

TEMA 3. BASE DE DATOS DE CHEMCAD

1. INTRODUCCIÓN

La base de datos estándar de Chemcad contiene las propiedades de una serie de compuestos puros. Se puede acceder a todos ellos o limitar el acceso a ciertas clases de compuestos como alcoholes o aldehídos. Además de las propiedades físicas estándar, hay datos para los parámetros de interacción binaria para alrededor de 6000 pares de compuestos, para los modelos NRTL, UNIQUAC, Margules, Wilson, y Van Laar. Estos datos son accesibles directamente desde cualquier simulación. Además se pueden visualizar o imprimir datos individuales de compuestos o grupos de compuestos.

Los datos almacenados por el programa son sólo accesibles para su lectura o para su uso en una simulación, pero no pueden modificarse, aunque si pueden modificarse si se añaden como nuevos componentes por parte del usuario.

1.1. Acceso a la base de datos

Se accede desde el comando Thermophysical, seleccionando Databank. En el menú correspondiente se puede añadir nuevos componentes o editar las propiedades de los ya existentes.

La mayoría de los datos se refieren a ecuaciones de la “biblioteca” de Chemcad (accesible desde la ayuda del programa), aunque también se dan valores para otros métodos.

ViewEdit – Una vez seleccionado el componente, permite ver y, opcionalmente cambiar, los valores de distintas propiedades físicas y químicas.

2. BASE DE DATOS DE COMPONENTES

Chemcad contiene propiedades de 1743 compuestos puros. Además se incluyen alrededor de 6000 BIP's para diversos modelos de coeficiente de actividad, a los que puede accederse directamente en cualquier simulación. Pueden visualizarse o imprimirse los datos de compuestos individuales o de grupos de componentes.

El acceso a **Databank** permite añadir nuevos componentes al banco de datos, o editar las propiedades de los compuestos ya existentes. Sólo pueden cambiarse directamente los valores referentes a compuestos añadidos por el usuario, y no los valores originales incluidos en Chemcad. Si se desea cambiar algún valor de éstos, se debe duplicar el compuesto y editarlo luego como componente definido por el usuario.

El comando **View/edit** permite, una vez seleccionado el componente, acceder a una lista de propiedades almacenadas en la base de datos.

Sinónimos
 Fórmulas
 Clases
 Datos mínimos necesarios para todos los componentes
 Datos básicos
 Densidades
 Vps + HOVs (coeficientes y límites para las ecuaciones de presión de vapor y de calor de vaporización).
 Capacidad calorífica
 Viscosidad
 Conductividad térmica y tensión superficial
 Grupos Unifac
 Datos de electrolitos
 Otros datos

La correlación utilizada para la capacidad calorífica del gas ideal:

$$C_p = A + BT + CT^2 + DT^3 + ET^4 + FT^5 \quad T \text{ en K}$$

Cp en cal/gmol.K

Mientras que para el resto de propiedades se hace referencia al tipo de ecuación mediante un código, cuya equivalencia se puede consultar en la ayuda del programa. A continuación se indican propiedades físicas que son calculadas por Chemcad a partir de diversas correlaciones en función de la temperatura. Se muestran también las unidades correspondientes a cada propiedad; la temperatura siempre se expresa en K:

<u>Propiedad dependiente de la temperatura</u>	<u>Unidades</u>
Solid density	(kmol/m ³)
Liquid density	(kmol/m ³)
Vapor pressure	(Pa)
Heat of vaporization	(J/kmol)
Solid heat capacity	(J/kmol-K)
Liquid heat capacity	(J/kmol-K)
Ideal gas heat capacity	(J/kmol-K)
Liquid viscosity	(Pa-sec)
Vapor viscosity	(Pa-sec)
Liquid thermal conductivity	(W/m-K)
Vapor thermal conductivity	(W/m-K)
Surface Tension	(N/m)

Ecuación 100: $Y = A + B \cdot T + C \cdot T^2 + D \cdot T^3 + E \cdot T^4$
 Se puede especificar cualquier número de coeficientes.

Ecuación 101: $Y = \exp(A + B/T + C \cdot \ln(T) + D \cdot T^E)$
 Se han de especificar 2, 3, o 5 coeficientes.

Ecuación 102: $Y = A \cdot T^B / (1 + C/T + D/T^2)$
 Se han de especificar 2, 3, o 4 coeficientes.

Ecuación 103: $Y = A + B \cdot \exp(-C/(T^D))$
Se han de especificar los 4 coeficientes.

Ecuación 104: $Y = A + B/T + C/T^3 + D/T^8 + D/T^9$
Se han de especificar 2, 3, 4 o 5 coeficientes.

Ecuación 105: $Y = A/B^{(1 + (1 - T/C)**D)}$
Se han de especificar los 4 coeficientes.

Ecuación 106: $Y = A \cdot (1 - T_r)^{(B + C \cdot Tr + D \cdot Tr^2 + E \cdot Tr^3)}$
Tr es la temperatura reducida (T/Tcrit, en Kelvin). Se han de especificar 2, 3, 4 o 5 coeficientes y Tr, la temperatura reducida (T/T_{crítica})

Ecuación 107: $Y = A + B \cdot [(C/T)/\sinh(C/T)]^2 + D \cdot [(E/T)/\cosh(E/T)]^2$
Se han de especificar 3 o 5 coeficientes.

Ecuación 114: $Y = A^2/T_r + B - 2 \cdot ACT_r - ADT_r^2 - (C^2 \cdot T_r^3)/3 - (CDT_r^4)/2 - (D^2 \cdot T_r^5)/5$

Tr es la temperatura reducida (T/T_{crítica})
Se han de especificar 2, 3, o 4 coeficientes y Tr (temperatura reducida, T/T_{crítica}).

2.1. Compuestos añadidos por el usuario

Se pueden añadir hasta 2000 nuevos compuestos. Cuando se usa el comando View/Edit para componentes del banco de datos de Chemcad, los campos numéricos sólo muestran los valores. Cuando se refiere a un compuesto añadido por el usuario, además los campos son editables. Antes de editar un componente hay que copiarlo (**Copy**) para así hacerlo editable.

El comando **Copy** permite copiar el compuesto con un nuevo número de identificación.

El comando **Delete** permite borrar un componente de la lista de los añadidos o definidos por el usuario.

La adición de nuevos componentes se lleva a cabo mediante el comando **New component**. Se pueden definir las propiedades del nuevo componente por tres caminos:

- Estimándose a partir de correlaciones para definir componentes del tipo pseudo-hidrocarburo.
- Estimándose por el método de Lyndersen modificado
- Introduciéndose directamente por el teclado.

2.1.1. Definición de un componente puro (entrada mediante el teclado)

1. New component
2. Teclear el nombre del componente y presionar Ctrl + Enter
3. Seleccionar Minimum data e introducir los datos.

2.1.2. Definición de un pseudo-hidrocarburo

1. New Component. Introducir el nombre del componente, su punto de ebullición normal y su densidad. El campo de "pseudocomponent" ha de contener un *. Presionar Ctrl + Enter.
2. Elegir la correlación para la estimación de la masa molecular.
3. Elegir el método para las propiedades críticas
4. Ctrl + Enter.
5. Utilizar el menú Edit Component para revisar los datos generados por el programa y cambiar, si procede, los valores estimados por los datos experimentales.

2.1.3. Introducción de una curva de destilación. Comp/Distillation curve

Permite introducir la curva de destilación a partir de la que el programa establecerá fracciones que serán tratadas como componentes puros. La primera vez que se usa este comando, va conduciendo al usuario paso a paso. En los usos siguientes, proporciona un menú que permite la selección de cada comando individualmente. Para introducir una curva de destilación:

1. Definir los componentes puros de la forma habitual en que se hace al construir los diagramas de flujo (thermophysical/component list). Si la curva se va usar en un problema en el que se usa vapor directo como agente de calefacción en la destilación, debe añadirse agua a la lista de componentes. Los hidrocarburos ligeros que constituyen la cola de ligeros de la curva también deben incluirse.
2. Activar el comando Distillation Curve. Se piden los números de identificación de las corrientes a caracterizar. Si se introduce más de un número, posteriormente se podrá elegir la opción de "mezclar" las propiedades de ambas corrientes para crear un conjunto común de pseudocomponentes.
3. Seleccionar qué correlación se va a utilizar para estimar la masa molecular y las propiedades críticas de los pseudocomponentes.
4. Indicar las temperaturas de corte para definir las fracciones y el número de pseudo-componentes a definir en cada fracción.
5. Introducir las siguientes propiedades de la corriente global:

Tipo de curva de destilación
P
Tipo de densidad especificada
Densidad del material en bloque
Unidades para el flujo total
Caudal total
Unidades de flujo para los componentes ligeros
unidades para la curva de destilación

6. Introducción de los puntos de la curva.
7. La siguiente pantalla permite introducir una curva de densidad para la curva completa. Si se ha introducido la densidad para el material en bloque, este dato es opcional. Sin embargo, si se dan ambos datos, el programa ajusta la curva de densidad para hacerla coincidir con la densidad global del material.
8. Aparece en pantalla un análisis de la cola de productos ligeros (sólo si en el alimento hay agua o hidrocarburos ligeros)
9. Utilizar la opción Edit Curve Data para retroceder y cambiar, si procede, algún dato de la curva.
10. Save, Exit: inicio de los cálculos.

Al finalizar el proceso, en la lista de componentes se habrán añadido los pseudo-componentes obtenidos a partir de la curva de destilación y en el cuadro de diálogo de la corriente correspondiente aparecerá también la concentración que les haya sido asignada por el programa.

2.2. Comandos adicionales

Edit BIP's permite visualizar o introducir/modificar (para componentes añadidos por el usuario) BIP's. Primero se selecciona el tipo de BIP's a considerar y luego el par de componentes.

Pick Solids permite que el usuario escoja qué componentes deben ser tratados como sólidos. Para éstos se puede introducir la distribución de tamaño de partícula (PSD) para uno o más componentes que hayan sido definidos como sólidos con el comando Pick Solids. Cuando se ejecuta por primera vez, pide la selección de las corrientes para las que se va a especificar la PSD. A continuación se solicitan los datos de PSD para todos los componentes de cada corriente seleccionada que hubieran sido definidos como sólidos.

Se pueden importar propiedades físicas de un fichero o fuente externo, utilizando un formato de "fichero neutro". El procedimiento está descrito en el manual de Chemcad.

3.TERMODINÁMICA Y PROPIEDADES DE TRANSPORTE

3.1. Métodos termodinámicos disponibles

3.1.1. Métodos para el cálculo de K

Ecuaciones de Estado

Soave-Redlich-Kwong
Grayson-Streed/Chao-Seader
Peng-Robinson
API Soave-Redlich-Kwong
Soave-Redlich-Kwong modificada
Soave-Redlich-Kwong Extendida
Soave-Redlich-Kwong predictiva

Empíricos

ESSO (Maxwell-Bonnell)
Presión de vapor (Solución ideal)
Ley de Henry

Métodos de coeficiente de actividad

UNIQUAC
UNIFAC
UPLM (UNIFAC para polímeros)
Wilson
T.K. Wilson
HRNM Wilson modificada
Van Laar
NRTL
Margules
GMAC (Chien-Null)
Scatchard-Hildebrand (Solución regular)
Wilson para sales

Sistemas especiales

Solubilidad hidrocarburos-agua
aminas
Método de Flory-Huggins para polímeros
Otros

Valores de K suministrados por el usuario

Polinomios
Tablas
Presiones parciales de mezclas acuosas
subrutina especificada por el usuario
coeficientes de actividad

3.1.2. Métodos para el cálculo de la entalpía

Ecuaciones de estado

Redlich-Kwong
Soave-Redlich-Kwong
Peng-Robinson
API Soave-Redlich-Kwong
Lee-Kesler

Métodos químicos

Calor latente

Sistemas especiales

Tabla de vapor
No entalpía (sólo balance de materia)

Datos introducidos por el usuario

Polinomio
Tablas
Datos de calor de solución
Subrutina

3.1.3 Métodos para calcular la densidad

Cavett
API
Librería
Rackett

3.1.4. Métodos para calcular la densidad del vapor

Soave-Redlich-Kwong
Peng-Robinson
API Soave-Redlich-Kwong
Lee-Kesler

3.1.5. Métodos para calcular la presión de vapor

Antoine
Antoine extendido (DIPPR)
API

3.1.6. Métodos para calcular la entropía

Redlich-Kwong
Soave-Redlich-Kwong

Peng-Robinson
API Soave-Redlich-Kwong
Lee-Kesler
Tabla de vapor

3.1.7. Métodos para calcular la viscosidad

CIPPR
Chapman y Enskog
Neufeld
Brokaw
Thodos
Wilkes
Dean y Steil
Letsou-Steil
ASME para hidrocarburos

Las ecuaciones a aplicar en cada caso y las características principales de cada método pueden consultarse en la bibliografía o en la ayuda de Chemcad.

3.2. Guía para la selección de los métodos termodinámicos

Dado que no existe una única ecuación para describir el comportamiento del equilibrio entre fases para cualquier tipo de mezclas y con cualquier tipo de componentes, hay que recurrir a modelos parciales que sólo pueden aplicarse a clases específicas de mezclas y de componentes. Para obtener el mejor resultado en la simulación, es necesario seleccionar el mejor método para una aplicación dada.

3.2.1. Recomendaciones

La primera recomendación a la hora de seleccionar el modelo termodinámico, es preguntarse qué ocurre en la fase líquida, es decir, si se trata de una disolución ideal, regular, polar (altamente no ideal) o especial. En función de esto:

1. Soluciones ideales (sistemas donde el vapor es esencialmente ideal (baja presión) y todas las moléculas de la fase líquida son virtualmente del mismo tamaño y no hay fuerzas de atracción intermolecular). Para estos sistemas se puede usar el modelo VAP (vapor ideal) para los valores de K y SRK para la entalpía. El equilibrio V-L se determina mediante la ley de Raoult :

$$K_i = VP_i / P$$

(VP_i es la presión de vapor del componente i)

2. Soluciones regulares (la no idealidad procede de interacciones físicas moderadas). Se modelizan mejor con ecuaciones de estado como PR, SRK,

APIS CS/GS y MSRK. Se recomienda usar PR y SRK para todos los sistemas de hidrocarburos, excepto para cierto estrecho margen alrededor del punto de ebullición y cuando se tratan materiales pesados a bajas presiones. Entonces se sugiere el modelo ESSO. Para especies químicas que forman soluciones regulares (hidrocarburos ramificados, hidrocarburos halogenados, algunos compuestos polares) se recomienda MSRK.

3. Soluciones polares (altamente no ideales), donde la no idealidad procede fundamentalmente de asociaciones moleculares, se modelizan con métodos de coeficientes de actividad, que suelen requerir BIP's. La fase vapor se trata como una solución regular y:

$$K_i = \frac{\gamma_i f_{ii}^0}{P \phi_{vi}}$$

donde $f_{ii}^0 = VP_i$ y $\phi_{vi} = 1$.

$$f_{ii}^0 = VP_i \phi_{vi}^{\text{sat}} \exp\left(\frac{(P - VP_i)V_i}{RT}\right)$$

Las ecuaciones que entran en esta categoría son:

NRTL
UNIFAC
UNIQUAC
Wilson
TK Wilson
Hiramuna
Van Laar
Margules

y las recomendadas son NRTL y UNIQUAC, y UNIFAC cuando se carece de datos.

4. Electrolitos. Se describen en la ayuda del Chemcad.

5. Sistemas especiales.

- Gases disueltos. Se recomienda utilizar la Ley de Henry, para gases ligeros disueltos en agua, y el método TSRK para gases ligeros disueltos en metanol.
- Sistemas reactivos, en los que ocurren reacciones en la fase líquida. Se recomienda el método AMIN para la eliminación de gases ácidos en corrientes de hidrocarburos, utilizando MEA o DEA, y el sistema SOUR WATER para sistemas conteniendo CO₂, NH₃, H₂S y otros compuestos disueltos en agua.
- Deshidratación de hidrocarburos utilizando trietilenglicol: método TEG.

- También existe la posibilidad de
 - a) Introducir los coeficientes de un polinomio (dependiente de T para calcular K y H.
 - b) Introducir tablas con valores de K y H, en las que el programa interpola durante la simulación.
 - c) Utilizar subrutinas introducidas por el usuario.

3.2.2. Modelos para el cálculo de la entalpía y de la entropía

Salvo excepciones, Chemcad calcula la entalpía y la entropía de una de estas dos formas:

- a) utilizando un método basado en una ecuación de estado
- b) utilizando un método de calor latente

En el caso a), se calculan las entalpías reales del líquido, calculando las desviaciones de la entalpía del gas ideal. El método b) integra el término que incluye la capacidad calorífica del líquido y lo suma al calor latente y la integral de la capacidad calorífica del gas ideal.

El estado referencia para todas las entalpías es el calor de formación del líquido a 298.15°C (a menos que se especifique otra cosa).

3.2.3. Recomendaciones

Hidrocarburos

- Soave-Redlich-Kwong P y T moderadas
- API Soave General HC P y T moderadas y altas
- Peng-Robinson P y T moderadas y altas
- Benedict-Webb-Ruben-Starling P y T moderadas y altas
- Grayson-Streed P y T moderadas
- Maxwell-Bonnell K-charts Presiones bajas, materiales pesados
- ESD Hidrocarburos-agua; hidrocarburo-gas
- SAFT Hidrocarburos-agua; hidrocarburo-gas

Mezclas generales de compuestos químicos

- UNIFAC T = 275K - 475K; P = 0-4 atm.; dos fases líquidas. No ideal; contribución de grupos; predictivo.
- Wilson Altamente no ideal.
- Vapor Pressure Soluciones ideales.
- NRTL Altamente no ideal y 2 fases líquidas.
- UNIQUAC Altamente no ideal y 2 fases líquidas.
- Margules Altamente no ideal y 2 fases líquidas. (4 sufijos)
- T. K. Wilson Altamente no ideal y 2 fases líquidas.
- Hiranuma (HRNM) Altamente no ideal y 2 fases líquidas.
- Regular Solution Moderadamente no ideal (Predictivo).

- Van Laar Moderadamente no ideal.
- Modified SRK (4 parameter) 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

- Ley de Henry Gases disueltos en agua
- Amine (MEA DEA) Gas sweetening
- Sour Water gases ácidos y NH₃ disueltos en agua
- 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 con methanol; particularmente con gases ligeros.
- PPAQ General, aunque su principal aplicación es para sistemas con electrolitos.
- TEG Deshidratación de corrientes de hidrocarburos con trietilénglicol
- FLOR Método de Flory-Huggins para polímeros
- UPLM UNIFAC para polymers
- ACTX coeficientes de actividad especificados por el usuario
- ESD Puentes de hidrógeno. Puentes de hidrógeno a alta presión.
- SAFT Puentes de hidrógeno. Puentes de hidrógeno a alta presión.

Para la selección de los métodos de la entalpía se pueden tener en cuenta las siguientes recomendaciones:

<u>Si el modelo para K es:</u>	<u>Utilizar éste para la entalpía:</u>
PR	PR
BWRS	BWRS
SRK, APIS, MSRK, VAP	SRK
REGU, SOUR, TEG, TSRK	SRK
ESD, SAFT	SRK
Grayson-Streed, ESSO	Lee-Kesler
NRTL, UNIF, UNIQ, WILS,	LATE
VANL, MARG, HRNM,	LATE
T. K. Wilson, PSRK, FLOR,	LATE
UPLM, ACTX	LATE
AMIN	AMIN
PPAQ	SRK or LATE w/HTSL

4. EL ASISTENTE PARA SELECCIÓN DE MÉTODOS TERMODINÁMICOS

Chemcad proporciona una ayuda para la selección de los modelos termodinámicos, aunque el sistema Expert de Chemcad no sustituye al juicio del ingeniero que está utilizando el programa y que es quien debe decidir si el modelo seleccionado es o no adecuado.

1. A la vista de la lista de componentes, el programa elige el tipo general de modelo: ecuación de estado, modelo de coeficiente de actividad, etc.
2. A la vista de los intervalos de P y T especificados por el usuario, decide qué ecuación es la más adecuada para representar al sistema.
3. Si el método es un modelo de coeficientes de actividad, el programa comprueba para qué modelo hay más BIP's en la base de datos. Si la fracción de BIP's disponibles (con respecto a la matriz total de BIP's) es mayor que el valor introducido para el parámetro "BIP threshold", selecciona el modelo, en caso contrario, utiliza UNIFAC.

Independientemente de la selección de modelo termodinámico realizada por el programa, el usuario debe ser muy riguroso a este respecto y revisar si dicha selección es o no adecuada. La mejor comprobación acerca de la bondad de un modelo consiste en hacer una predicción de datos de equilibrio y comparar los valores experimentales y los calculados. No hay que olvidar que **la bondad de los resultados de una simulación depende fundamentalmente de la bondad de las predicciones hechas por los modelos termodinámicos seleccionados.**

5. PARÁMETROS DE INTERACCIÓN BINARIA (BIP) PARA MODELOS DE COEFICIENTES DE ACTIVIDAD

La fuente principal de datos para el cálculo del equilibrio líquido-líquido y líquido-vapor son las series de datos DECHEMA data series. La tabla siguiente muestra las unidades con que se presentan los BIP's en dicha colección de datos, y las unidades con que deben ser introducidos en Chemcad, así como el tipo de conversión que se necesita:

Conversión de los parámetros de DECHEMA a CHEMCAD

MODELO	DECHEMA	CHEMCAD	CONVERSIÓN
VLE			
UNIQ(VLE)	($u_{ij}-u_{jj}$), cal/mol	(las mismas)	ninguna
NRTL(VLE)	($g_{ij}-g_{jj}$), cal/mol	($g_{ij}-g_{jj}$) /R, deg K	/R
WILS(VLE)	($g_{ij}-g_{jj}$), cal/mol	(las mismas)	ninguna
LLE			
UNIQ(LLE)	($u_{ij}-u_{jj}$) /R, deg K	($u_{ij}-u_{jj}$), cal/mol	R
NRTL(LLE)	($g_{ij}-g_{jj}$) /R, deg K	(las mismas)	ninguna

$$R = 1.98721 \text{ cal/mol/deg K}$$

Si se utilizan parámetros de otra procedencia distinta, se debe asegurar que se introducen en las unidades adecuadas.

De nuevo conviene recordar que la bondad de los resultados de la simulación dependerá fundamentalmente de la bondad de la predicción de los datos de equilibrio y por tanto es fundamental comprobar que los BIP (introducidos por el usuario o proporcionados por el sistema) son válidos mediante la comparación entre valores experimentales y calculados.

6. EL MENÚ DE HERRAMIENTAS

El menú de herramientas de Chemcad permite utilizar ciertos programas accesorios a la simulación de un cierto equipo (correlación de datos, informes medioambientales, cálculo de costes ...). A continuación se describen algunas de estas herramientas que son especialmente útiles.

6.1. Regresión de datos

Chemcad permite hacer regresiones para propiedades físicas de compuestos puros o para equilibrio entre fases. Los sistemas de equilibrio entre fases pueden ser L-L ó L-V y de hasta 4 componentes.

Además, también se hace regresión sobre datos generados por UNIFAC, para aquellos casos en que se necesite disponer de BIP's para el sistema, pero no se disponga de datos experimentales para correlacionar. En este caso hay que tener en cuenta que:

1. Los datos para la regresión no los proporciona el usuario, sino el modelo UNIFAC. Por tanto, constituyen sólo una estimación de los datos.
2. El modelo UNIFAC proporciona coeficientes de actividad estimados, no composiciones. Luego Chemcad ajusta éstos en función de la ecuación seleccionada para ello.

El método utilizado es el del SIMPLEX flexible.

Los problemas de convergencia se pueden intentar seleccionar :

1. Expandiendo el área de búsqueda.
2. cambiando el punto de partida para la búsqueda.
3. Fijando uno de los parámetros.
4. Reduciendo la tolerancia en el cálculo.
5. Confirmando la región de datos de interés.

Dentro del menú de herramientas se encuentra la posibilidad de correlacionar “datos puros” de ciertas propiedades físicas o “datos de equilibrio” para obtener los BIP’s correspondientes.

6.1.1. Regresión pura

Se puede hacer regresión para obtener los ,coeficientes de:

- Ec. de Antoine para la presión de vapor
- Presión de vapor mediante la correlación de la “librería” de Chemcad.
- Calor de vaporización
- Densidad del líquido
- Capacidad calorífica del líquido
- viscosidad del líquido
- Conductividad térmica del líquido
- Tensión superficial del líquido
- Capacidad calorífica del gas ideal
- Viscosidad del vapor
- Conductividad térmica del gas ideal

El procedimiento:

1. Añadir un nuevo componente a la base de datos
2. Seleccionar la propiedad sobre la que se va a hacer regresión
3. Seleccionar el compuesto en la lista de componentes
4. Completar las estimaciones iniciales
5. Introducir los datos experimentales
6. Ctrl + Enter: comienza el cálculo
7. Si hay un mensaje de convergencia, tomar los coeficientes de la regresión y añadirlos al banco de datos

6.1.2. Regresión de datos de equilibrio para la obtención de BIP’s

a) Regresión a partir de VLE UNIFAC

Se obtienen BIP’s para algún modelo cuando no se dispone de datos experimentales.

b) Regresión a partir de datos VLE TPXY

Se introducen los datos de composición de la fase líquida (x_i) y de la fase vapor (y_i).

c) Regresión de datos VLE TPX

Se introducen datos de P, T y x_i .

d) Regresión de datos LLE TXX

Se introducen los siguientes datos:

- $x_{1,1}$, $x_{2,1}$, $x_{3,1}$: fracciones molares de componentes 1, 2 y 3 en la primera fase líquida.
- $x_{1,2}$, $x_{2,2}$, $x_{3,2}$: fracciones molares de componentes 1, 2 y 3 en la segunda fase líquida.

e) Regresión de datos de γ

$x_{1,1}$, $x_{2,1}$, $x_{3,1}$ son las fracciones molares de componentes 1, 2 y 3.

γ_1 , γ_2 , γ_3 , γ_4 son los coeficientes de actividad de los componentes 1, 2, 3 y 4.

f) Regresión de datos LLE UNIFAC

Es similar al caso a). El procedimiento:

1. Seleccionar opciones termodinámicas del menú /Thermophysical:
SRK
Peng-Robinson
BWRS
Algún método de coeficientes de actividad
2. /Tools/BIP regresión
3. Elección de la opción correspondiente en función del tipo de datos disponibles.
4. Elección de los componentes de la lista de componentes
5. Aparece una pantalla para la introducción de datos experimentales: estimación inicial y/o límites para los BIP's (sólo cuando se correlacionen datos experimentales).
6. Introducción de parámetros de convergencia.
7. Si se trata de regresión de datos experimentales, aparece una pantalla en la que se introduce:
 - factor de ponderación: se debe dar más peso a los datos en la región de interés. El valor por defecto es uno para todos los datos, lo que significa que todos los datos son de igual importancia.
 - T. Si se desea regresión a T constante, sólo se introduce la T del primer punto.
 - P. Si se desea regresión a P constante, sólo se introduce la P del primer punto.
 - x_i
 - y_i
8. Ctrl + enter salva los datos. Esc no los salva.
9. Comienza la regresión.
10. Si los componentes están en la lista de componentes, los BIP's se guardan automáticamente en el lugar correspondiente. Si no, se deben registrar para su uso posterior. Se puede verificar que los BIP's se han grabado visualizando la matriz con el comando /Thermophysical/BIP's.

6.2. Otras herramientas

- Predicción del equilibrio sólido-gas en sistemas conteniendo CO₂.
- Predicción de las condiciones de formación de hidratos a partir de hidrocarburos y gases relacionados.
- Realización de balances rigurosos de materia y energía dependientes del tiempo para analizar el funcionamiento de sistemas de válvulas en condiciones de emergencia.
- TOC/COD: Permite calcular el carbono orgánico total y la demanda química de oxígeno de las corrientes del proceso.
- Regresión de datos de electrolitos
- Regresiones de datos en reactores discontinuos
- Herramienta para conversión de unidades.
- Cálculo del coste de equipos.
- Obtención de informes medioambientales (ejecución del algoritmo WAR de reducción de residuos).
- Calculadora
- Hojas de especificaciones para los equipos.

BIBLIOGRAFÍA

- Manual del programa. Disponible en la ayuda en línea de CHEMCAD
- "Introducció a l'ús del simulador de processos químics CHEMCAD 5.2.0", A. Gómez Ciurana, A. Font Escamilla, S. Menargues Irlles, Col·lecció Joan Fuster nº 95, Secretariat de Promoció del Valencià. Universitat d'Alacant.