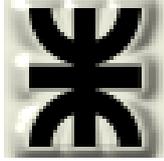


Integración IV



Trabajo práctico N° 2: Introducción al entorno de HYSYS

Generación de casos.
Selección de componentes y paquetes fisicoquímicos.
Personalización de sistemas de unidades.
Generación de reportes.

1. Características generales del simulador

Con HYSYS, los ingenieros sólo necesitan desarrollar un simple modelo del proceso que puede ser usado desde diseños conceptuales, a diseños de mejoras, optimización de la producción y una mejor toma de decisiones. HYSYS está diseñado para que el usuario lo pueda configurar a su medida. Esto permite la interacción con otras aplicaciones para crear poderosos programas híbridos.

Algunas de las características más relevantes son:

-  Ambiente gráfico de operación.
-  Metodología de cálculo en estado estacionario: modular no secuencial. Los cálculos en el flowsheet son realizados automáticamente cuando el usuario aporta información. Los resultados de cualquier cálculo pasan automáticamente a otra corriente u operación que esté afectada por el cálculo, propagando los resultados a través del flowsheet. La información parcial (insuficiente para permitir un cálculo completo) también es dirigida bidireccionalmente a través del flowsheet.
-  Metodología de cálculo en estado dinámico: cada operación unitaria individual contiene la información necesaria para calcular su respuesta dinámica, así como también integrar sus hold-ups, o en el caso de operaciones sin hold-ups, algebraicamente.
-  Multi-Flowsheet: un número ilimitado de flowsheets pueden ser instalados en una simulación. La información de cualquier locación es accesible en cualquier momento.
-  Sub-flowsheets y flowsheet templates: Cada flowsheet posee un paquete de fluidos (componentes, propiedades, reacciones, etc.). Un sub-flowsheet aparece como una operación multi-input/output y es resuelto automáticamente como cualquier otra operación. Los templates pueden ser construidos específicamente: paquetes de fluidos, operaciones, corrientes, especificaciones del proceso, etc., y guardados en disco.

-  Los cálculos de equilibrio de fase pueden ser automáticamente realizados por el método apropiado para el flowsheet. Una vez que la composición y dos variables de estado (presión, temperatura, fracción de vapor o entalpía) son conocidas para una corriente, esta es automáticamente calculada. Los cálculos de las propiedades físicas son realizados automáticamente para cada fase.
-  Base de datos con más de 1500 compuestos puros: Hidrocarburos, Aminas, Alcoholes, Cetonas, Aldehídos, Esteres, Acidos carboxílicos, Halógenos, Fenoles, Sólidos, etc.
-  Métodos de cálculo termodinámico: Peng-Robinson, Soave-Redlich-Kwong, ESO Tabular, Chao Seader, etc.
-  Línea de soporte vía telefónica, On-Line (e-mail y Web) y en planta.
-  Cursos de entrenamiento para usuarios.
-  Acceso a documentos vía Web.
-  Licencias especiales para universidades.

Las operaciones unitarias y equipos disponibles son:

-  Separación: Separador de 2 fases, de 3 fases, Tanque
-  Separadores de sólidos: Ciclón, Hidrociclón, Filtro rotativo de vacío, Filtro de bolsa, Cristalizador
-  Destilación: Absorbedor, Absorbedor con rehervidor, Absorbedor con reflujo, Torre atmosférica de crudo, Extractor Líquido-Líquido, Fraccionador.
-  Reactores: CSTR, PFR, Gibbs
-  Transferencia de calor: Intercambiador de calor, Condensador, Evaporador.
-  Distribución: Cañería, T, Mezclador
-  Incremento de Presión: Bomba, Compresor, Válvula, Expander.
-  Lógicas: Balance molar, Balance de masa, Balance de energía, Balance Gral., Adjust, Set, Controlador PID, Selector de señal, Función de transferencia.

Algunas herramientas de análisis con las que cuenta son:

-  Case Study: Grabador de datos con el cual se pueden realizar varias simulaciones simultáneamente.
-  Intercambio de calor: Análisis Pinch, curvas de calor.
-  Equilibrio de fase: tablas de propiedades, Hidratos, T-XY, P-XY.
-  Diseños de destilación: Mc Cabe - Thiele, síntesis de destilación binaria, síntesis de destilación ternaria.

- ☞ Cañerías: Dimensionamiento, caída de presión.

2. Arquitectura básica de HYSYS

Como se mencionó en el punto anterior, uno de los aspectos más útiles de HYSYS es su arquitectura Multi-Flowsheet. El concepto de Flowsheets y Sub-Flowsheets es un método flexible e intuitivo que permite:

- ☞ Descomponer un proceso complejo en procesos más pequeños con componentes más concisos: Simular cada unidad del proceso en forma independiente del proceso completo, pero ligado a él, construyendo un sub-flowsheet con sus corrientes y operaciones unitarias accesorias.
- ☞ Usar paquetes termodinámicos independientes para cada flowsheet.

El concepto de *Medio Ambiente (Environment)*, permite acceder e ingresar información en una determinada área o “medio ambiente” del programa, mientras que las otras áreas están en modo hold (“esperando”) hasta que se finalice la tarea en el área de interés. Hay 5 Environments:

- ☞ Basis (se crean, definen y modifican los Paquetes de Fluidos a ser utilizados –incluyen, como mínimo, el paquete de propiedades y los componentes)
- ☞ Oil Characterization (se caracterizan cortes de petróleo)
- ☞ Main Flowsheet (se define mayoritariamente la topología del flowsheet principal)
- ☞ Sub-Flowsheet (se define la topología del sub-flowsheet)
- ☞ Column (se define la topología de una particular Columna Sub-Flowsheet)

Entre las herramientas disponibles en HYSYS podemos mencionar:

- ☞ Capacidad para realizar cálculos interactivos y acceso instantáneo de la información.
- ☞ Inteligencia incorporada al programa que le permite conocer cuando la información disponible es suficiente para efectuar un cálculo y corregir los cálculos flash en forma automática.
- ☞ Operación modular: Todas las operaciones unitarias y/o corrientes pueden realizar todos los cálculos siempre que se especifique la información mínima necesaria en cada caso o la misma se transmita a través de las corrientes ligadas. La información, completa o parcial, se transmite en forma bi-direccional.
- ☞ Algoritmos de solución No Secuenciales. Ellos operan en forma independiente del orden en que se construye el flowsheet.

HYSYS cuenta con Elementos de Interfase Primarios, los cuales son formas alternativas para acceder e ingresar información del proceso. Estos son:

- ☐ El Diagrama de Flujo de Proceso (The Process Flow Diagram -PFD-)
- ☐ Workbook.
- ☐ Property View.

2.1 Medio Ambiente Básico

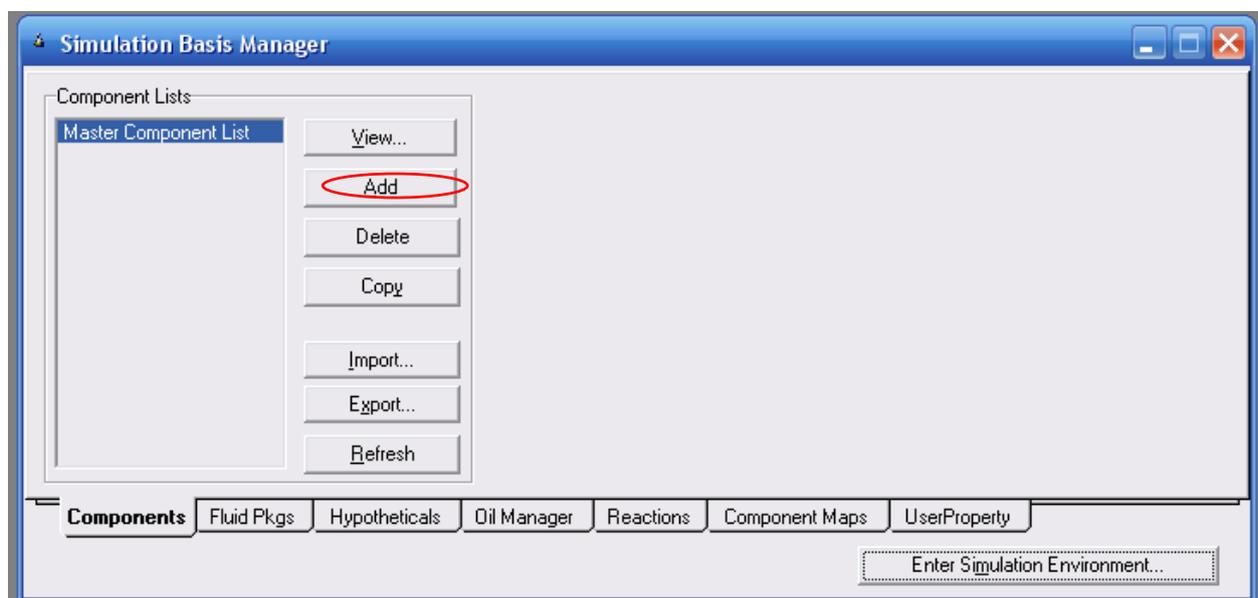
Es la primer interface con la que nos encontramos al iniciar un nuevo caso en HYSYS. Las principales tareas que se realizan dentro del mismo son:

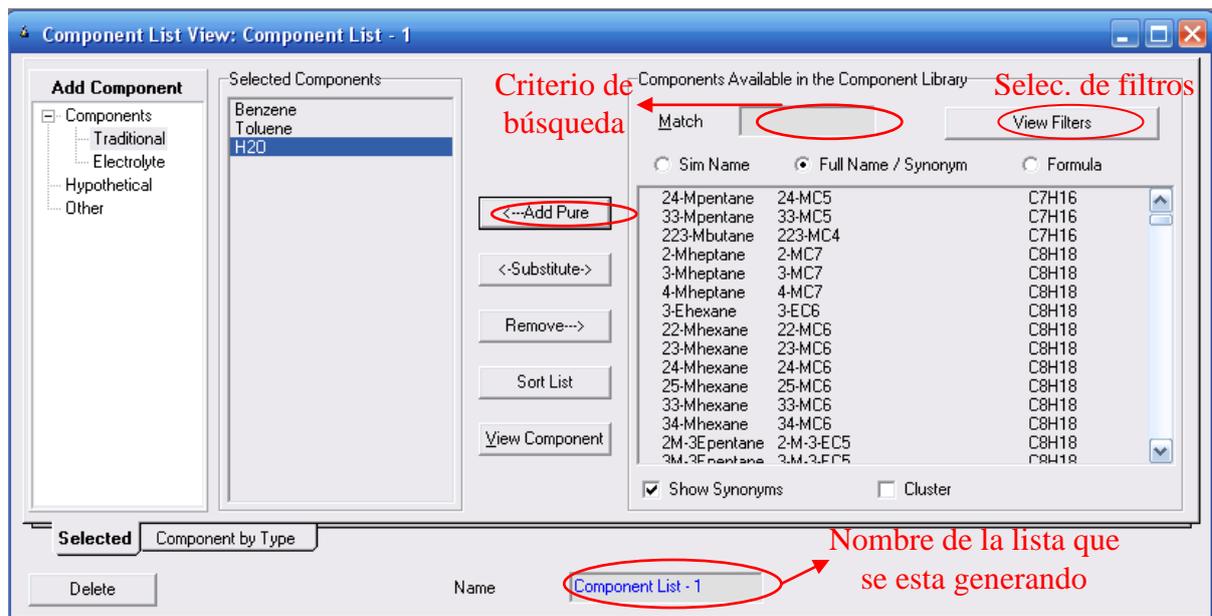
- ☐ Creación de lista de componentes
- ☐ Selección de paquetes de propiedades asociados a cada lista (base)
- ☐ Selección de reacciones químicas (tipo de cinética y parámetros de las misma)
- ☐ Conformación del corte de un crudo a partir de sus propiedades
- ☐ Inclusión de componentes hipotéticos ya seas estos fluidos o sólidos

2.1.1 Creación de un nuevo caso e ingreso de componentes

Para comenzar a crear un caso de HYSYS se debe presionar el botón (☐) “New Case”, a continuación aparece la ventana “Simulation Basis Manager”.

Para seleccionar los componentes, en la pestaña “Components” se debe presionar “Add”, luego de lo cual aparece una nueva ventana que permite buscar componentes dentro de una librería de compuestos ya almacenados (“Tradicional”, ya contenidos en HYSYS, “Hypothetical”, creados y definidos por el usuario y “Other”.





Dentro de la opción “Tradicional” se puede observar, desplegada en la parte derecha de la pantalla, la tabla “*Components Available in the Component Library*” que contiene un listado de los compuestos que posee almacenado HYSYS en su base de datos.

La búsqueda de los compuestos se puede realizar según varios criterios (por ejemplo nombre o fórmula) colocando parte de la expresión en la casilla “*Match*”. Luego deben ser agregados al listado de componentes presionando el botón “*Add Pure*” o realizando doble clic sobre el compuesto.

Si se desea reducir el espectro sobre el cual se realiza la búsqueda, se puede utilizar el botón “*View Filtres*”, el cual permite seleccionar una familia de compuestos (función química) o seleccionar elementos que sean compatibles con la utilización de cierto paquete de propiedades.

En la parte inferior de la ventana aparece la casilla “*Name*”, la cual permite el ingreso de un nuevo nombre a la serie de componentes seleccionados. Por defecto ya posee un nombre asignado.

Una vez que se hayan seleccionado todos los componentes cerrar la ventana para regresar a la ventana original del “*Simulation Basis Manager*”.

NOTA:

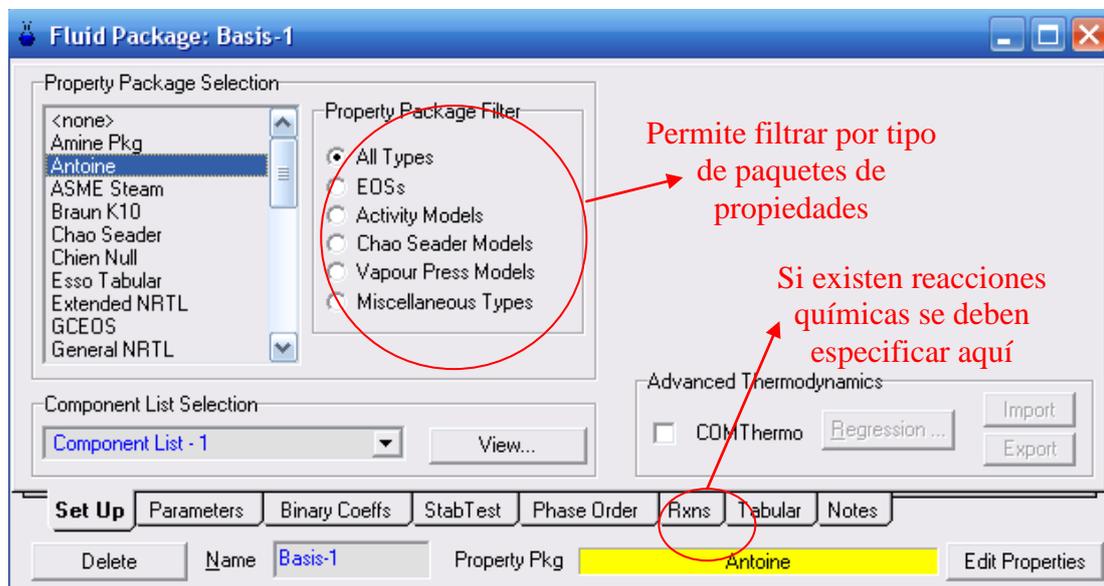
La base de datos de compuestos incorporada en HYSYS es muy grande, pero como es un simulador muy orientado a la industria petroquímica, es difícil encontrar componentes de otro tipo de industrias, como por ejemplo los sulfatos, óxidos y demás componentes inorgánicos en solución. Las últimas versiones de HYSYS incluyen el paquete de electrolitos, lo que permite incluir tales sustancias y por lo tanto, variar las propiedades coligativas de la mezcla.

También es posible incluir componentes que no estén en la base de datos, ingresando algunos de sus parámetros característicos.

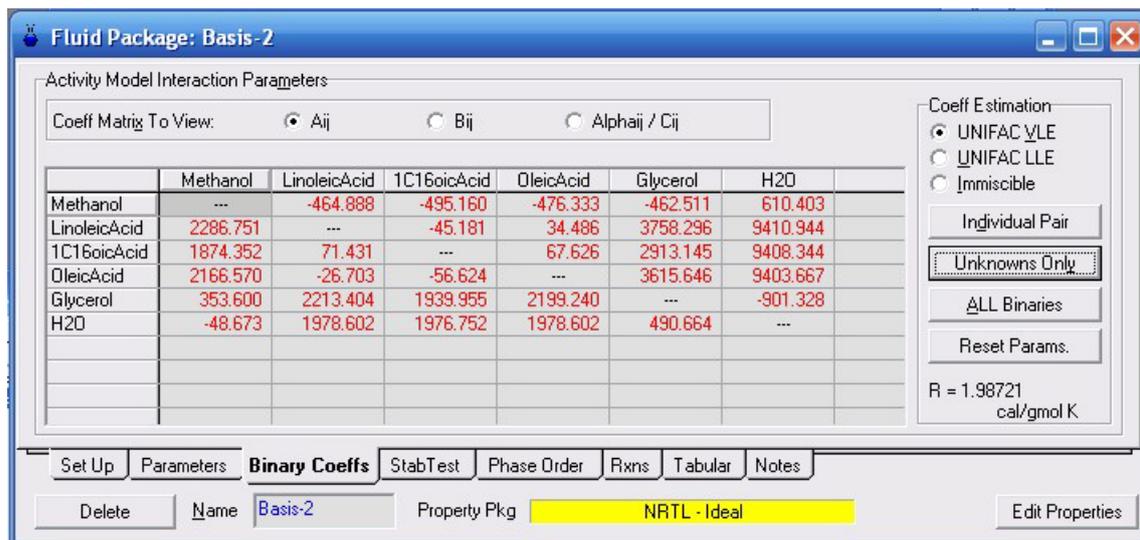
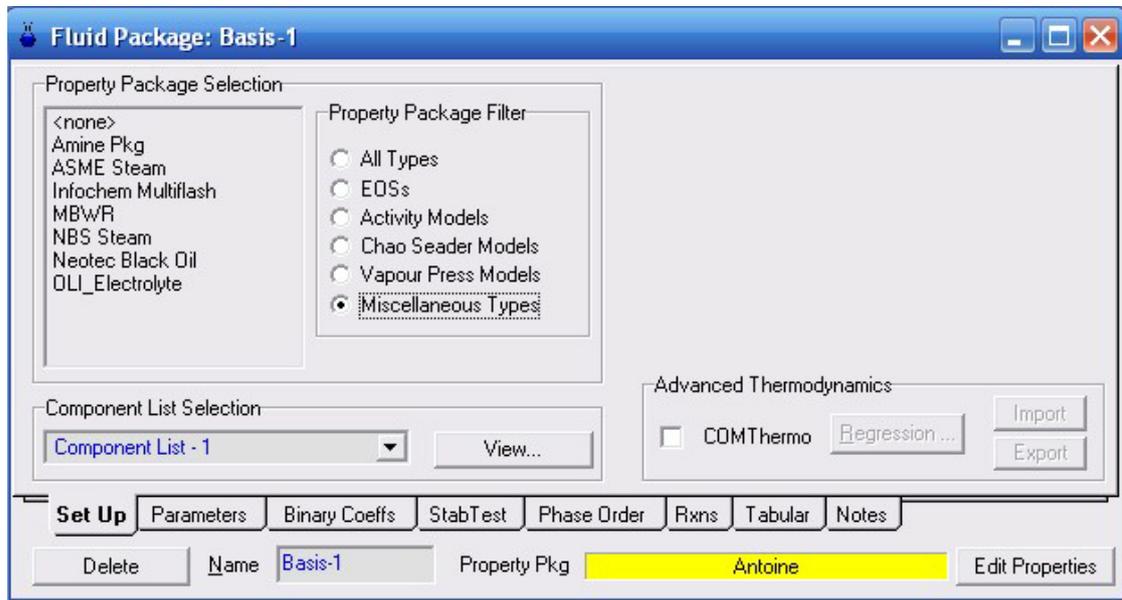
2.1.2 Selección de paquetes de propiedades asociados a cada lista

En la pestaña “Fluid Pkgs”, presionar “Add” para que se despliegue una nueva ventana, la cual permitirá seleccionar un paquete de propiedades de los fluidos acorde a las características del sistema formado por los componentes seleccionados en el paso anterior.

Este paso es muy importante, ya que definirá la base de la simulación. Si se tiene una buena base, se tendrá una buena simulación, pero si se introduce un error desde el principio, éste se agravará con el desarrollo de la simulación.



Paquetes fisicoquímicos por su tipo



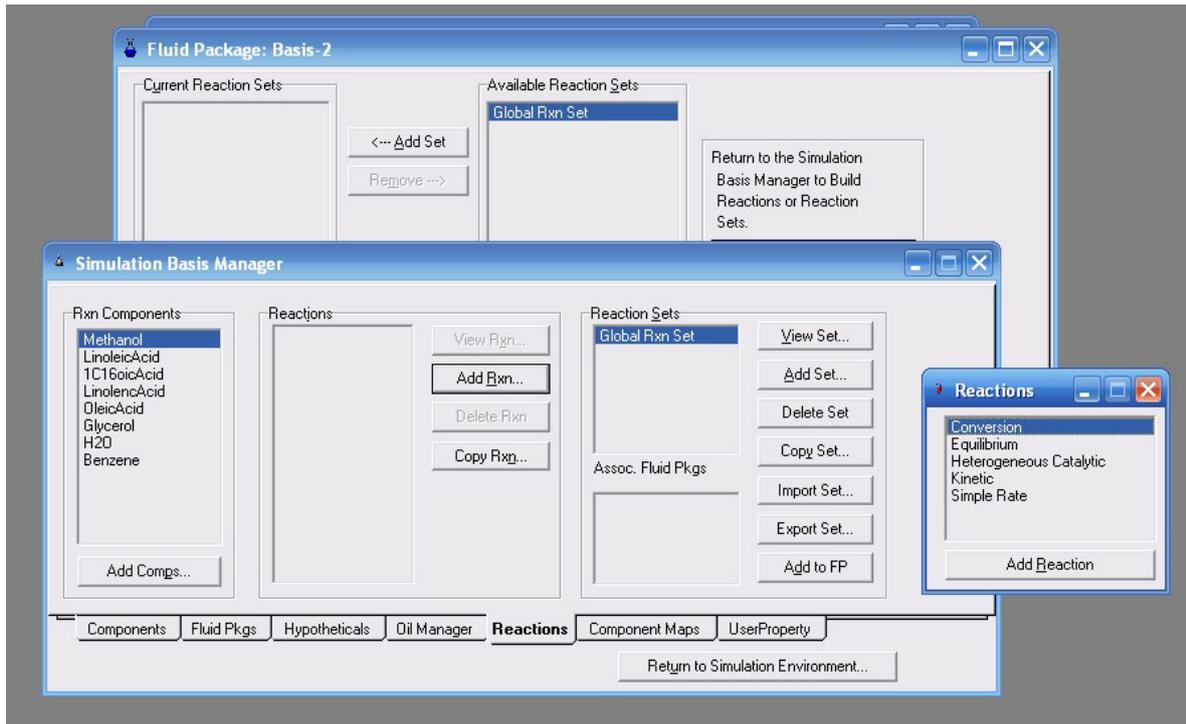
En algunos casos puede ser necesario definir los coeficientes binarios de los pares de los diversos componentes, parámetros para las reacciones químicas, etc., antes de cerrar la ventana “Fluid Pakage”.

Cabe destacar que en ésta etapa deben definirse los modelos para el cálculo de las entalpías y demás propiedades.

2.1.3 Selección de reacciones químicas

De existir reacciones químicas en alguna etapa del proceso, deben especificarse en este espacio.

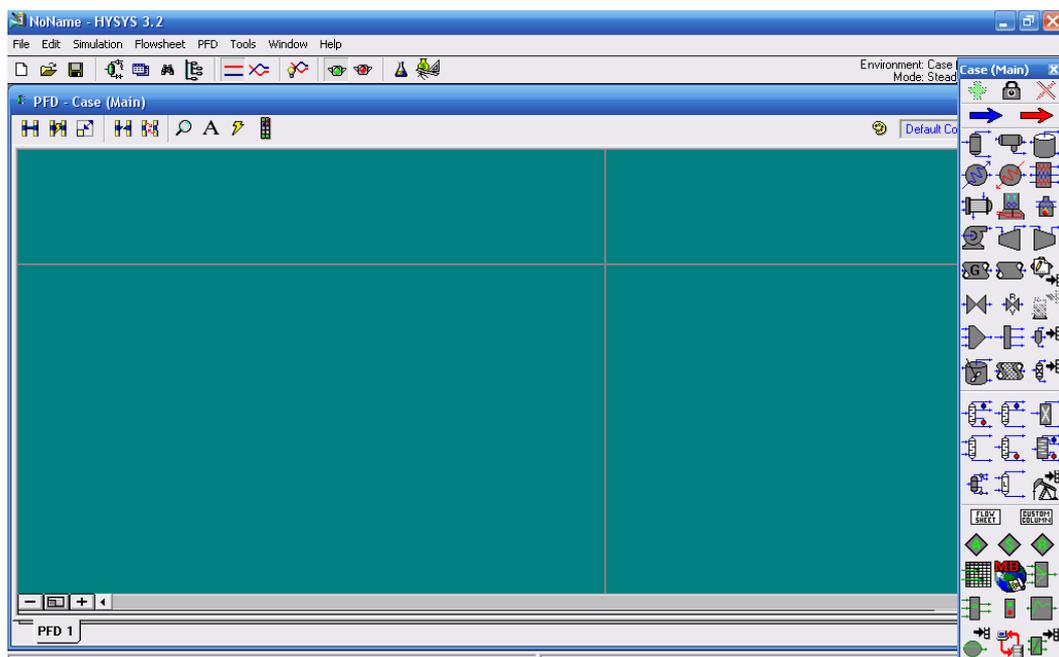
Este tema se ampliará al abordar sistemas con Reactores.



2.2 Medio Ambiente de simulación

Aquí se realiza el armado del flowsheet a partir de los objetos básicos de la paleta de operaciones unitarias. *Simulation Environment* es la pantalla principal de HYSYS donde realizaremos las simulaciones. En este medio la simulación se hace muy visual y fácil de llevar. Hay otro medio de simulación en HYSYS que veremos más adelante: el *Workbook*

Diseño del Diagrama de Flujo (Process Flow Design – PFD)



La **Paleta de Objetos** se usa para seleccionar el equipo o el tipo de corriente que queremos introducir en el sistema de simulación

La función “F4” permite visualizar u ocultar la paleta de operaciones unitarias

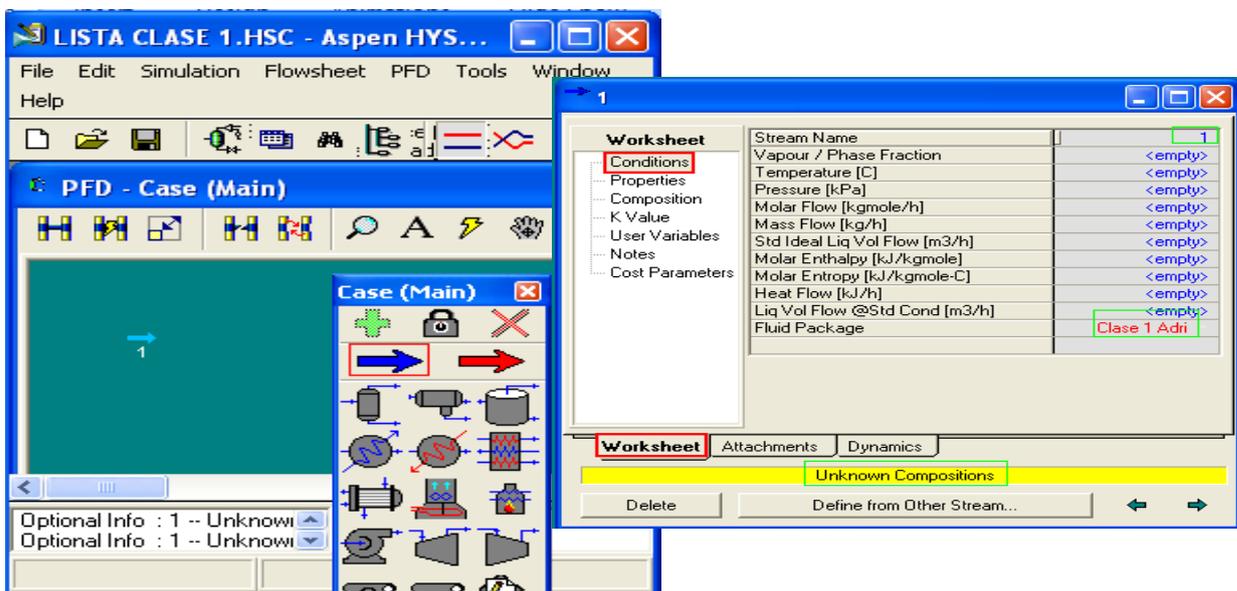
La paleta se puede dividir en cuatro secciones:

- 🖨 Corrientes: Materia ( / Energía ()
- 🖨 Equipos de separación de fases, presión, transferencia de calor y reactores,
- 🖨 Equipos de transferencia de masa (destilación, absorción...)
- 🖨 Operaciones lógicas

2.2.1 Ingreso de corrientes desde la paleta de objetos

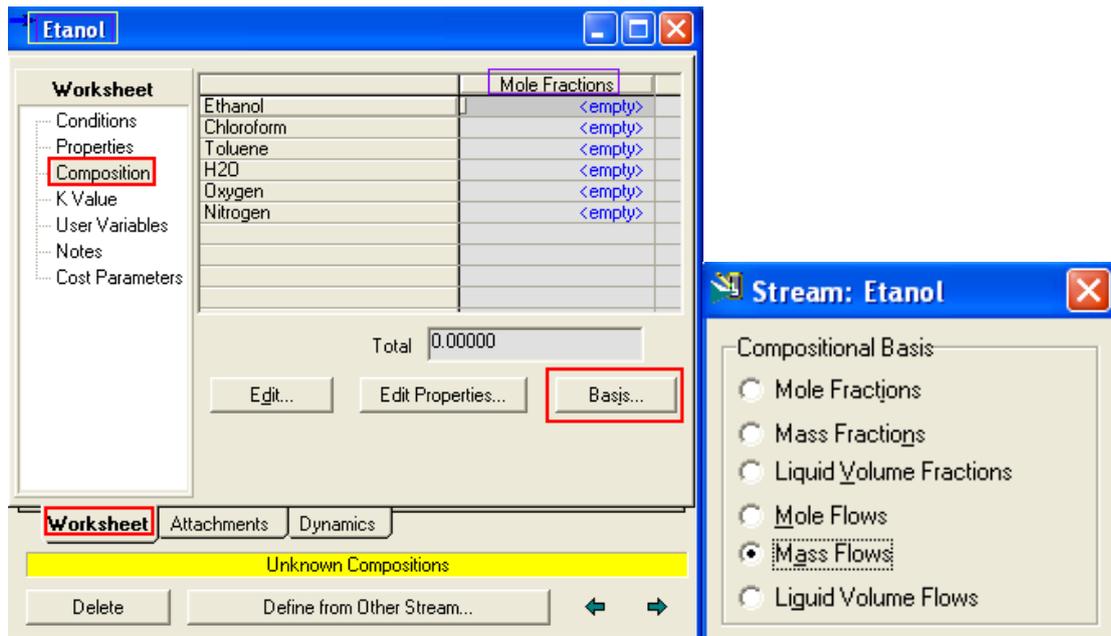
Seleccionar mediante un click en la paleta de objetos la flecha azul o roja, según se desee incorporar una corriente de materia o energía, y volver a clickear en el PFD. Se puede visualizar la corriente representada mediante una flecha celeste.

Para dar especificaciones a la corriente debemos hacer doble click en la corriente y aparecerá el visor de propiedades de las corrientes. Se puede cambiar el nombre de la corriente simplemente escribiendo un nombre nuevo en la caja *Stream Name*.



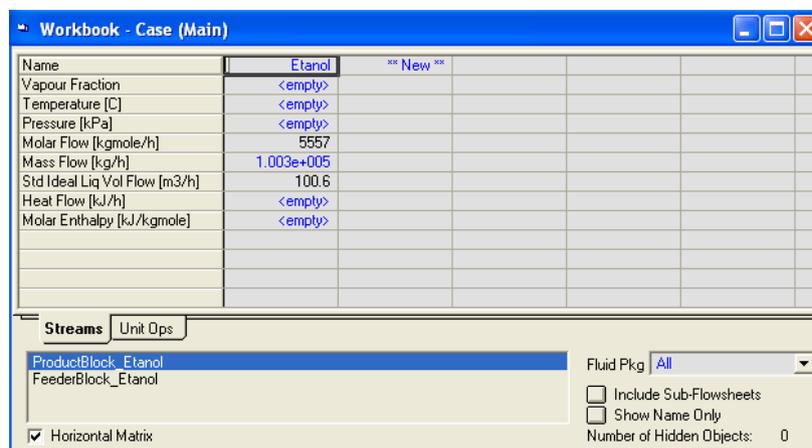
La barra amarilla en la parte inferior indica la falta de información para definir completamente la corriente.

En HYSYS se puede seleccionar la base para definir las composiciones. Dentro de la opción *Compositions* haciendo clic en el botón *Basis*, aparece la caja de diálogo que permite elegir una base entre las diferentes opciones.

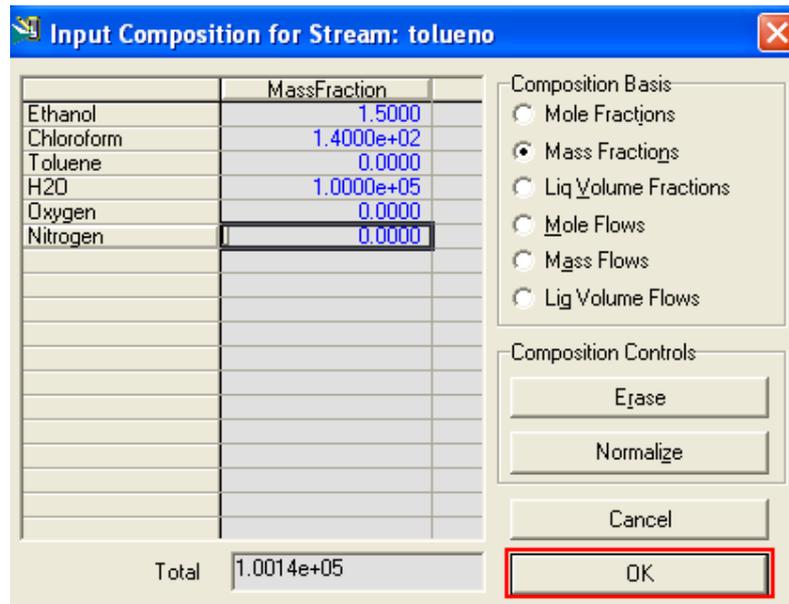


2.2.2 Ingreso de corrientes desde el workbook

Para abrir o desplegar el *Workbook*, presione el botón de Workbook  sobre la barra de botones. Luego ingrese el nombre de la corriente en la celda ****New****.



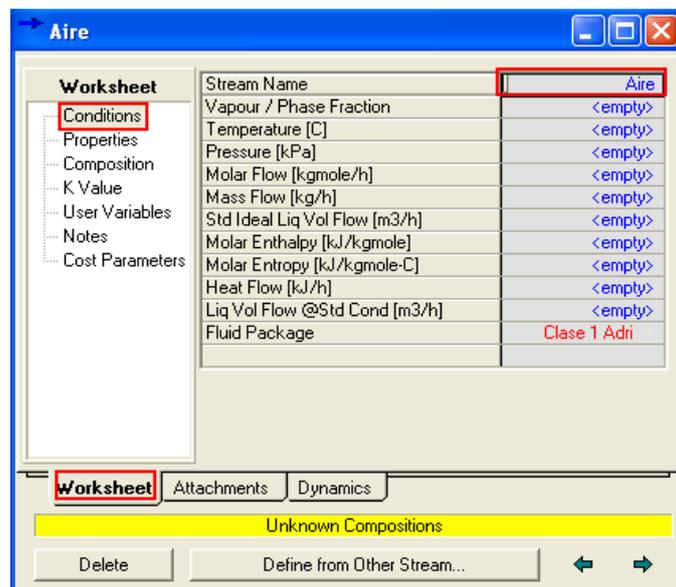
Para especificar la composición hacer doble click en <empty> de la fila *Mass Flow*



Al pulsar el botón OK se regresa a la ventana del PFD donde se ha incorporado la nueva corriente.

2.2.3 Ingreso de corrientes desde la barra de menú

Pulsando <F11> cuando estamos en modo simulación, aparece el visor de propiedades. En la celda *Stream Name* colocamos el nombre de la corriente.

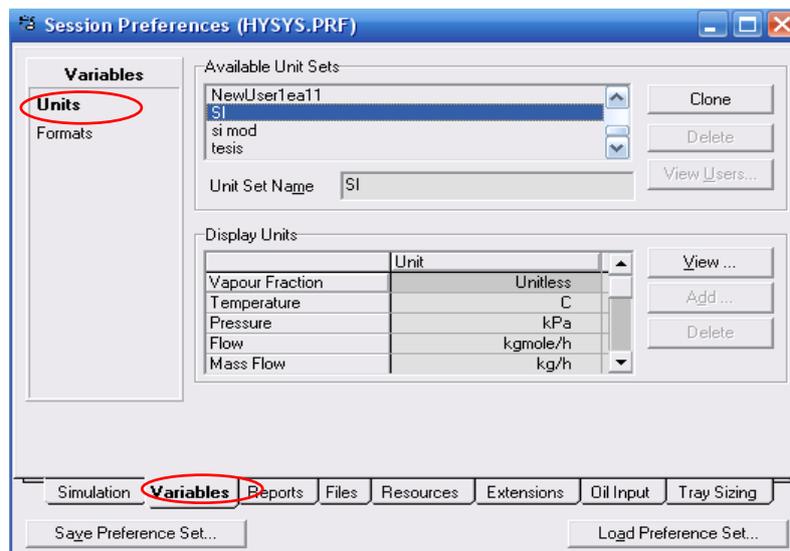


Seleccionamos la opción *Compositions* donde se puede cambiar de base de unidades para las corrientes seleccionando *Basis*, o seleccionando directamente *Edit*.

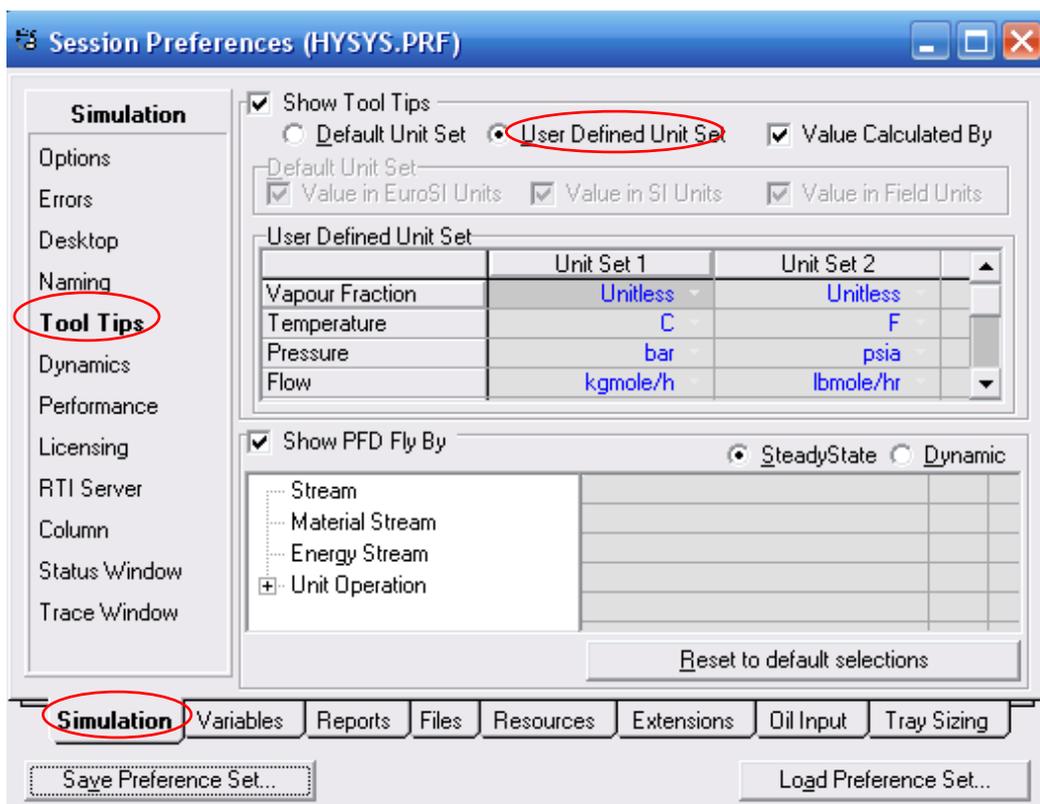
2.3 Selección del Sistema de Unidades de trabajo

El sistema de unidades predeterminado en HYSYS es el SI, pero es posible cambiar el sistema de unidades usado para exteriorizar las diferentes variables.

Para esto del menú “Tools”, seleccione “Preferentes”. Luego cambie a la pestaña “variables”, y a continuación vaya a la opción dentro de “Variables” que se llama “Units”; aquí se puede seleccionar el sistema deseado.



Una alternativa es crear uno nuevo con el conjunto de unidades adecuadas para mostrar las variables. Para ello seleccionar la pestaña “Simulation”, luego presionar “Tool Tips” y a continuación seleccionar “User Defined Unit Set”.



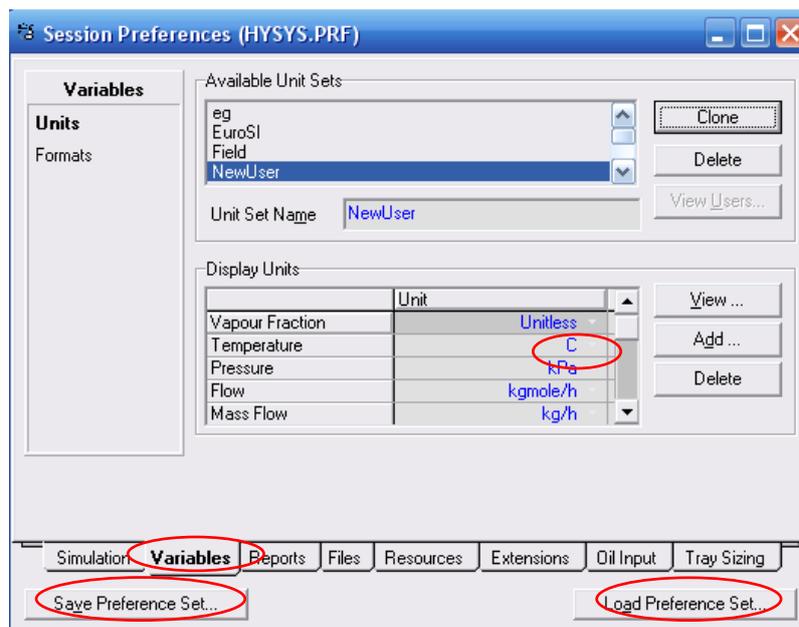
Pasar a la pestaña “Variables”, y al seleccionar “Units” aparecen los sistemas de unidades (Por ejemplo, la unidad por defecto para la presión es kPa. Y se desea cambiar a atm.). Para crear el nuevo conjunto presionar el botón “Clone”. “NewUser” aparecerá resaltado en azul en “Unit Set Name” (este es el nombre que asigna por defecto HYSYS al nuevo set de unidades); para cambiarlo se debe ingresar el nombre a asignar al set de unidades en esta casilla y al hacer Enter se actualiza el nombre en el campo “Available Unit Sets”. A continuación se pueden modificar las unidades asignadas a cada variable.

Por ejemplo al seleccionar la celda “Pressure” y al hacer click en kPa se abre una lista desplegable de las unidades disponibles, de la cual se selecciona atm, haciendo clic.

Una vez definido el nuevo conjunto de unidades se debe presionar el botón “Close” y se regresa al entorno de simulación.

Para guardar el sistema de unidades definido presionar “Save Preference Set”.

Para cargar este sistema en un trabajo cualquiera “Load Unit Set”.



Luego cierre esta ventana haciendo clic en  para volver a la simulación.

2.4 Cálculos Instantáneos

Como se mencionó, HYSYS puede efectuar 5 tipos de cálculos instantáneos sobre las corrientes:

-  P-T
-  Vf-P
-  Vf-T
-  P-Entalpía Molar
-  T-Entalpía Molar.

Una vez que la composición de la corriente y dos parámetros cualesquiera: temperatura, presión, fracción de vapor o la entalpía molar son conocidas, HYSYS realiza un cálculo instantáneo en la corriente, calculando los otros dos parámetros.

Con las capacidades instantáneas de HYSYS, se calcula el punto de rocío y punto de burbuja.

Especificando una fracción de vapor de 1 y la presión o la temperatura de la corriente, HYSYS calculará la Temperatura o la Presión de Rocío.

Para calcular la Temperatura o la Presión de Burbuja, debe introducirse una fracción de vapor de 0 y cualquier presión o cualquiera temperatura.

Ejercicio propuesto:

Dada de la corriente de gas cuyo Flujo es de 100 kg/h, y de composición:

Componente	Fracción molar
N2	0.0025
H2S	0.0237
CO2	0.0048
C1	0.68
C2	0.1920
C3	0.0710
i-C4	0.0115
n-C4	0.0085
i-C5	0.0036
n-C5	0.0021
C6	0.0003
H2O	0.0000
C7+	0.0000

Realice el cálculo en el flash para esta corriente, aplicando el paquete termodinámico UNIQUAC. Ajuste una presión de 7500 kPa y una temperatura de 10° C. ¿Cuál es la fracción de vapor?

Realice el cálculo de punto de rocío a esta corriente. Fije una presión de 7500 kPa. ¿Cual es la temperatura de rocío?

3. Simulación de bombeo de agua

Se propone calcular la potencia necesaria para bombear un flujo de 0,551 [kgmol/h] de agua que se encuentra a una temperatura de 253 [°K] desde una presión de 101 [KPa] hasta 202 [KPa] empleando los siguientes paquetes fisicoquímicos:

- a) NRTL
- b) Wilson

c) UNIQUAC

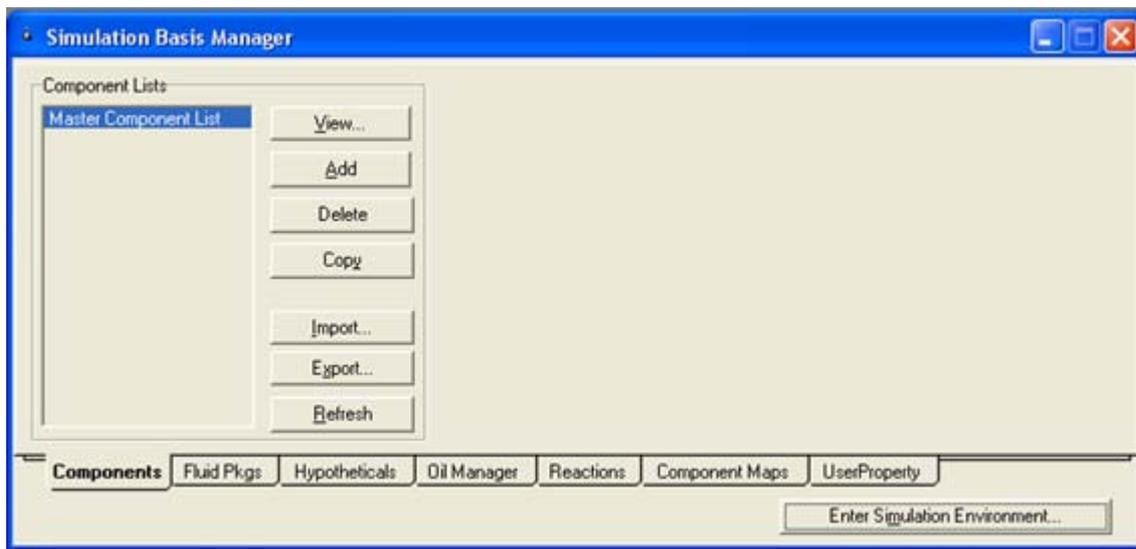
d) SRK

Considerar la fase vapor como ideal

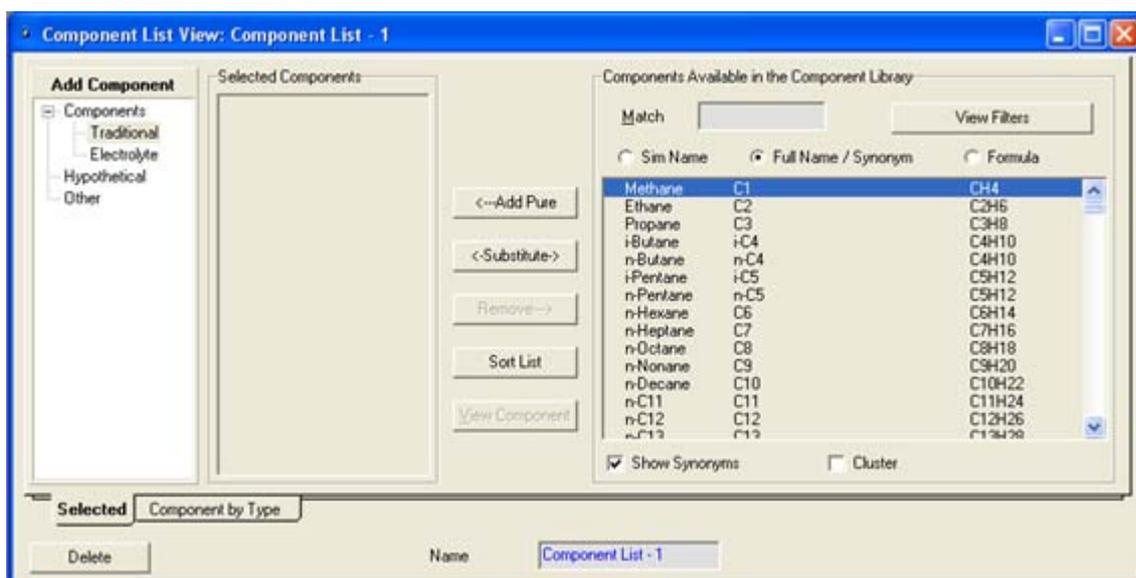
Armado del caso:

Ejecutar el programa Hysys® e iniciar un nuevo caso desde *File-New-Case* (o Ctrt N) o bien haciendo clic en el icono: 

Se despliega la siguiente ventana (Administrador Básico de Simulación):

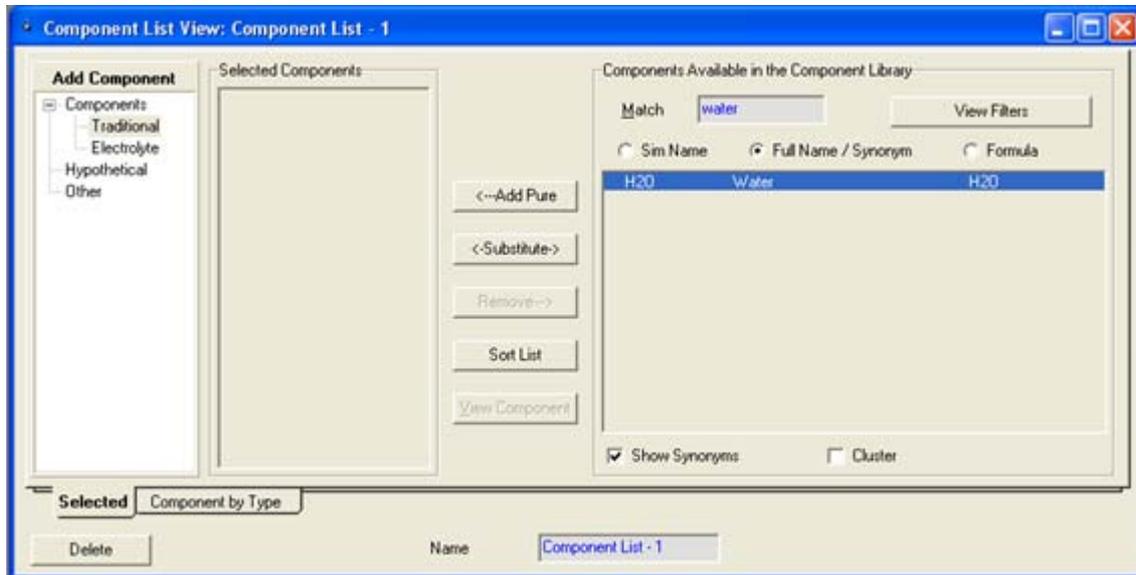


Desde la etiqueta “*Components*”, hacer clic en “*Add*” (alt+A) para agregar una lista de componentes. Se despliega la ventana:

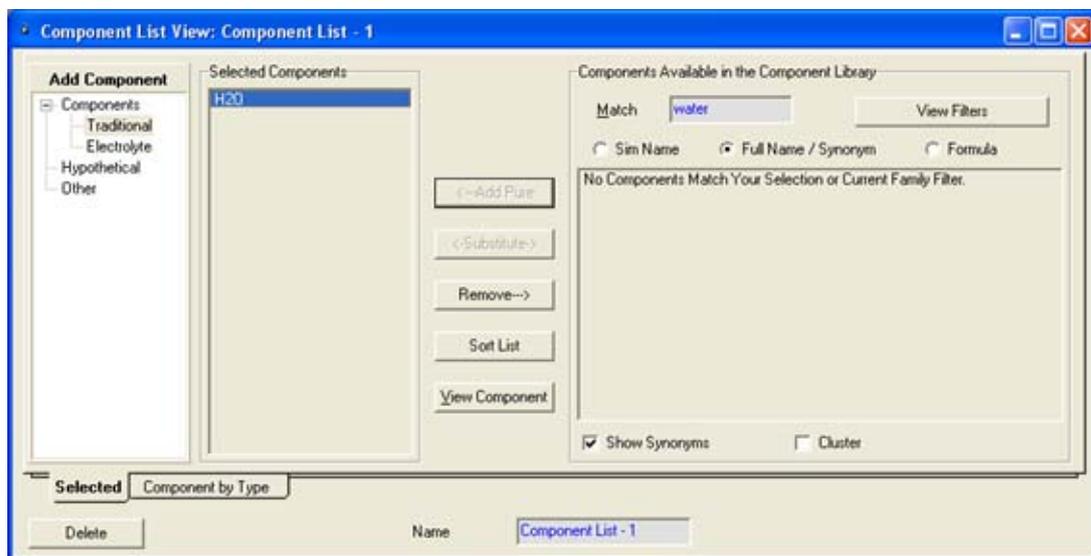


Desde el cuadro de texto *Match* escribir el compuesto por su nombre en inglés, el nombre simplificado o su fórmula (ver qué casilla de opciones está activada: “*Sim name*”- “*Full name*” o

“Formula”). En nuestro caso “water” debería resaltar un solo componente (escribiendo H₂O aparecen todos los componentes que tienen 2 hidrógenos y un oxígeno aparte de otros elementos y no solo el agua).



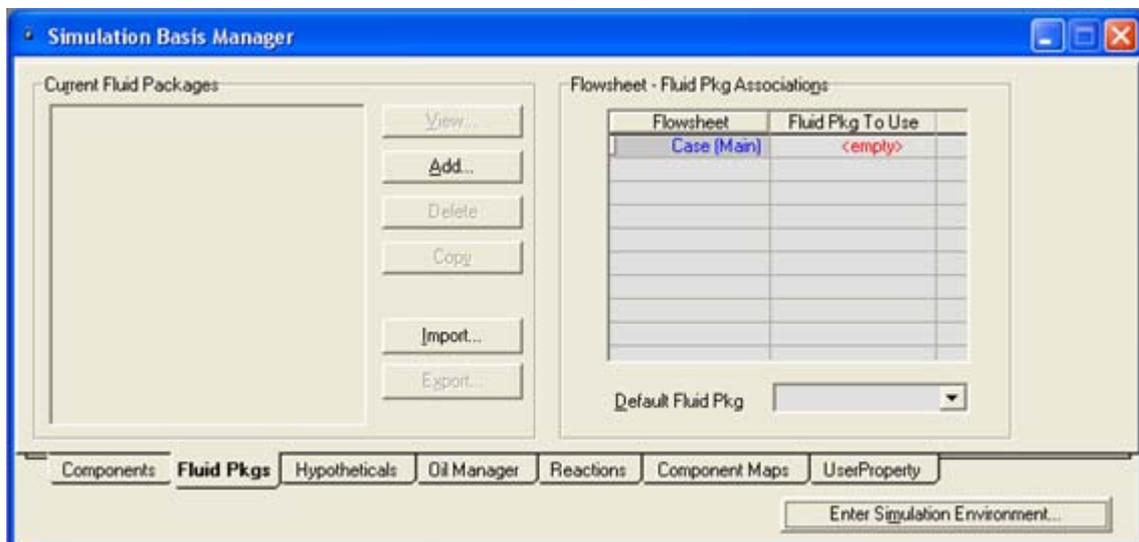
Seleccionar haciendo clic en “←Add Pure” o mediante la tecla <ENTER>



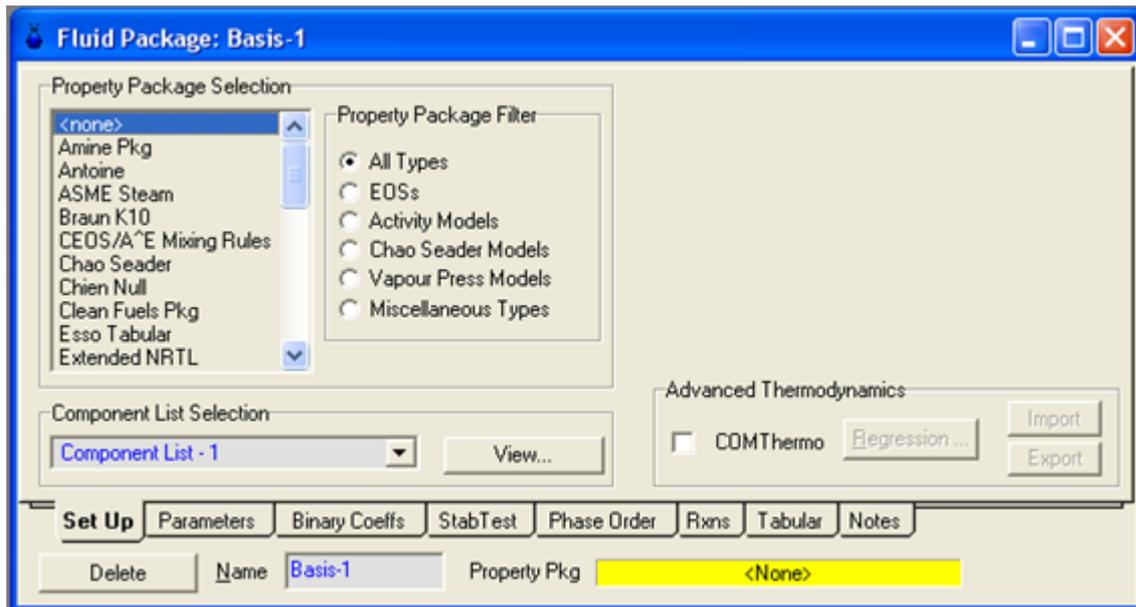
Cerramos la ventana anterior y volvemos al *Simulation Basis Manager*. Se ve que aparece la lista de componentes recién creada:



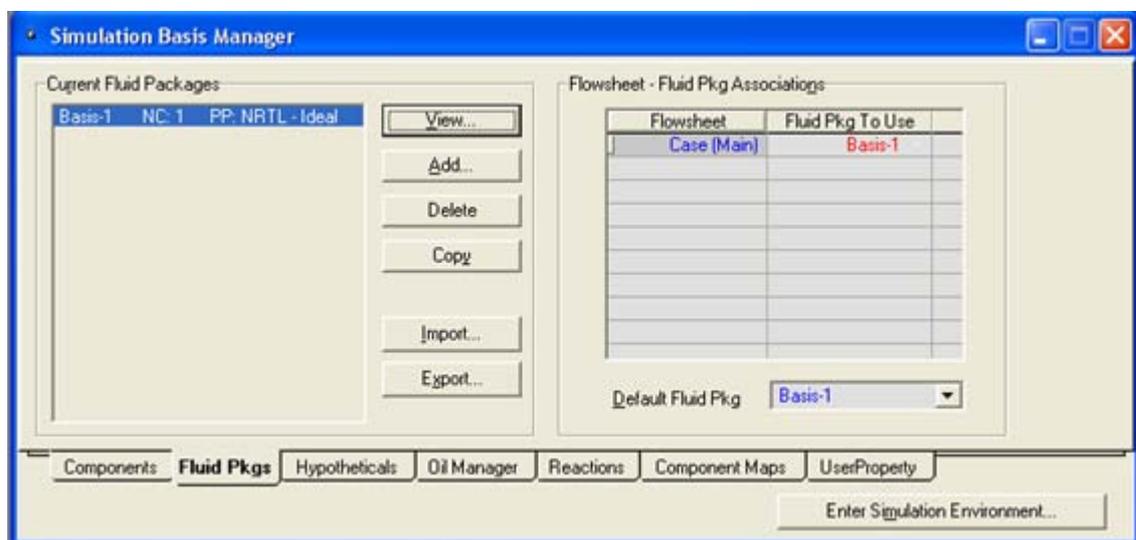
Se selecciona la nueva lista (que se mostrará resaltada) y se ingresa a la pestaña “*Fluid Pkgs*”: Paquete de Fluidos. El mismo contiene toda la información necesaria para los cálculos físicos de las propiedades de los componentes.



Se hace clic en “*Add*” para agregar un nuevo paquete:



Si el botón de opciones esta seleccionado en “*All Types*” se despliegan todos, de lo contrario solo los que entren en la categoría seleccionada, ejemplo “*EOSs*” (basados en ecuaciones de estado), “*Activity Models*” (para los basados en modelos de actividad), etc. Para el punto “a” del problema seleccionamos “*NRTL*” y cerramos la ventana. Volvemos a la ventana básica:



Como se mencionó, es posible cambiar el sistema de unidades usado desde el menú *Tools* → *Preferences*. Ingresando a la etiqueta “*Variables*” se selecciona la opción “*Units*”, y dentro de sus campos se encuentran los distintos sets de unidades disponibles. Para agregar un sistema de unidades diferente a los que están disponibles, se debe seguir el camino: *Tools* → *Preferences* → *Simulation* → *Tool Tips* → *User Defined Unit Set* → *Variables* → *Clone*.

Haciendo clic en el botón “*Enter Simulation Environment.*” abandonamos el entorno básico y vamos al de simulación.

Se aprecian dos ventanas, la de Diseño del Diagrama de Flujo (*PFD*) y la Paleta de Objetos.

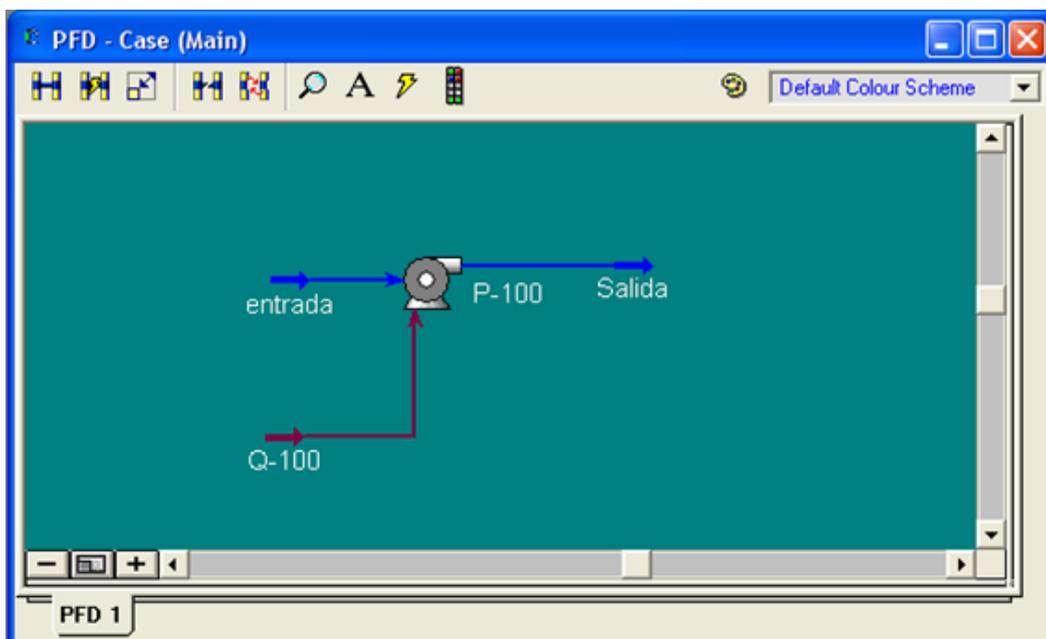
Para agregar equipos se hace un clic sobre el icono del elemento de interés representado en la paleta de objetos (como ayuda, una vez en foco sobre un icono, aparece su nombre bajo el cursor del mouse), y luego un clic sobre la ventana de diseño. Si no es visible la paleta de objetos presionar la tecla de función “F4”.

Comenzamos introduciendo dos corrientes materiales (flecha azul ) y una de energía (flecha roja ) .

Finalmente se agrega una bomba centrífuga () .

Haciendo doble clic en la corriente 1 le especificamos el nombre, composición, presión, temperatura y flujo molar. A la corriente 2 solo se le especifica la presión de descarga y se le cambia el nombre, según desee indentificarla el usuario.

Finalmente haciendo doble clic en la bomba centrífuga, se conectan las corrientes utilizando la pestaña “*Design*” → “*Connections*”. El flowsheet debería quedar de la siguiente manera (salvo el nombre de las corrientes y/o equipos que depende de la especificación seleccionada por el usuario):



Una vez especificados los datos necesarios (los que cierran los grados de libertad del sistema) el simulador está en condiciones de obtener la solución de los modelos respectivos y por lo tanto, el cálculo de todos los parámetros para cada corriente y/o equipos en el diagrama de flujo.

Haciendo clic en cualquiera de las corrientes se pueden ver todos los valores que la definen calculados. La potencia requerida por la bomba se puede observar haciendo clic en “*Q-100*”, que es la corriente de energía asociada a la bomba. Otra forma cómoda es ver todas las corrientes y equipos en forma tabular desde “*Workbook*” cuyo botón esta en la barra de superior: 

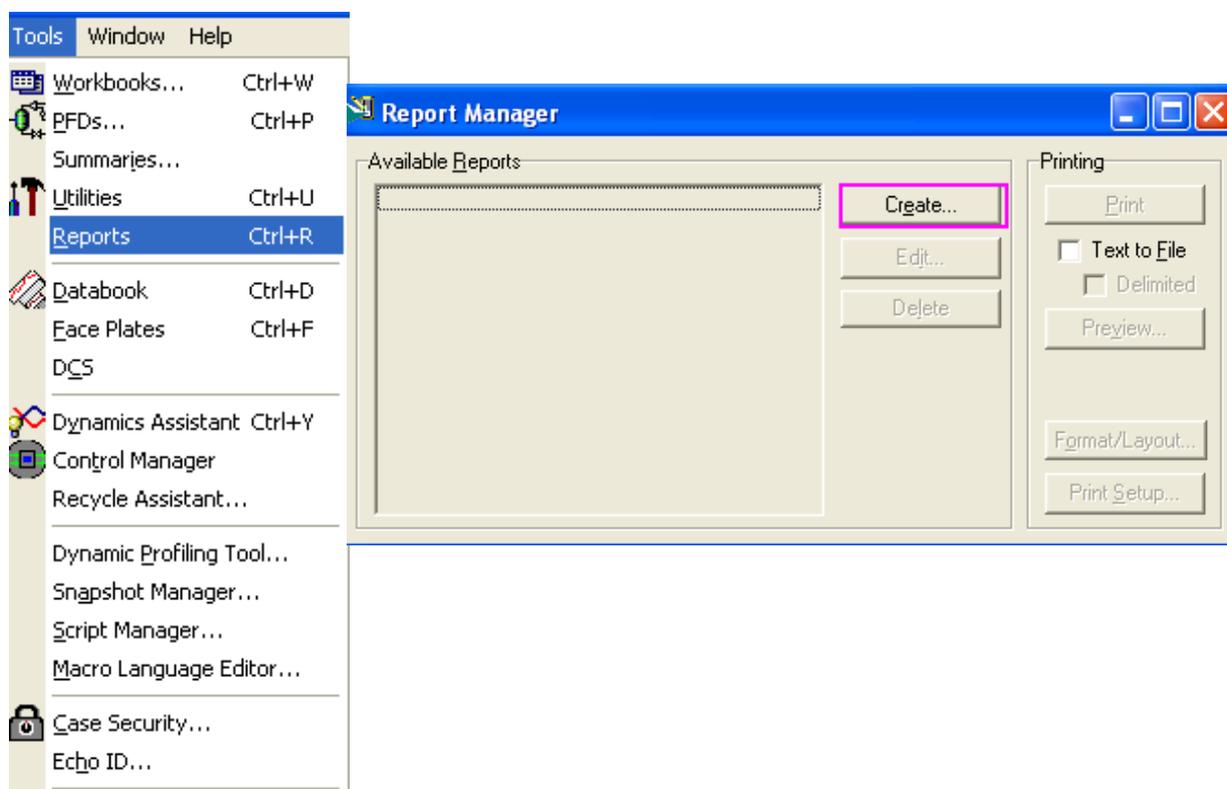
Anotar en una tabla la potencia calculada en las unidades [KCal/h] y repetir todo lo anterior para los otros paquetes de estimación de propiedades fisicoquímicas. Para ello volver a “*Basis Environmental*” haciendo clic en el botón de la barra superior: 

Una vez en *Basis* y resaltado el paquete actual se puede modificar haciendo clic en el botón “*View*”. Una vez seleccionado el nuevo modelo se vuelve al medio ambiente de trabajo mediante “*Enter Simulation Environment*” desde donde se pueden observar los nuevos valores calculados.

¿Qué podemos concluir? ¿Hay diferencias en los resultados obtenidos con los diferentes modelos de estimación de propiedades fisicoquímicas? ¿Cuál refleja mejor la realidad según su criterio?

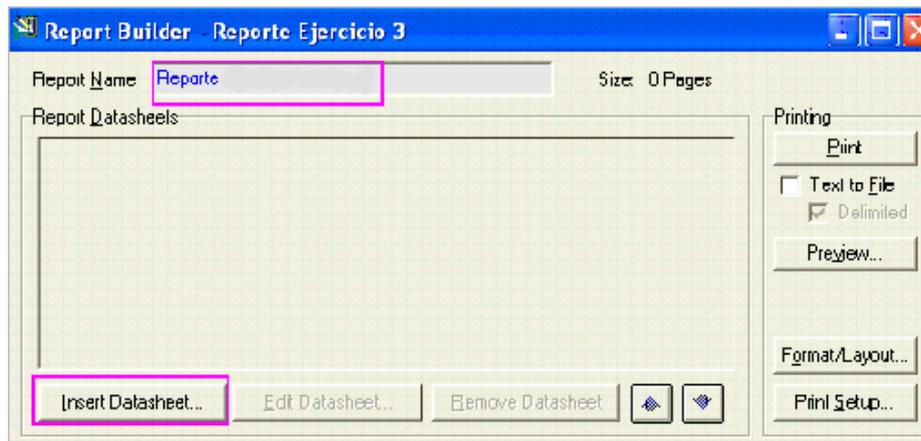
3.1 Generación de reportes

Para generar un reporte general del caso anterior hacer un clic sobre el botón *Tools* → *Reports*.

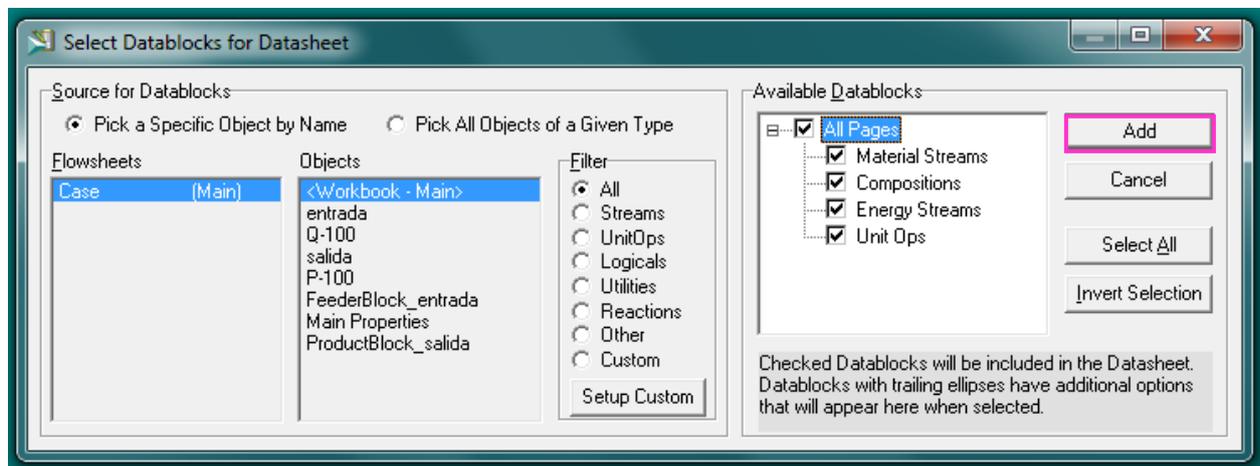


Hacer clic en *Create*, y dar un nombre al reporte.

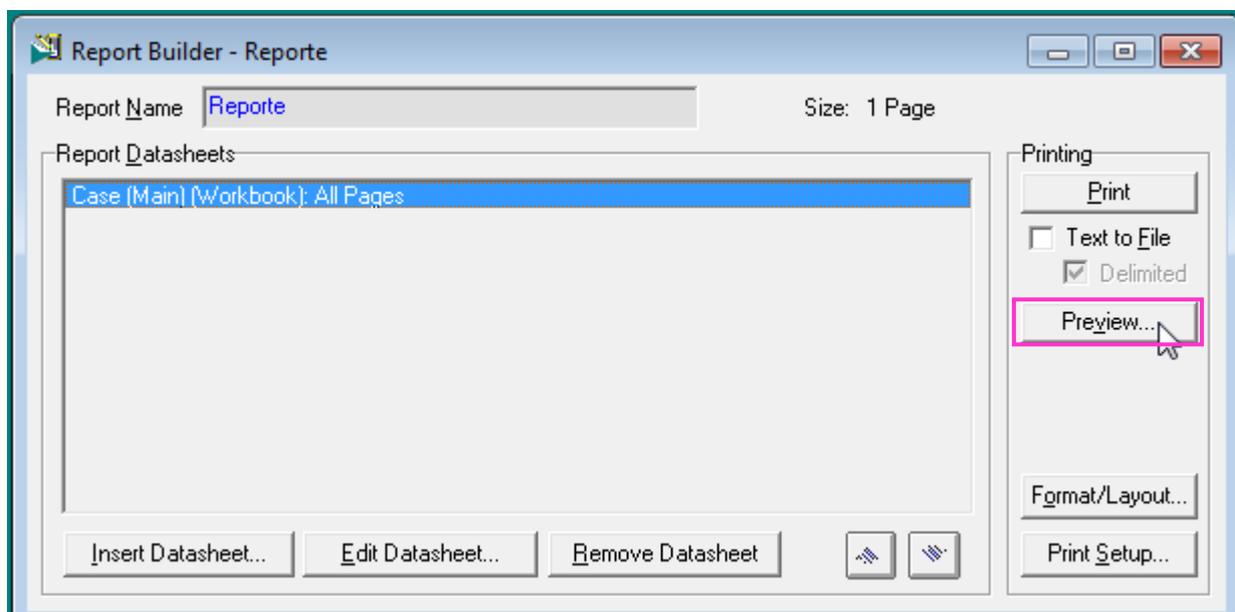
Luego presionar el botón *Insert datasheet*.



Seleccionar <Workbook-Main> y luego “Add” al reporte.



Una vista preliminar del informe se puede observar presionando el botón “Preview” en la ventana “Report Builder”:



Vista del informe:

1	 LEGENDS Calgary, Alberta CANADA		Case Name: C:\Program Files\Hyprotech\HYSYS 3.2\NoName.hsc			
2			Unit Set: si mod			
3			Date/Time: Thu May 02 21:25:42 2013			
4						
5						
6	Workbook: Case (Main)					
7						
8	Material Streams Fluid Pkg: All					
9						
10	Name	entrada	salida			
11	Vapour Fraction	0.0000	0.0000			
12	Temperature (K)	253.0 *	253.0			
13	Pressure (atm)	1.000 *	2.000 *			
14	Molar Flow (kgmole/h)	0.5510 *	0.5510			
15	Mass Flow (kg/h)	9.926	9.926			
16	Liquid Volume Flow (m3/h)	9.946e-003	9.946e-003			
17	Heat Flow (kcal/h)	-3.797e+004	-3.797e+004			
18						
19	Compositions Fluid Pkg: All					
20	Name	entrada	salida			
21	Comp Mole Frac (H2O)	1.0000 *	1.0000			
22						
23	Energy Streams Fluid Pkg: All					
24	Name	Q-100				
25	Heat Flow (kcal/h)	0.3081				
26						
27	Unit Ops					
28						
29	Operation Name	Operation Type	Feeds	Products	Ignored	
30	P-100	Pump	entrada	salida	No	
31			Q-100			500.0 *