Settings – Permite especificar una miscelánea de opciones de optimización.

Print level – nivel de detalle que se desea en el informe.

Iterations

Tolerance

Derivatives – diferentes opciones para el cálculo de la pendiente de una función.

Perform Optimization

9.9. Visualización de resultados

El comando **Results** de la barra de menús de la ventana de simulación permite visualizar en pantalla tanto los datos del problema como los resultados obtenidos al resolverlo.

9.10. Representación gráfica de los resultados

El comando **Plot** de la barra de menús de la ventana de simulación ofrece la posibilidad de realizar diversas representaciones gráficas a partir de los datos y resultados del problema. Se puede manejar esta opción sin necesidad de seleccionar ninguna operación unitaria (tan sólo una corriente, por ejemplo), para obtener representaciones gráficas de los datos de una determinada mezcla.

Los gráficos se pueden editar mediante el **explorador de mapas** (Chart Explorer) al que se accede mediante la opción Edit del menú de Graph.

9.11. Preparación de informes

El comando Output de la barra de menús de la ventana de simulación permite elegir la forma en la que se desea visualizar (y en su caso exportar o imprimir) los resultados del problema.

La opción **Reports** del menú permite seleccionar la forma en que aparecerán por pantalla los resultados del problema, en el correspondiente documento de Word. La opción **PFD** permite visualizar los resultados del problema sobre el

propio diagrama de flujo, así como cambiar el aspecto de éste (etiquetas, números de identificación, etc.).

9.11.1. Obtención de Informes (Reports)

CALCULATE AND GIVE RESULTS. Esta opción crea un informe según un esquema que puede ser definido a priori. La opción por defecto incluye:

- La topología del diagrama
- La lista de componentes
- Las opciones termodinámicas seleccionadas para realizar los cálculos
- El balance global de materia
- Un resumen del equipo del diagrama de flujo
- Los caudales molares y las composiciones de las corrientes.

REPORT FORMAT. Permite definir el número de cifras decimales y el formato numérico:

- F normal
- E exponencial
- G Combinación de ambos

para los caudales y las composiciones y seleccionar la opción de visualizar el informe mediante un archivo con formato de procesador de textos o bien guardarlo como fichero de Lotus o de Excel.

SELECT STREAMS. Permite seleccionar las corrientes a incluir en el informe: la selección puede hacerse tecleando los números correspondientes en los huecos del cuadro de diálogo, o bien directamente sobre el diagrama.

SELECT UNIT OPERATIONS. Similar al anterior: permite seleccionar las opciones a incluir en el informe.

STREAM PROPERTIES. Permite seleccionar qué características de las corrientes se desea incluir en el informe. Las propiedades físicas almacenadas por Chemcad son válidas dentro de unos ciertos rangos de P y T. fuera de éstos, Chemcad puede calcular el valor de la propiedad, pero su validez es cuestionable. Si la respuesta a la pregunta que figura en la esquina superior derecha de la pantalla es "Y", Chemcad imprimirá un mensaje en el fichero de salida cada vez que se excedan los límites de dichos rangos.

STREAM FLOWRATE/COMPOSITION. Permite elegir las unidades correspondientes (mediante la barra espaciadora).

DISTILLATION SUMARIES. Permite seleccionar el tipo de informe para simulación de columnas de destilación. Las opciones disponibles son:

TRAY PROFILE. Incluye: para cada piso, razón de reflujo, T, P, caudal molar de vapor y de líquido, localización de alimentos y productos, pérdidas y aportes de calor en condensadores, calderas e intercambiadores laterales.

TRAY PROPERTIES. Incluye caudales másicos y propiedades de transporte en cada piso de la columna.

TRAY SIZING. Imprime un informe de los cálculos de las dimensiones del piso.

PACKED COL. Genera un informe del dimensionado de la columna de relleno.

TRAY COMP. Permite seleccionar las unidades a utilizar en el informe piso a piso.

HEATING CURVES. Genera un informe para intercambiadores, calderas o condensadores.

BATCH/DYNAMIC RESULTS. Se pueden obtener tres tipos de informes para columnas de rectificación por cargas:

RESULTADOS DE LA OPERACIÓN. Contiene T, P, H, fracción de vapor, composición y cantidades globales.

HISTORIA DE LA COLUMNA. Contiene la misma información que en el caso anterior, pero para distintos momentos entre el inicio y el final de la operación, y los aportes de calor en la caldera y el condensador.

FINAL HOLDUPS. Se dan las cantidades y composiciones finales en cada piso de la columna.

TOPOLOGY/CONV/THERM. Permite seleccionar la opción de incluir o no en el informe la información correspondiente a los parámetros de convergencia, modelos termodinámicos y topología del diagrama de flujo.

END REPORT. Permite salir del menú (pulsar después de Calculate and give results). También se sale con Esc.

9.11.2. Obtención de PFDs

Una vez que se ha completado la simulación, se pueden combinar los resultados calculados con el diagrama de flujo dibujado para crear un **diagrama de flujo del proceso** (PFD) que consiste en:

- (i) El dibujo del diagrama de flujo
- (ii) Tablas con los balances de materia y energía y/o con las propiedades de las corrientes
- (iii) Tablas con información de la operación unitaria
- (iv) Un bloque con el título
- (v) Miscelánea de notas referentes al proceso
- (vi) Logotipo de la compañía

- ✓ Item (i) se crea cuando se dibuja el diagrama de flujo
- ✓ Item (ii) recibe el nombre de caja de corrientes (Stream Databox). CHEMCAD dispone de una función especial para crear cajas de corrientes (comando Add Stream Box en el menú de Format).

- ✓ Item (iii) recibe el nombre de caja de operaciones unitarias (UnitOp databox). CHEMCAD dispone de una función especial para crear cajas de corrientes (comando Add UnitOp Box en el menú de Format).
- ✓ Item (iv) es un símbolo que se crea como un bloque dentro de CHEMCAD, aunque los usuarios pueden crearse el suyo propio. El bloque de título se almacena como una pieza de la paleta de PFD.
- ✓ Item (v) se crea mediante la función de texto de la paleta de PFD.
- ✓ Item (vi) se incorpora utilizando la función Import Bitmap del menú de Format.

Se pueden crear varios PFD's para cada diagrama de flujo.

El PFD principal es el que se crea mediante el comando **Main PFD** del menú de **Output** y suele ser el primero que se construye. Difiere de los demás en que, una vez creado, siempre aparece, incluso aunque no se esté en el modo PFD.

El procedimiento general para crear PFD's es el siguiente:

1. Seleccionar el comando **Output**
2. Seleccionar la opción deseada del menú de Output: Main PFD, New PFD, Ope PFD. Aparece la paleta de PFD Palette, indicando que el programa está en modo PFD.
3. El PFD se crea añadiendo cajas de corrientes y de operaciones unitarias, bloques de título, símbolos y texto, moviendo objetos, cambiando colores, etc.
4. Imprimir el PFD, si se desea.
5. Salir del modo PFD (si se trata del PFD principal, mediante el comando Run simulation, en caso contrario, cerrando o cambiando de ventana, según se desee).

Todos los PFD's están asociados a un diagrama de flujo específico: si a posteriori se modifica éste, el PFD asociado cambia automáticamente, y si se recalculan los balances de masa y energía, los nuevos resultados son transferidos automáticamente al PFD.

10. MENÚ DE DIMENSIONES DEL EQUIPO (EQSIZE)

Se utiliza cuando se pretende diseñar ciertos equipos para llevar a cabo una determinada operación.

11. EL MENÚ DE HERRAMIENTAS

Permite acceder a varios programas de utilidades: regresión de datos, estimar la formación de hidratos o de CO₂(s), ...

12. CREACIÓN DE NUEVOS ICONOS

Desde Windows:

- Programas/Chemcad/Utilidades/Symbol builder
- Construir el icono (puede hacerse a partir de uno preexistente; están en cc5/import/symbols).
- Seleccionar todo (con el cursor o mediante Edit/Select all) y agrupar (Structure/Group).
- Guardar (File/Save as) con extensión *.sym
- Incluir en la paleta de iconos: Palette/Insert as Chemcad Palette; seleccionar el tipo de operación unitaria.
- Salir. El programa pregunta si se desea guardar el trabajo realizado.

El nuevo icono aparece al volver a abrir Chemcad y desplegar la paleta de símbolos. Al desplegar la subpaleta correspondiente, puede verse en la parte inferior de la ventana.

13. ALGUNAS OPERACIONES UNITARIAS U OTRAS OPCIONES DISPONIBLES EN EL LA PALETA DE SÍMBOLOS DEL SIMULADOR CHEMCAD

Las principales operaciones unitarias disponibles en Chemcad :

Stream: corriente

Baghouse filter (BAGH)

Batch column: columna de destilación por cargas en estado no estacionario (requiere un módulo especial).

Batch Reactor: reactor discontinuo (requiere un módulo especial)

Calculator

Centrifuge (CFUG): filtración con centrifugación.

Component separator: separador de componentes

Compressor (COM): módulo para compresión adiabática y politrópica de una corriente.

Control valve

Controller (CONT): controlador de retroalimentación/alimentación hacia adelante.

Crusher/grinder (CRSH): molinos.

Crystallizer (CRYS): cristizador.

Cyclone (CYCL): ciclón.

Divider (DIVI): divisor de corrientes.

Dynamic vessel

Electro precipitator (ESPT): precipitador electrostático.

Equilibrium reactor (EREA): reactor de equilibrio.

Expander (EXPN): módulo de expansión.

Extractor (EXTR): extractor líquido-líquido

Feed: punto de alimentación.

Fired Heater (FIRE): caldera.

Flash (FLAS): simulador para operación flash.

Gibbs Reactor (GIBS): reactor de Gibbs.

Heat Exchanger (HTXR): cambiador de calor.

Hydrocyclone (HCYC) hidrociclón.

Kinetic reactor (KREA): reactor cinético.

LLV Flash (LLVF): módulo para operación flash de tres fases (L, L y V).

LNGH: LNG para un cambiador de calor.

Loop: calculo local de un bucle.

Mixer (MIXE): mezclador de corrientes.

Phase generator (PGEN): generador de fases.

PID controller

Pipe simulator (PIPE) simulador de longitud y relación diámetro/longitud de una tubería.

Product: punto de extracción de producto.

Pump (PUMP): bomba (para líquidos).

Ramp control

Recorder registro de los valores de una corriente para operación no estacionaria.

SCDS column (SCDS): módulo para fraccionamiento riguroso utilizando el método de corrección simultánea.

Screen (SCRE): tamizador.

Sedimentator (CSED): sedimentador por centrifugación.

Shortcut column (SHOR): cálculo aproximado de una columna de destilación.

Solid washer (WASH): lavador de sólidos.

Solid dryer (DRYE): secador de sólidos.

Stoichiometric reactor (REAC): reactor estequiométrico.

Stream reference (REF): módulo para transferencia de información de una corriente a otra.

Tank: acumulador o recipiente de reserva.

Time delay

Time Switch: controlador de la dirección del flujo dependiente de tiempo.

Tower (TOWR): módulo para fraccionamiento riguroso utilizando el algoritmo inside/out.

Tower plus: simulación de una columna compleja mediante el algoritmo inside/out.

Vacuum Filter (FLTR): filtro de tambor rotatorio de vacío.

Valve (VALV): válvula (flash adiabático).

Vessel: recipiente para fines diversos (flash + divisor).

Venturi scrubber (VSCR): lavador ventury.

BIBLIOGRAFÍA

Manual del programa. Disponible en la ayuda en línea de CHEMCAD