

UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA NACIONAL - FACULTAD REGIONAL ROSARIO
Departamento de Ingeniería Química

INTEGRACIÓN IV

Año 2001

Introducción al Uso del Simulador HYSYS

Se presenta a continuación una guía paso a paso para realizar la simulación estacionaria y la simulación dinámica de un proceso químico en el ambiente del simulador de procesos Hysys. Se indican las facilidades para construir el flowsheet, resolver los balances de masa y energía, y preparar el caso para correrlo en modo dinámico.

Simulación en estado estacionario

Caso I: Proceso de Producción de Etilen Glicol

El Etilen Glicol (EGlycol) se obtiene por reacción del Oxido de Etileno (C2Oxide) y agua, y posterior separación en una columna de destilación. En la Fig. 1 se presenta el flowsheet del proceso.

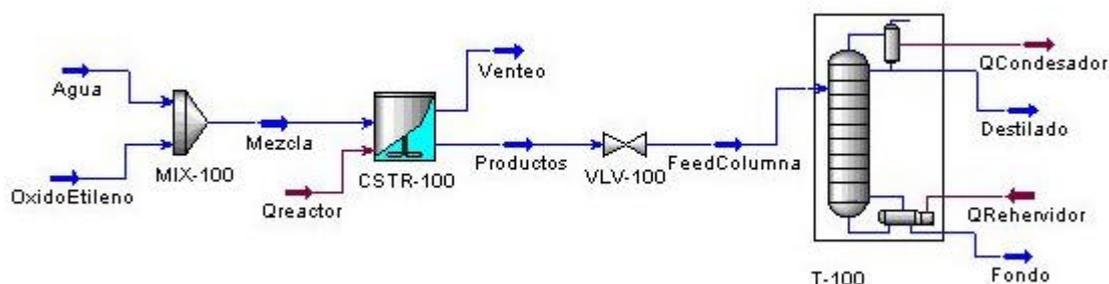


Fig. 1: Diagrama de flujo del proceso de producción de Etilen Glicol

Las condiciones de las corrientes de alimentación al sistema, se indican en la Tabla 1.

Tabla 1

Nombre	Oxido de Etileno	Agua
Fracción de Vapor	-	0
Temperatura (°C)	50	-
Presión (atm)	10	10
Flujo Molar (kgmol/h)	500	-
Composición de las corrientes		
Oxido de Etileno	Fracción Molar: 1.0	Flujo Molar: 0.0 kgmol/hr
Agua	Fracción Molar: 0.0	Flujo Molar: 1000 kgmol/hr
Etilen Glicol	Fracción Molar: 0.0	Flujo Molar: 0.0 kgmol/hr
Dietilen Glicol	Fracción Molar: 0.0	Flujo Molar: 0.0 kgmol/hr

Las corrientes de alimentación se mezclan previamente en un *Mixer*. La corriente resultante ingresa a un reactor tanque agitado continuo que funciona a temperatura constante y a 10 atm de presión. Las reacciones, que se describen en Tabla 2, ocurren en fase líquida. El reactor tiene un volumen de 8 m³,

se supone caída de presión nula y mantiene un nivel de líquido de 85 %. En la Tabla 3 se indican los datos cinéticos.

Tabla 2: Reacciones Químicas

Rx1	H ₂ O	+	C ₂ H ₄ O	→	C ₂ H ₆ O ₂
Rx2	C ₂ H ₄ O	+	C ₂ H ₆ O ₂	→	C ₄ H ₁₀ O ₃

Tabla 3: Datos Cinéticos

Reacción 1: Producción de Etilenglicol $r_1 = A \times e^{\left(\frac{-E}{RT}\right)} x_{H_2O} x_{OE}$ $A = 1.2 \times 10^{16} \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \text{h}}$ $E = 18971.3 \frac{\text{Cal}}{\text{mol}^\circ\text{C}}$	Reacción 2: Producción de Dietilenglicol $r_2 = A \times e^{\left(\frac{-E}{RT}\right)} x_{EG} x_{OE}$ $A = 2.1 \times 10^{16} \frac{\text{kmol}}{\text{m}^3 \text{h}}$ $E = 18971.3 \frac{\text{Cal}}{\text{mol}^\circ\text{C}}$
--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------	--------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------

Comenzando a “dialogar” con el simulador...

Creando un Set de unidades

El primer paso en la construcción de un nuevo caso (New Case) de simulación es elegir el conjunto de unidades con el que se prefiere trabajar. HYSYS no permite modificar los tres conjuntos de unidades básicos (SI, EuroSI, Field) que trae incorporado, pero si posibilita generar a partir de ellos, un nuevo set que se ajuste a nuestras exigencias/preferencias.

1.- Para cambiar las unidades debemos seleccionar **Tools** del menú principal; posicionar el cursor sobre **Preferences**, aparecerá una pantalla titulada **Session Preferences (HYSYS.prf)**. Posicionar el cursor sobre la página **Units** y hacer click; esto puede verse en la Fig. 2. El Set de Unidades por defecto es el conjunto **SI**, pero se puede modificar desde esta pantalla.

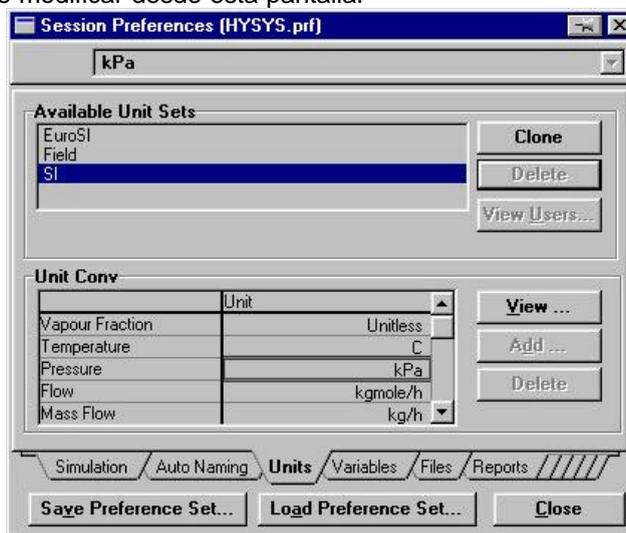


Fig. 2

Para cambiar las unidades utilizadas se procede de la siguiente manera

2.- Click en **SI** en la lista **Available Unit Set** para asegurarnos que éste sea el set activo. Notar que la unidad por defecto para la presión es kPa. Deseamos cambiarla a atm.

3.- Presionar el botón **Clone**. NewUser aparecerá resaltado en **Unit Set Name**. Este es el nombre que asigna HYSYS al nuevo set de unidades; para cambiarlo debemos ingresar **EG** (nombre que decidimos asignarle al set de unidades que se utilizará para este caso) en esta casilla.

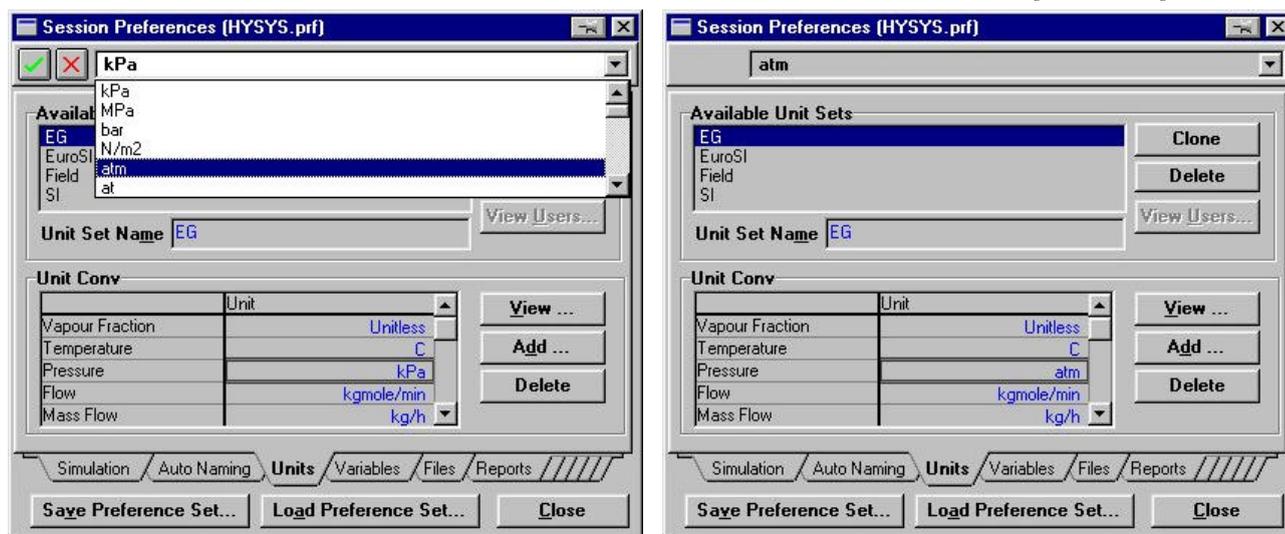


Fig. 3

- 4.- Nos movemos hasta la celda Pressure haciendo click en kPa.
- Abrir la lista desplegable de las unidades disponibles en la Barra de Edición haciendo click en 
- 5.- Haciendo click en atm, seleccionaremos la nueva unidad.

El nuevo conjunto de unidades queda así definido. Presionando el botón **Close** se regresa al entorno de simulación.

Inicio de la simulación: Construcción del Flowsheet

Si hay otros casos en uso, es conveniente cerrarlos. Para ello, seleccionar **Close All** del menú **File**. Comenzar un nuevo caso seleccionando → **File** → **New** → **Case** tal como se muestra en la Fig. 4.

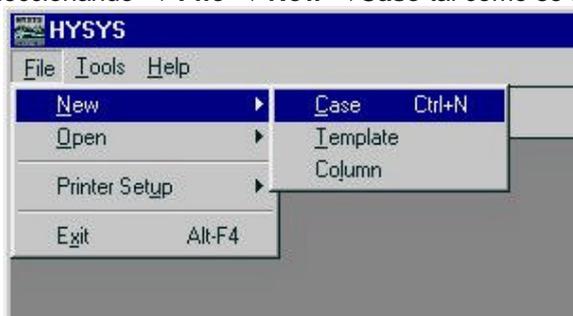


Fig. 4

Aparecerá la ventana del **Simulation Basis Manager** como se muestra en la Fig. 5.

El próximo paso es crear el **Fluid Package**. Este contiene los componentes y el método elegido para la predicción de propiedades fisico-químicas.

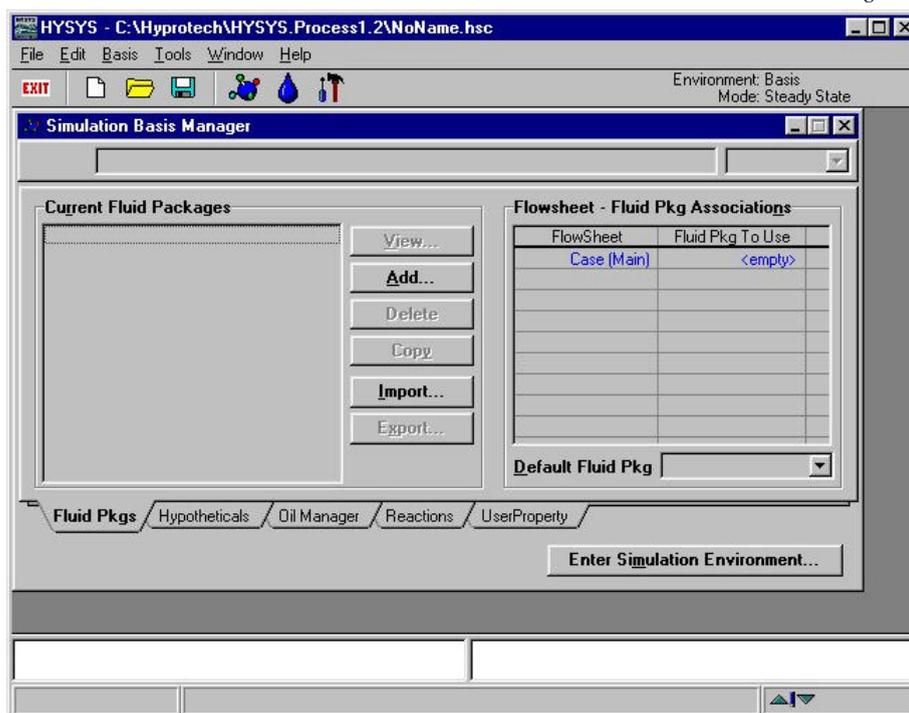


Fig. 5

Para agregar un nuevo **Fluid Package**, estando en la página **Fluid Pkgs**, presionar el botón **Add**. La elección del paquete de propiedades se realiza en la página **Prop Pkg**. Para nuestro ejemplo utilizaremos Wilson.

Utilizando la barra de desplazamiento buscar **Wilson** en la lista **Base Property Package Selection**. Ubicar el cursor sobre la palabra **Wilson** y hacer click. Aparecerá un cartel en amarillo con la leyenda **Wilson** al pie de la ventana, como se muestra en la Fig. 6

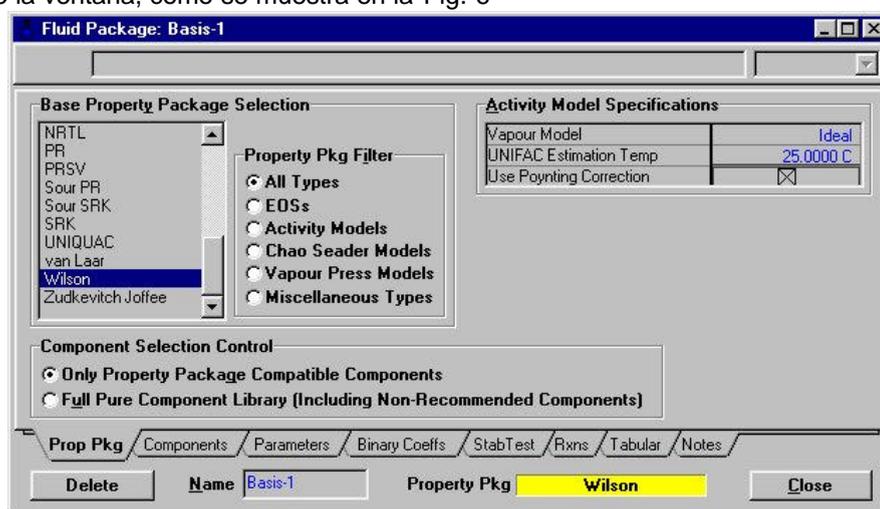


Fig. 6

El siguiente paso es agregar los compuestos utilizados en el caso, para ello seleccionar la página **Components** como se muestra en la Fig. 7.

En la celda **Match**, ingresar "water". Una vez que aparece el componente en azul, presionar el botón **Add pure**. En la sección **Current Component List** aparecerá H₂O.

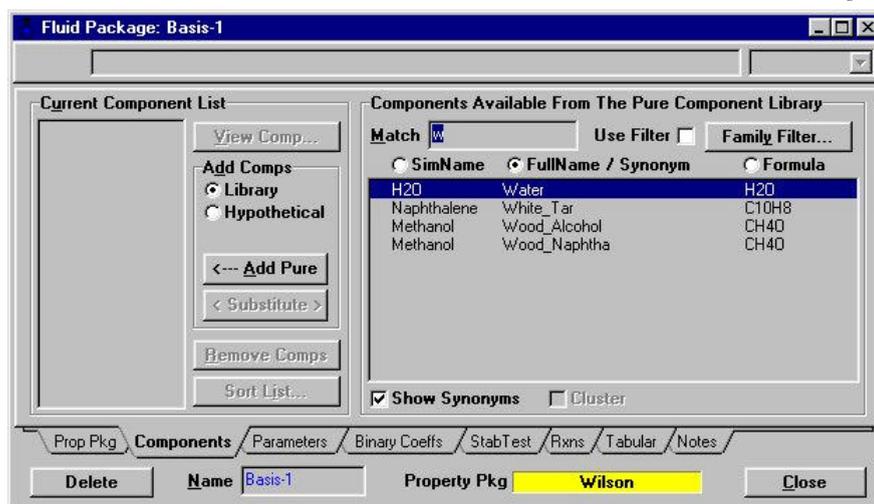


Fig. 7

Volver a la celda **Match**, hacer click, borrar *Water* e ingresar *Ethylene_Glycol*, presionar **Add pure**.
 Volver a la celda **Match**, ingresar *EthyleneOxide*, presionar el botón **Add pure**.
 Repetir para el último componente, ingresando *Ethylene_Diglycol*

Una vez seleccionados todos los componentes aparecerá en la pantalla, dentro de la sección **Current Component List**, una lista con los cuatro componentes adicionados.



Fig. 8

Cálculo de los coeficientes binarios faltantes

Ir a la página **Binary Coeffs**, si aparecen algunos coeficientes binarios sin calcular (esto es, si hay guiones de color rojo), presionar el botón **Unknowns Only** tal como se muestra en la Fig. 9.

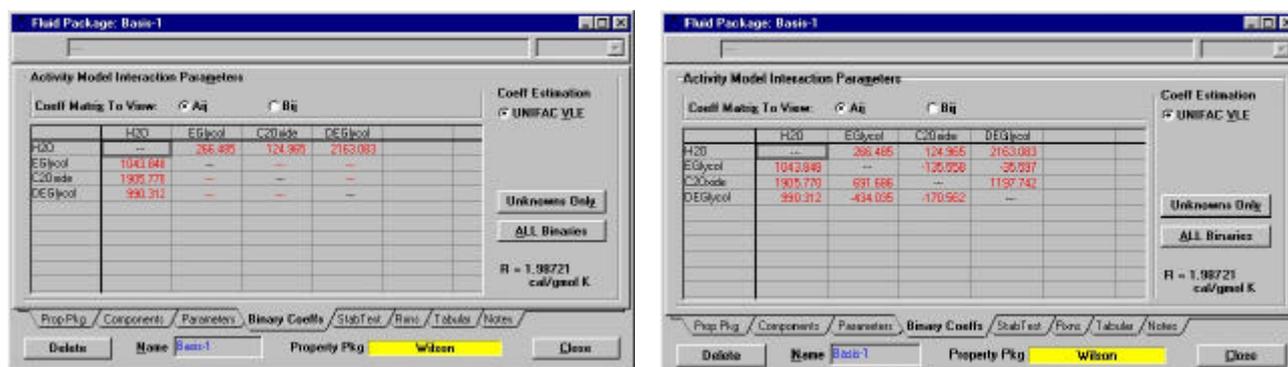


Fig. 9

Definición de la reacción química

Recordemos que la definición de la reacción química pertenece a las actividades básicas o preliminares. Por lo tanto, lo primero que debemos hacer es acceder al denominado **Basis Manager**, si es que no estamos allí. Para ello se puede seleccionar el botón:



Si estamos en la ventana **Fluid Package** se puede proceder de la siguiente manera:

Ir a la página **Rxns**.

Presionar el botón **Simulation Basis Mgr...**, aparece la pantalla **Simulation Basis Manager**. Ver Fig. 10.

Ir a la página **Reactions**.

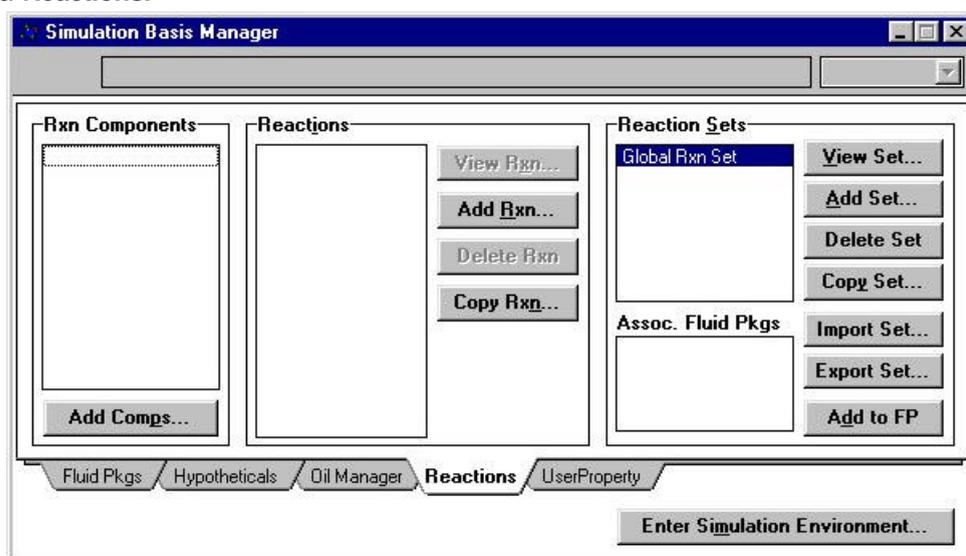


Fig. 10

Presionar el botón **Add Comps...**, aparecerá la pantalla **Reaction Component Selection**.

Presionar el botón **Add this Group of Components**. Aparecerán los componentes en el recuadro **Selected Reaction Components**.

Presionar el botón **Close**. Ver Fig. 11

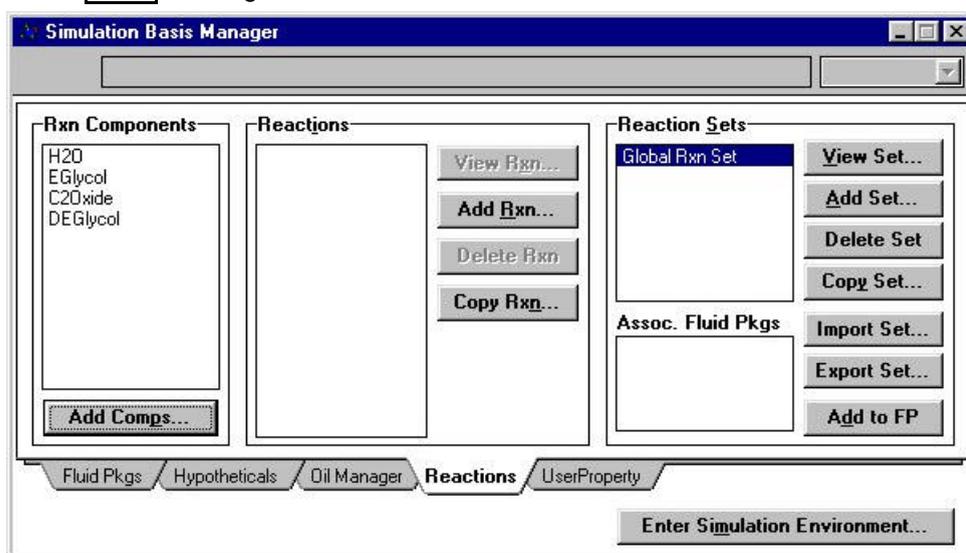


Fig. 11

Presionar el botón **Add Rxn...**, aparecerá una pantalla titulada **Reactions**. Ver Fig. 12.

Seleccionar el tipo de reacción: posicionar el cursor sobre **Kinetic**. Presionar el botón **Add Reaction**. Aparecerá la pantalla **Kinetic Reaction: Rxn-1**, en su primera página: **Stoichiometry**.

Agregar los componentes de la reacción seleccionándolos de la lista desplegable en el campo superior de la pantalla. Aparecerán los pesos moleculares de cada componente. En primer lugar definiremos la reacción para la obtención del Etilenglicol, por lo tanto se seleccionan los compuestos H₂O, EGlycol y C₂Oxide. Ver Fig. 13

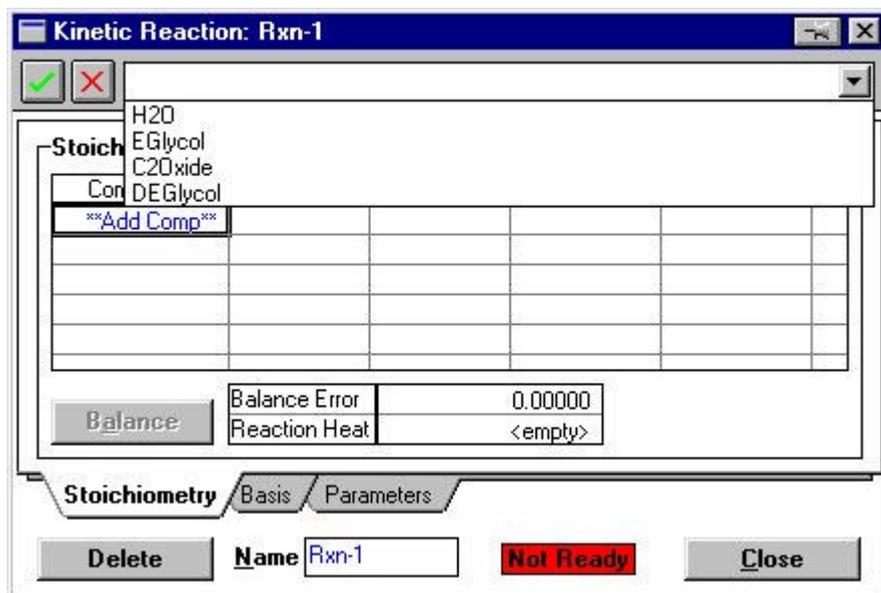


Fig. 13



Fig. 12

Completar los coeficientes estequiométricos, recordando que se deben asumir valores negativos cuando los coeficientes correspondan a reactivos. Verificar que el campo denominado **Balance Error** sea igual a cero. Nótese que los órdenes de reacción aparecen automáticamente, y son iguales a los coeficientes, pero pueden ser modificados ya que HYSYS los ha colocado en color rojo.

Pasar a la página **Basis**. Ver Fig. 14. En el campo **Basis** seleccionamos **Mole Fraction**. En el campo **Base Component** colocar **C₂Oxide** seleccionándolo de la lista desplegable del campo superior. En el campo **Rxn Phase**, colocar **LiquidPhase**, también seleccionándolo de la lista desplegable del campo superior. Tomar en cuenta las unidades de velocidad utilizadas, las cuales son independientes del Set de Unidades seleccionado, y son las que determinarán las unidades de la constante en la ecuación de Arrhenius.

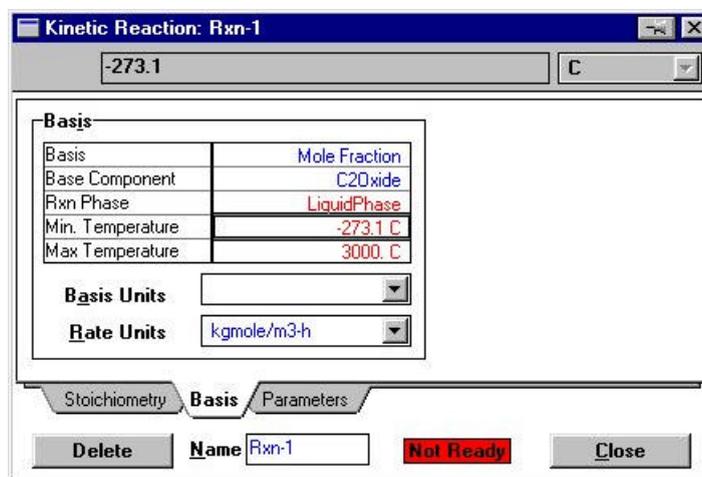


Fig. 14

Pasar a la página **Parameters** e ingresar los valores de los parámetros de la reacción con las unidades que correspondan. Para el caso de E, es posible ingresar el valor y seleccionar la unidad correspondiente de la lista desplegable, en nuestro caso podemos ingresar E con el valor dado al inicio y seleccionar cal/gmol de la lista desplegable (Ver Fig. 15). Una vez ingresados los parámetros de la reacción directa, el cartel en rojo **Not Ready** cambiará por el de **Ready** en color verde. Esto significa que para HYSYS estos datos son suficientes ya que hemos elegido una reacción cinética y no una cinética reversible, y si bien se podrían agregar los datos para la reacción indirecta, esto no es necesario. Presionar el botón **Close**.

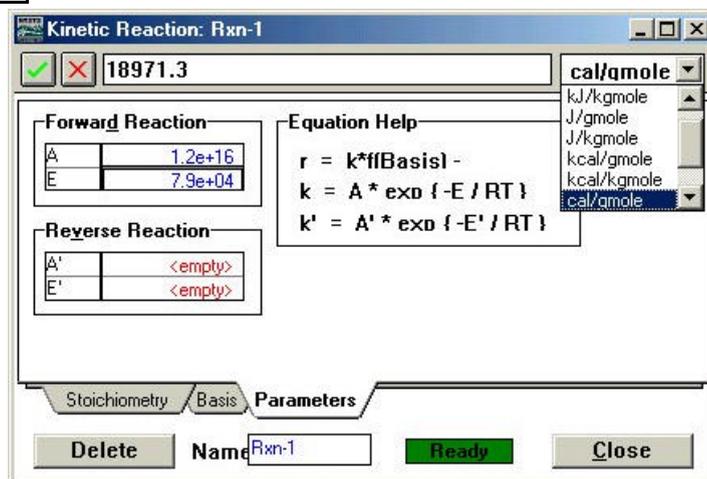


Fig. 15

Hasta aquí hemos definido la primera de las reacciones consideradas. Es necesario definir la reacción correspondiente a la obtención del DEGlycol. Por lo tanto, solo basta repetir los pasos enunciados anteriormente cambiando la estequiometría y los parámetros cinéticos A y E.

Las reacciones que hemos definido se encuentran en el Grupo de Reacciones denominado **Global Rxn Set**, y es necesario adicionarlo al Paquete de propiedades que hemos definido, para ello, posicionados en la página **Reactions** de la vista **Simulation Basis Manager**, seguir los siguientes pasos:

Presionar el botón **Add to FP**. Aparecerá una pantalla titulada **Add 'Global Rxn Set'**, seleccionar con el cursor el Paquete de Propiedades **BASIS-1 NC:4 PP:Wilson**, y cuando se haya coloreado en azul, presionar el botón **Add Set to Fluid Package**. La palabra **Basis-1** aparecerá en el recuadro **Assoc. Fluid Pkgs.** Ver Fig. 16

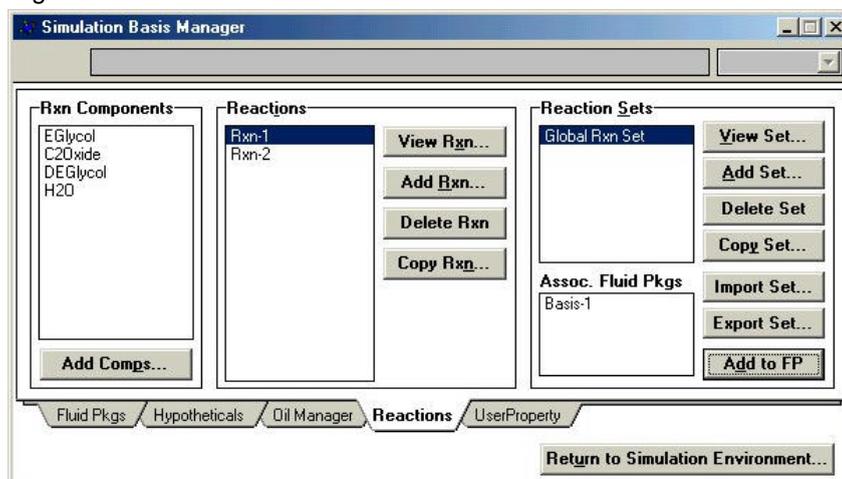


Fig. 16

Hasta aquí hemos definido las bases de nuestro caso. Presionando el botón **Enter to Simulation Enviroment** se ingresa al ámbito de simulación.

Entorno de Simulación

Al ingresar al ámbito de simulación, aparecerá una ventana denominada PFD en la cual se irá construyendo el caso, y se visualizará además la plantilla de operaciones denominada Object Palette (ver Fig. 17). Esta herramienta contiene en forma de iconos, las diversas operaciones unitarias que se utilizan en la construcción de casos de simulación. Presionando la tecla F4 la misma se activa o desactiva.

Para construir un caso se puede comenzar de diferentes modos, nosotros elegiremos el siguiente:

1.- Definir las corrientes de alimentación.

Primero activaremos la planilla para el ingreso de datos denominada Workbook

presionando el botón 

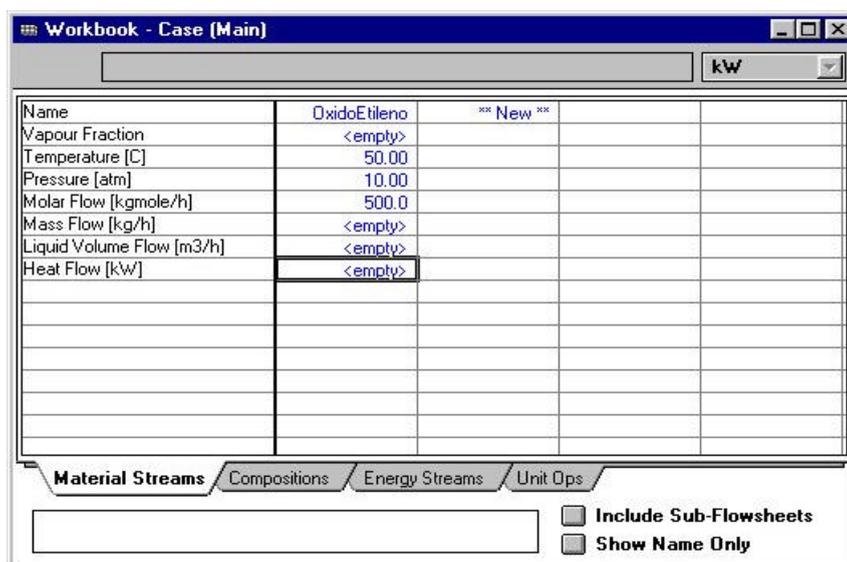
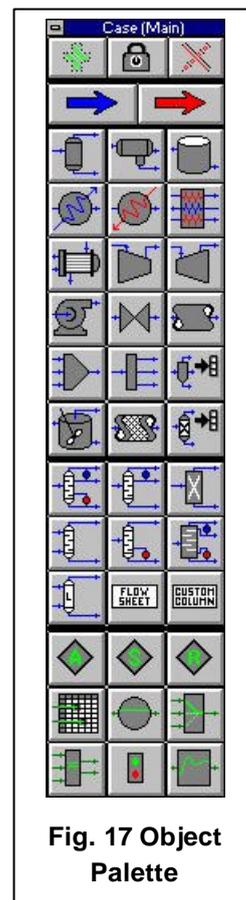
En la página **Material Streams**, posicionarse en la celda ****New**** y agregar los siguientes datos:

Name	OxidoEtileno	Agua
Vapour/Phase Fraction	-	0
Temperature (C)	50	-
Pressure (atm)	10	10
Molar Flow (kgmol/h)	500	1000

Una vez ingresados estos valores se puede observar que las demás celdas permanecen con la palabra <empty>, porque aún es necesario agregar la composición de cada corriente. Ver Fig. 18

Seleccionar la página **Compositions**, y agregar las composiciones molares para cada componente:

Name	OxidoEtileno	Agua
Comp Mole Frac (H2O)	0	1
Comp Mole Frac (EGycol)	0	0
Comp Mole Frac (C2Oxide)	1	0
Comp Mole Frac (DEGlygol)	0	0



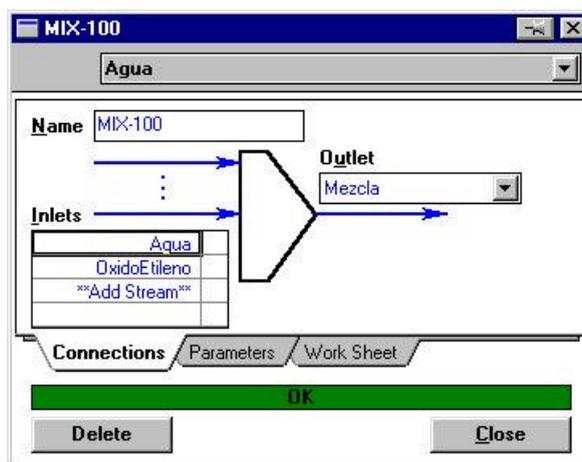


Fig. 21

Parameters: Se puede continuar sin modificar los valores de esta página.

4.- Seleccionar el **Reactor de Tanque Agitado (CSTR)**

Posicionar el cursor sobre el icono del CSTR de la paleta de objetos (Object Palette), y hacer click, luego posicionar el cursor en la posición del PFD dónde deseamos ubicar el reactor, y hacer nuevamente click, aparecerá el diseño del reactor. Ver Fig. 22.

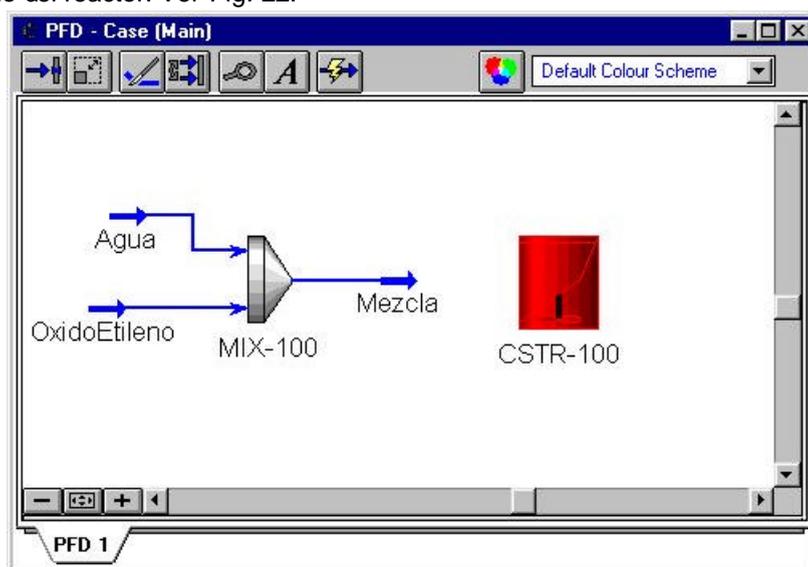


Fig. 22

5.- Definir los parámetros del reactor

Hacer doble click sobre el icono del reactor, aparecerá una pantalla titulada **CSTR: CSTR -100**, en su primera página. Aquí debemos definir:

Connections: Podemos ingresar varias corrientes de alimentación (**Feeds**). Posicionar el cursor en **<New Feed>**, abrir la lista desplegable de la barra situada en la parte superior de esta pantalla. Seleccionar **Mezcla** con el cursor, y automáticamente aparecerá esta corriente como alimentación del reactor.

Posicionarse en la celda **Vapour Outlet** e ingresar el nombre **Venteo**, hacer lo mismo en la celda **Liquid Outlet** ingresando la palabra **Productos**, y luego en **Energy (Optional)** ingresar **Qreactor**. Aparecerá un cartel en amarillo con la leyenda **Not Solved**, pues aún faltan datos para que HYSYS pueda efectuar los cálculos.

Parameters: aquí se encuentran colocados por defecto el volumen del reactor. En la sección **Optional Heat Transfer** seleccionar **Cooling**, ya que la reacción es exotérmica.

Reactions: abrir la lista desplegable en la celda **Reaction Set** y seleccionar **Global Reaction Set**. Aparecerá un cartel verde con la leyenda **Ready**. Esto significa que ha sido asignada una reacción al reactor. En la sección **Vessel Parameters**, modificar el volumen del reactor a 8 m³ y el nivel del líquido (**Liquid Level**) a 85%. Ver Fig. 23

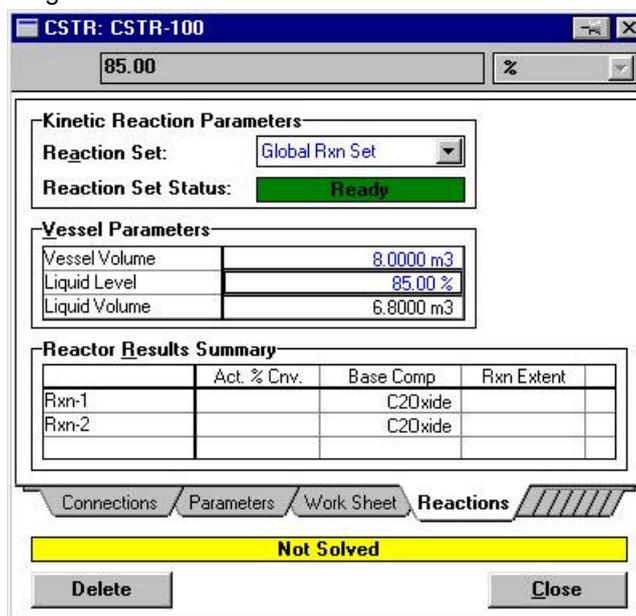


Fig. 23

Worksheet: en esta página observamos todas las corrientes que entran o salen del reactor, mientras en la parte inferior se observa la leyenda **Not Solved** en color amarillo, esto es porque HYSYS no dispone de todos los datos necesarios para resolver el modelo del reactor. El reactor puede funcionar de las siguientes maneras:

I) **Isotérmico:** Para ejemplificar ingresar el valor 98.6212 °C (valor correspondiente a la mezcla de reactivos) en la celda de temperatura de la corriente **Productos**. La leyenda **Not Solved** debe cambiar a **OK**, en color verde. Ver Fig. 24. Nótese que se han completado todos los valores de las corrientes **Productos** y **Venteo**. Podemos ir a la página **Reactions** para ver el % de conversión alcanzado.

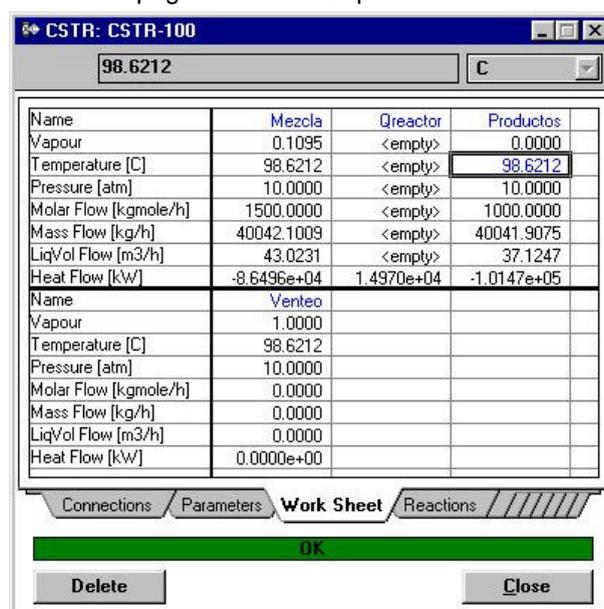


Fig. 24

II) **Adiabático:** volver a la página Worksheet, posicionar el cursor sobre la temperatura de la corriente **Productos** y presionar **<SUPR>**, con ello se volverá al valor original **<empty>** de ésta celda y de todas

las que se calcularon a partir de ella. Luego posicionarse en **Heat Flow** de la corriente **Qreactor** e ingresar el valor cero. HYSYS comienza a calcular y después de algunos momentos mostrará los valores calculados (271 °C para los productos), con una conversión del 100%. Analizar estos resultados.

III) Politrópico: Siguiendo los procedimientos anteriores se pueden resolver casos de funcionamiento no isotérmico-no adiabático. En este caso ingresar 180°F en la celda de temperatura de la corriente **Productos**.

El PFD desarrollado hasta este momento debe modificarse, si es necesario, para que su apariencia sea similar a la Fig. 25. Grabar el caso seleccionando File → Save .

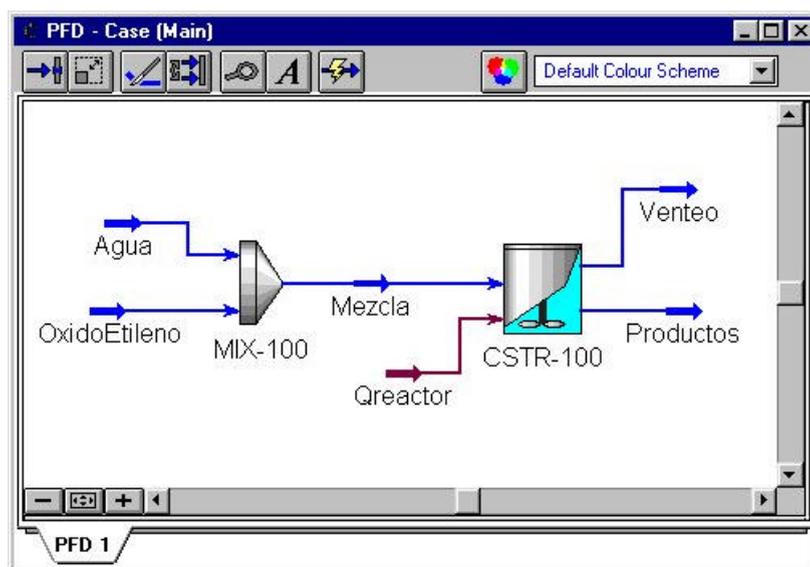


Fig. 25

Aparecerá la casilla de diálogo *Save Simulation Case As*.

b) Escribir un nuevo nombre, por ejemplo CASOEG, en la celda File Name. Nótese nuevamente que no es necesario ingresar la extensión .HSC; HYSYS lo añadirá automáticamente.

c) Presionar el botón OK, y HYSYS salvará el caso bajo el nuevo nombre.

Uso de Case Studies

Con el objeto de realizar un estudio sobre la reacción de obtención de Etilenglicol para diferentes condiciones operativas, se puede hacer uso de una de la posibilidades ofrecidas a través de la herramienta Databook, estudios sobre un caso o Case Studies.

En primer termino analizaremos la influencia producida por la relación de reactivos. Para poder especificar el valor de una variable de una corriente dada en función del valor tomado de otra variable se hace uso de la operación **SET**. Ver Fig. 26.

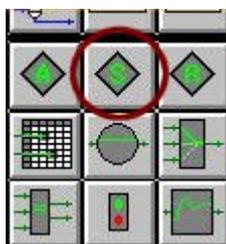


Fig. 26

Eliminar la especificación de flujo molar en la corriente **OxidoEtileno**. Notar que al eliminar el valor, HYSYS no puede calcular completamente la corriente.

Hacer doble clic sobre el icono del **SET**. En el grupo **Target Variable** presionar el botón **Select Var...**. Ingresar la propiedad **Molar Flow** de la corriente **OxidoEtileno** como variable objetivo según se muestra en la Fig. 27.

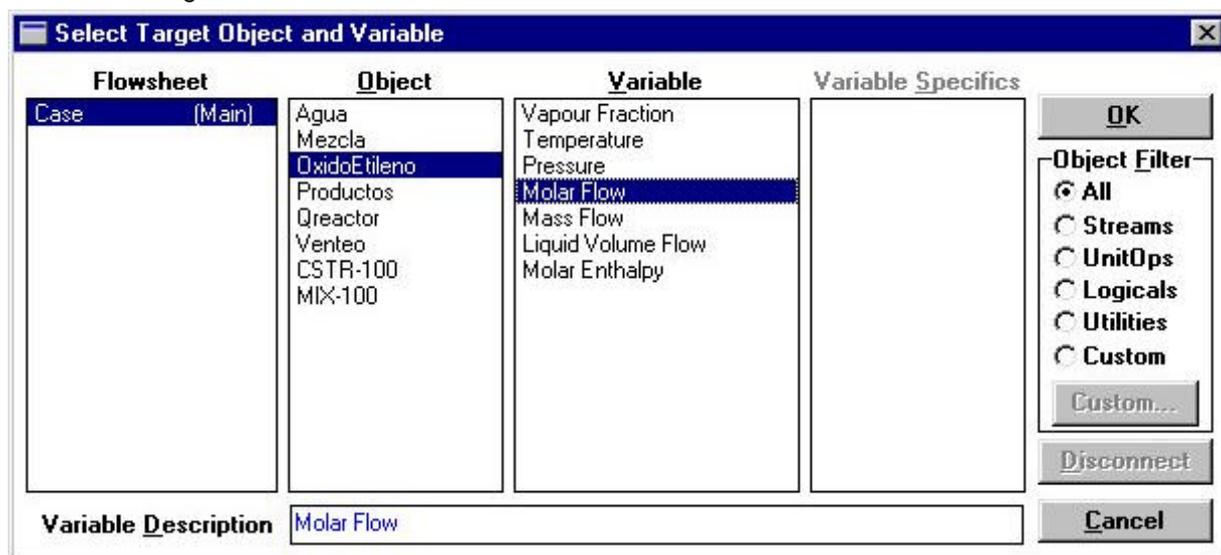


Fig. 27

En el grupo **Source** seleccionar como variable fuente la corriente **Agua**. Ver Fig. 28. De esta manera el caudal molar de Oxido de Etileno será función lineal del caudal molar de la corriente de agua. Es necesario ahora especificar el valor de los parámetros que determinan esta función. En la sección **Parameters** es necesario definir el factor multiplicador que en nuestro ejemplo utilizaremos 0.5 por el momento. Ver Fig. 29. De esta manera el caudal molar de Oxido de Etileno será la mitad del de Agua.



Fig. 28

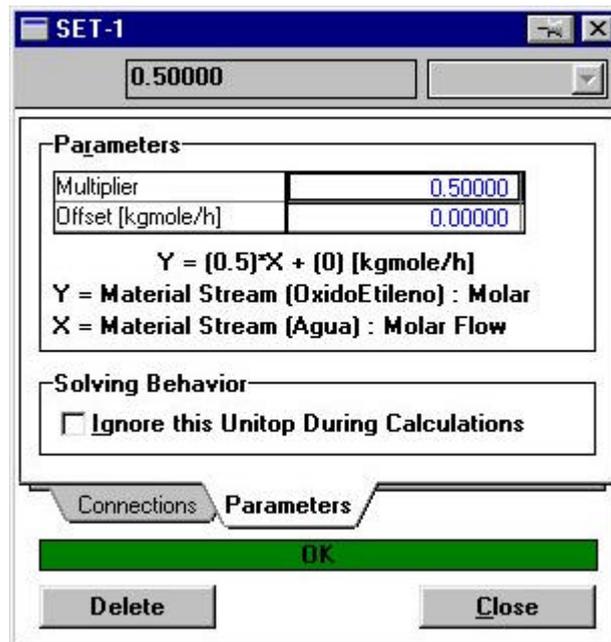


Fig. 29

A continuación utilizaremos la herramienta **Databook** para seleccionar las variables involucradas en el análisis.

En primer lugar, seleccionaremos **Databook** del menú **Tools**, aparecerá una pantalla con varias páginas como se muestra en la Fig. 30.

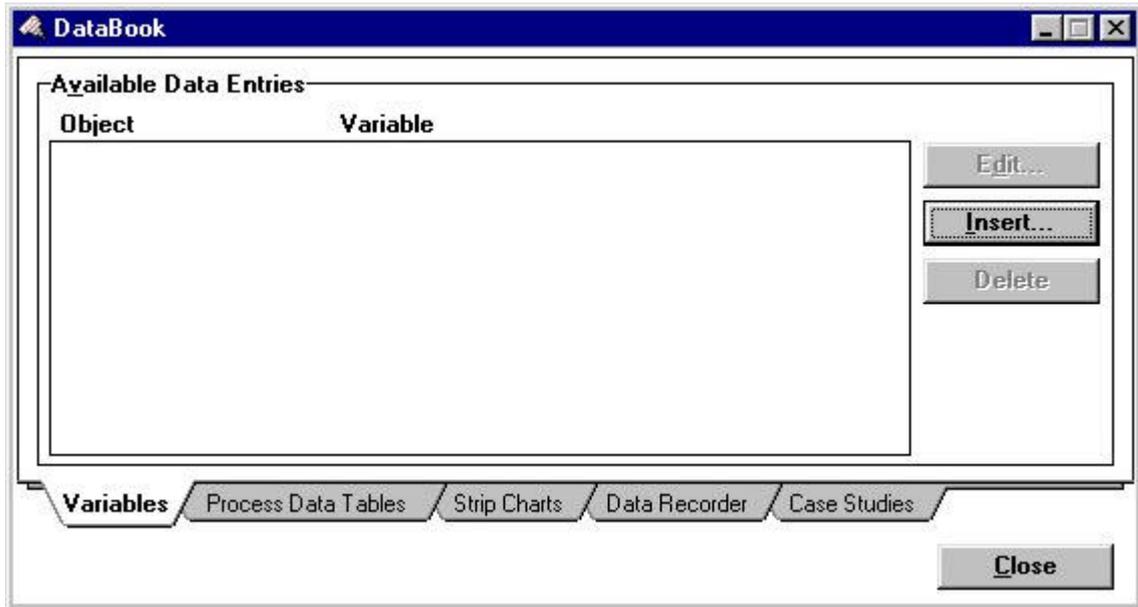


Fig. 30

La primer sección **Variables** se utiliza para seleccionar las variables a estudiar. Presionamos el botón **Insert**, y seleccionamos **SET-1** de la columna **Object** y luego **Multiplier** de la columna **Variable**. Ver Fig. 31 . Presionar el botón **OK** al finalizar.

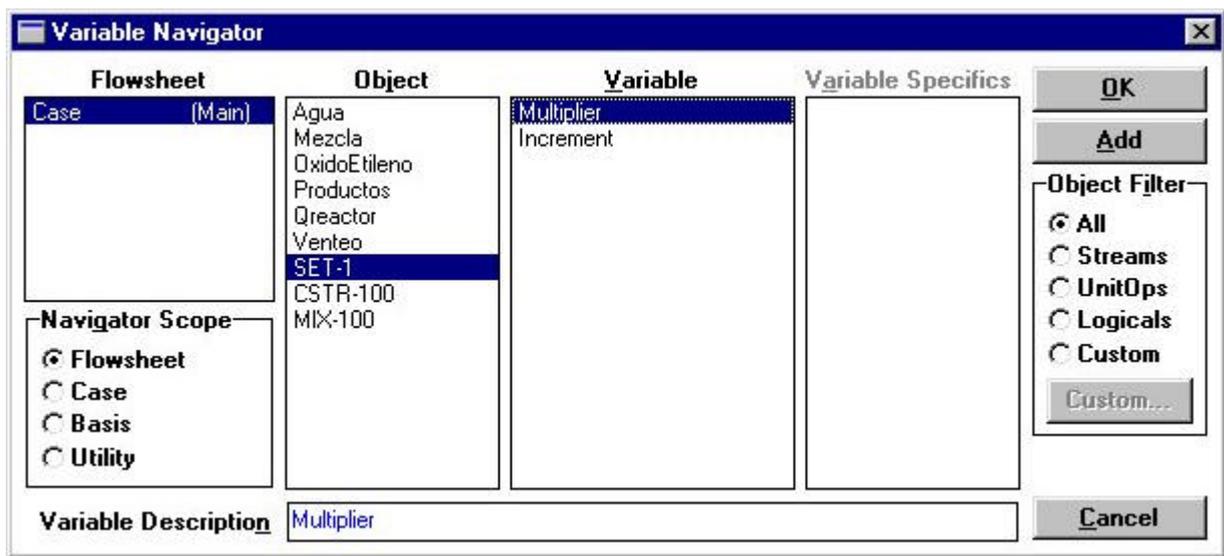


Fig. 31

Siguiendo el mismo procedimiento insertar a continuación las variables indicadas la Fig. 32

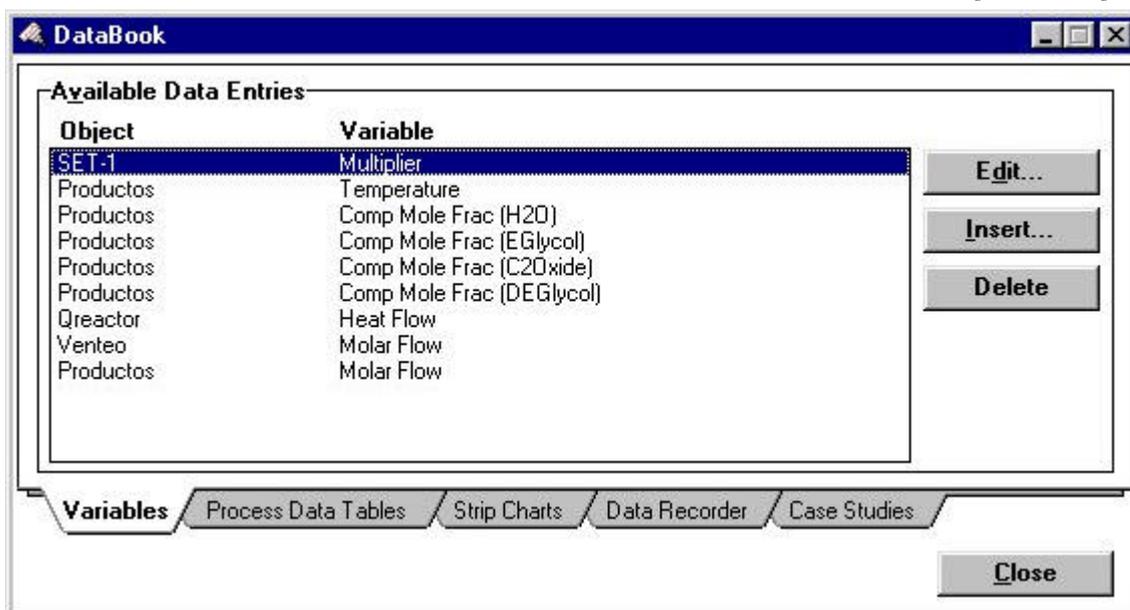


Fig. 32

Una vez ingresadas todas las variables de interés, seleccionar la sección **Case Studies**. Presionar el botón **Add**. Aparecerá la leyenda **Case Studies 1** en el recuadro **Available Case Studies**. Ahora será necesario definir las variables independientes y dependientes. Entendemos por variables independientes aquellas que podemos variar su valor y a partir de la cuales se determinan los valores de las demás variables.

Seleccionaremos la variable **Multiplier** del objeto **SET-1** como variable independiente. La composición de los compuestos de la corriente **Productos** serán las variables dependientes. Ver Fig. 33.

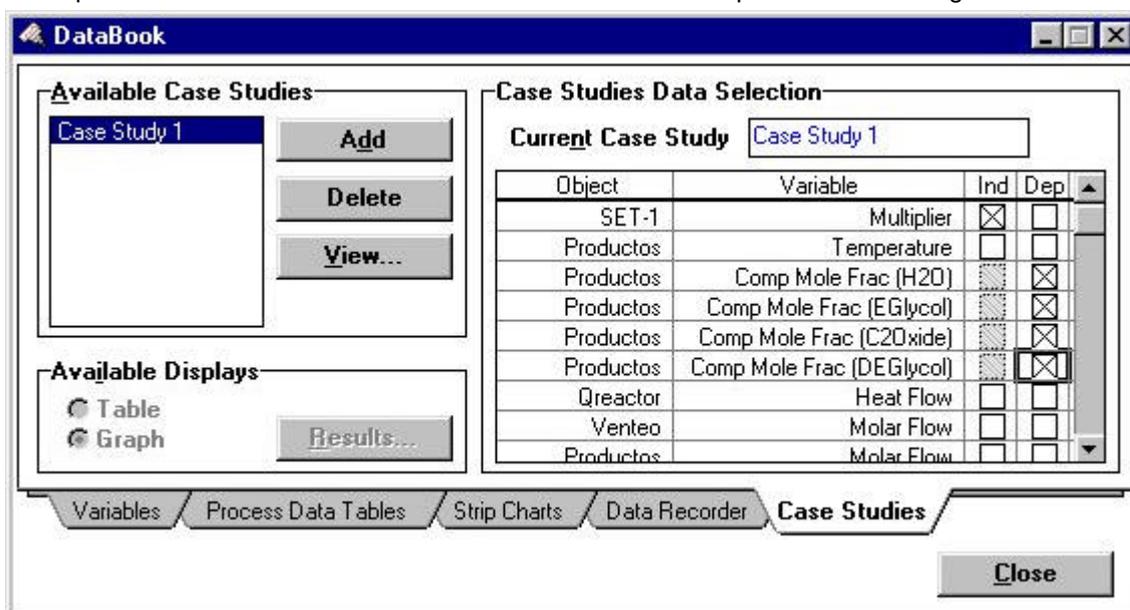


Fig. 33

A continuación presionar el botón **View..** para establecer los límites e incremento de la variable independiente. Se sugiere hacer el estudio en el rango de 0.001 a 1 con incrementos de 0.1. Ver Fig. 34. Observar el recuadro **Number of States**, nos indica la cantidad de estados que se calcularán.

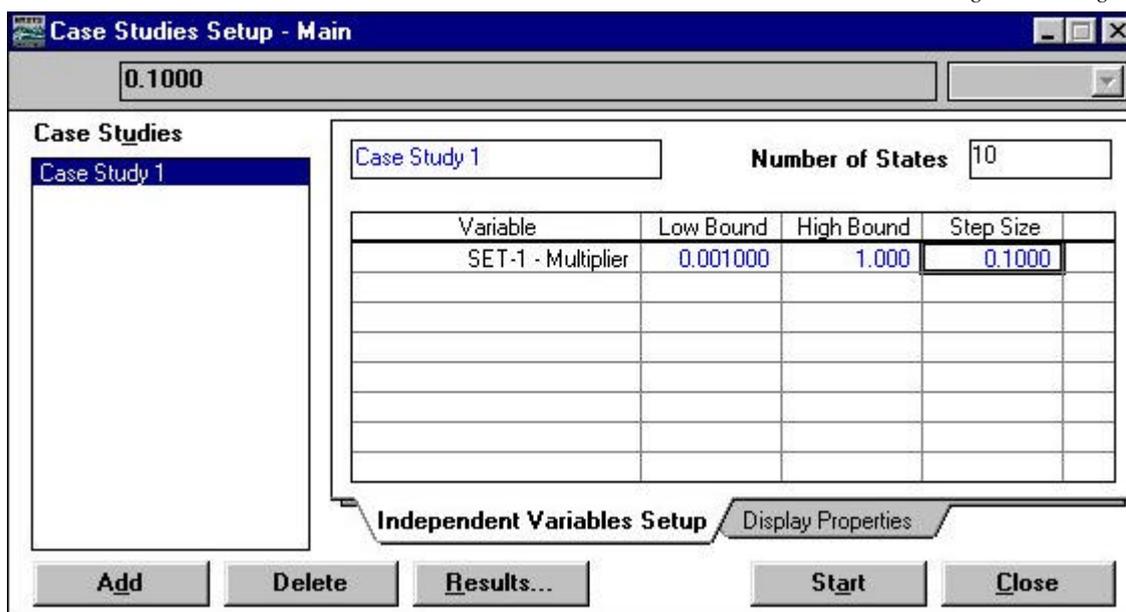


Fig. 34

Presionando el botón **Start** comienza a ejecutarse los cálculos. Mientras esperamos podemos presionar el botón **Results...** y observar el Gráfico o la Tabla de valores que se genera. El Gráfico final puede verse en la Fig. 35.

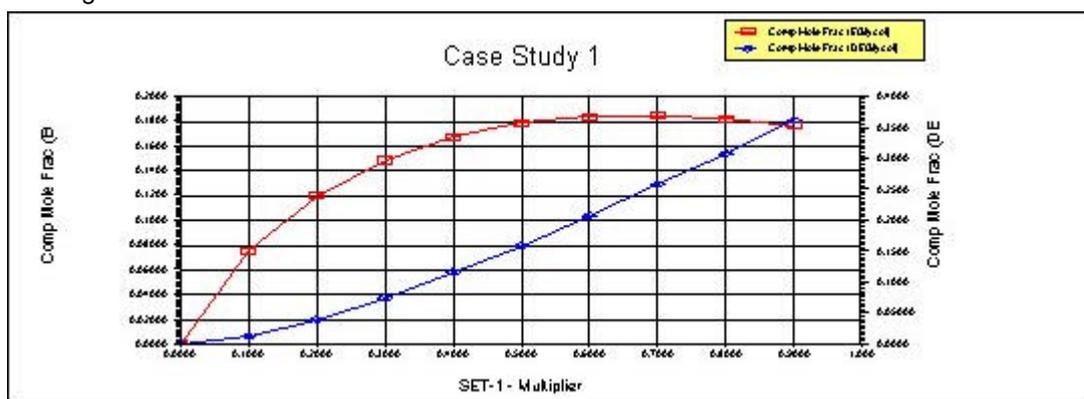


Fig. 35

Observando el gráfico se puede suponer que es más conveniente trabajar a relaciones OE/Agua bajas donde la producción de EtilenGlicol se ve favorecida frente a la de DietilenGlicol.

Se puede plantear el mismo análisis seleccionando la temperatura de la corriente Productos como variable independiente. De este modo podemos ver la influencia de la temperatura sobre la velocidad de reacción.

Aplicación de Columnas de Destilación

En este ejercicio se deberá comenzar a trabajar con el archivo Planta1.hsc que contiene el diagrama de flujo, representado en la Fig. 25

El objetivo es incrementar el diagrama de flujo de acuerdo con el de la Fig. 36

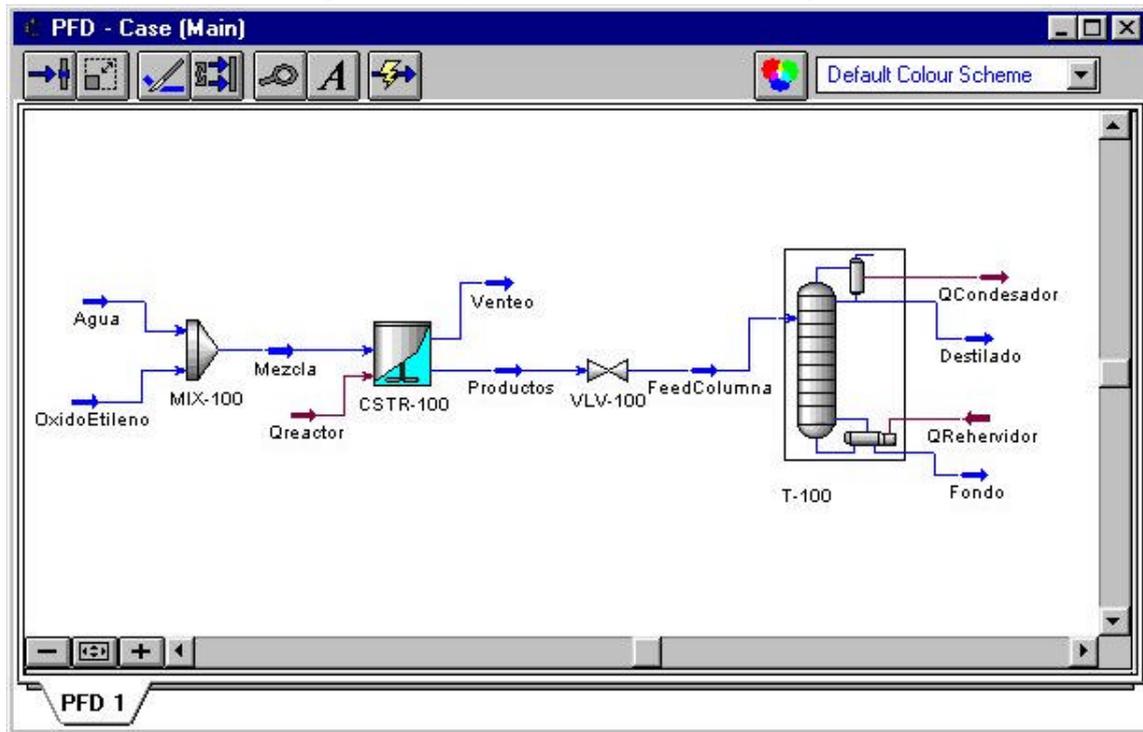


Fig. 36

El primer paso consiste en incorporar una válvula cuya única función es disminuir la presión de la corriente que fluye del reactor. Presionando F4 aparecerá la paleta de objetos, la válvula corresponde al icono mostrado en la Fig. 37.

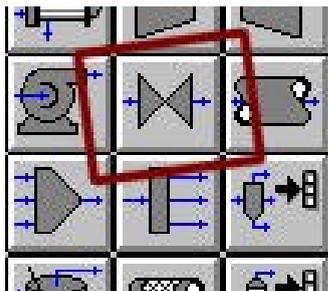


Fig. 37

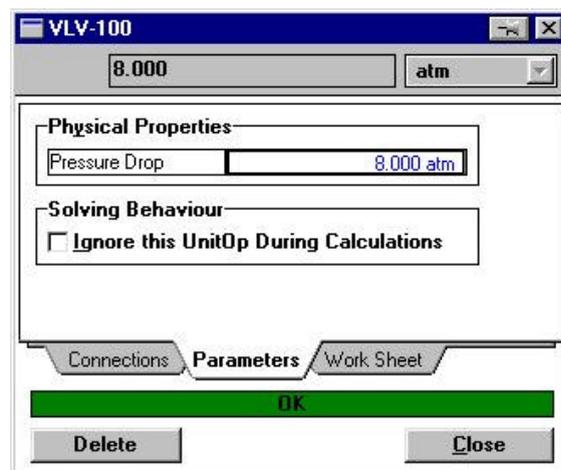


Fig. 38

En la sección **Parameters** se introducirá la caída de presión correspondiente a 8 atm (ver Fig. 38)

Agregando la columna de destilación

La inserción de la columna puede realizarse desde el PFD. Presionando F4 aparece la paleta de objetos tal como se muestra en Fig. 17 y se selecciona el esquema de la columna con sus correspondientes condensador y rehervidor. (Ver Fig. 39)

Haciendo doble click en el esquema de la columna aparecerá el **Distillation Column Input Expert** (ver Fig. 40) a fin de guiar en el llenado de los datos que definen a este sistema.

En la página 1 de 4 ingresar los siguientes datos:

- Número de etapas : **10**
- Plato de alimentación: **5**
- Nombre de la alimentación: **FeedColumna**
- Tipo de condensador: **Total**
- Nombres de las corrientes de materia y energía según se muestra en la Fig. 41.



Fig. 39

Completada la página 1 se habilitará el botón **Next**. Presionando este pasaremos a la página siguiente.

En la página 2 de 4 se define el perfil de presión dentro de la columna. Los valores son:

- Presión en el condensador: 15.00 psia
- Presión en el rehervidor: 17.00 psia
- Caída de presión en el condensador: 0 psia

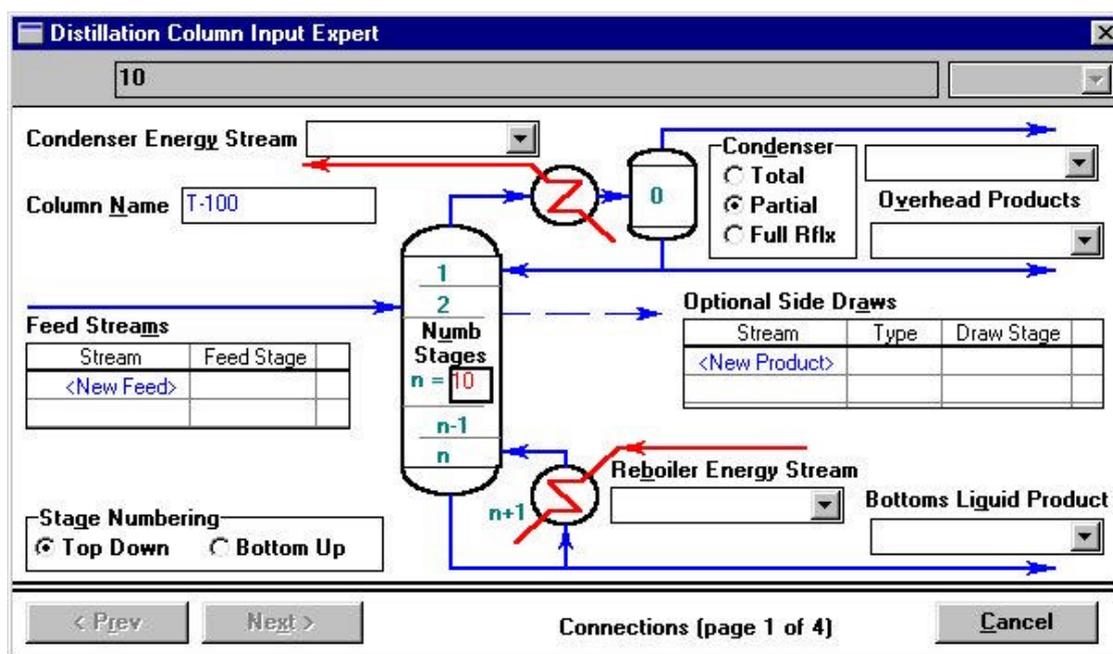


Fig. 40

En la página siguiente (3/4) se pueden ingresar estimaciones. Estos valores son opcionales y no se consideran en este ejemplo.

En la última página (4/4) se ingresan las especificaciones operativas de la columna:

- Relación de reflujo: 0.7
- Flujo : Base molar

Al terminar presionar el botón **DONE**.

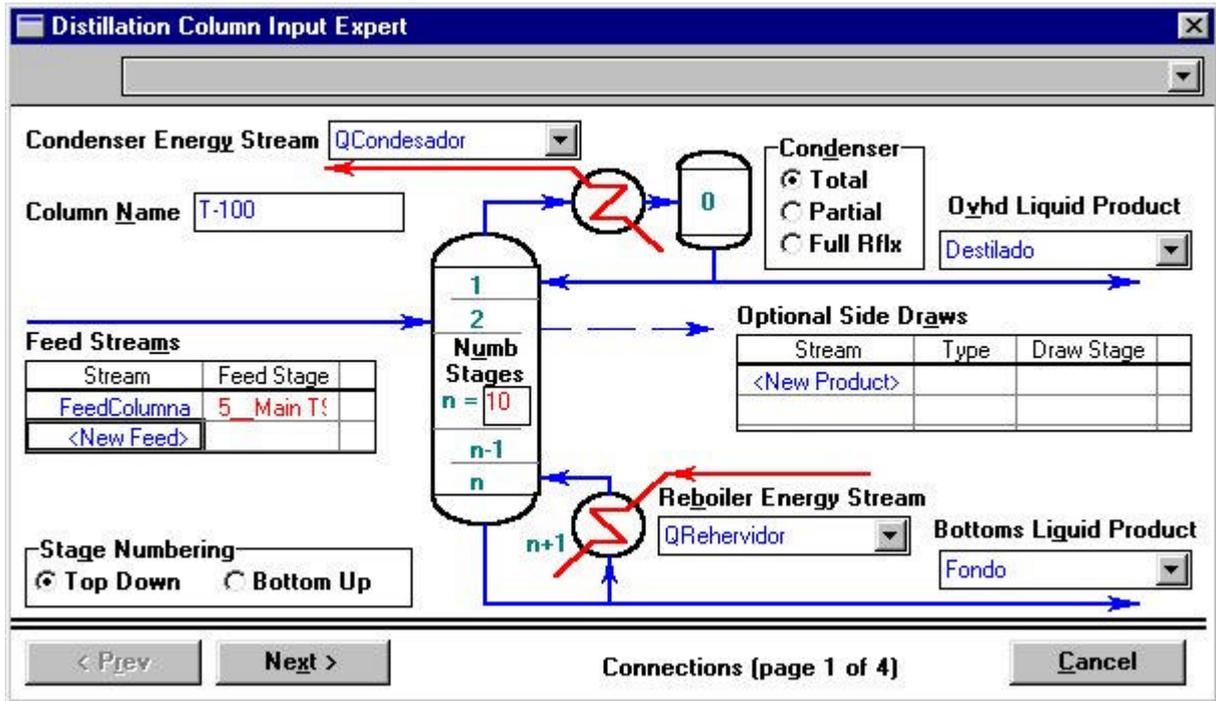


Fig. 41

Los datos del sistema quedan completamente definidos. Una vez posicionados en el libro de cálculo correspondiente a la columna en la hoja **Specs** se debe notar que las especificaciones establecidas deben ser tales que garanticen que los grados de libertad sean igual a 0 indicando que la columna ya esta lista para ser resuelta. Además el **INPUT EXPERT** indica que se requiere la especificación en 2 variables a fin de conformar el conjunto de datos que configuren esta condición (grados de libertad = 0). La adición de especificaciones distintas de las sugeridas por el **INPUT EXPERT** se realizan como se muestra en la Fig. 42. Presionando el botón **ADD** aparece una ventana con todas las posibles variables que pueden ser especificadas.

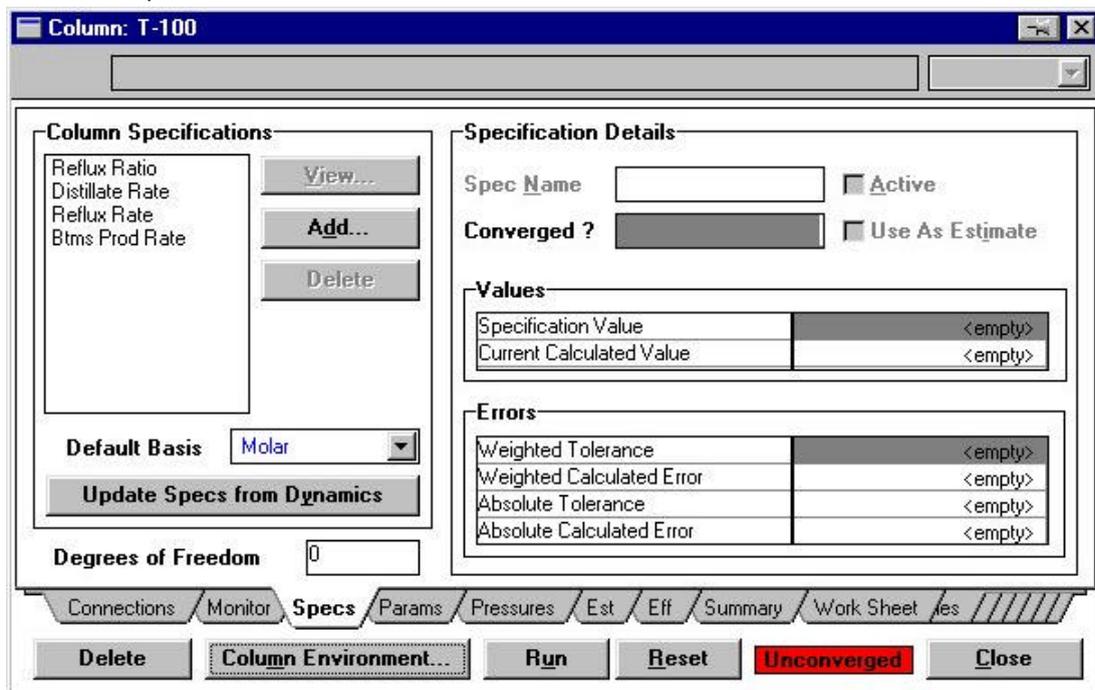


Fig. 42

Se seleccionará **COMPONENT FRACTION** (Fig. 43) y aparecerá una nueva ventana como la que se muestra en la Fig. 44, en la que deberán consignarse los datos que allí aparecen. Luego apretar **Close** y esa opción queda incluida en la lista de especificaciones. Es importante notar que pueden aparecer en la hoja **Monitor** varias especificaciones a la vez, sin embargo las únicas con las que efectúa el cálculo es con las que tienen la **x** en la columna **ACTIVE**. Volviendo a la hoja **Monitor** si se presiona **Group Active** se reordenan las especificaciones activas. Finalmente presionando el botón **Run** comienza el cálculo en estado estacionario de la columna. El mismo consiste en cerrar los balances de masa y energía bajo la suposición de que las “entradas” son iguales a las “salidas”.

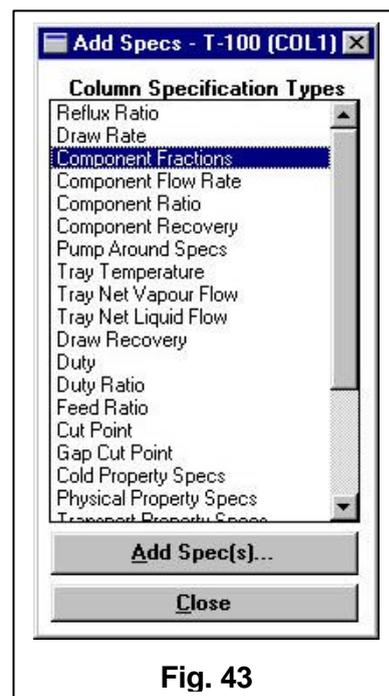


Fig. 43

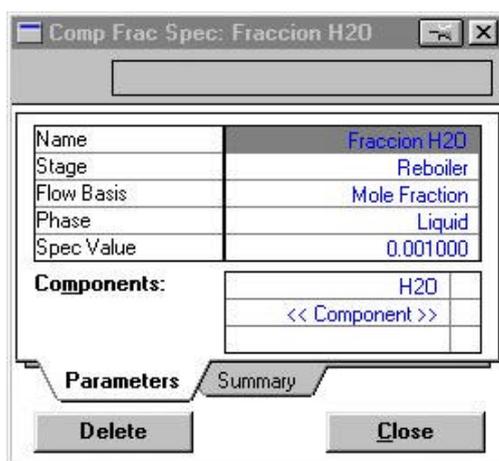


Fig. 44

Cuando el cálculo ha culminado con éxito aparece el cartel en fondo verde **CONVERGED** (ver Fig. 45) indicando que se han podido evaluar correctamente las variables de interés respetando las especificaciones dadas.

Notar que la mayoría de los datos de interés aparecen en la hoja **SUMMARY** así como los perfiles de las variables tales como temperatura, presión, flujos de líquido y vapor se hallan presentados en la hoja **PROFILE**.

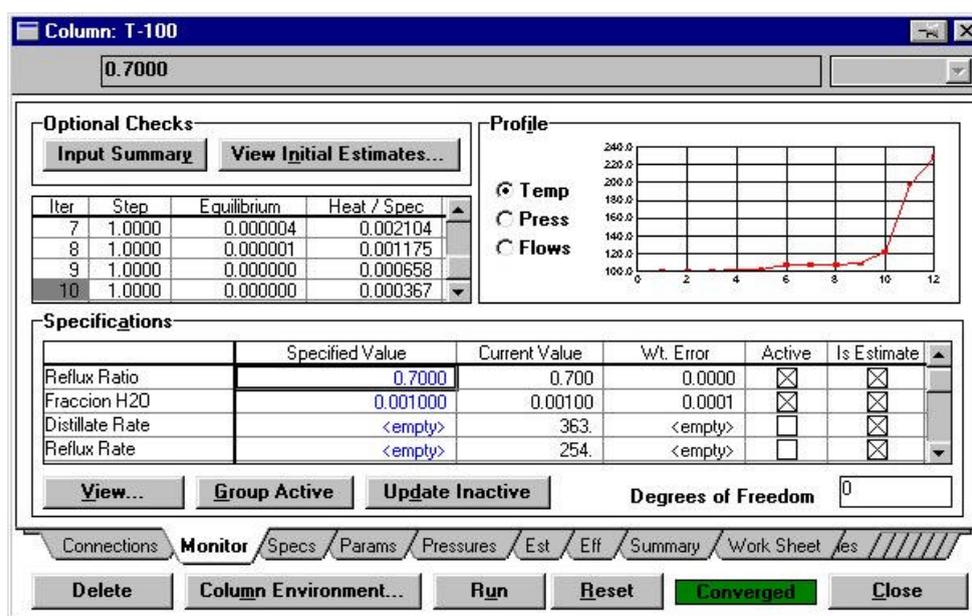


Fig. 45

Los resultados del caso principal pueden verse en el **WORKBOOK** desplegando la información detallada según se observa en la Fig. 46.

Name	OxidoEtileno	Agua	Mezcla	Venteo	Productos
Vapour Fraction	0.0000	0.0000	0.0851	1.0000	0.0000
Temperature [C]	50.00	180.5	95.11	180.0	180.0
Pressure [atm]	10.00	10.00	10.00	10.00	10.00
Molar Flow [kgmole/h]	456.5	652.2	1109.	0.0000	652.2
Mass Flow [kg/h]	2.011e+04	1.175e+04	3.186e+04	0.0000	3.186e+04
Liquid Volume Flow [m3/h]	22.80	11.77	34.57	0.0000	29.21
Heat Flow [kW]	-9571.	-4.958e+04	-5.915e+04	0.0000	-7.025e+04

Name	FeedColumna	Destilado	Fondo	** New **
Vapour Fraction	0.1902	0.0000	0.0000	
Temperature [C]	132.1	100.6	229.7	
Pressure [atm]	2.000	1.021	1.157	
Molar Flow [kgmole/h]	652.2	363.3	288.9	
Mass Flow [kg/h]	3.186e+04	6545.	2.532e+04	
Liquid Volume Flow [m3/h]	29.21	6.558	22.65	
Heat Flow [kW]	-7.025e+04	-2.824e+04	-4.152e+04	

Fig. 46

Es posible también presentar una **WORKBOOK** con las composiciones de las corrientes tal como se muestra en la Fig. 47.

Name	OxidoEtileno	Agua	Mezcla	Venteo	Productos	FeedColumna
Comp Mole Frac (H2O)	0.0000	1.0000	0.5883	0.9829	0.5574	0.5574
Comp Mole Frac (EGlycol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0128	0.1853	0.1853
Comp Mole Frac (C2Oxide)	1.0000	0.0000	0.4117	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (DEGlycol)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0043	0.2573	0.2573

Name	Destilado	Fondo	Reflux @COL1	To Condenser @	Boilup @COL1	To Reboiler @C
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	0.0010	1.0000	1.0000	0.0383	0.0229
Comp Mole Frac (EGlycol)	0.0000	0.4182	0.0000	0.0000	0.6554	0.5574
Comp Mole Frac (C2Oxide)	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
Comp Mole Frac (DEGlycol)	0.0000	0.5808	0.0000	0.0000	0.3063	0.4197

Name	Destilado @CO	Fondo @COL1	FeedColumna @	** New **
Comp Mole Frac (H2O)	1.0000	0.0010	0.5574	
Comp Mole Frac (EGlycol)	0.0000	0.4182	0.1853	
Comp Mole Frac (C2Oxide)	0.0000	0.0000	0.0000	
Comp Mole Frac (DEGlycol)	0.0000	0.5808	0.2573	

Fig. 47

Simulación en modo Dinámico

Caso II: Reactor de producción de Propilenglicol

Instalación de controladores PID

En el presente trabajo se propone la instalación de controladores en un reactor de producción de Propilenglicol. Por lo tanto, el usuario deberá instalar lazos de control locales y externos en el reactor. El usuario comenzará a trabajar con el archivo llamado "PG-Dinamico.hsc".

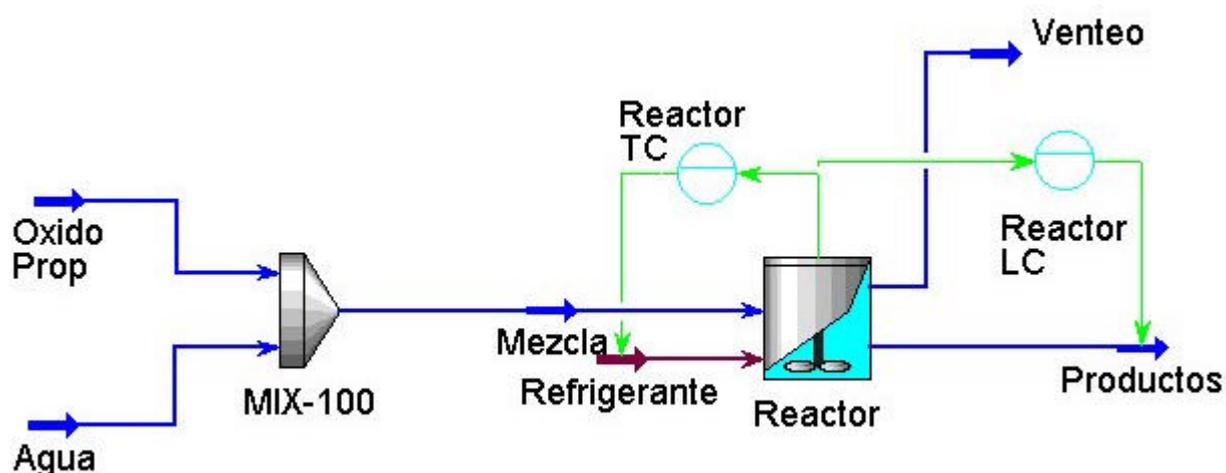


Fig. 48

Cabe señalar que se entiende por "control local" a aquellos que están implícitamente vinculados a las operaciones unitarias con el volumen de líquido en ellos retenidos (holdup). Por ejemplo cada recipiente tiene un control local de nivel. Luego si se produjera alguna alteración en el nivel de líquido, por ejemplo una subida extrema, la válvula de líquido asociada se encargaría de efectuar una salida del mismo para mantener el nivel en valores predeterminados.

Cada operación unitaria con volumen retenido que presenta HYSYS tiene incorporadas válvulas de vapor y líquido como un elemento estándar de la operación. La información necesaria para el dimensionamiento de estas válvulas se encuentra en la página correspondiente a **Liquid Valve** o **Vapour Valve**. Se analizará en cada equipo con volumen retenido, el dimensionamiento de las correspondientes válvulas. Inicialmente se realizará para el caso de la válvula de vapor del reactor tal como se observa en la pantalla de la Figura 49.

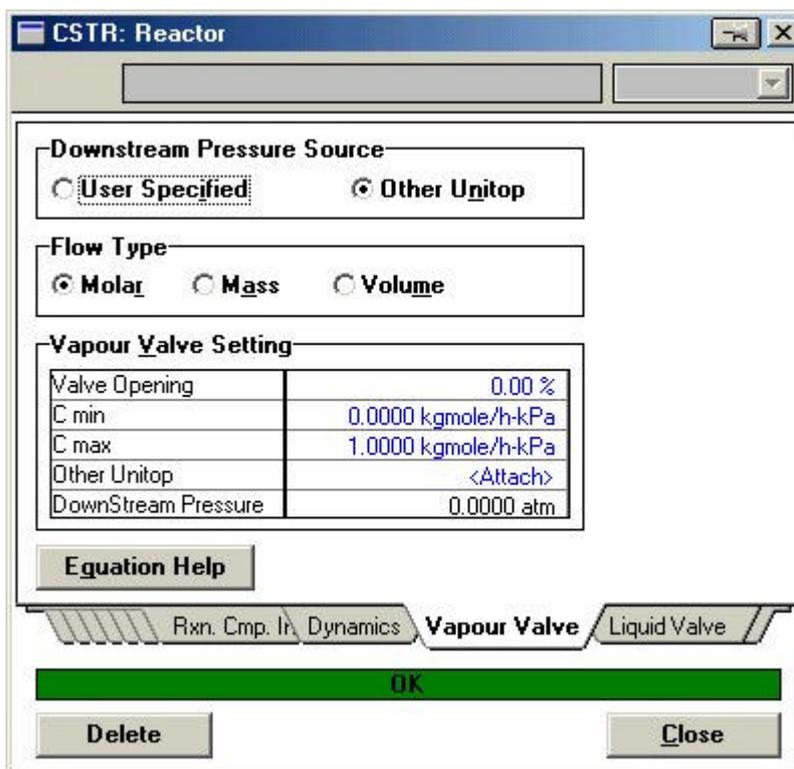


Fig. 49

En este caso las condiciones de la reacción son tales que no producen vapor en el reactor. El flujo a través de la válvula de vapor se calcula basándose en la presión diferencial entre el interior del recipiente y la corriente aguas abajo del equipo. Si la presión en el reactor comienza a subir la válvula debe abrirse a fin de producir el venteo del equipo. Esta clase de “control local” sería equivalente a tener un controlador de punto digital que abre o cierra la válvula en caso de que la variable de proceso exceda un determinado valor límite.

Análogamente a lo anterior sucede con la válvula de líquido del reactor a la que se le han asignado los valores indicados en la Figura 50. Cabe señalar que dado que la variación de nivel en el reactor produce cambios en el caudal de sus productos y que éstos a su vez son los que alimentarían a la columna de destilación aquí sólo se incorporarán los valores máximos y mínimos de flujo. Por lo tanto, en este caso se optará por efectuar el control de nivel en forma externa como se verá posteriormente.

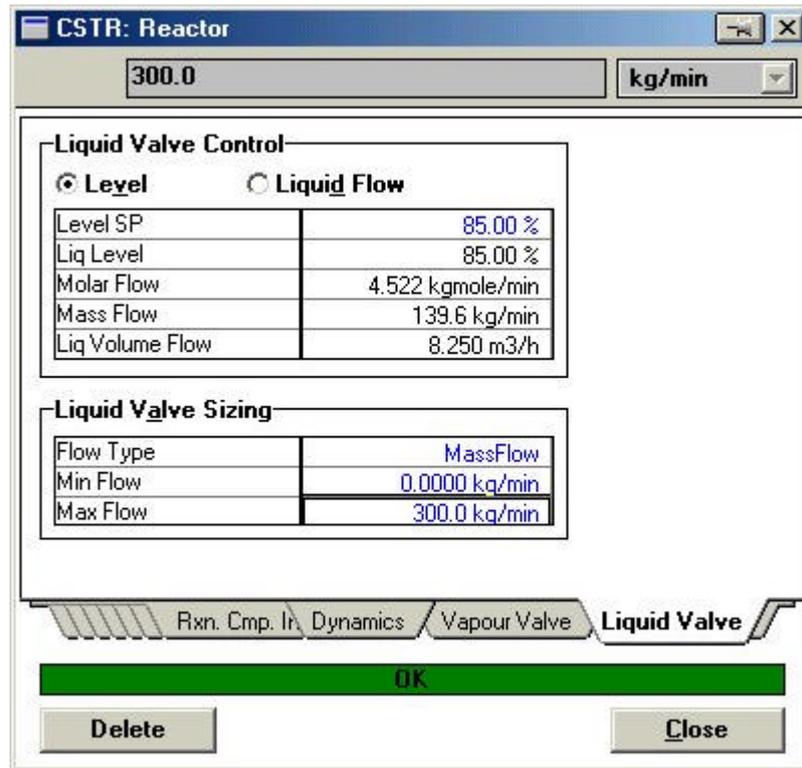


Fig. 50

Instalación de controladores externos

La nomenclatura utilizada para las principales variables que tienen que ver con el controlador es:

PV: variable de proceso, corresponde a la variable controlable

OP: salida (OUTPUT) o variable manipulable, encargada de mantener a PV en su valor de SET POINT.

También se debe tener en cuenta que la acción de control puede ser:

Directa: cuando el valor de la variable de salida aumenta, la apertura de válvula también aumenta

Inversa: cuando el valor de la variable de salida aumenta, la apertura de válvula debe disminuir

“TUNING”: Se refiere a la sintonización de los controladores; es decir, darle valores a los parámetros de ajuste del mismo, tales como ganancia, tiempo integral y tiempo derivativo. Considerar que HYSYS sólo tiene incorporados controladores clásicos PID y en caso de necesitar esquemas de control de otro tipo es necesario incorporarlo a través de programas especialmente diseñados para ello.

Instalación de control de nivel en el reactor

De la paleta de objetos (OBJECT PALETTE -F4-) seleccionar el controlador PID. Ver 51. Colocar en el PFD, y hacer doble click sobre él.

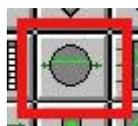


Fig. 51

En la primera sección, **Connections**, debemos definir la variable controlada (PV) y la variable manipulada (OP). Presionamos el botón **Select PV..** y se nos abrirá la ventana **Select Input PV**, debemos seleccionar la variable **Liquid Percent Level** del reactor como se indica en la Fig. 52.

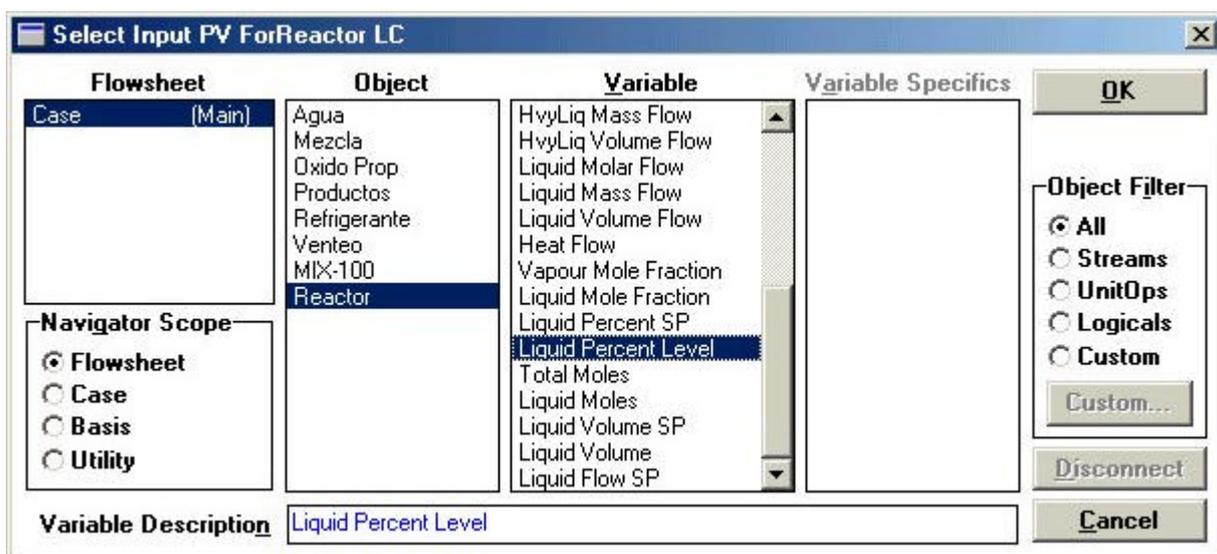


Fig. 52

Presionamos el botón **OK** y regresamos a la vista original. Para seleccionar la variable manipulada hacemos click sobre el botón **Select OP** y elegimos la corriente **Productos**. Finalmente nos quedará definido el controlador como se muestra en la Fig. 53.

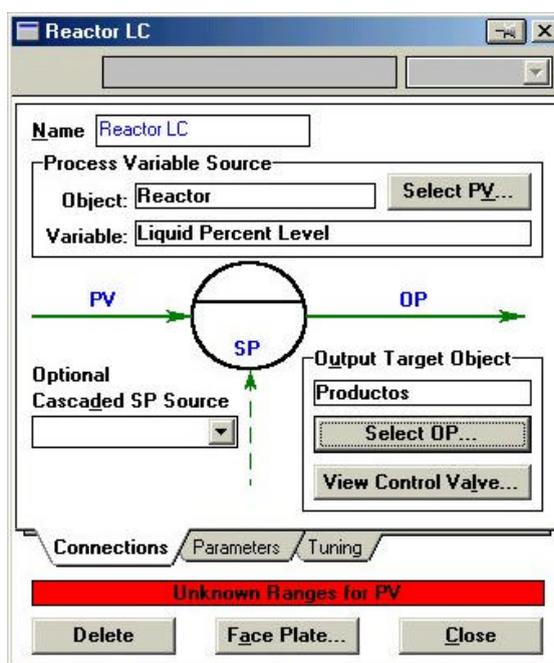


Fig. 53

Debemos ingresar los demás parámetros necesarios para definir el controlador guiándonos por la tabla siguiente.

Sección	Variable	Valor a Ingresar
---------	----------	------------------

Connections	Name	Reactor LC
	PV – Process Variable Source	Object: Reactor Variable: Liquid Percent Level
	Output Target Object	OP: Productos
Parameters	PV Minimum	0%
	PV Maximum	100%
	Control Action	Direct
Tunning	Kp	1
	Ti	20
	Td	<empty> porque se opta por un controlador PI

Finalmente, definido el controlador, activaremos la ventana que nos permite modificar los parámetros del controlador denominada **Face Plate**. Debemos presionar el botón **Face Plate** que se encuentra en la parte inferior de la ventana del controlador. Aparecerá una nueva ventana en la que cambiaremos el modo del controlador a **Auto**. Ver Fig. 54.



Fig. 54

Instalación de control de temperatura en el reactor

Repitiendo los pasos anteriores instalar un nuevo controlador PID y definirlo según los valores de la siguiente tabla.

Sección	Variable	Valor a Ingresar
Connections	Name	Reactor TC
	PV – Process Variable Source	Object: Reactor Variable: Vessel Temperature
	Output Target Object	OP: Refrigerante
Parameters	PV Minimum	20° C
	PV Maximum	120° C
	Control Action	Direct
Tunning	Kp	5
	Ti	20
	Td	<empty>

Para dimensionar la válvula de flujo calórico presionamos el botón **View Control Valve** en la sección **Connections** y completamos los siguientes datos:

- Asegurarse que el botón **DIRECT Q** está seleccionado.
- MIN AVAILABLE: 0 kW
- MAX AVAILABLE: 2500 kW. (aprox. el doble del valor de estado estacionario que coincide con el valor de SP)
- Presionar Close.

Para decidir qué valores poner para el PV MIN y PV MAX se toma como punto de partida el valor de estado estacionario, en este caso corresponde a la actual temperatura de operación del reactor 60° C.

El objetivo se plantea como tratar de mantener la temperatura del reactor en ese valor, luego se propone un rango de PV entre 20 y 120 ° C.

Finalmente activar el **Face Plate**, presionando el botón correspondiente.

Consideraciones previas a la simulación en modo dinámico.

Al trabajar con el caso en forma “dinámica” puede resultar útil ir observando la evolución de las variables de interés en forma gráfica o numérica. En particular esta última opción es útil para guardar en archivos aquellos resultado de los que pueden obtenerse conclusiones. HYSYS presenta una interesante herramienta para este fin como es el STRIP CHART. Por ello, en lo que sigue se presentará un pequeño resumen de las etapas a seguir para recopilar y visualizar los resultados de una simulación.

Ingresando al **Databook** debemos seleccionar las variables claves del proceso. Para este ejemplo seleccionaremos las siguientes variables.

Variables Controladas	Variables Manipuladas
Temperatura del Reactor Nivel del reactor	Caudal de la corriente Productos Caudal de la corriente Refrigerante
Variables de Interés	Otras
Comp Molar de Oxido de Propileno Comp Molar de Agua Comp Molar de PropilenGlicol	Setpoint del Reactor LC Setpoint del Reactor TC

Una vez ingresadas todas las variables, nos posicionamos en la sección **StripCharts**. Presionando el botón **Add** se genera un nuevo grafico denominado Strip Chart 1. El nombre puede ser cambiada haciendo click en la celda **Strip Chart Name** y escribiendo el nuevo valor.

Para seleccionar las variables a visualizar se activan las casillas de la columna **Active**. Cuando el numero de variables a monitorear es grande conviene agruparlas por categorías y utilizar varios **Strip Charts**.

En la Fig. 55 se muestran el conjunto de variables para el reactor que aparecerán graficados en la pantalla **Variables Reactor**. Notar que las variables seleccionadas se indican en su correspondiente cuadro por medio de una cruz

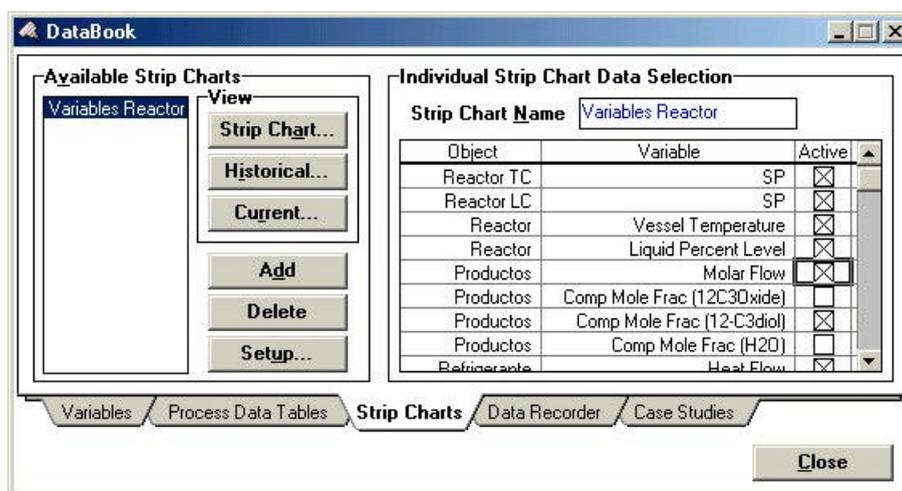


Fig. 55

Las diferentes características vinculadas netamente con la presentación gráfica se establecen presionando el botón **Setup** de la pantalla mostrada en la Fig. 55. A partir de allí aparece la pantalla de la Fig. 56 permitiendo en cada hoja asignar distintas propiedades.

Object	Variable	Line Minimum	Current Value	Line Maximum	Units
Reactor TC	SP	0.0000	60.00	60.00	C
Reactor LC	SP	0.0000	85.00	90.00	%
Reactor	Vessel Temperature	10.00	60.29	110.0	C
Reactor	Liquid Percent Level	0.0000	85.00	100.0	%
Productos	Comp Mole Frac (12-C3dic	0.0000	0.2140	1.000	
Refrigerante	Heat Flow	-9.000e+06	998.7	2.000e+07	kW
Productos	Molar Flow	0.0000	4.522	5.000	kgmole/min

Fig. 56

Pasando al modo dinámico...

Para alternar al modo dinámico se presiona el botón . Así aparece en la barra de menú el botón con el símbolo integral con el cual se comienza o detiene la integración numérica de las ecuaciones diferenciales. Este botón aparece sólo en modo dinámico.

Inicio de los cálculos dinámicos.

El caso ya está listo para iniciar una corrida en modo dinámico. Para comenzar los cálculos es necesario acceder al **Integrador** que forma parte del menú encabezado por **Simulation** y aparece la pantalla de la Fig. 57.

Units	minutes
Current Time	0.00000
End Time	0.00000
Display Interval	1.0000
Units	seconds
Step Size	0.50000
Minimum	0.50000
Maximum	5.0000
Method	Euler

Fig. 57

El ítem **Current Time** señala el tiempo actual de corrida. Presionando el botón **Start** aparecen las variables claves evolucionando en el tiempo e indicadas por el **StripChart** en cada etapa. El botón **Start** cambia por **Stop** mientras se efectúan los cálculos de integración. Una vez presionado el botón **Stop** el procedimiento se detiene, de otra forma el cálculo continúa hasta alcanzar el tiempo indicado en el ítem **End Time**. El botón **Reset** restablece las condiciones de estado estacionario iniciales del sistema.

Incorporando perturbaciones al sistema

En este ejemplo se efectuarán algunos cambios en determinadas variables a partir del estado estacionario del sistema que se viene analizando. En la Fig.58 se observan, a través de los **Face Plates** de los controladores, los valores de Set Point, variable controlada y manipulada del nivel y temperatura del reactor. Luego de haber corrido el programa durante 30 minutos y, dado que hasta el momento no se

introdujeron cambios en los valores de las variables de interés, éstas permanecen en el rango de partida a lo largo del tiempo.



Fig. 58

Perturbación en escalón de la temperatura

En el primer caso se propone efectuar una caída de temperatura en el reactor de 60 °C a 30 °C. Para ello se debe clicar en **Tuning** del **Face Plate** de temperatura del reactor y en la hoja **Parameter** se debe ingresar el nuevo SP (set point) = 30 °C. Luego de correr el programa hasta los 130 minutos de simulación aparecerá la pantalla tal como se muestra en la Fig. 59 para el caso de las variables de interés vinculadas al reactor. Puede observarse que la línea en rojo corresponde al cambio de SP pedido y la línea azul corresponde a la evolución de la temperatura en el reactor. La producción del Propilenglicol disminuye dado que a una temperatura más baja la cinética también cambia (línea de trazos).



Fig. 59

Perturbación de la temperatura mediante una función rampa

En este caso se pretende llevar al reactor a la temperatura de 80 °C. Para ello se procederá como en el caso anterior estableciendo las condiciones pedidas a través del controlador de temperatura **Reactor TC**, tal como se muestra en la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia..** En la página **Tuning** se observa el ítem **Set Point Ramping** que se completará de acuerdo con los datos presentados en la **¡Error! No se encuentra el origen de la referencia..** Con esto se pretende que la temperatura se eleve hasta los 80 °C alcanzando ese valor en un período de 30 minutos. Así la pendiente de la rampa queda totalmente especificada. La opción **Start Ramp** es la encargada de disparar la orden de comenzar. Luego se inicializa el integrador a partir del punto anterior con el comando **Start** o presionando el símbolo de la Integral que se encuentra en la barra de herramientas.

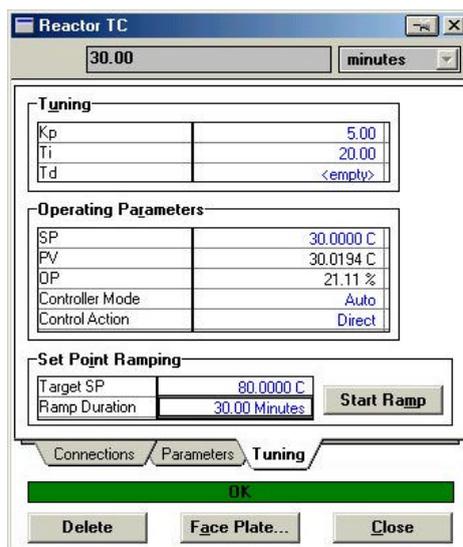


Fig. 60

En la Fig. 61 puede observarse la evolución de la rampa en el Set Point y el buen seguimiento que realiza la temperatura del reactor con lo cual queda demostrado que el ajuste del controlador que aquí actúa resulta eficiente para este equipo. En la Fig. 62 puede observarse que los datos generados en el total de estas corridas han sido guardados en el **History data** y que si resultan de interés los datos pueden enviarse a un archivo presionando el comando **Save to file**.



Fig. 61

Para acceder a la ventana **History Data** se ingresa a la Sección **Strip Charts** del **Databook** y seleccionando el Strip Chart correspondiente, al presionar **Historical** se abre la ventana mostrando los valores de las variables en forma tabular.

Time (s)	Reactor TC_SP	Reactor LC_SP	Reactor_Vessel Temperature [C]	Reactor_Liquid Percent Le [%]	tos_Comp Mole Frac (12)
0.0000	60.00	85.00	60.00	85.00	0.2161
60.01	60.00	85.00	60.00	85.01	0.2161
120.1	60.00	85.00	60.00	85.01	0.2161
180.2	60.00	85.00	60.00	85.01	0.2161
240.3	60.00	85.00	60.00	85.01	0.2161
300.3	60.00	85.00	60.00	85.02	0.2161
360.3	60.00	85.00	60.00	85.02	0.2161

Fig. 62