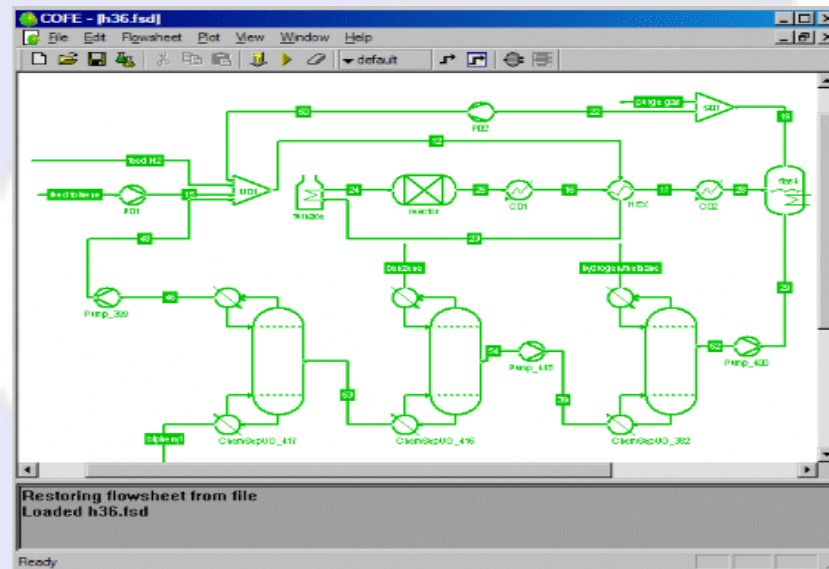




SIMULADORES DE PROCESOS



Dr Francisco Cubillos

Depto Ing Química Universidad de Santiago de Chile .

Modelación y Simulación de Procesos

Prof. Francisco Cubillos

REALIDAD

(observada, medida, conocida, publicada, estudiada)

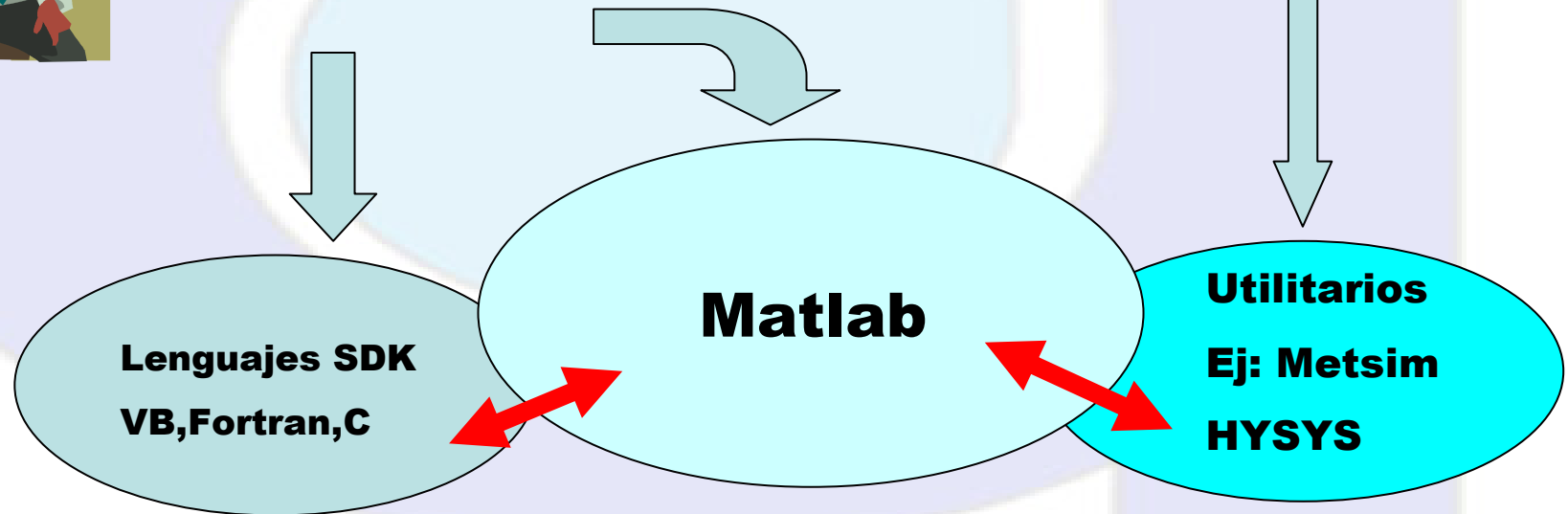
PERCEPCION + CONOCIMIENTO PROPIO

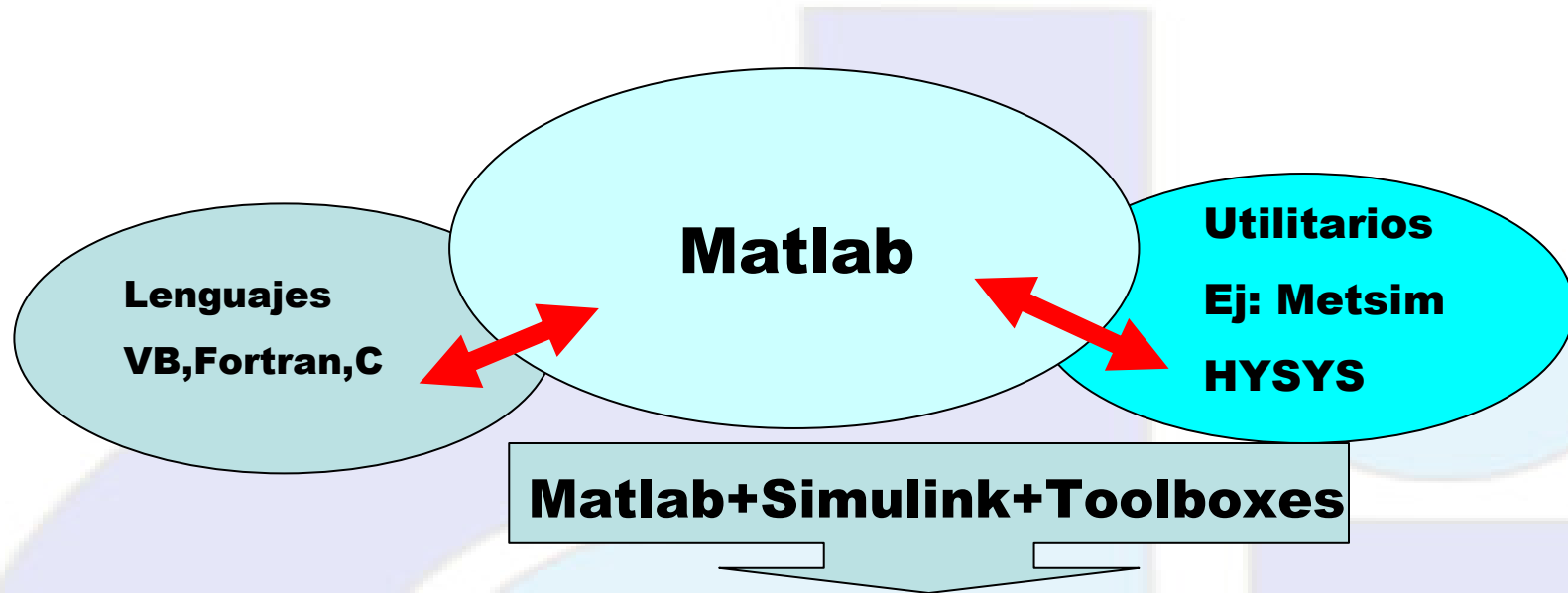


Aplicación Personalizada

**CONOCIMIENTO
EXPERTOS**

Programas usuarios

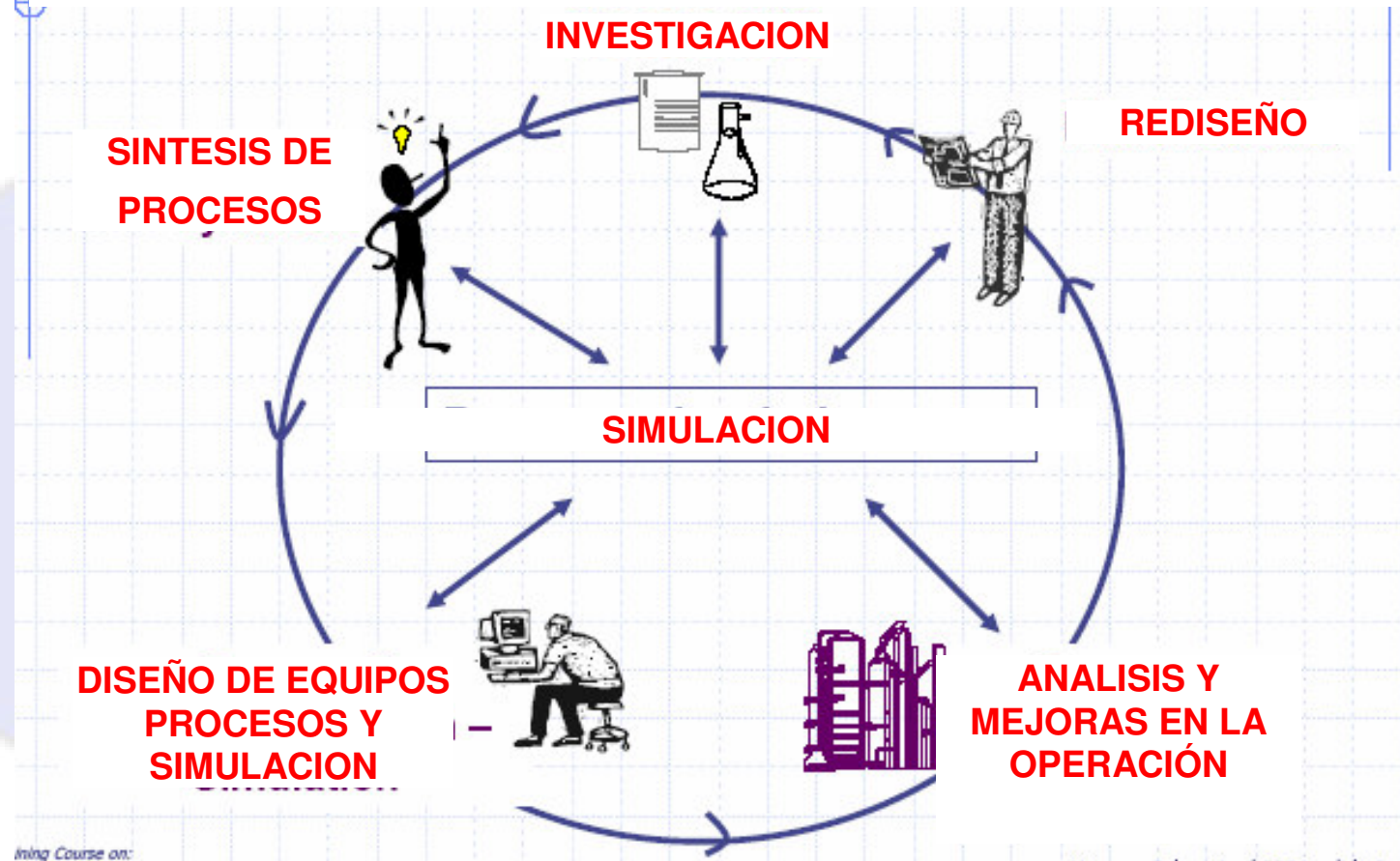




- **ANALISIS:** Información compactada, conclusiones, reportes
- **MODELACION:** Representación abstracta de la realidad en base a herramientas matemáticas
- **SIMULACION:** Emulación frente a diferentes escenarios controlados
- **HERRAMIENTAS DE GESTION:** Toma de decisiones frente a escenarios cambiantes y/o excesos de grados de libertad

Simulación de procesos

Donde usarla?



SIMULADOR DE PROCESOS

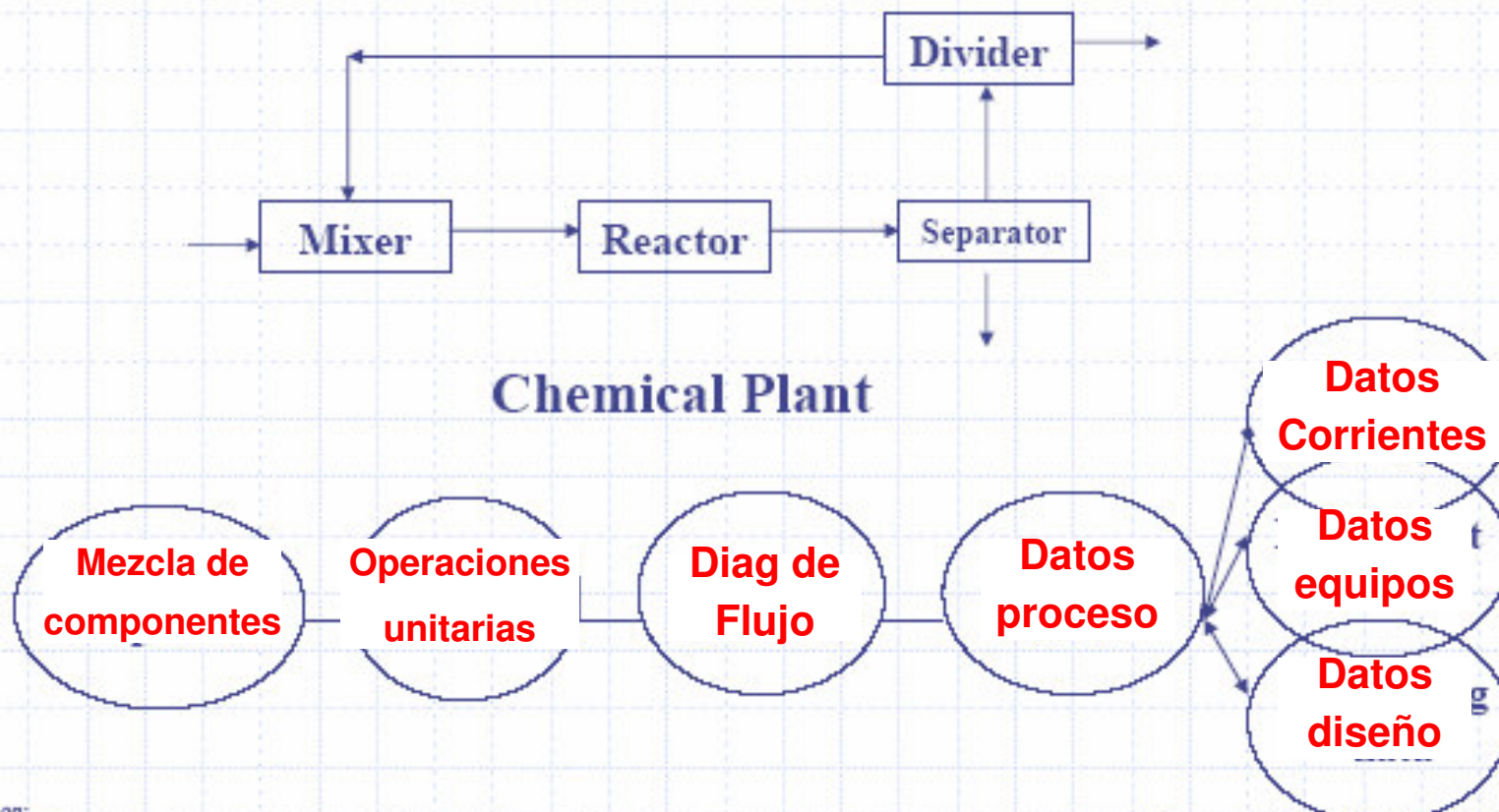
Es una herramienta de ingeniería que hace:

- **Cálculos automatizados**
- **Balances de Masa y/o Energía (flowsheeting)**
- **Estimación de propiedades físicas**
- **Diseño / tamaño/costo de equipos**
- **Optimización de procesos**

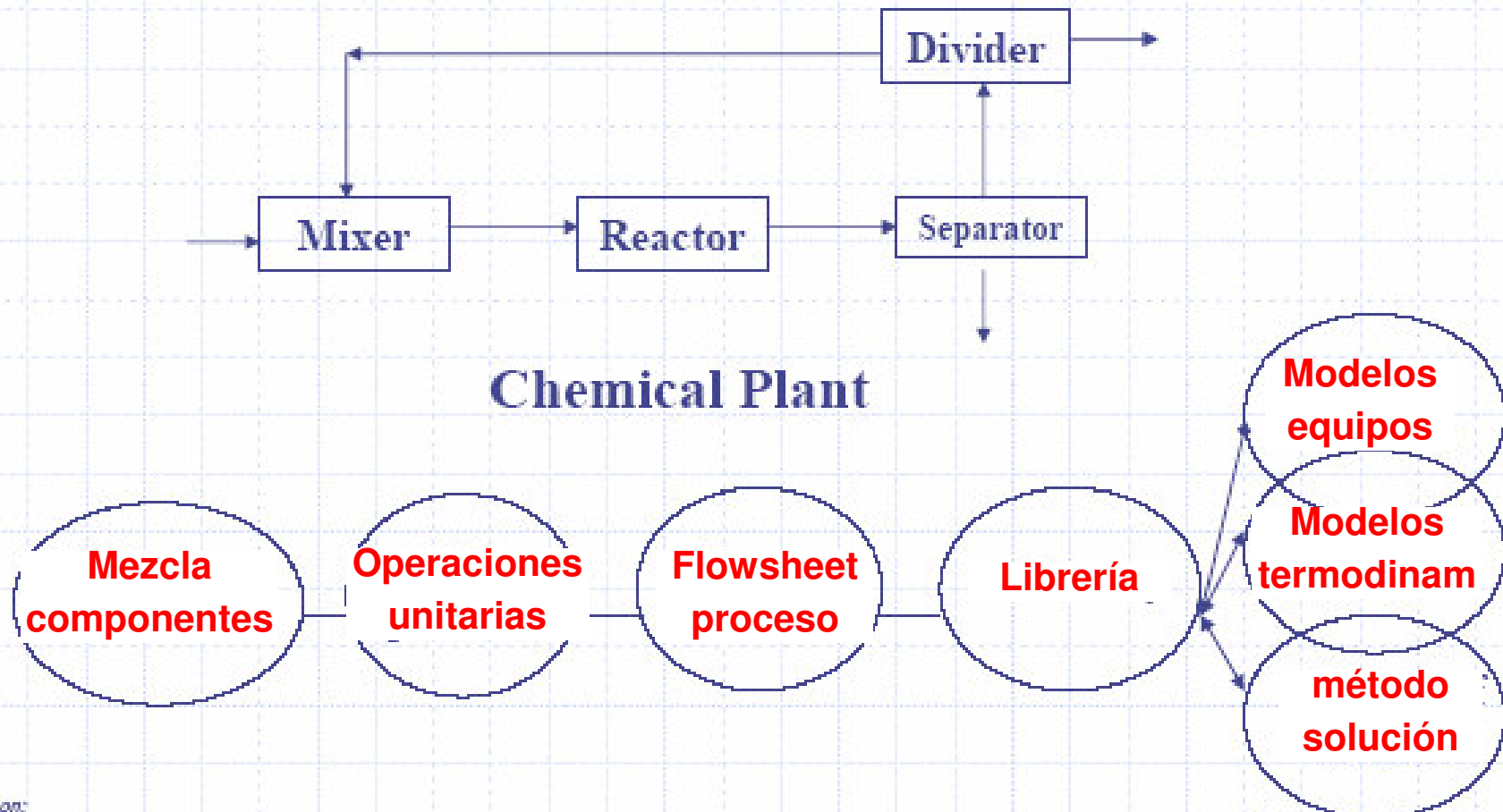
No reemplaza al ingeniero de procesos si no que lo asiste en la generación de resultados

Su gran popularidad radica en que diversos escenarios son evaluados rápidamente lo que permite una mejor toma de decisiones.

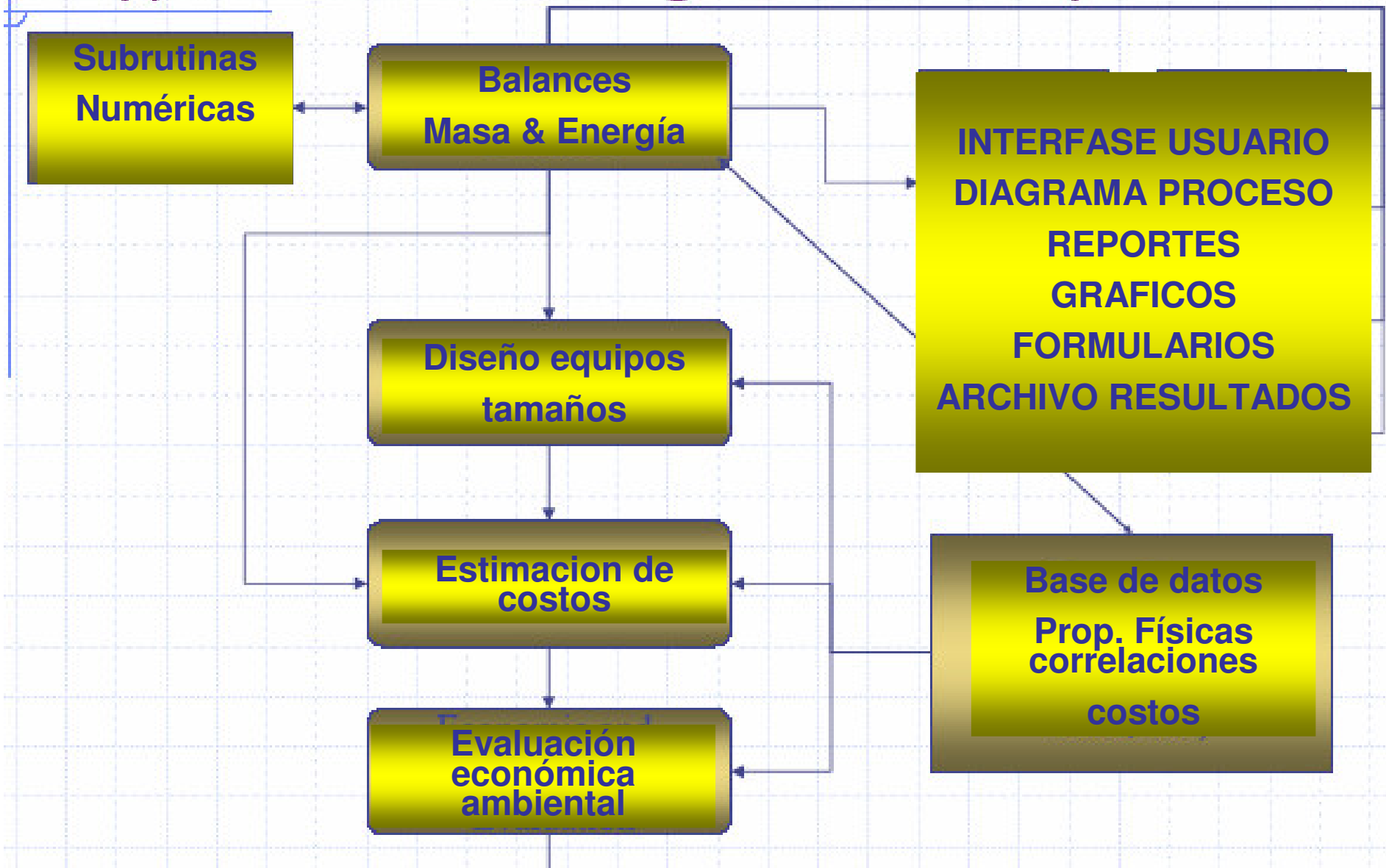
Información requerida



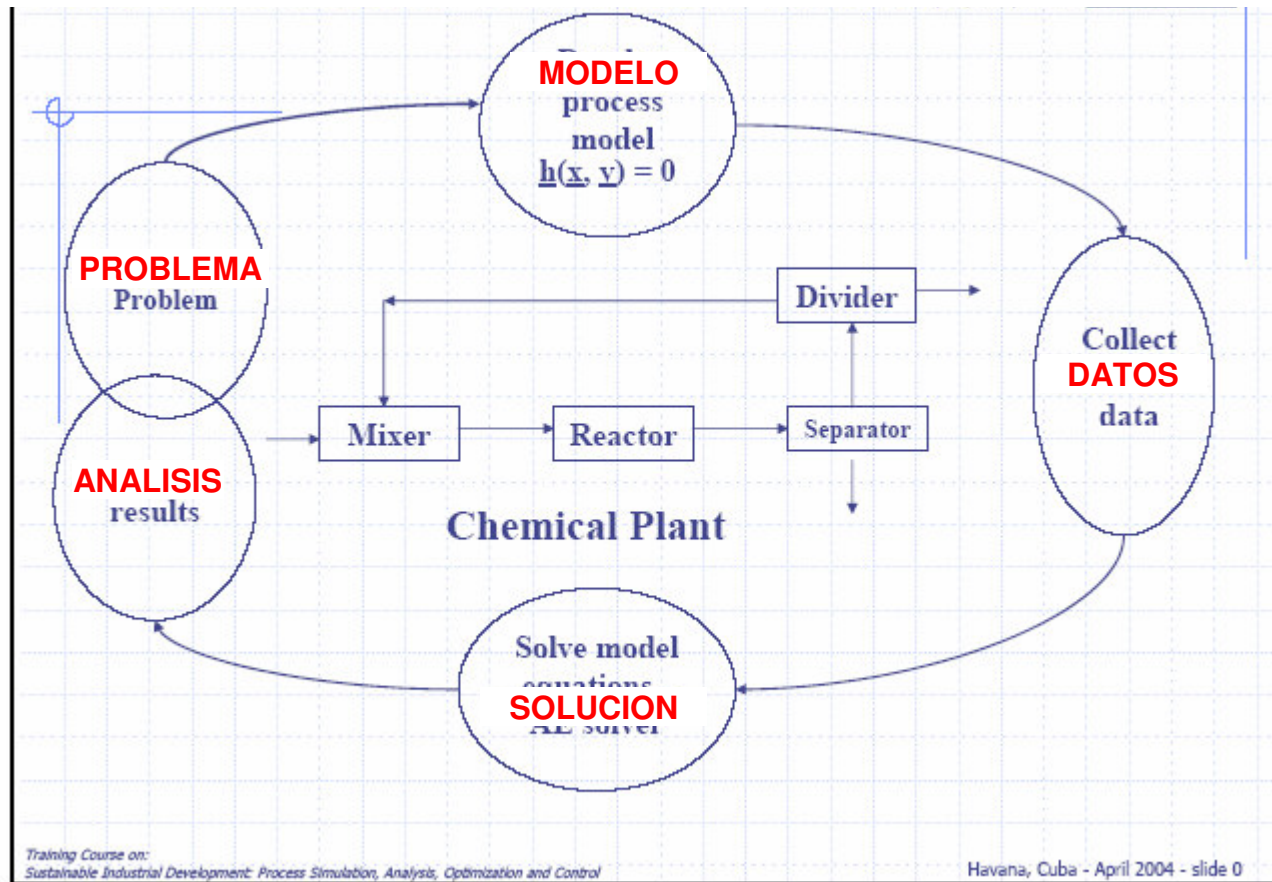
Datos a especificar en el simulador



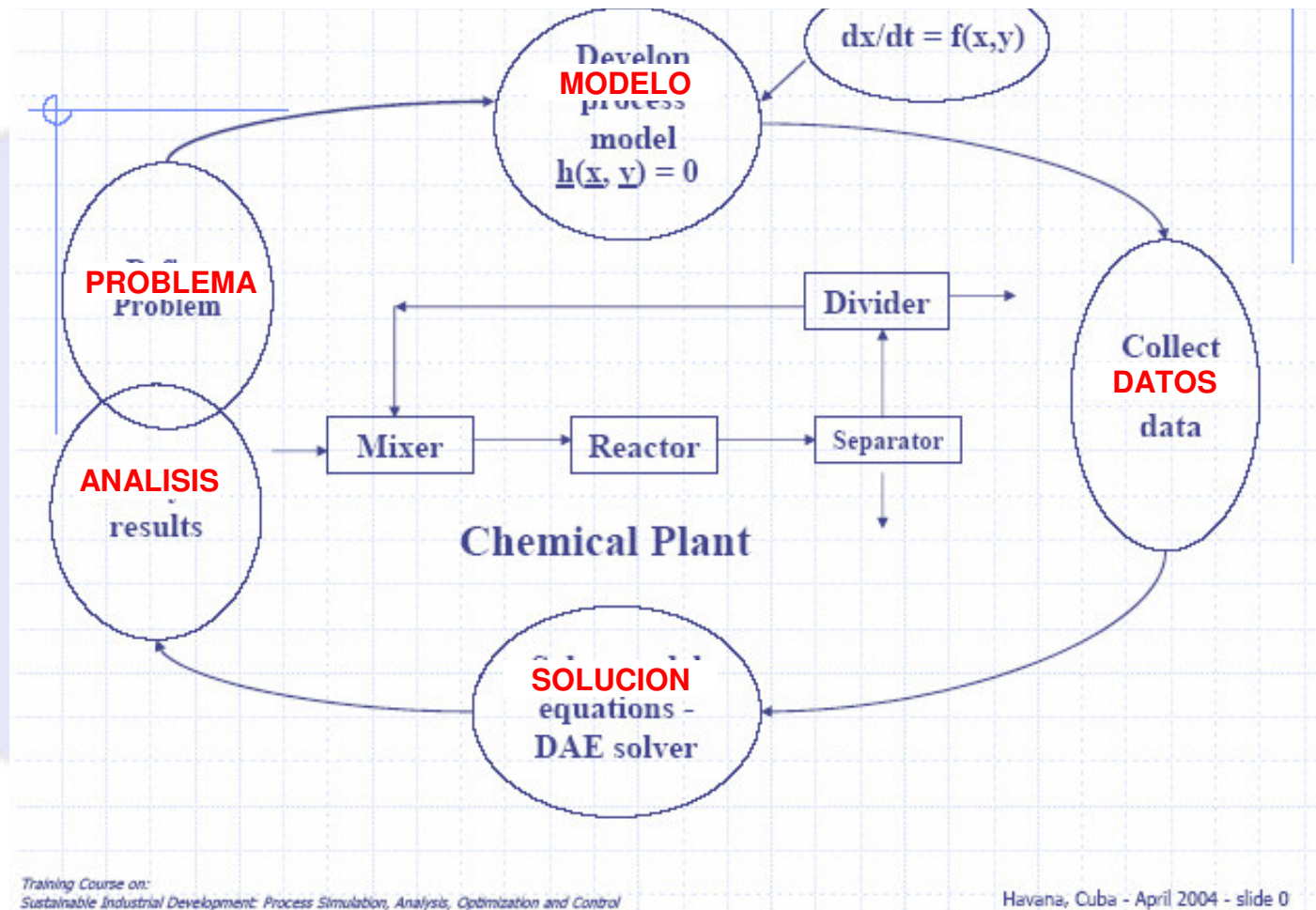
ESTRUCTURA DE UN SIMULADOR ESTACIONARIO



SIMULACION ESTACIONARIA => SOLUCION SISTEMA ALGEBRAICO

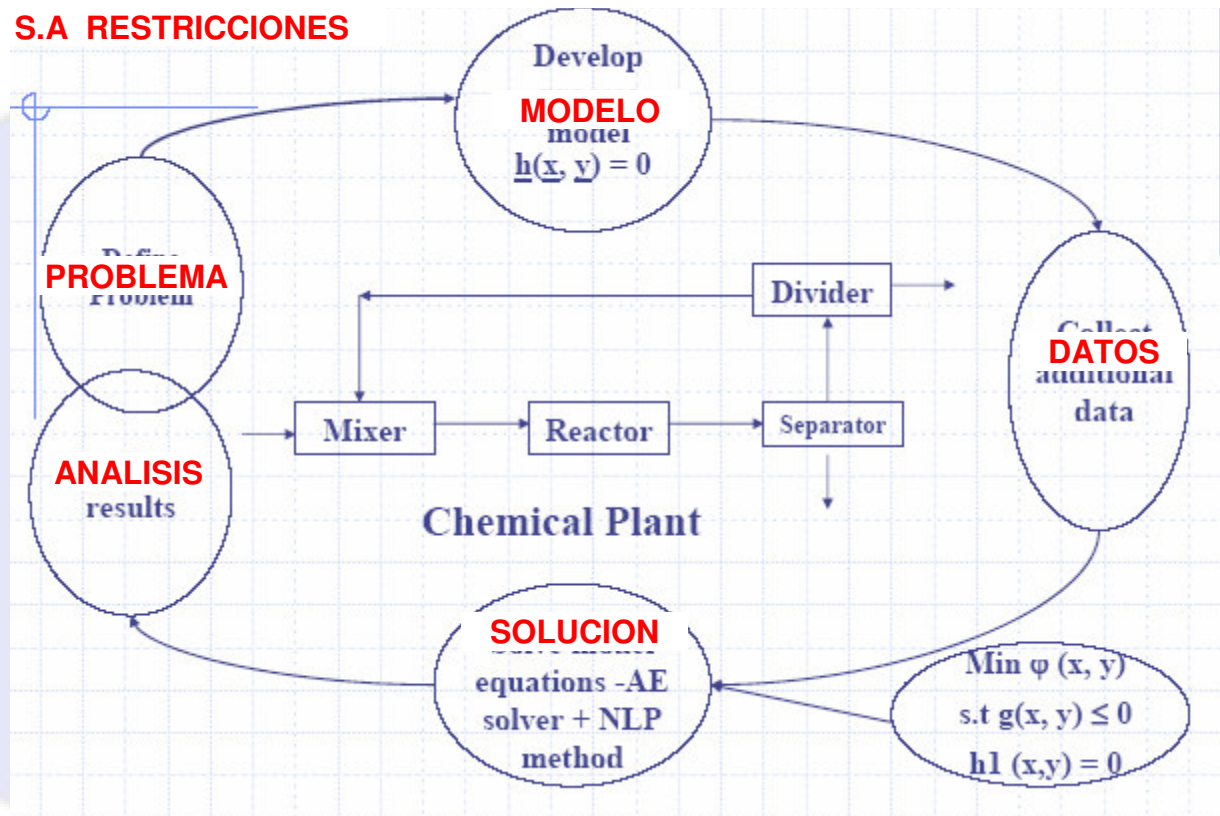


SIMULACION NO ESTACIONARIA => SOLUCION SISTEMA DIFERENCIA ALGEBRAICO



OPTIMIZACION DE PROCESOS => MINIMIZAR FUNCIONES N.L

S.A. RESTRICCIONES



Estrategias de solución I

- **Basadas en ecuaciones (Equation Oriented)**
 - Explicitar el conjunto de ecuaciones
 - Matriz de conexiones de corrientes
 - Identificar restricciones
 - Solución del sistema en forma simultanea
 - Lineal : solución exacta sin iteraciones
 - Nolineal: usar método numérico (newton)

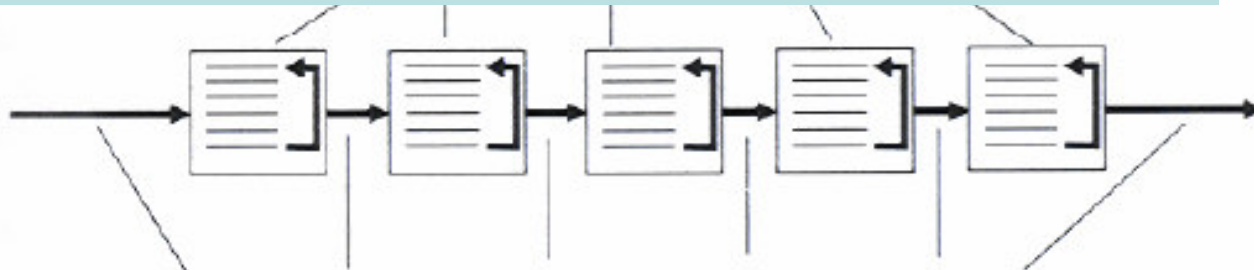
Estrategias de solución II

- **Secuencial Modular**

- Esquema más usado
- Cada proceso o corriente es un Modulo (ecuaciones, objeto)
- La salida de un modulo es la entrada del próximo
- El sistema se soluciona secuencialmente modulo a modulo
- En caso de reciclo se requiere tanteo e iteraciones (tearing) hasta convergencia

Esquema secuencial modular

- Algoritmo mas usado
- Sistema sin reciclo se resuelve en una iteración

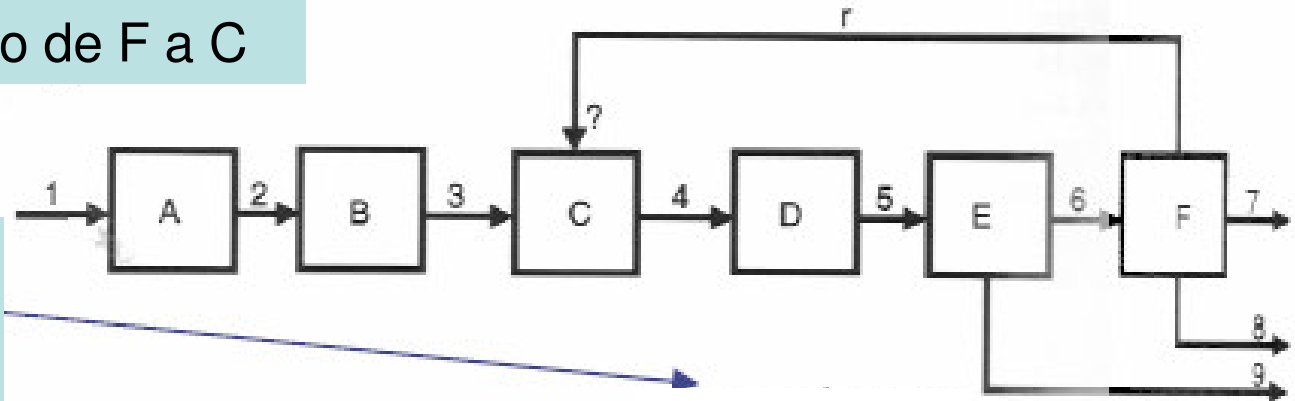


Los módulos individuales pueden requerir iteraciones para su solución

Reciclos en esquema secuencial modular

- Los sistemas con ciclos son mas complicados

r ciclo de F a C

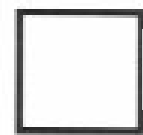
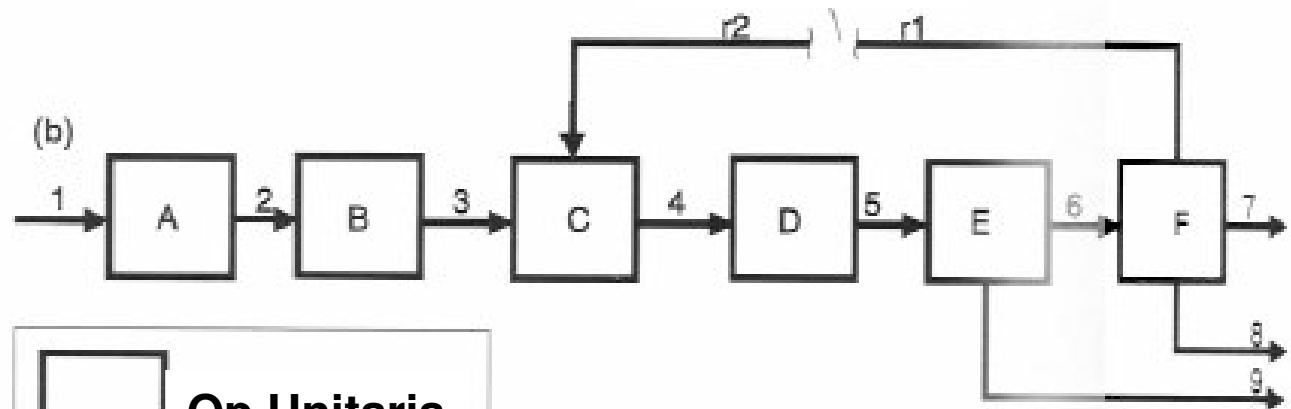


Se particiona
r en r_1 y r_2

Se asume r_2
y se resuelve
hasta obtener
 r_1

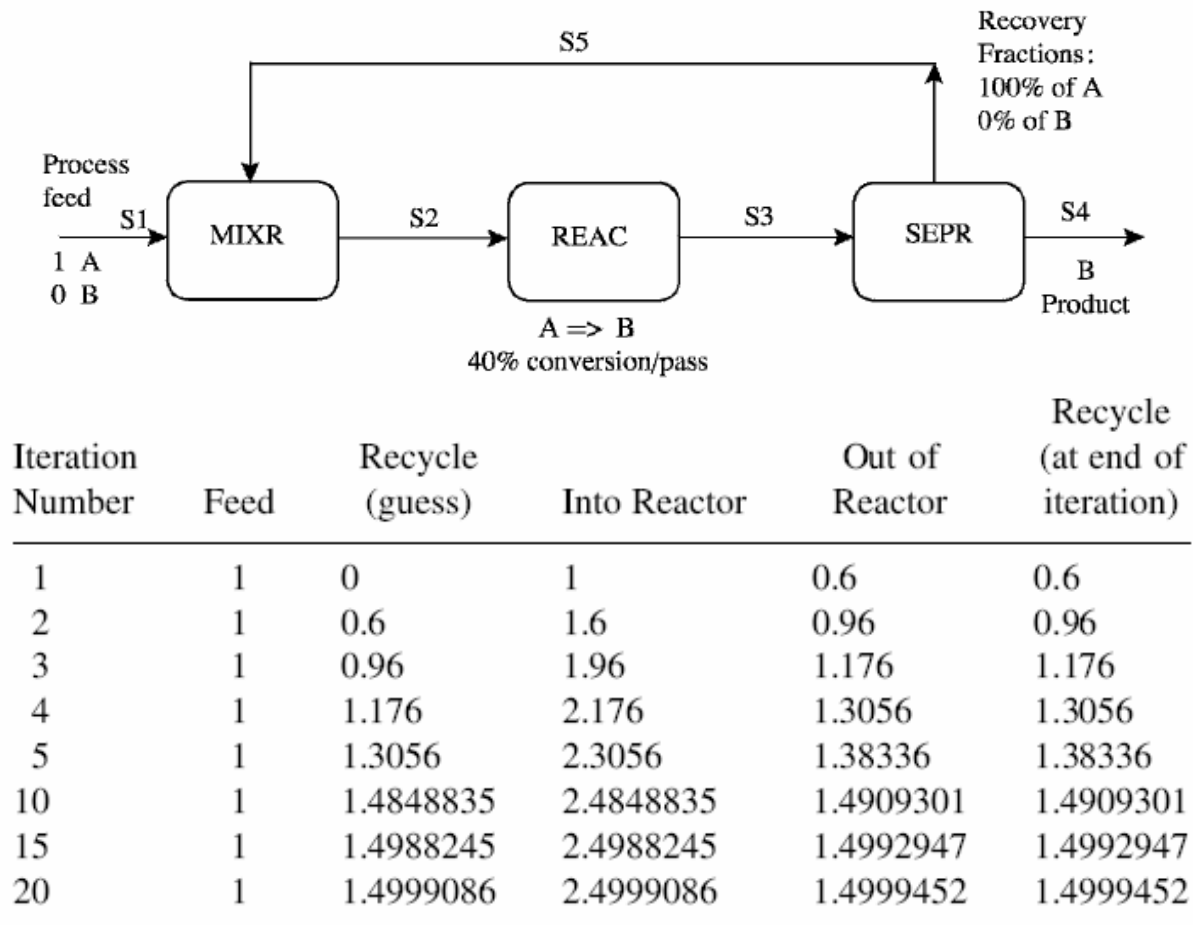
Parar si $r_1 = r_2$

Reciclo particionado



Op Unitaria

TRATAMIENTO DE RECICLOS METODOLOGIA M-S



VENTAJAS Y DESVENTAJAS DEL EMS

VENTAJAS

- Es fácil de entender ya que el flowsheet es similar al proceso
- Los equipos (módulos) se incorporan o retiran fácilmente
- Se pueden reemplazar módulos con diferente grado de detalle sin alterar los demás componentes.
- Solución robusta

DESVENTAJAS

- Solución lenta modulo por modulo
- Discontinuidades pueden generar inestabilidad (eq. de fases)
- Manejo de reciclos necesita iteraciones

Lista de simuladores de procesos

Fuente wikipedia

Flowtran: primer simulador secuencial 1975 desarrollado en fortran

Simuladores comerciales actuales

- ASCEND
- Aspen Plus
- Design II
- Dymola
- EMSO
- Hysys
- gPROMS
- Petro-SIM
- Pro II
- SysCAD
- CHEMCAD

Antecedentes en la selección de un simulador

- **Método de solución**
- **Estático/Dinámico/Costos/ Optimización**
- **Conectividad/ Soporte/Modelos propios**
- **Biblioteca de modelos y componentes**
- **Costo licencia y capacitación**

Cape-open promueve el desarrollo de software libre para el área de ingeniería de procesos.

El simulador de libre disposición que se promueve es el “COCO”

Descargar en: <http://www.cocosimulator.org/>



TAREA: investigar los simuladores de procesos comerciales que ofrece el mercado

Fuente:

Chemical Engineering

Chemical Engineering Progress

Ingeniería Química

Directorio de productos

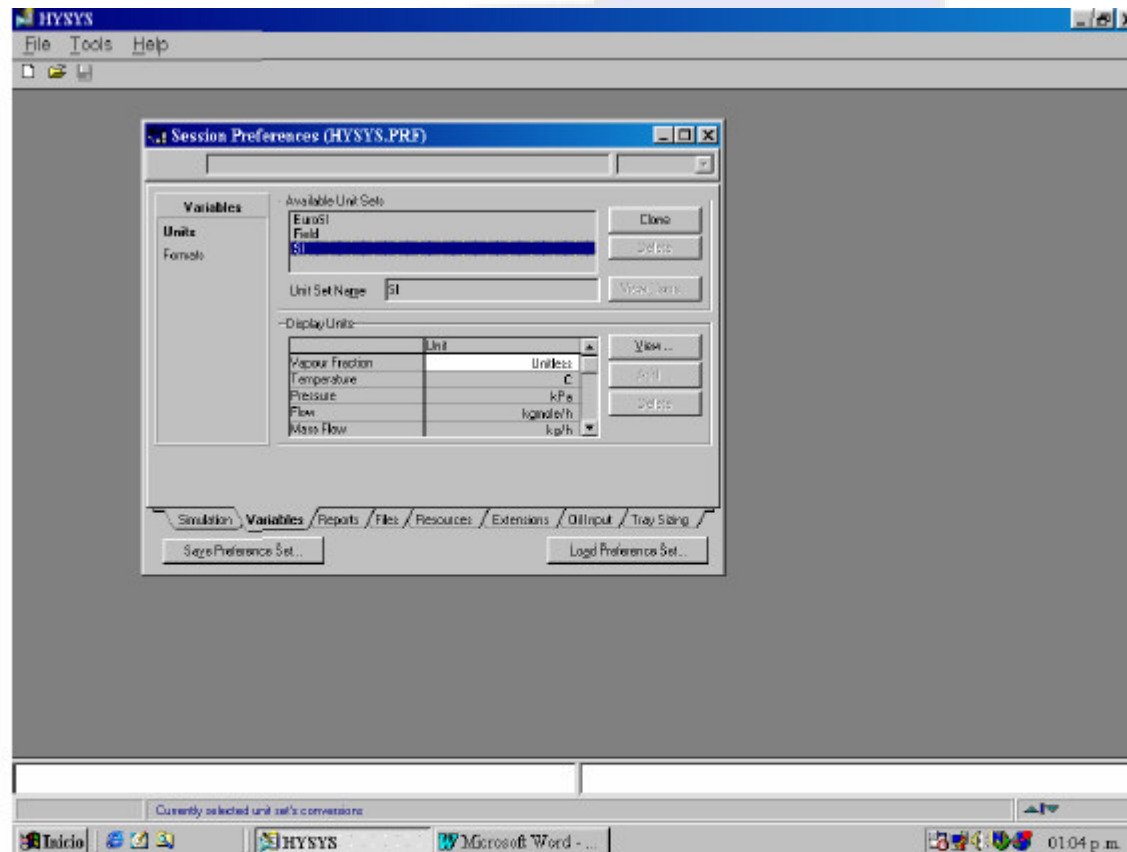
INTRODUCCION SIMULADOR HYSYS

Aspen One

Características

- **Tipo secuencial modular**
- **Estado estacionario y dinámico**
- **Calculo automatico segun GL (Diseño Simulación Control)**
- **Optimizador**

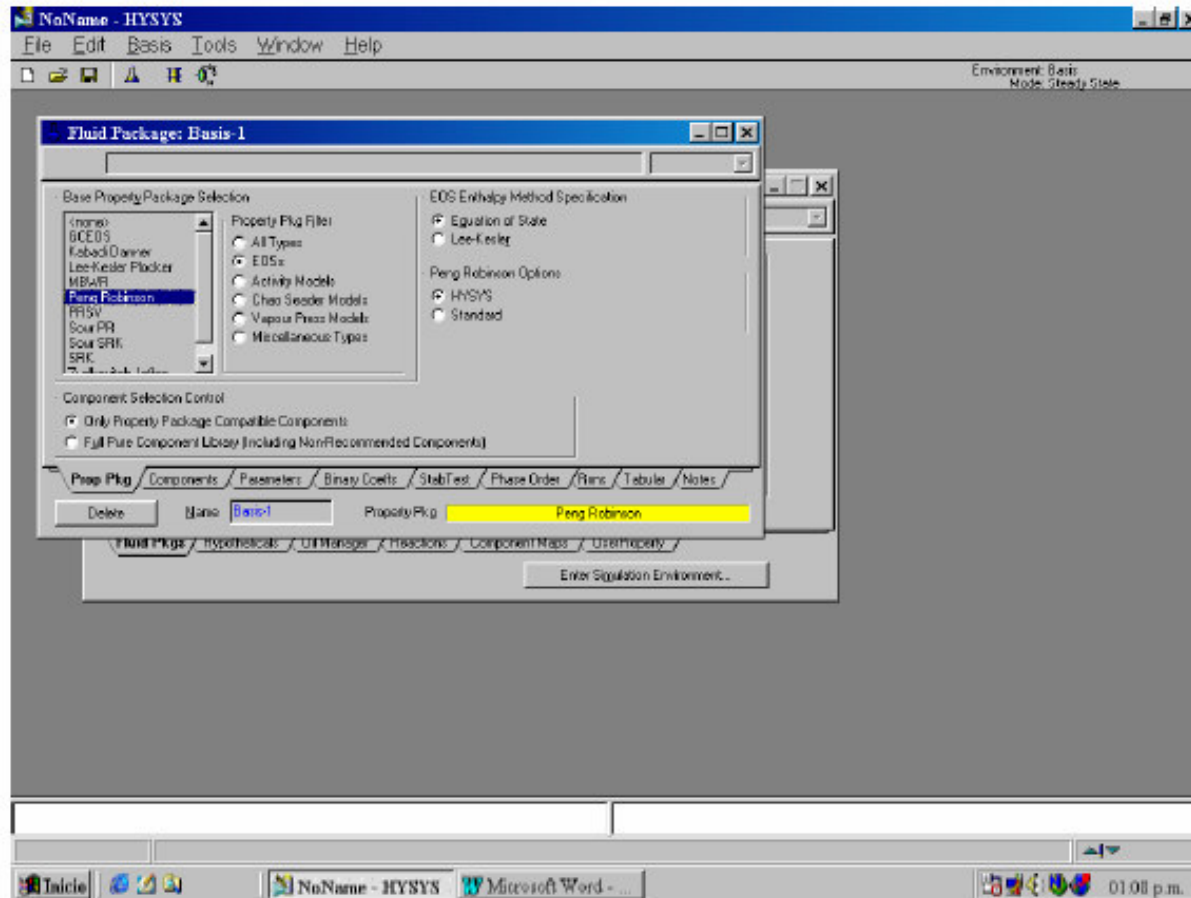
1er paso : Set de Unidades



Escoja las unidades que desee luego cierre el cuadro de diálogo. Para crear una nueva simulación, en el menú superior haga clic en *File, New, Case*.

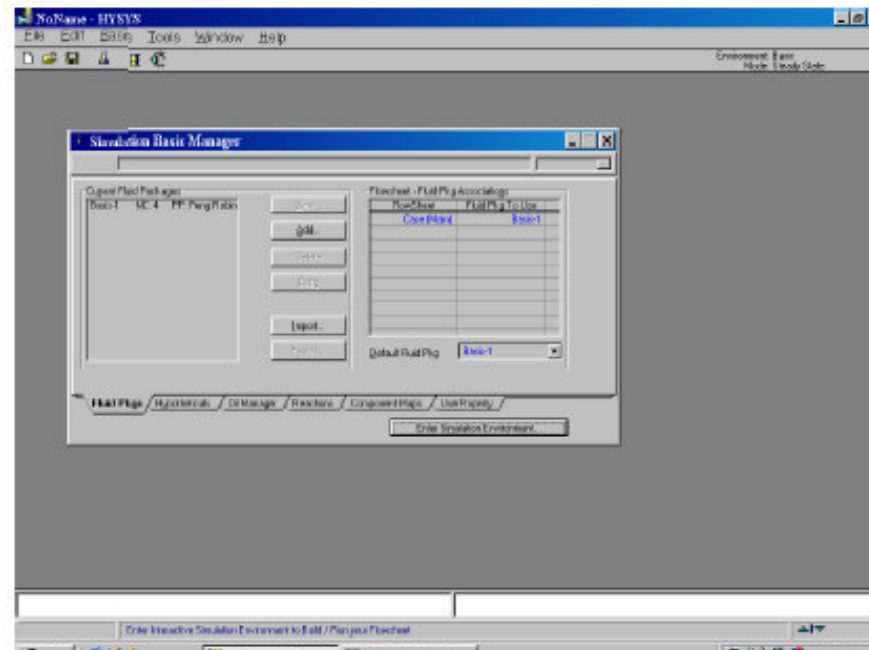
2º paso : Seleccionar paquete de fluidos

Elija la etiqueta *Fluid Pkgs* , entonces haga clic en *Add*.



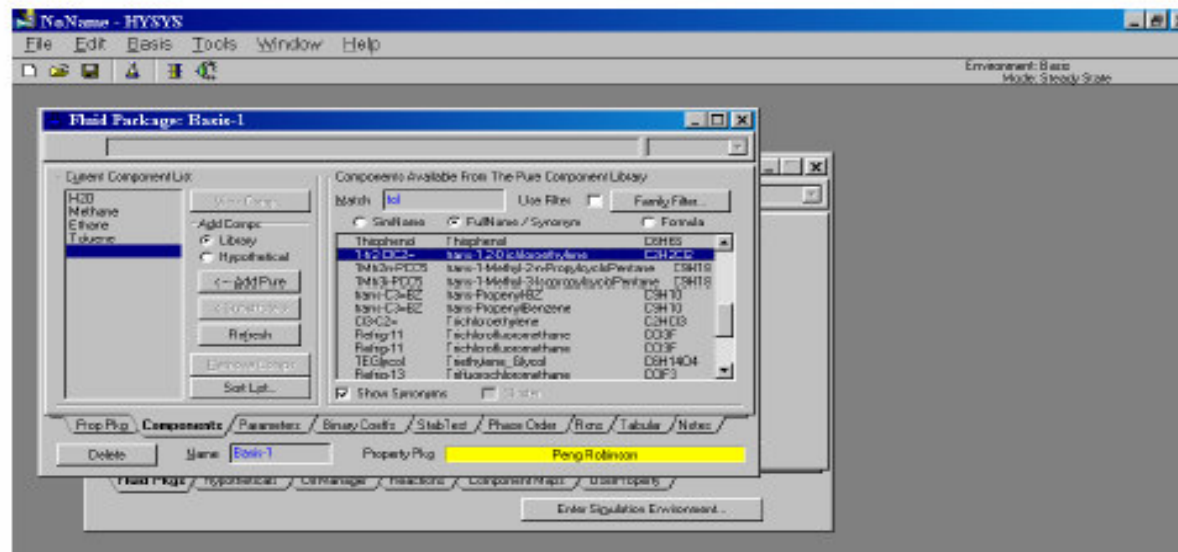
3º paso: Seleccionar opciones TD

Escoja el paquete de propiedades que usted desee. *Peng Robinson (PR)* es recomendado para la mayoría de aplicaciones en donde existan hidrocarburos. Si la simulación involucra compuestos polares, como alcoholes o aminas no podrá encontrar el componente que usted necesita bajo PR. Para fluidos polares un modelo de actividad como *UNIQUAC* o *NTRL*.



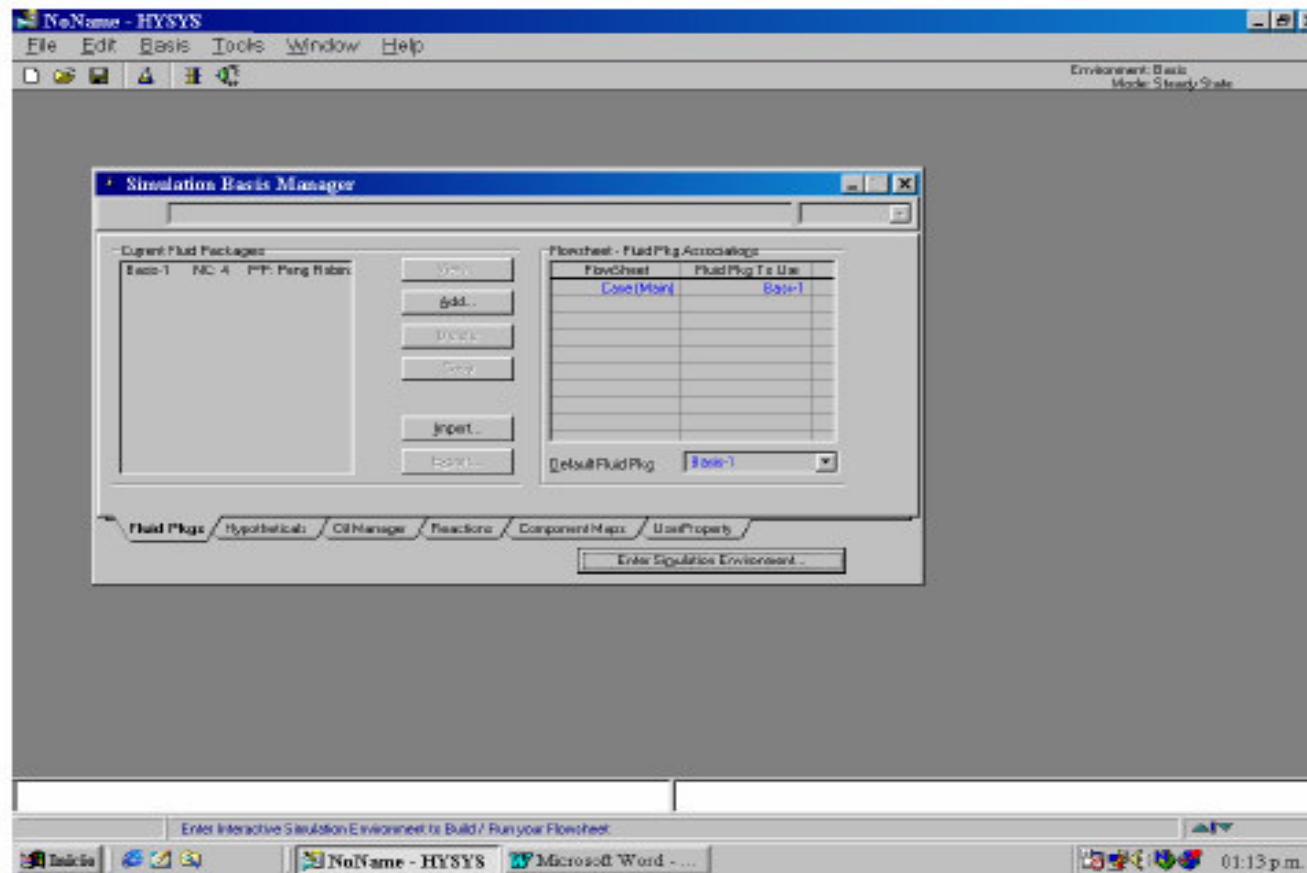
4º paso: Adicionar componentes y Rx

Seleccione la etiqueta *Components*. Escoja los componentes que desee haciendo doble clic sobre ellos. O bien resalte el componente y haga clic sobre *Add pure*. Puede encontrar los componentes que busca arrastrando la barra lateral, escribiendo su nombre o su formula química en el campo *Match*. Si ha seleccionado un componente por error y desea removerlo resalte el componente en la lista de componentes y presione el botón *Remove Comps*. También es posible cambiar el orden de los componentes pulsando sobre el botón *Sort List*. Una vez elegidos todos los componentes cierre el cuadro de diálogo en la esquina superior derecha.



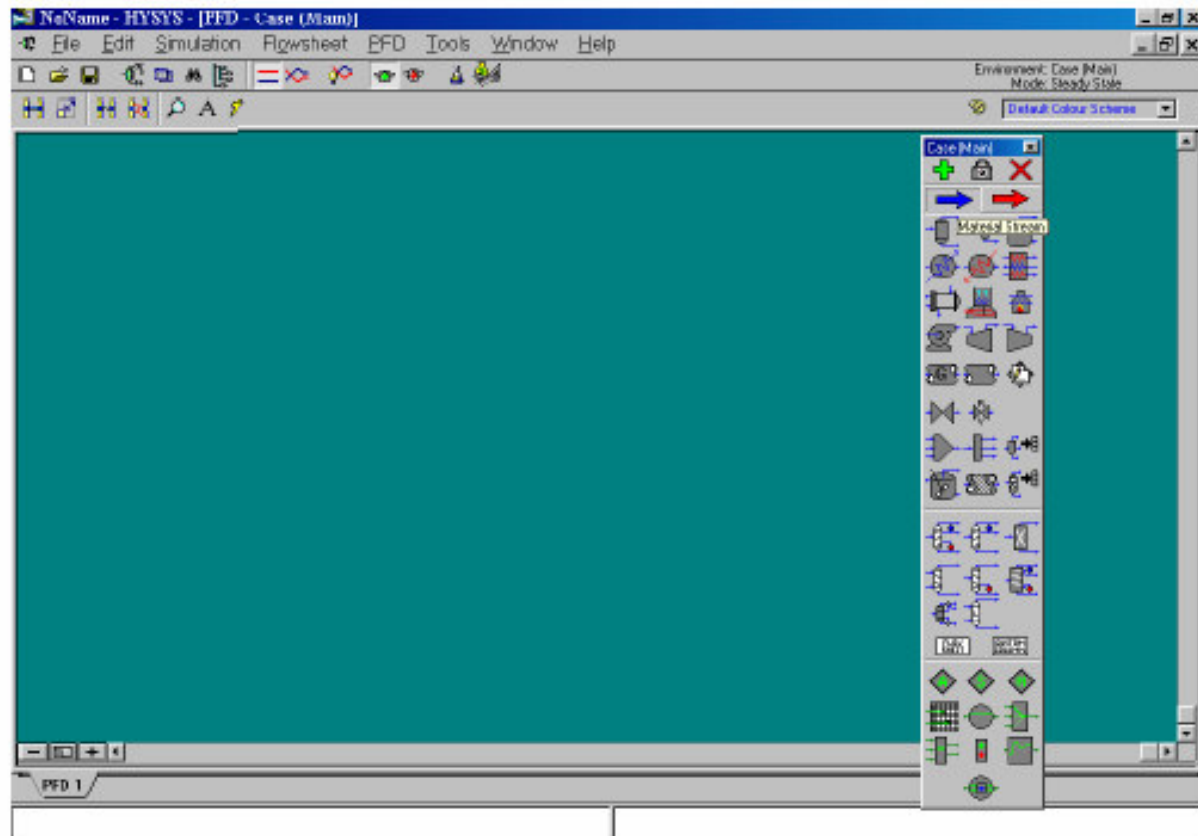
5º Paso : Ir a modo de Simulacion

Haga clic sobre el botón *Enter Simulation Environment*.

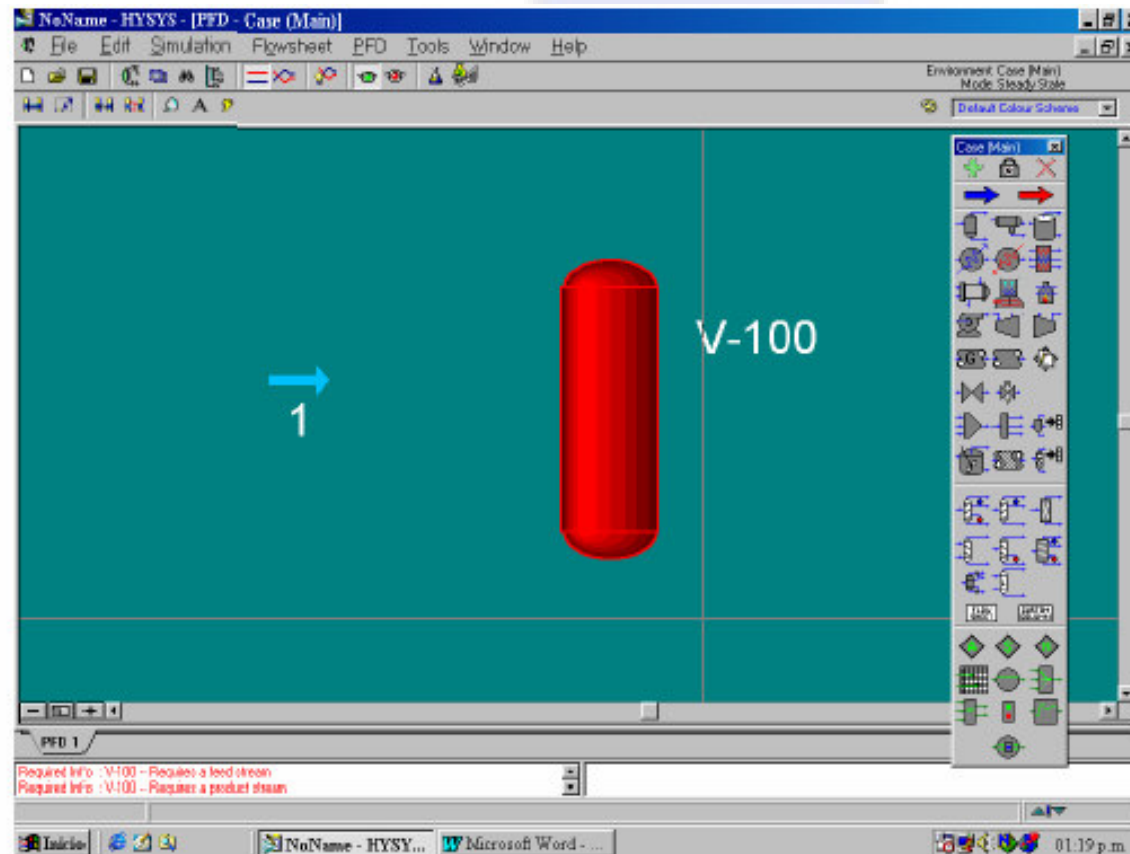


6º Paso: Desarrollo del flowsheet PFD

Para comenzar el *flowsheet* arrastre una flecha color azul llamada *material stream*, la cual se encuentra en un menú flotante.



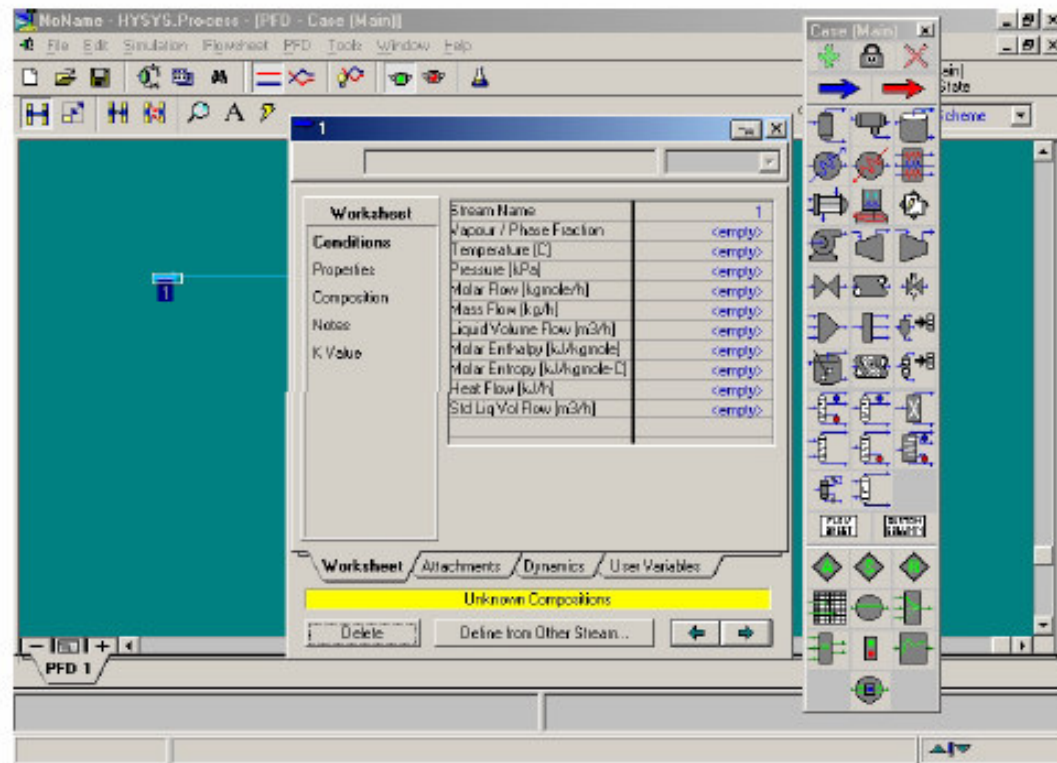
Agregar Equipos y Corrientes de proceso



Como se aprecia en la figura el equipo posee un color rojo, esto significa que aún no se encuentra especificado, en la zona inferior izquierda puede observar dos mensajes en el mismo color: "Required info: V100 Requires a feed stream"

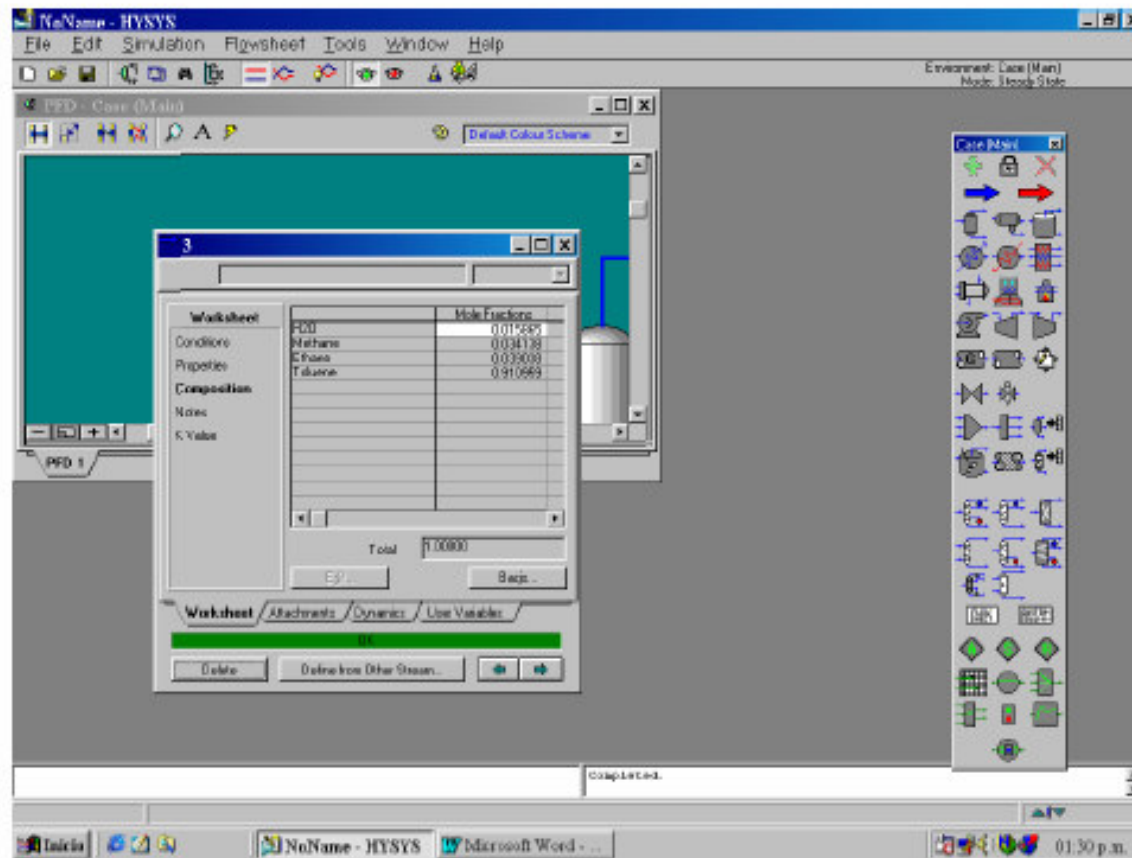
Corrientes (Stream)

Para especificar la corriente existen dos caminos, lo anteriormente señalado, o bien hacer doble clic sobre la corriente color celeste.

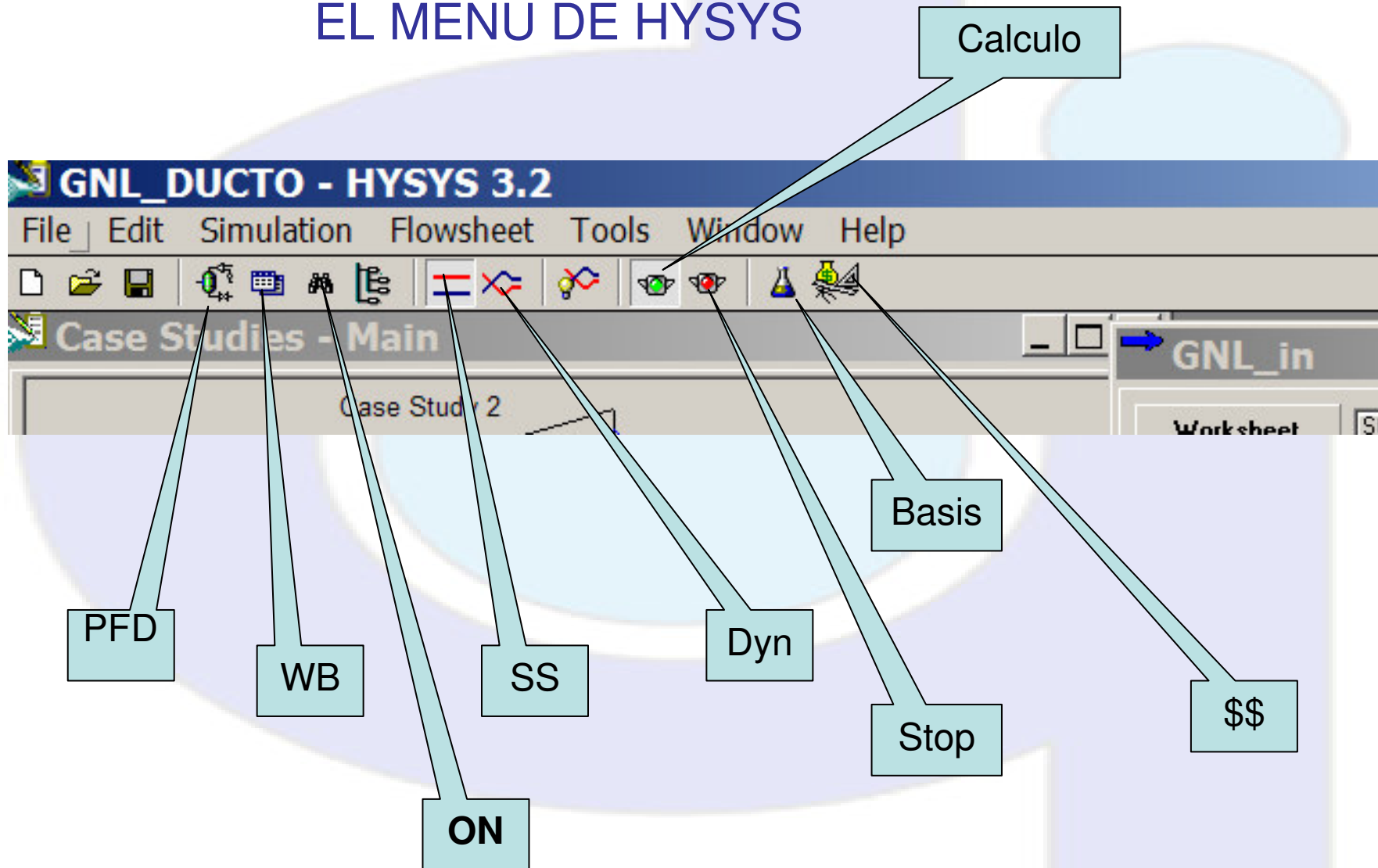


Objetos (corrientes y operaciones) OK en verde

Inmediatamente ingresada la composición la línea amarilla cambiará a verde y se leerá el mensaje *OK*. ¡El equipo ha sido calculado!



EL MENU DE HYSYS



Stream

Unit Op

Op Logicas



Prof. Francisco Cubillos

Stream Principal

→ **GNL_in**

Worksheet

Conditions

Properties

Composition

K Value

User Variables

Notes

Cost Parameters

Stream Name	GNL_in	Vapour Phase	Liquid Phase
Vapour / Phase Fraction	0.9809	0.9809	0.0191
Temperature [C]	0.0000	0.0000	0.0000
Pressure [psig]	950.0	950.0	950.0
Molar Flow [kgmole/h]	8822	8653	168.9
Mass Flow [kg/h]	1.758e+005	1.687e+005	7039
Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	507.1	493.1	14.00
Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-8.637e+004	-8.556e+004	-1.280e+005
Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	143.2	143.9	103.1
Heat Flow [kW]	-2.117e+005	-2.057e+005	-6004
Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	<empty>	<empty>	14.93
Fluid Package	Basis-1		

Worksheet Attachments Dynamics

OK

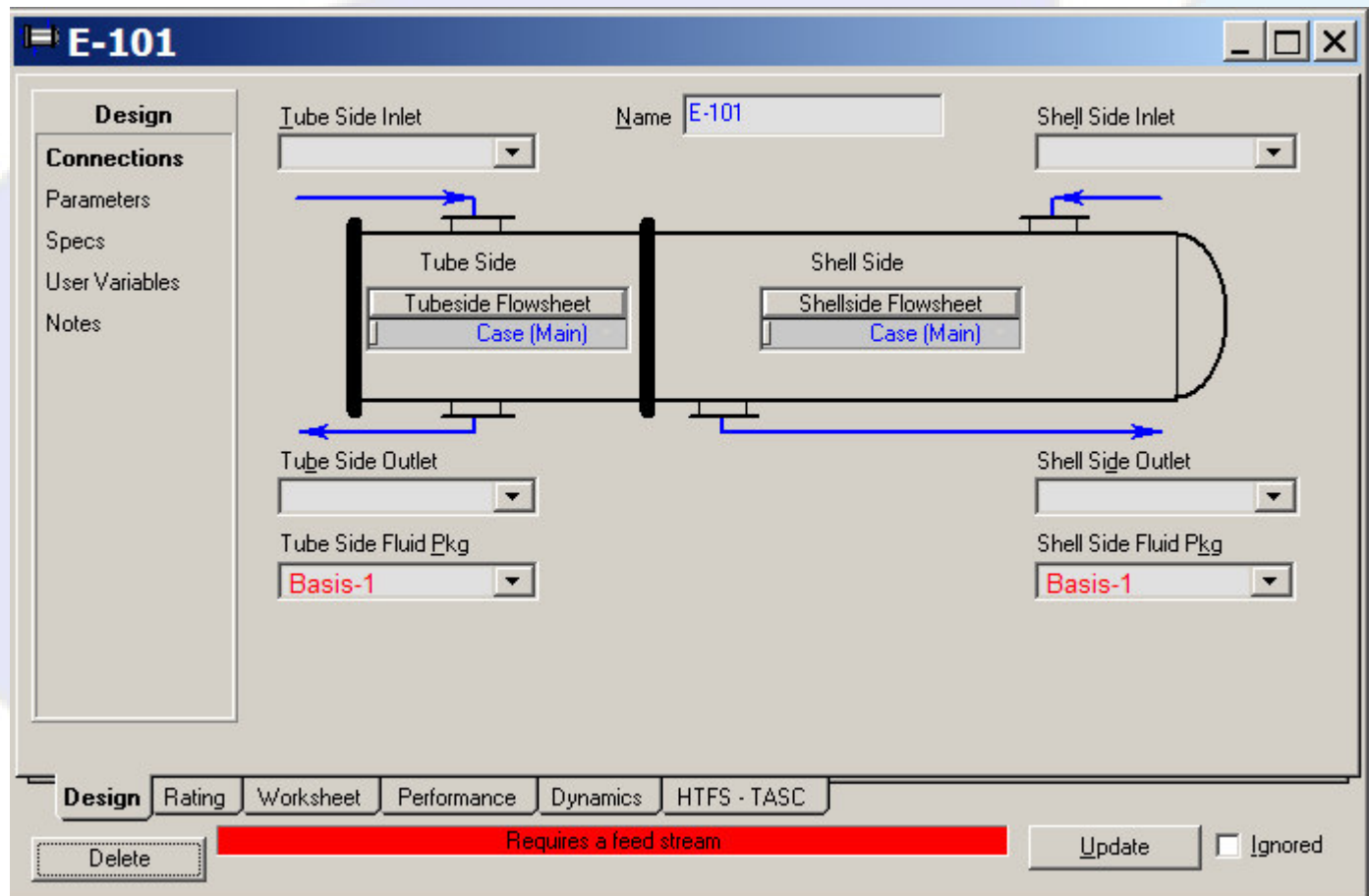
Delete Define from Other Stream...

← →

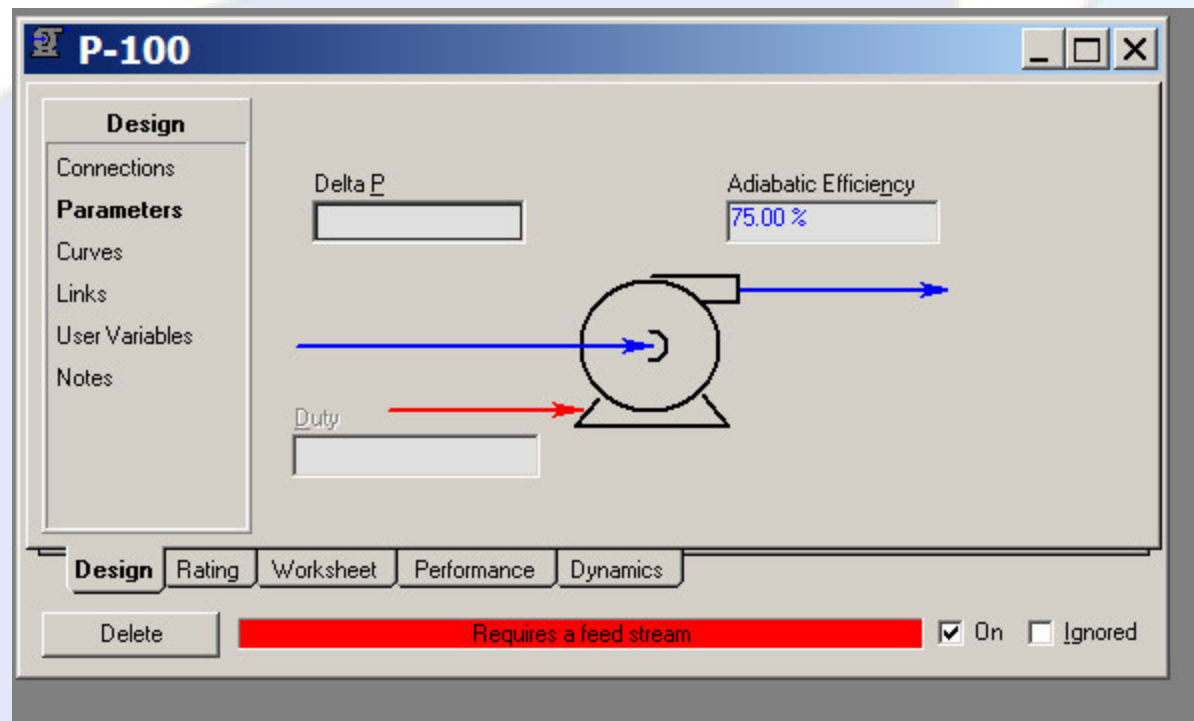
Stream Propiedades

GNL_in				
Worksheet Conditions Properties Composition K Value User Variables Notes Cost Parameters	Molar Density [kgmole/m3]	3.951	3.900	11.97
	Mass Density [kg/m3]	78.72	76.05	498.9
	Act. Volume Flow [m3/h]	2233	2219	14.11
	Mass Enthalpy [kJ/kg]	-4335	-4388	-3071
	Mass Entropy [kJ/kg-C]	7.185	7.381	2.473
	Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	58.66	57.74	105.7
	Mass Heat Capacity [kJ/kg-C]	2.944	2.961	2.536
	Lower Heating Value [kJ/kgmole]	9.074e+005	8.882e+005	1.894e+006
	Mass Lower Heating Value [kJ/kg]	4.554e+004	4.555e+004	4.543e+004
	Phase Fraction [Vol. Basis]	0.9724	0.9724	2.760e-002
	Phase Fraction [Mass Basis]	0.9600	0.9600	4.005e-002
	Partial Pressure of CO2 [psig]	4.657	<empty>	<empty>
	Cost Based on Flow [Cost/s]	0.0000	0.0000	0.0000
	Act. Gas Flow [ACT_m3/h]	<empty>	2219	<empty>
	Avg. Liq. Density [kgmole/m3]	17.40	17.55	12.06
	Specific Heat [kJ/kgmole-C]	58.66	57.74	105.7
	Std. Gas Flow [STD_m3/h]	2.086e+005	2.046e+005	3992
	Std. Ideal Liq. Mass Density [kg/m3]	346.6	342.2	502.8
	Act. Liq. Flow [m3/s]	3.919e-003	<empty>	3.919e-003
	Z Factor	<empty>	0.7509	0.2447
Property Correlation Controls				
Preference Option: Active				
Worksheet Attachments Dynamics				
OK				
Delete Define from Other Stream...				

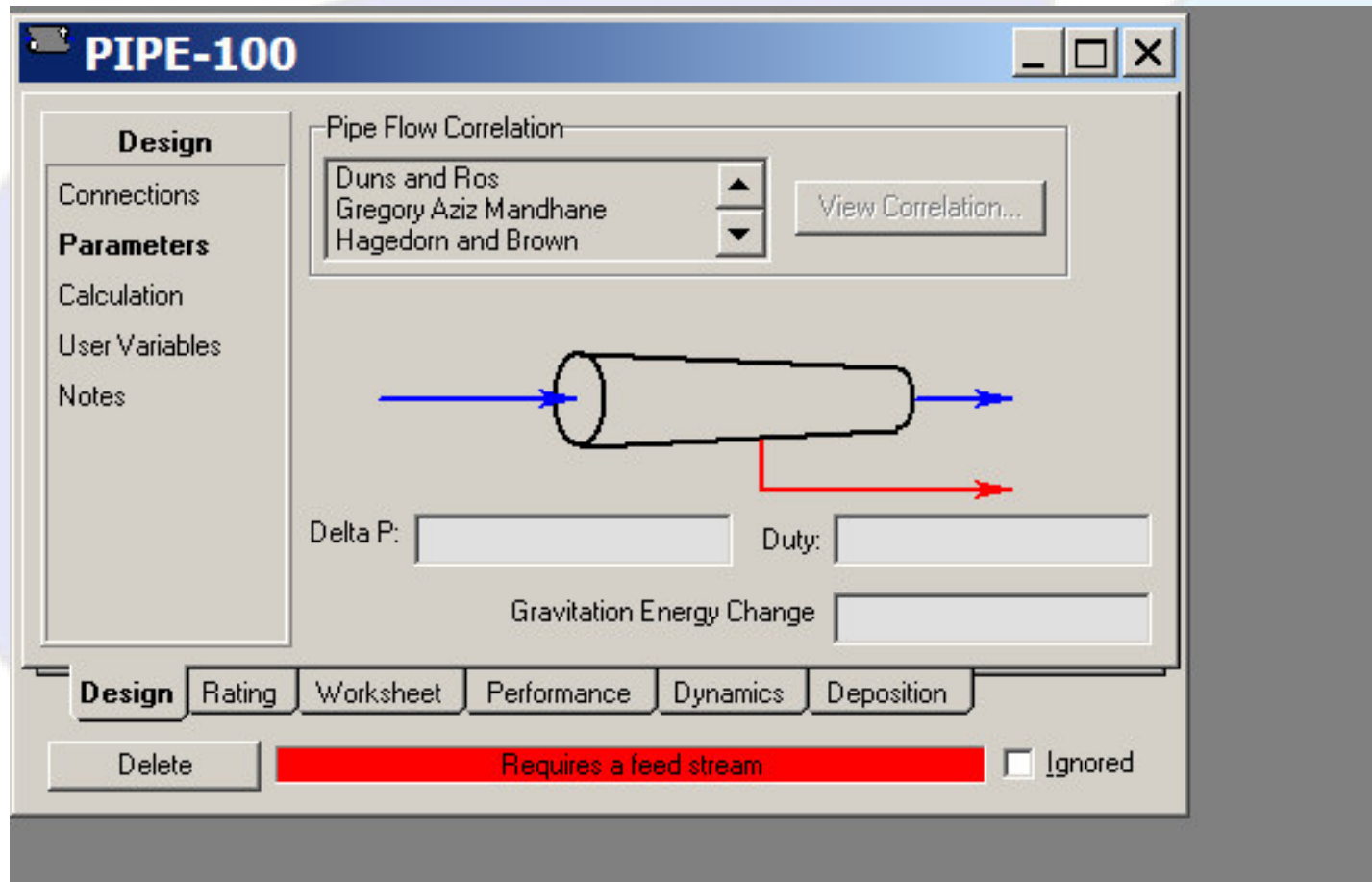
Intercambiador de calor



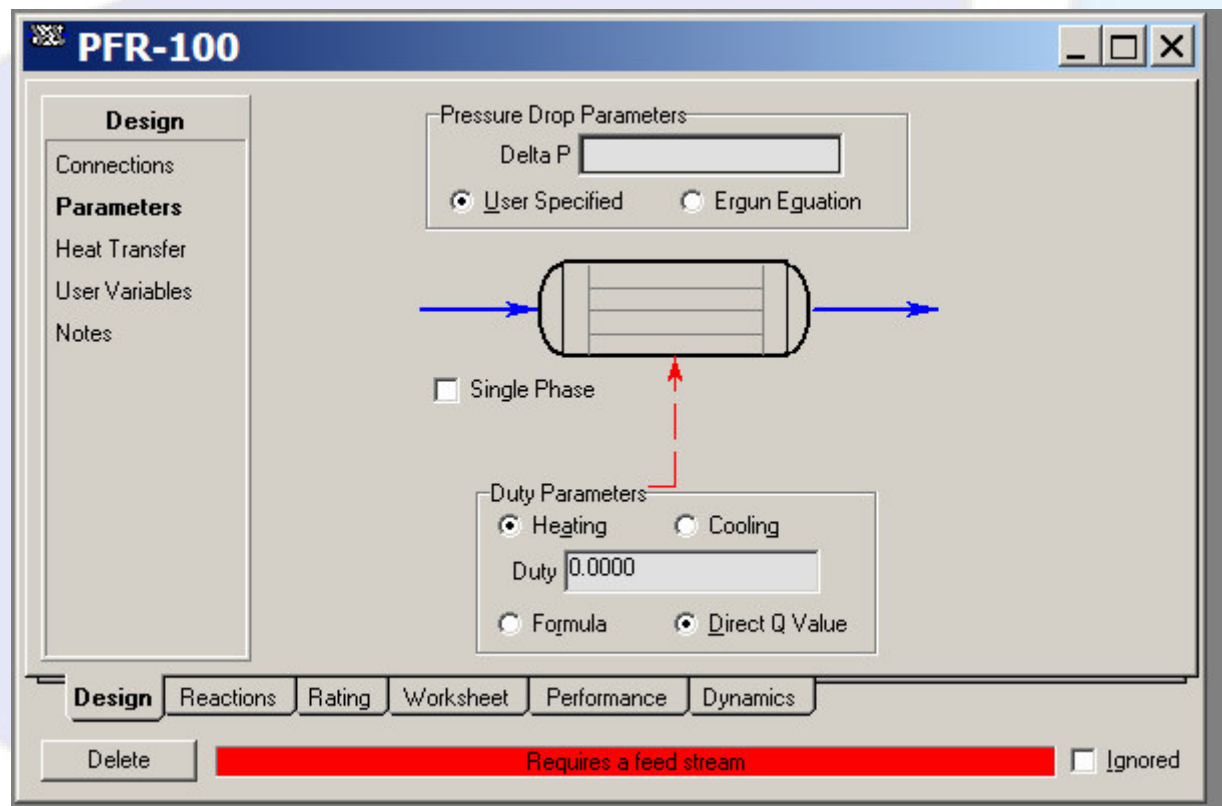
Bomba



Tuberia



Reactor PFR



COLUMNA DESTILACION

Distillation Column Input Expert

Condenser Energy Stream:

Column Name:

Inlet Streams

Stream	Inlet Stage
<< Stream >>	

Stages:

Stage Numbering: ☒ Top Down ☐ Bottom Up

Condenser: ☐ Total ☒ Partial ☐ Full Rflx

Cond Outlets:

☐ Water Draw

Optional Side Draws

Stream	Type	Draw Stage
<< Stream >>		

Reboiler Energy Stream:

Bottoms Liquid Outlet:

< Prev Next >

Connections (page 1 of 4) Cancel

Logicas: Ajuste - planilla calculo

ADJ-1

Adjust Name: **ADJ-1**

Connections

Adjusted Variable

Object: Select Var...

Variable:

Target Variable

Object: Select Var...

Variable:

Target Value

Source

☒ User Supplied ☐ Another Object ☐ SpreadsheetCell Object

Specified Target Value:

Connections Parameters Monitor User Variables

Requires an Adjust connection

Delete Start ☐ Ignored

SPRDSHT-1

Current Cell: Exportable ☐

A1 Variable: Angles in:

	A	B	C	D
1	Q STDCMD	KMOL/H	Poder Calorifico	
2	5.000e+006	8822 kgmole/h	9.952e+005 kJ/kg	
3			9.074e+005 kJ/kg	
4	2.086e+005 STD_r		5.006e+006 STI	
5				
6				
7				
8				

Connections Parameters Formulas **Spreadsheet** Calculation Order es

Delete Function Help... Spreadsheet Only... ☐ Ignored

GNL_DUCTO - HYSYS 3.2

File Edit Simulation Flowsheet Workbook Tools Window Help

Environment: Case (Main)
Mode: Steady State

Simulation Navigator

Filter Types: Object, Status, Flowsheet

Status Legend: OK, Not Solved, Warning, Under-Specified, Error

- Streams
 - Gas_User
 - GATE
 - GNL_in
 - GNL_out
 - Q_Duty
- Vessels
- Heat Transfer Equipment
 - E-100
- Rotating Equipment
- Piping Equipment
 - DUCTO_GNL
 - VLV-100
- Solids Handling Operations
- Reactors
- Prebuilt Columns
- Short Cut Columns
- Standard Sub-Flowsheets
- CDM Hydraulic Sub-Flowsheets
- Logical Operations
 - SPRDSHT-1
- Extension Objects
- Flowsheets

Design

Connections: Inlet (GATE), Fluid Package (Basis-1)

Object Navigator

Flowsheets: Case (Main)

Flowsheet Objects: FeederBlock_GNL_in, Gas_User, GATE, GNL_in, GNL_out, ProductBlock, Q_Duty, **SPRDSHT-1**, VLV-100

Buttons: Build, Find..., View, Cancel, Setup Custom

Workbook - Case (Main)

Name	GNL_in	GNL_out	GATE	Gas_User
Vapour Fraction	0.9809	0.9812	0.9693	1.0000
Temperature [C]	0.0000	0.2851	-14.17	14.00
Pressure [psig]	950.0	890.7	450.0	450.0
Molar Flow [kgmole/h]	8822	8822	8822	8822
Mass Flow [kg/h]	1.758e+005	1.758e+005	1.758e+005	1.758e+005
Liquid Volume Flow [m3/h]	507.1	507.1	507.1	507.1
Heat Flow [kW]	-2.117e+005	-2.113e+005	-2.113e+005	-2.070e+005
Name	** New **			
Vapour Fraction				
Temperature [C]				
Pressure [psig]				
Molar Flow [kgmole/h]				

Material Streams

Compositions, Energy Streams, Unit Ops

FeederBlock_GNL_in

SPRDSHT-1@C2
SPRDSHT-1@C3
SPRDSHT-1@A4

☒ Horizontal Matrix

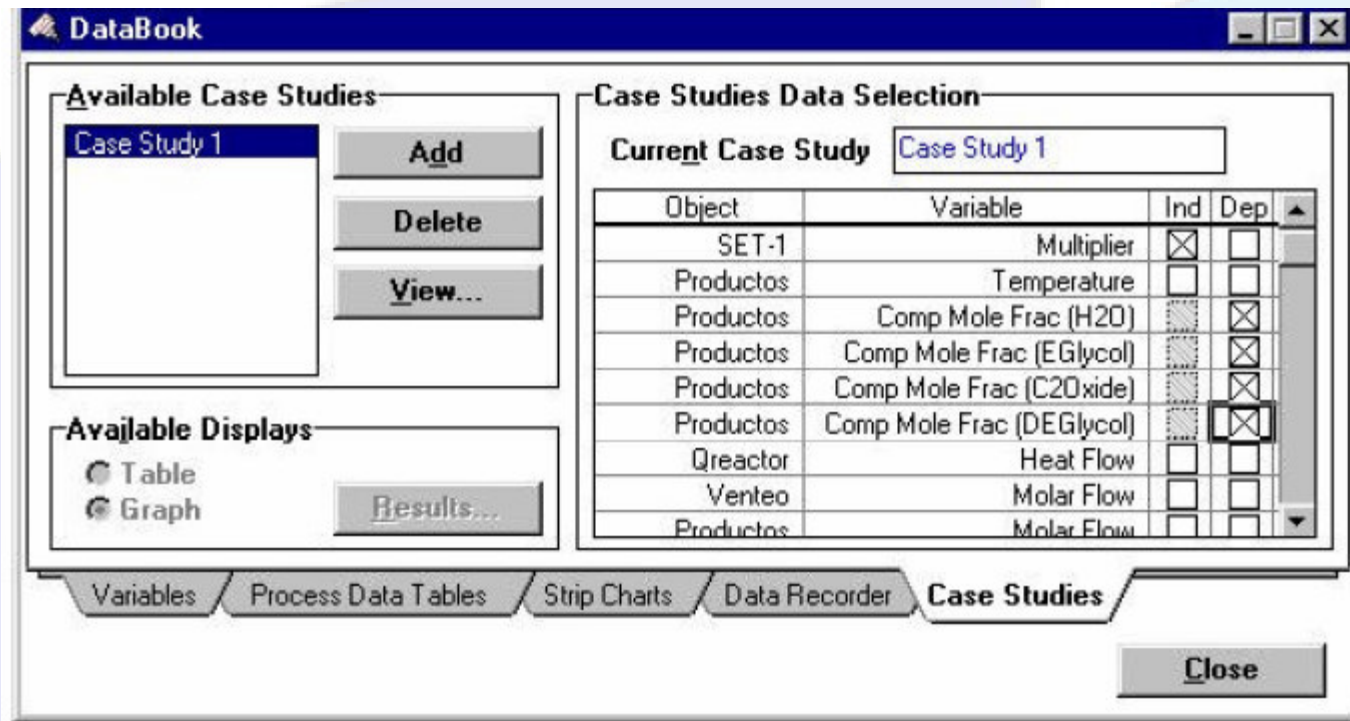
Fluid Pkg: All

☐ Include Sub-Flowsheet
☐ Show Name of Number of Hidden

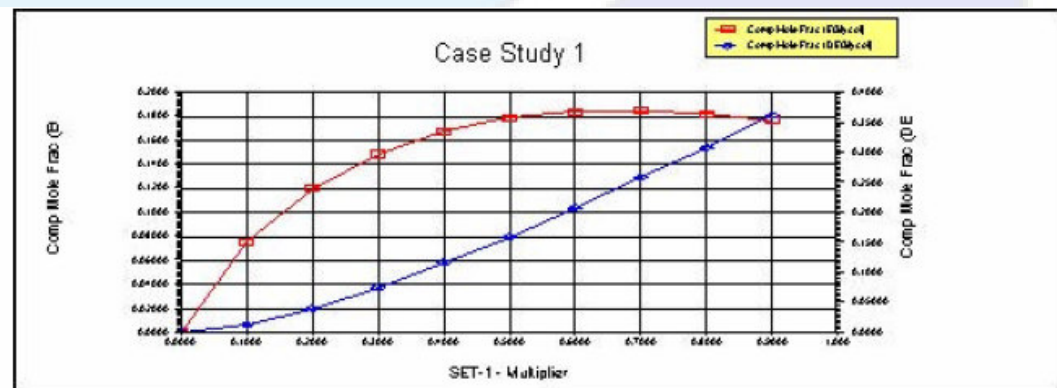
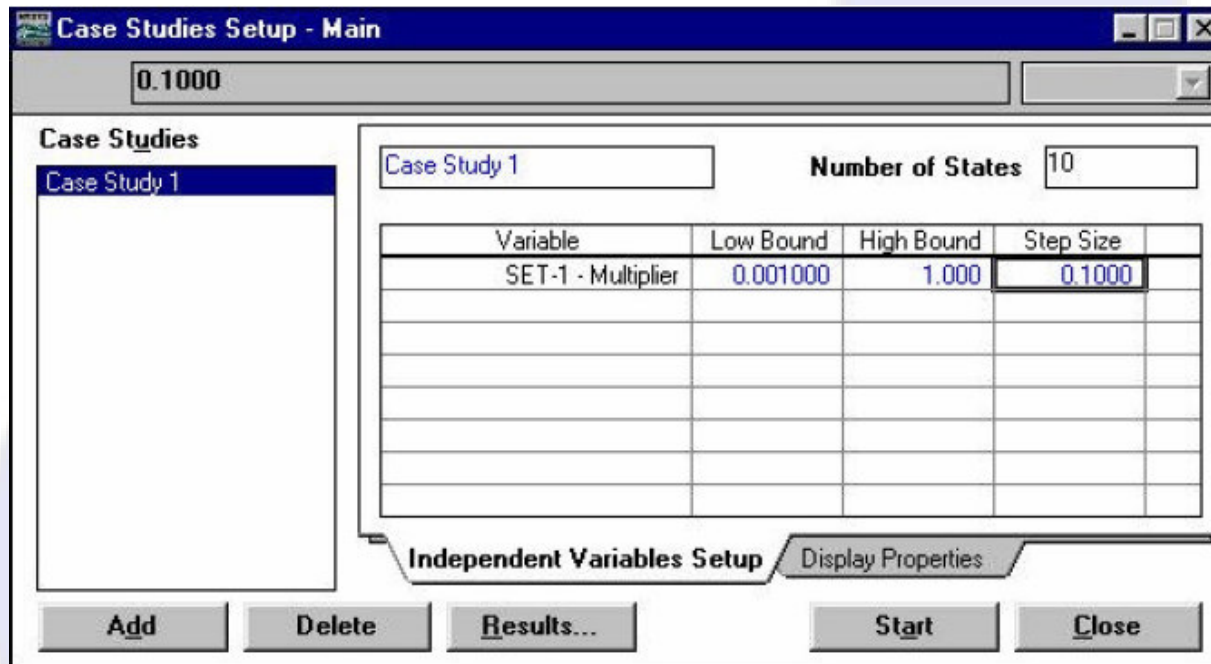
Buttons: Delete, OK

OBJECT NAV – WORKBOOK.-OBJ BROWSER

DataBook : Selecciona reasultados para visualizacion



Casos de estudio: Resultados parametrizados



PAGINAS UTILES

Pagina de manuales Labcontrol : Tutoriales y manuales del programa. SimulatioBasis y OperGuide

http://archivos.labcontrol.cl/HYSYS_DOCUS/

Pagina de Ejemplos U Florida: <http://hysys.che.ufl.edu/>

Portal de Ingeniería Química, <http://www.todoquimica.net>

Tutorial de hysys de todoquimica.net en Labcontrol
tema2, tema3, tema4



www.todoquimica.net

Tema 2

El entorno de Hysys

[Siguiente](#) [Condiciones de uso.](#) [Autor](#)



EJEMPLOS A REALIZAR

- | | |
|--------------------------------|------------------------------|
| • Sistema simple | Obj: Uso de Hysys |
| • Sistema con reciclo | Obj: Estrategia SM |
| • Proceso con Reacción Química | Obj: Incorporar Reaccion |
| • Sistema dinámico | Obj: Simulacion dinamica |
| • Optimización | Obj: Calculo con optimizador |