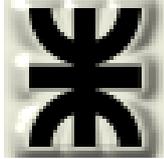


Integración IV



Trabajo práctico N° 4: Estimación de propiedades termodinámicas y generación de curvas de equilibrio con HYSYS. Uso de Spreadsheets

Generación de tablas de propiedades y curvas de equilibrio L-V.

1. Manejo de la Utility: *Property Table* de HYSYS.

Ésta permite examinar tendencias de propiedades de la variable dependiente sobre un rango de variación de la variable independiente, en formato tabular y gráfico.

Se propone estimar la Capacidad calorífica molar y la Densidad del Benceno como función de la temperatura utilizando la herramienta “Utilities”.

Sugerencia: Seleccionar el paquete termodinámico WILSON con modelo de vapor SRK (no ideal).

Condiciones de la corriente:

Componente: Benceno, *Temperatura:* 200 °F, *Presión:* 300 psia, *Flujo Másico:* 1000 lb/hr

Una vez especificadas las condiciones de la corriente, nos queda:

The image shows two overlapping windows from the HYSYS software. The background window is titled 'Benceno' and displays a 'Worksheet' with the following data:

Worksheet	Stream Name	Benceno
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0.0000
Properties	Temperature [C]	93.33
Composition	Pressure [bar]	6.895
K Value	Molar Flow [kgmole/h]	453.6
User Variables	Mass Flow [kg/h]	3.543e+004
Notes	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	40.16
Cost Parameters	Molar Enthalpy [kcal/kgmole]	1.413e+004
	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	-61.54
	Heat Flow [kcal/h]	6.407e+006
	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	40.13
	Fluid Package	

The foreground window is titled 'Input Composition for Stream: Benceno' and shows a table for defining the composition:

	MoleFraction
Benzene	1.0000
Total	1.0000

On the right side of the 'Input Composition' dialog, the 'Composition Basis' is set to 'Mole Fractions' (indicated by a red box). Other options include Mass Fractions, Liq Volume Fractions, Mole Flows, Mass Flows, and Liq Volume Flows. At the bottom, there are buttons for 'Erase', 'Normalize', 'Cancel', and 'OK' (also indicated by a red box).

En primer lugar, se debe seleccionar: *Tools* → *Utilities*. Dentro de la lista de utilidades disponibles seleccionar “*Property Table*” y hacer clic en el botón “*Add Utility*”.

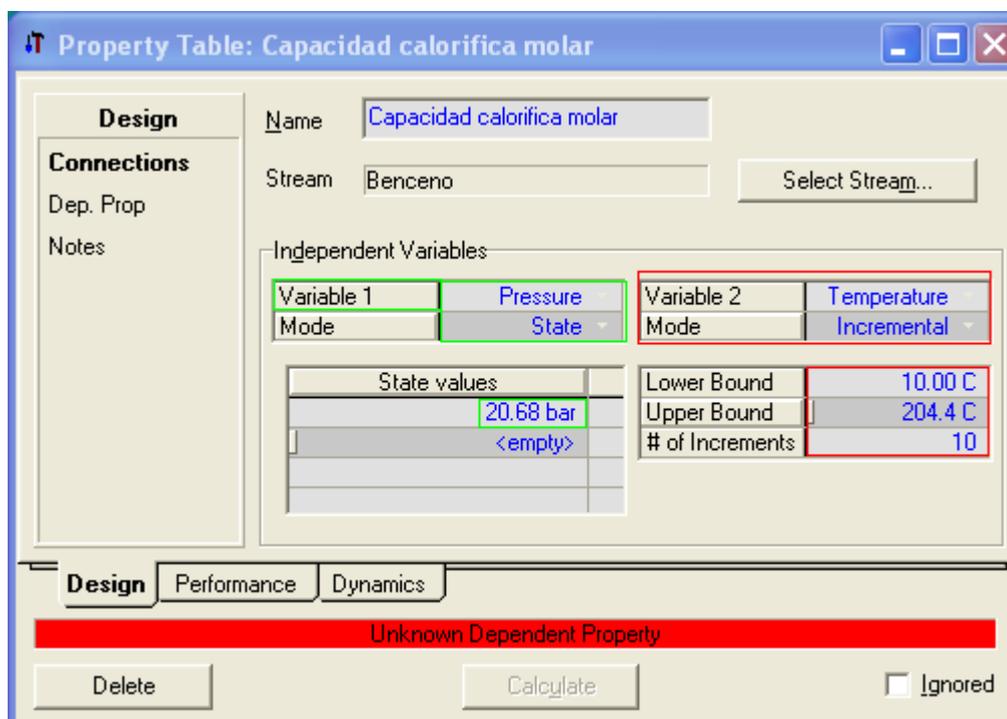
Nombramos como Capacidad calorífica molar a dicha tabla de propiedades.

Es necesario indicar la corriente objeto de simulación. Esto se realiza presionando el botón *Select Stream* → *Benceno*.

The image displays two screenshots from the Aspen Plus software interface. The top screenshot shows the 'Available Utilities' dialog box, where the 'Property Table' utility is selected in a list. The 'Add Utility' button is highlighted with a red box. The bottom screenshot shows the 'Property Table: Capacidad calorífica molar' dialog box. The 'Name' field is set to 'Capacidad calorífica molar'. The 'Stream' field is empty, and the 'Select Stream...' button is highlighted with a red box. A red arrow points from this button to the 'Select Process Stream' dialog box above it. The 'Property Table' dialog also shows independent variables for Temperature and Pressure, and a red bar at the bottom indicating 'Requires a Stream'.

Especificar como Variable Independiente 1: Pressure y modo: State.

El “*Mode*” determina si se quiere declarar los valores actuales o usar un rango de valores dentro de los límites superior e inferior especificados.



Luego ingresar como *State Value* el valor de 300 psia.

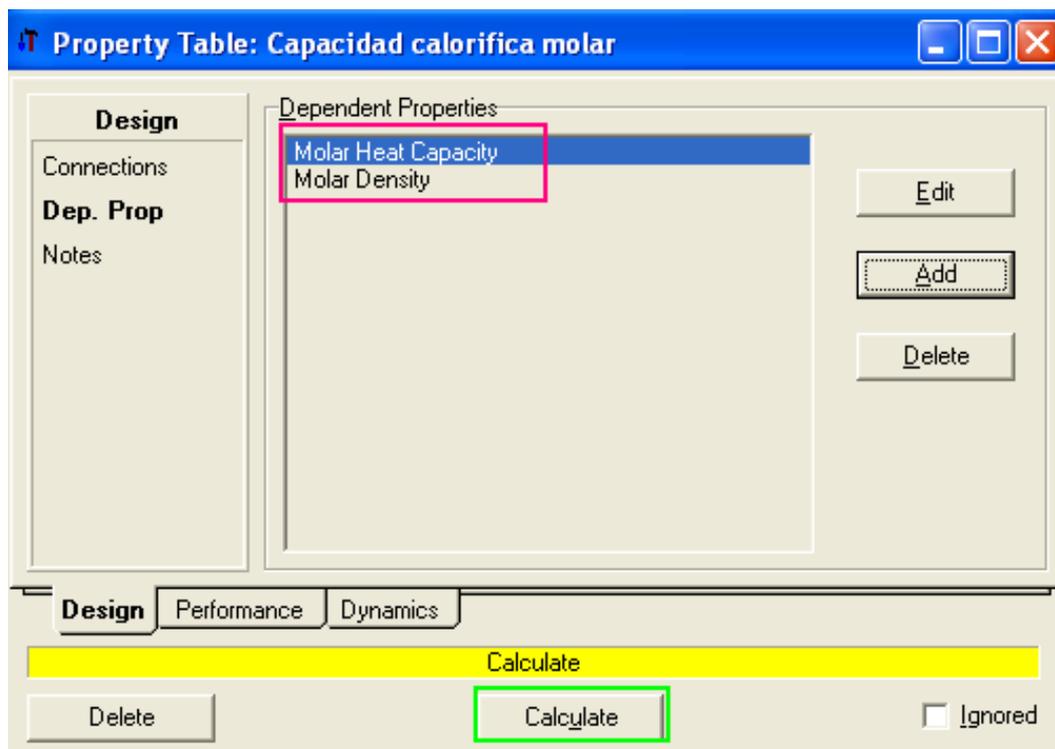
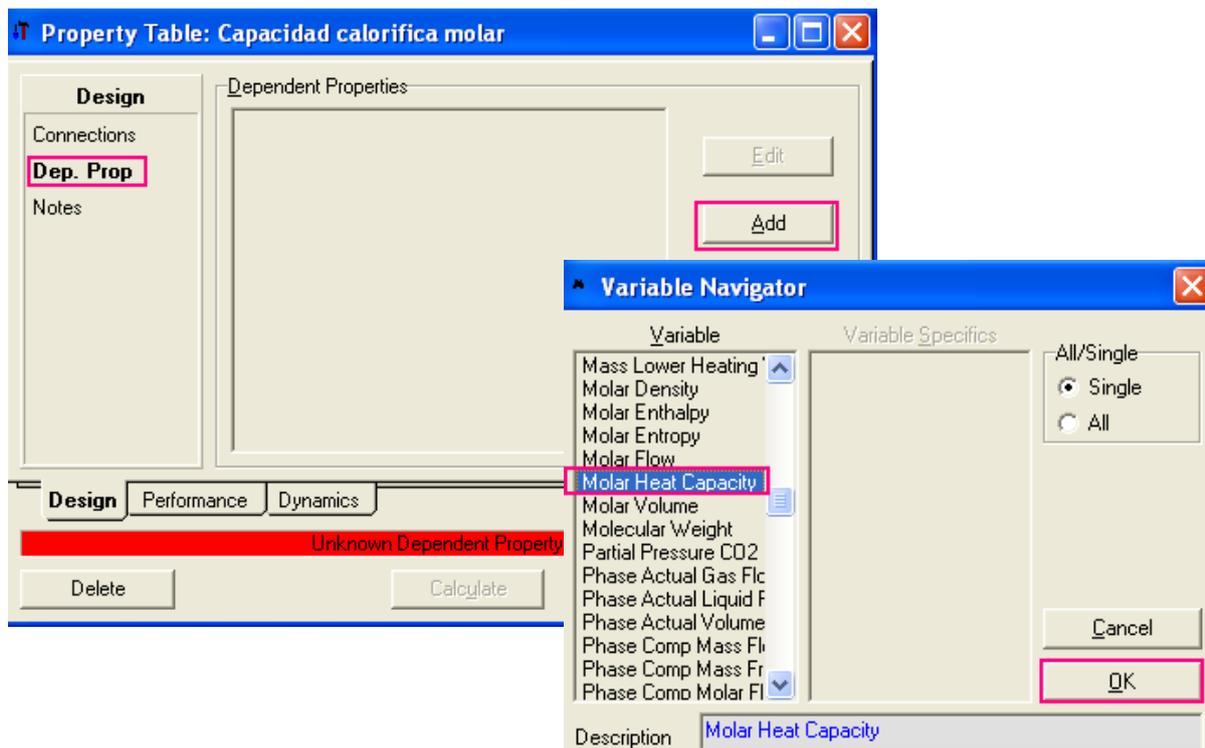
Se puede ingresar mas de un valor para *State values* si se desea, obteniéndose curvas paramétricas.

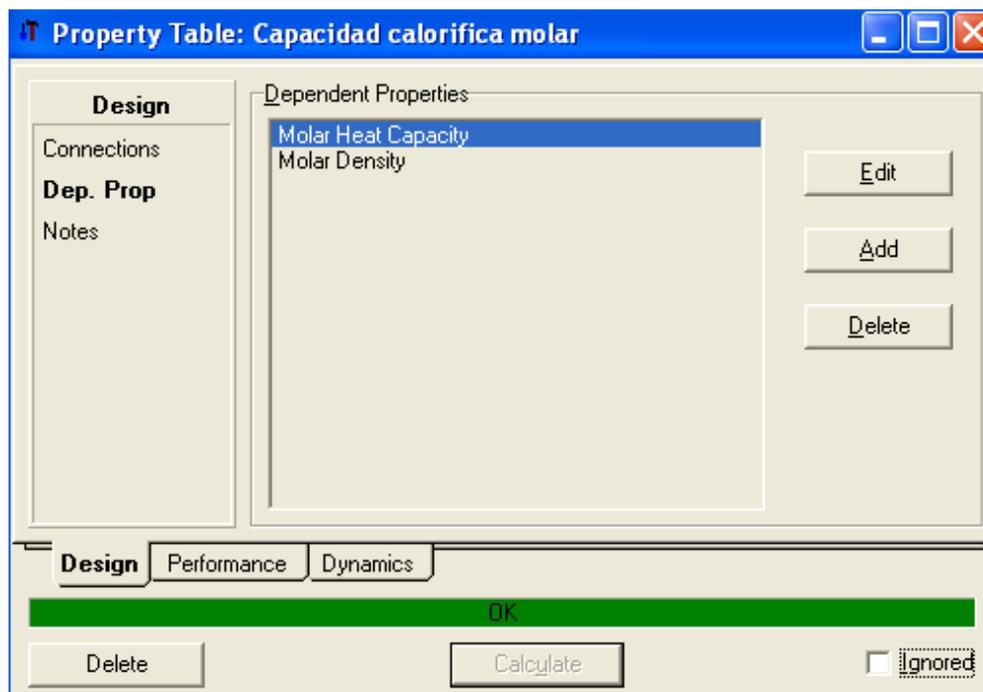
A continuación fijar la Variable Independiente 2: Temperatura, *Mode* como incremental y luego fijar el Limite inferior (*Lower bound*) como 50 °F, el límite superior (*Uper Bound*) como 400 °F, y número de incrementos como 10.

Para especificar la Capacidad calorifica molar, hacer clic “*Dep. Prop*”, y luego en “*Add*”. Bajo la columna “*Variable*” de la ventana que se abre seleccionar “*Molar Heat capacity*” y hacer clic en “*OK*”.

Del mismo modo, se agrega la propiedad “*Molar Density*”.

Finalmente al hacer clic en el botón “*Calculate*”, se efectúan los cálculos y la barra inferior se torna de color verde.



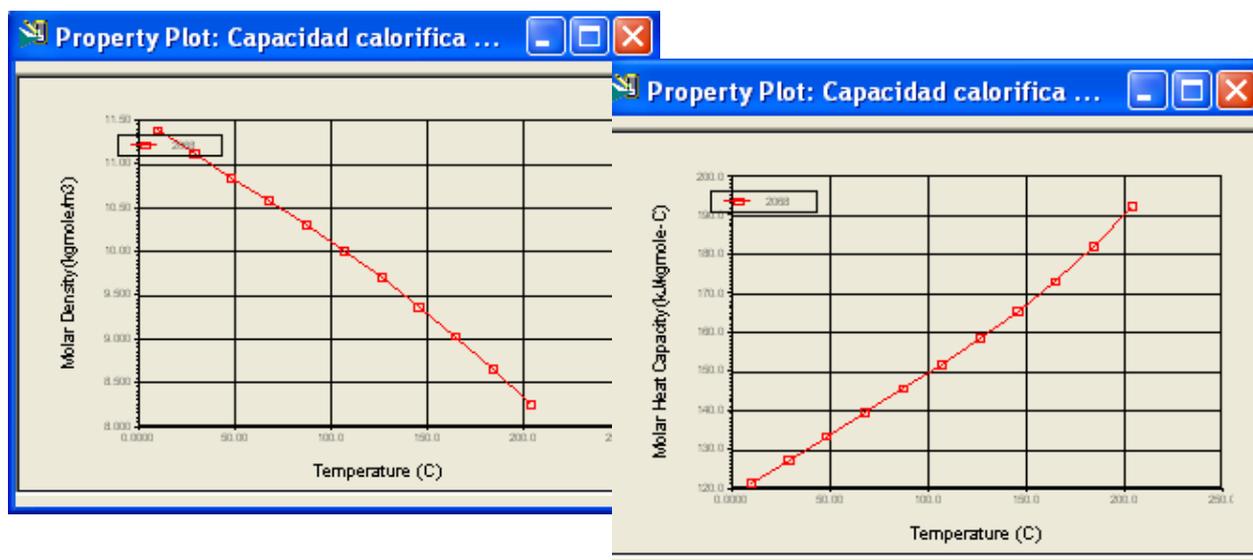
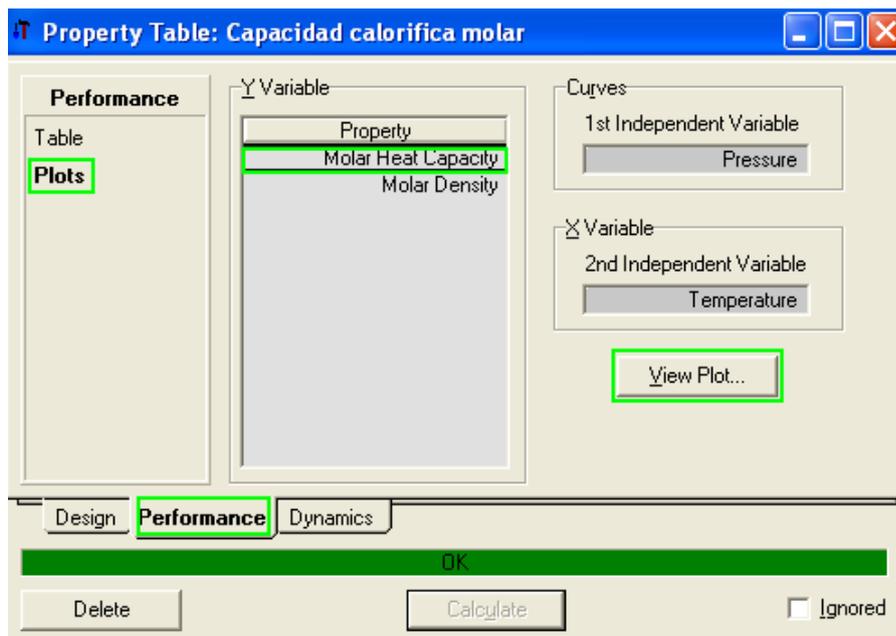


En la pestaña “*Performance*”, los resultados pueden visualizarse haciendo clic en “*Table*” o “*Plot*”.

Environment: Case (Main)
Mode: Steady State

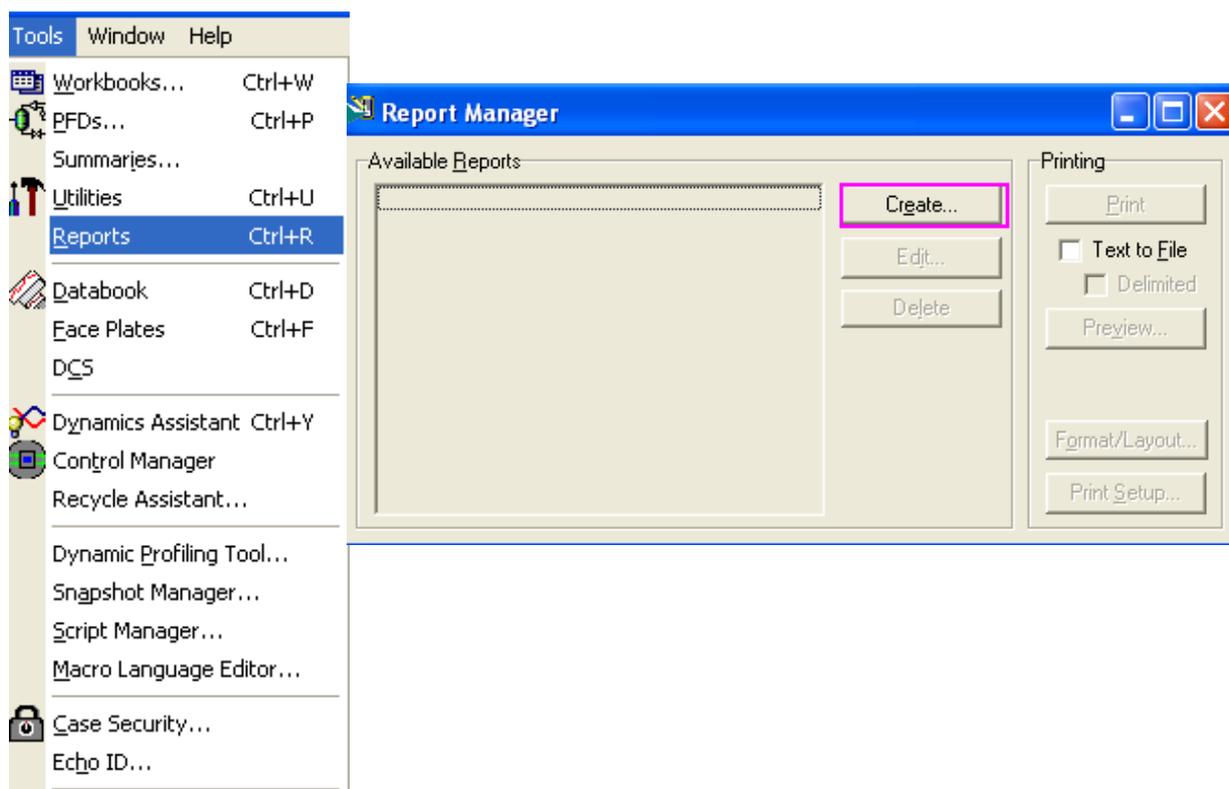
Pressure [bar]	Temperature [C]	Phases	Molar Heat Capacity [kJ/kgmole-C]	Molar Density [kgmole/m3]
20.68	10.00	L	121.540	11.3901
20.68	29.44	L	127.504	11.1272
20.68	48.89	L	133.479	10.8587
20.68	68.33	L	139.506	10.5834
20.68	87.78	L	145.638	10.3000
20.68	107.2	L	151.948	10.0066
20.68	126.7	L	158.540	9.70079
20.68	146.1	L	165.562	9.37926
20.68	165.6	L	173.243	9.03721
20.68	185.0	L	181.951	8.66703
20.68	204.4	L	192.331	8.25513

Completed.

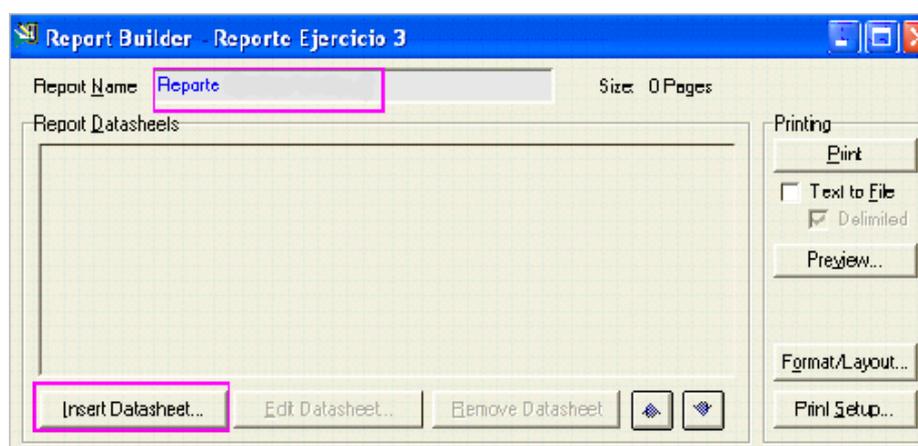


Las gráficas se pueden imprimir haciendo clic con el botón derecho del mouse sobre la gráfica → “Print Plot”.

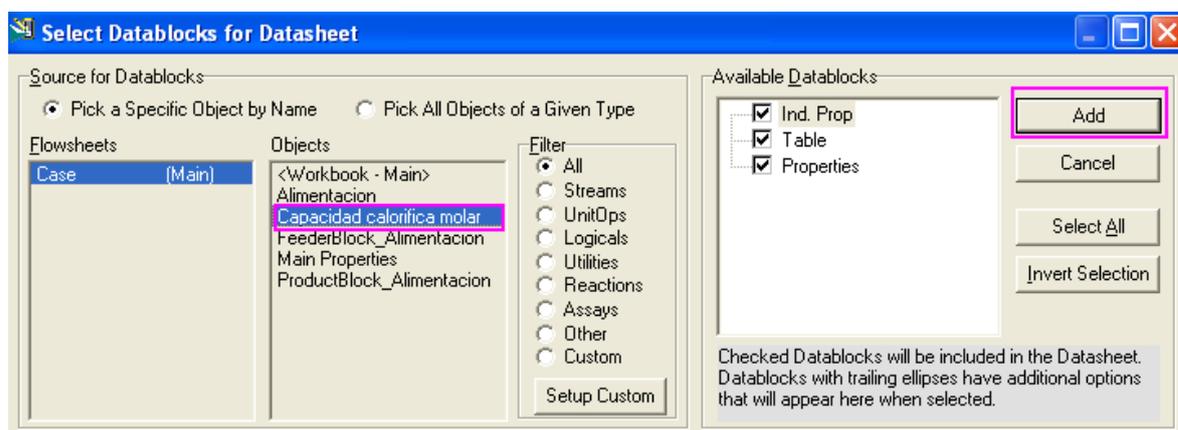
Para generar un reporte sobre la tabla de propiedades hacer un clic sobre el botón *Tools* → *Reports*.

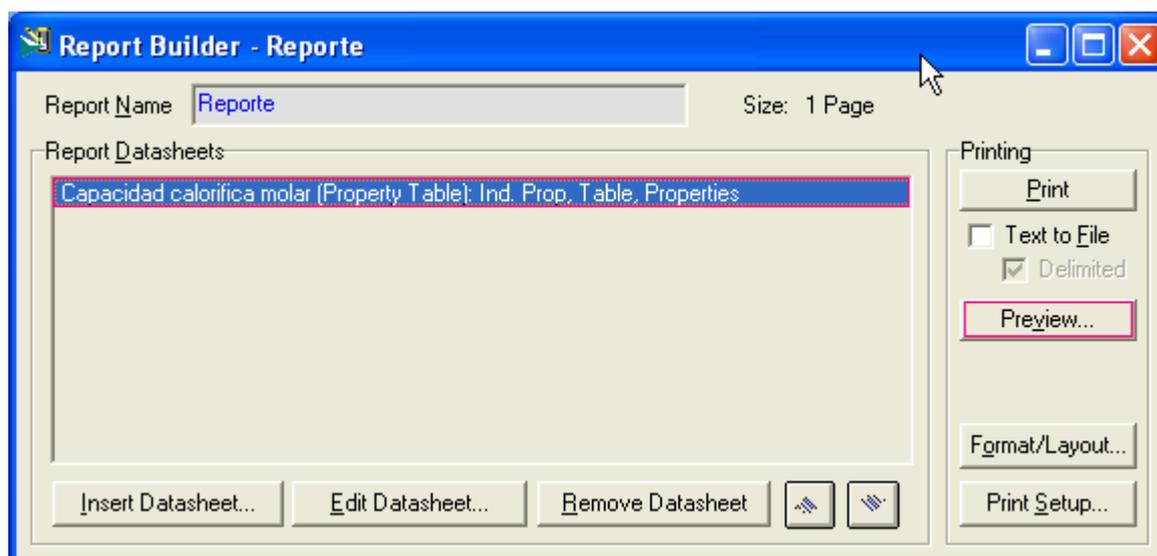


Hacer clic en *Create*, y dar un nombre al reporte. Luego presionar el botón *Insert datasheet*.



Seleccionar la tabla de propiedades que se creó previamente y luego “Add” al reporte.





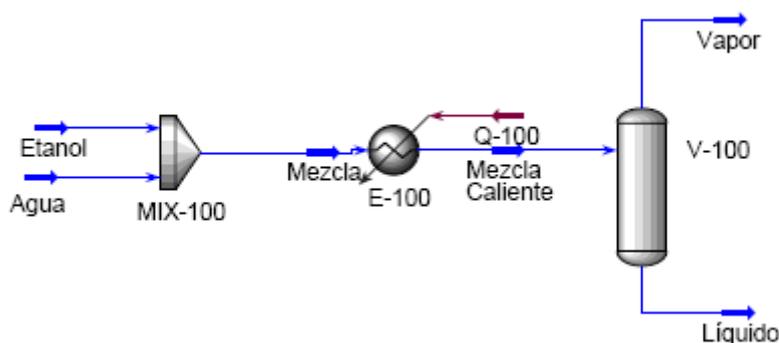
Una vista preliminar del informe se puede observar presionando el botón “*Preview*” en la ventana “*Report Builder*”:

1		2		3		4		5		6		7		8		9		10		11		12		13		14		15		16		17		18		19		20		21		22		23		24		25		26		27		28		29		30		31		32		33		34		35		36		37		38		39		40		41		42		43		44		45		46		47		48		49		50		51		52		53		54		55		56		57		58		59		60																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																																					
HYPROTECH		Canada, Alberta		CANADA		Case Name:		E:\Documents and Settings		Unit Set:		MKS/ENGLISH		Date/Time:		Sun Jul 29 10:25:01 2007		Stream:		Alimentacion		Property Table:		Capacidad calorifica molar		Variable 1:		Pressure		Mode:		Case		Variable 2:		Temperature		Table:		Incremental		Lower Bound:		10.00 °C		Upper Bound:		204.4 °C		No. of Intervals:		10		TABLE		Results		Pressure		kPa		Temperature		°C		Phase		Molar Heat Capacity		kJ/mole-C		Molar Density		kg/mole-m ³		21		2068		10.00		L		121.5		11.39		22		2068		20.44		L		121.4		11.17		23		2068		30.88		L		123.5		10.86		24		2068		40.33		L		125.3		10.58		25		2068		49.79		L		126.6		10.30		26		2068		59.2		L		127.9		10.01		27		2068		68.67		L		129.3		9.701		28		2068		78.1		L		130.6		9.379		29		2068		87.5		L		131.9		9.051		30		2068		96.9		L		133.2		8.721		31		2068		106.3		L		134.5		8.393		32		2068		115.7		L		135.8		8.065		33		2068		125.1		L		137.1		7.737		34		2068		134.5		L		138.4		7.409		35		2068		143.9		L		139.7		7.081		36		2068		153.3		L		141.0		6.753		37		2068		162.7		L		142.3		6.425		38		2068		172.1		L		143.6		6.097		39		2068		181.5		L		144.9		5.769		40		2068		190.9		L		146.2		5.441		41		2068		200.3		L		147.5		5.113		42		2068		209.7		L		148.8		4.785		43		2068		219.1		L		150.1		4.457		44		2068		228.5		L		151.4		4.129		45		2068		237.9		L		152.7		3.801		46		2068		247.3		L		154.0		3.473		47		2068		256.7		L		155.3		3.145		48		2068		266.1		L		156.6		2.817		49		2068		275.5		L		157.9		2.489		50		2068		284.9		L		159.2		2.161		51		2068		294.3		L		160.5		1.833		52		2068		303.7		L		161.8		1.505		53		2068		313.1		L		163.1		1.177		54		2068		322.5		L		164.4		0.849		55		2068		331.9		L		165.7		0.521		56		2068		341.3		L		167.0		0.193		57		2068		350.7		L		168.3		0.000		58		2068		360.1		L		169.6		0.000		59		2068		369.5		L		170.9		0.000		60		2068		378.9		L		172.2		0.000		61		2068		388.3		L		173.5		0.000		62		2068		397.7		L		174.8		0.000		63		2068		407.1		L		176.1		0.000		64		2068		416.5		L		177.4		0.000		65		2068		425.9		L		178.7		0.000		66		2068		435.3		L		180.0		0.000		67		2068		444.7		L		181.3		0.000		68		2068		454.1		L		182.6		0.000		69		2068		463.5		L		183.9		0.000		70		2068		472.9		L		185.2		0.000		71		2068		482.3		L		186.5		0.000		72		2068		491.7		L		187.8		0.000		73		2068		501.1		L		189.1		0.000		74		2068		510.5		L		190.4		0.000		75		2068		519.9		L		191.7		0.000		76		2068		529.3		L		193.0		0.000		77		2068		538.7		L		194.3		0.000		78		2068		548.1		L		195.6		0.000		79		2068		557.5		L		196.9		0.000		80		2068		566.9		L		198.2		0.000		81		2068		576.3		L		199.5		0.000		82		2068		585.7		L		200.8		0.000		83		2068		595.1		L		202.1		0.000		84		2068		604.5		L		203.4		0.000		85		2068		613.9		L		204.7		0.000		86		2068		623.3		L		206.0		0.000		87		2068		632.7		L		207.3		0.000		88		2068		642.1		L		208.6		0.000		89		2068		651.5		L		209.9		0.000		90		2068		660.9		L		211.2		0.000		91		2068		670.3		L		212.5		0.000		92		2068		679.7		L		213.8		0.000		93		2068		689.1		L		215.1		0.000		94		2068		698.5		L		216.4		0.000		95		2068		707.9		L		217.7		0.000		96		2068		717.3		L		219.0		0.000		97		2068		726.7		L		220.3		0.000		98		2068		736.1		L		221.6		0.000		99		2068		745.5		L		222.9		0.000		100		2068		754.9		L		224.2		0.000	

2. Generación de curva de equilibrio liquido-vapor utilizando una Spreadsheet.

Se propone generar la curva de equilibrio liquido-vapor para la mezcla Etanol-Agua. Para ello comenzar iniciando un caso nuevo que se guardará como “CURVAS XY-etanol-agua.hsc”.

- Crear al lista de componentes: etanol y agua
- Seleccionar el paquete de propiedades UNIQUAC para la fase líquida
- Seleccionar el paquete SRK para la fase vapor
- Introducir los equipos del flowsheet que se muestra en la siguiente figura:



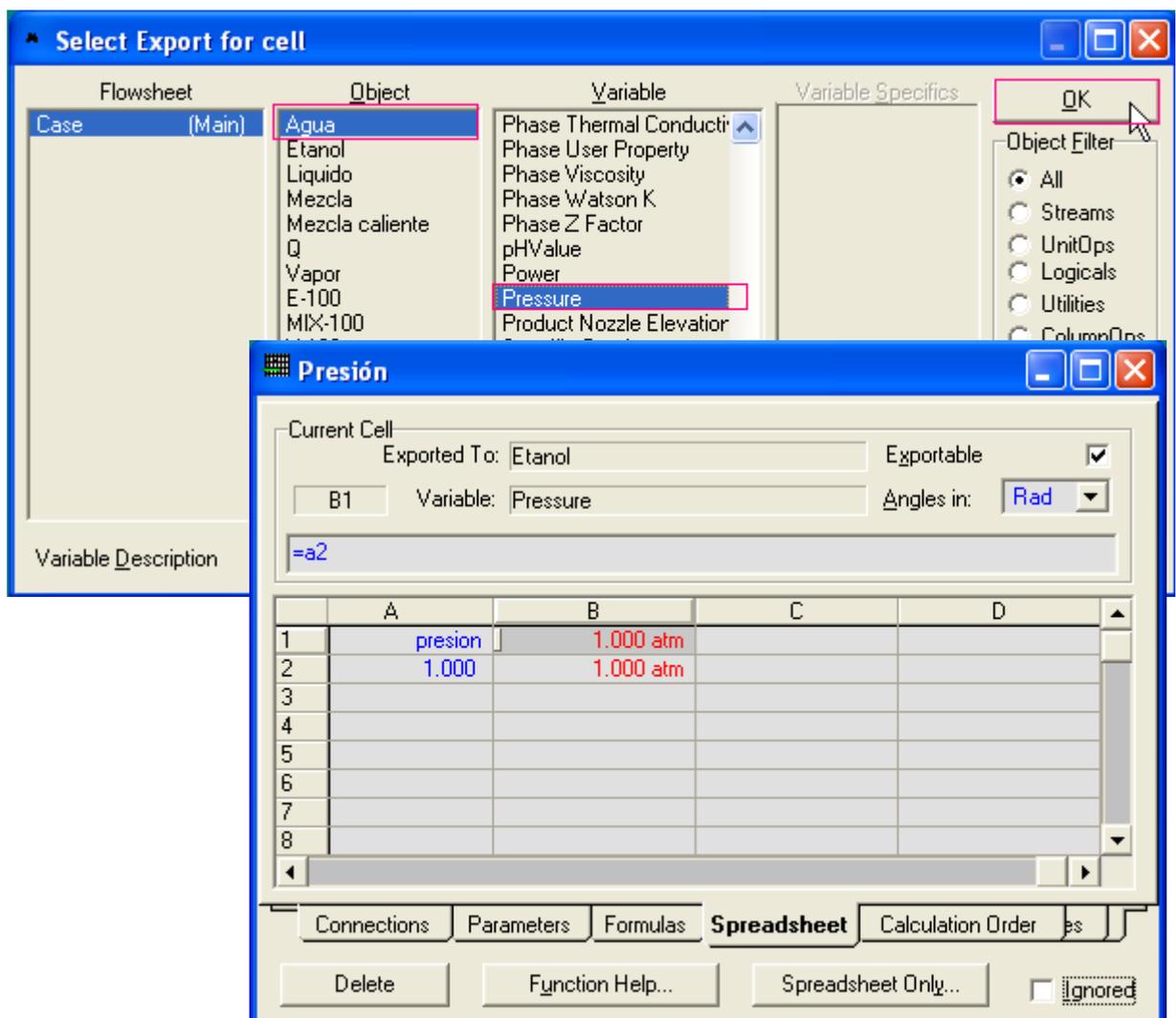
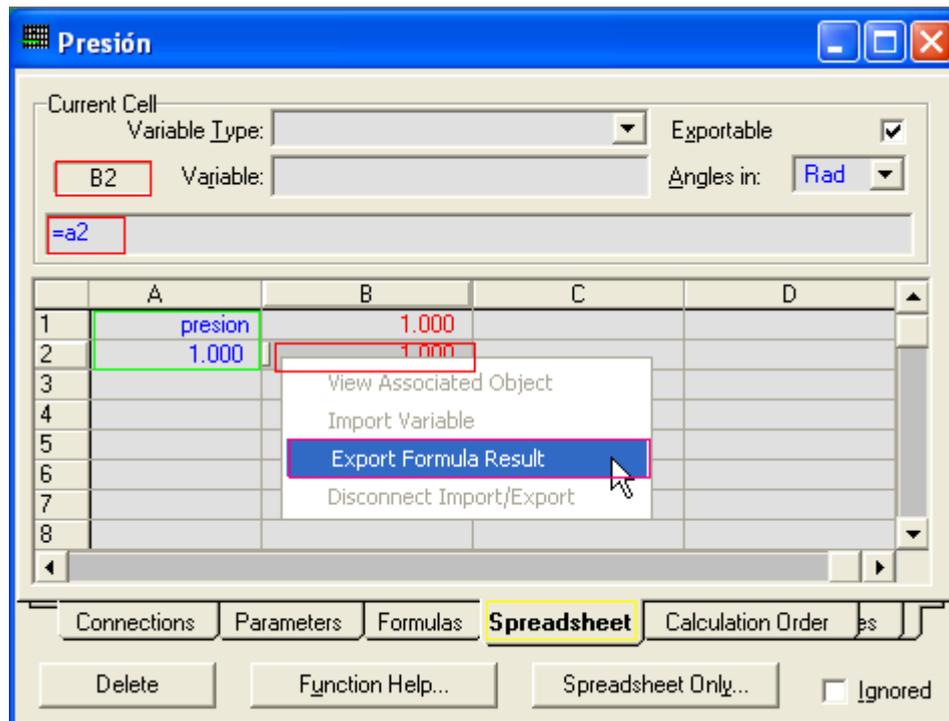
A continuación, introducir dos *Spreadsheet* u hojas de datos.

La *Spreadsheet* es una herramienta de HYSYS que permite tener acceso total a todas las variables del proceso. Desde aquí se pueden adicionar funciones, fórmulas, operadores lógicos y exportar e importar variables. Todo cambio en el ambiente de simulación se refleja de inmediato en la *Spreadsheet* y viceversa.

Es muy útil para analizar los resultados o la influencia de una variable sobre otra, sin necesidad de abrir varias ventanas de equipos a la vez. Algunas aplicaciones importantes de las *Spreadsheets* son su utilización en operaciones matemáticas que utilizan variables de simulación como por ejemplo conversiones y rendimientos de reactores o costos de equipos.

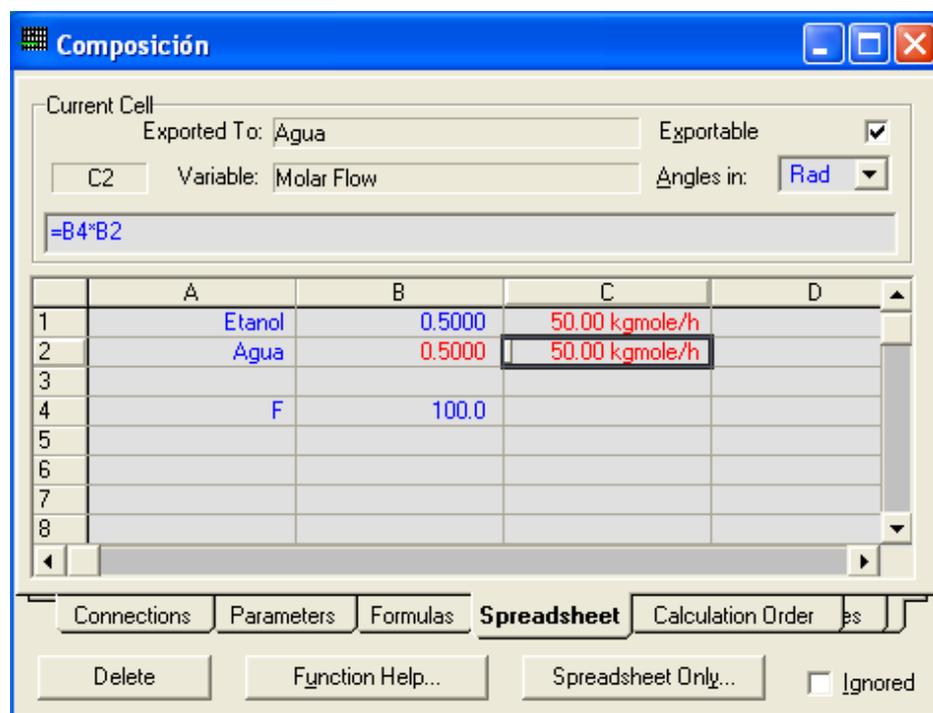
Spreadsheet Presión

Equipo	Spreadsheet	
Nombre	Presión	
Celda	Contenido	Exportar a
A1	Presión	
A2	1.000	
B1	=A2	Etanol-pressure
B2	=A2	Agua-pressure



Spreadsheet Composición

Equipo		Spreadsheet	
Nombre	Composición		
Celda	Contenido		Exportar a
A1	Etanol		
A2	Agua		
A4	F		
B1	0.5		
B2	=1-B1		
B4	100		
C1	=B4*B1		Etanol-Molar Flow
C2	=B4*B2		Agua-Molar Flow



Especificaciones de las corrientes y equipos:

Corriente	Material	
Nombre	Etanol	
Propiedad	Valor	Unidad
Temperatura	25	[°C]
Fracción molar de etanol	1.000	[adim]
Fracción molar de agua	0.000	[adim]

Corriente	Material	
Nombre	Agua	
Propiedad	Valor	Unidad
Temperatura	25	[°C]
Fracción molar de etanol	0.000	[adim]
Fracción molar de agua	1.000	[adim]

Equipo	Heater	
Nombre	E-100	
Propiedad	Valor	Unidad
Delta P	0	[KPa]

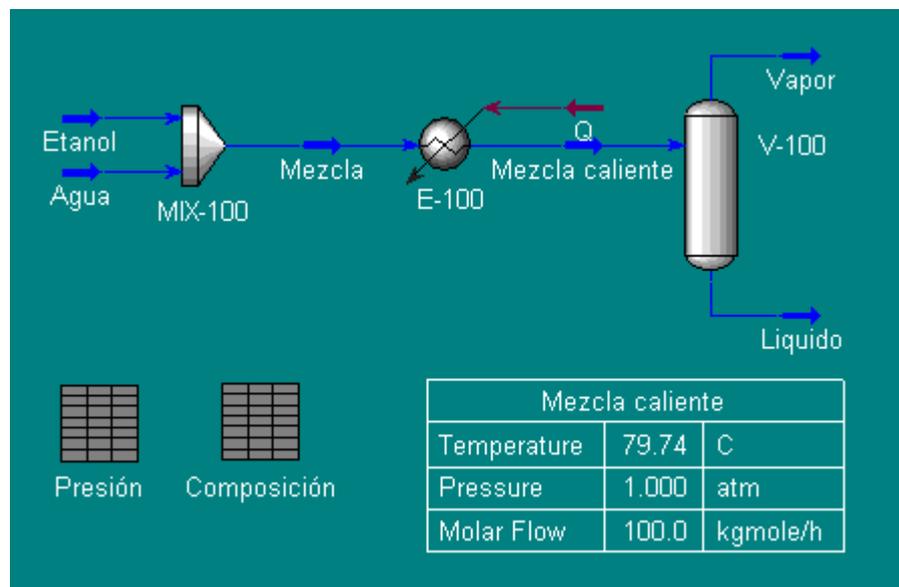
Corriente	Material	
Nombre	Mezcla Caliente	
Propiedad	Valor	Unidad
Fracción vaporizada	0.000	[adim]

Corriente	Energía	
Nombre	Q-100	
Equipo	Separador	
Nombre	V-100	

Corriente	Material	
Nombre	Vapor	

Corriente	Material	
Nombre	Líquido	

El PFD resultante quedará así:



HYSYS permite al usuario ver las propiedades y tablas para el PFD, operaciones unitarias y corrientes.

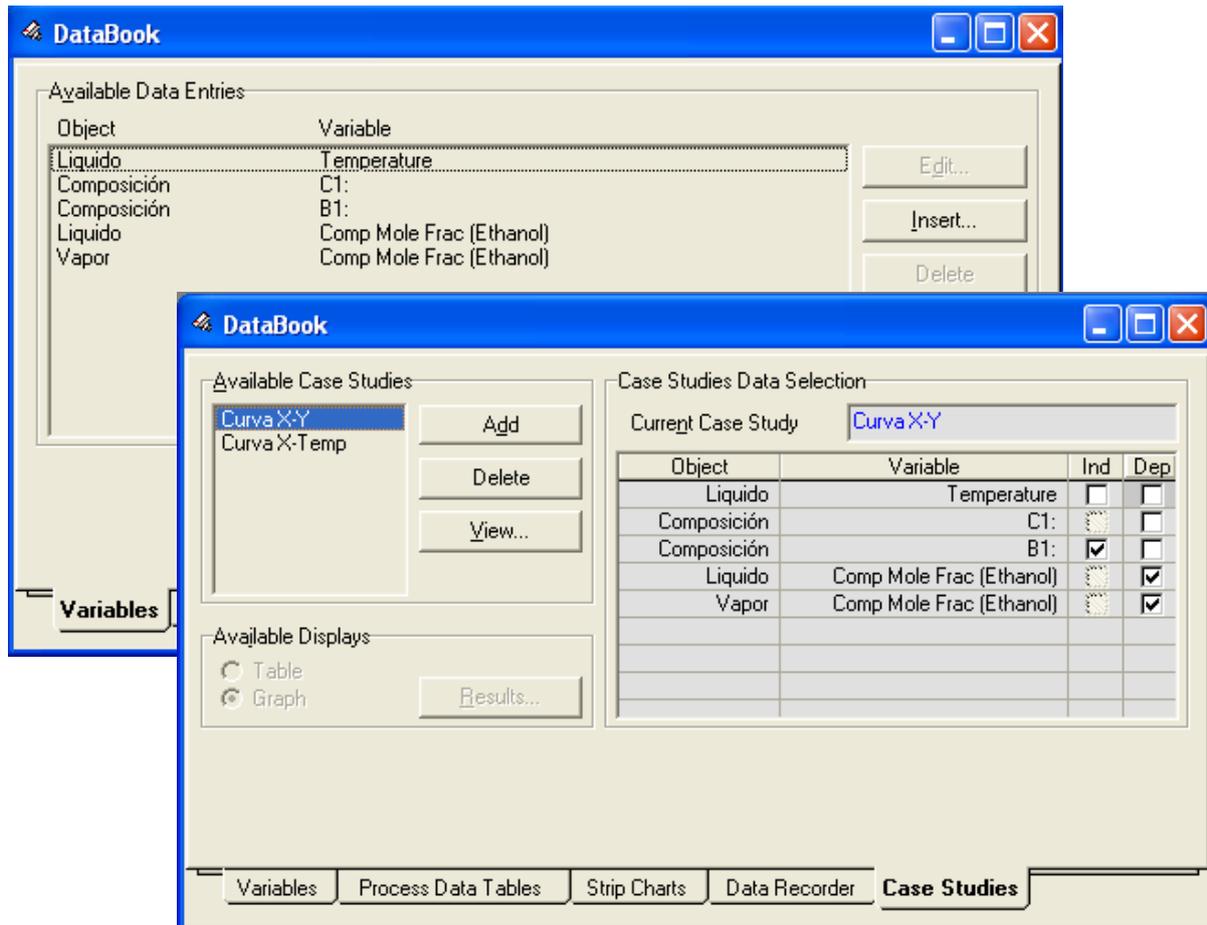
En éste caso, se muestra la tabla de propiedades de la corriente Mezcla caliente. La misma se obtiene haciendo clic con el botón derecho del mouse sobre la corriente y seleccionando *Show Table*.

Si se desea ver toda la información del PFD, hacer clic sobre el mismo, seleccionar *Add Workbook Table*, y luego el tipo de información deseada.

Generación de los diagramas X-Y y X-Temp

Ir a “Tool”-“Databook” y en la pestaña “Variables” insertar las siguientes:

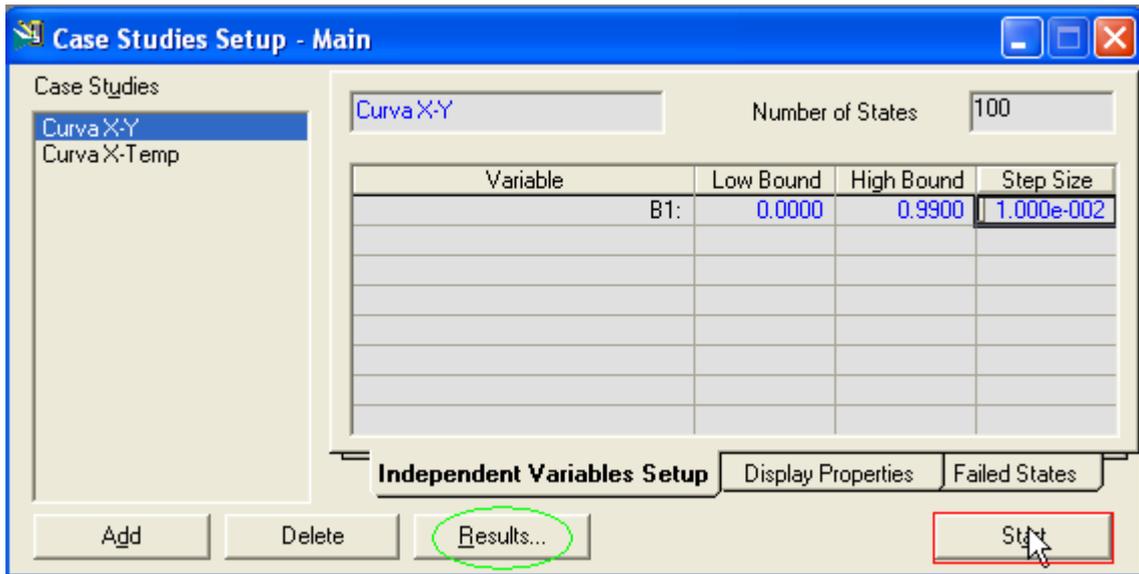
- i. Líquido-Temperature
- ii. Composición-C1
- iii. Composición-B1
- iv. Líquido-Comp mole fracc-Ethanol
- v. Vapor-Comp mole fracc-Ethanol



Ir a la pestaña “Case Studies” presionar “Add” para agregar uno con nombre “Curva X-Y”. Un caso de estudio permite realizar varias corridas de una simulación variando los parámetros de entrada. Se deben establecer cuales serán las variables independientes y cuales las dependientes. Para ello tildar en *Ind*: Composición-B1 y en *Dep*: Líquido-Comp mole fracc-Ethanol y Vapor-Comp mole fracc-Ethanol

Agregar otro caso de estudio con el nombre: “Curva X-Temp” tildando en *Ind*: Composición-B1 y en *Dep*: Líquido-Temperature.

- a) La curva de equilibrio líquido-vapor del Etanol en Agua se genera para la presión de operación: 1 atm, especificada en la Spreadsheet “Presión” (celda A2). Para graficar la curva de composición líquido-vapor debe estar seleccionado el caso de estudio “Curva X-Y”. Al presionar “View” completar los campos para el límite inferior: 0.00, el límite superior: 0.99 y el salto: 0.01. Luego presionar el botón “Start” y luego “Results”.



Una vez generada la curva sus atributos se pueden modificar haciendo clic con el botón secundario del mouse sobre la misma (“Cases Studies -Main”) y del menú contextual seleccionar “Graph Control” donde se puede cambiar los nombres y escalas de los ejes, los colores de las figuras, estilo de líneas etc. Se puede además, ocultar los símbolos y dejar solo las líneas para que el cruce de las curvas sea más visible.

Copiar la figura en el informe. Repetir lo mismo cambiando el paquete por WILSON, liquido ideal (solución regular o modelo ANTOINE) y compare resultados.

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

b) Generación de la curva de temperatura - composición

Siguiendo los pasos análogos a los realizados en el ítem anterior, pero esta vez en “Cases Studies Setup-Main” debe estar seleccionado el caso de estudio “Curva X-Temp”, fijar los mismos límites que en apartado a). Presionar “Start” y el gráfico se visualizará en la ventana correspondiente. Emplear el paquete WILSON.

¿Qué se puede concluir? ¿Hay diferencias en los resultados obtenidos con los diferentes modelos de estimación de propiedades fisicoquímicas? ¿Las bajas presiones mejoran o empeoran la obtención de alcohol puro?

3. Problemas extra aúlicos propuestos

Problema 1

Obtener la curva de equilibrio liquido-vapor para la mezcla Acetona – Cloroformo y analizar los resultados utilizando diferentes modelos de estimación de propiedades fisicoquímicas.

Problema 2

Analizar el comportamiento del sistema azeotrópico heterogéneo conformado por la mezcla ternaria Agua – Benceno – Etanol, de gran importancia práctica en operaciones de separación. Estimar el número de fases y composición de la mezcla a 1 atm de presión y a $T_1 = 25\text{ °C}$ y $T_2 = 63.7\text{ °C}$. Adoptar como composición de la alimentación $x_W = 0.5$, $x_E = 0.2$, $x_{Bz} = 0.3$. Seleccionar el modelo de estimación de propiedades fisicoquímicas que mejor refleje la realidad según su criterio.