

Eva Rodil Rodríguez (Departamento de Enxeñaría Química)

Aspen HYSYS (ou simplemente HYSYS) é un simulador de procesos químicos empregado para modelar matematicamente os procesos químicos, desde operacións unitarias ata plantas e refinerías químicas completas.

### Arquitectura de Aspen HYSYS

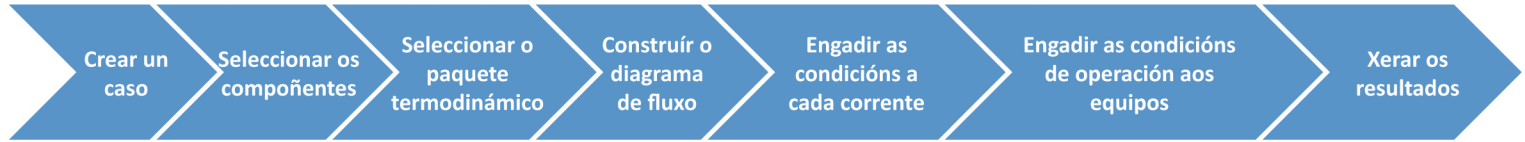
Contorna Propiedades

Contorna Simulación

Compoñentes  
 Compoñentes hipotéticos  
 Paquete termodinámico  
 Reaccións

Correntes  
 Unidades de operación  
 Diagrama de fluxo

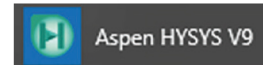
### Secuencia de pasos que seguir para realizar unha simulación no Aspen HYSYS



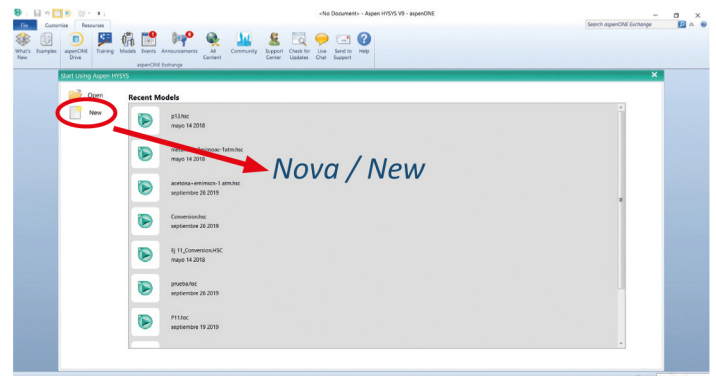
### Código de cores no Aspen HYSYS

	Código de cores	Indicación	Exemplo
Variables	<i>Azul itálica</i>	valores predeterminados que non foron editados	1.000
	Azul grossa	Especificado polo usuario	8.72 psi
	negro	Valor calculado (ou fixado)	6251
Correntes	Azul claro	Sen resolver	→
	Azul escuro	Resolto	→
Unidades de operación	Vermello	Faltan conexións – resolución imposible	→
	Amarelo	Non se pode resolver ou resolto con advertencias	→
	Negro	Resolto	→

### Comezar unha simulación co HYSYS



Abrir unha nova simulación en HYSYS



### Contorna de Propiedades no Aspen HYSYS

Barra de título

Barra de menús

Panel de navegación. Menús / Cartafoles

Xanela de mensaxes do estado de obxectos

Xanela de mensaxes de seguimento

Xanela de compoñentes/ propiedades

### Secuencia de pasos na Contorna de Propiedades:



## • Selección de compoñentes no Aspen HYSYS

Opcións para seleccionar compoñentes:

Biblioteca de compoñentes, Base de datos Aspen e Compoñentes hipotéticos

**1- Engadir listaxe**

**2- Seleccionar compoñentes**

**3- Engadir compoñentes**

**4- Listaxe de compoñentes**

Comprobar que engadimos á listaxe o/os compoñente/s seleccionado/s

Barra indicativa do estado

Simulation Name	Full Name / Synonym	Formula
	Methane	C1
	Ethane	C2
	Propane	C3
	i-Butane	i-C4
	n-Butane	n-C4
	i-Pentane	i-C5
	n-Pentane	n-C5
	n-Hexane	C6
	n-Heptane	C7
	n-Octane	C8
	n-Nonane	C9
	n-Decane	C10
	n-C11	C11

## • Selección do paquete termodinámico (Fluid Package, FP)

• Fontes de propiedades do paquete termodinámico:

*AspenHysys, Aspen properties ou COMThermo*

• Axuda para a selección do modelo de propiedades:

*Methods Assistant* ou documentación AspenHysys

**1- Engadir o paquete**

**2- Seleccionar o paquete**

**3- Axuda para selección do paquete termodinámico (Methods Assistant)**

Aspen HYSYS Property Package Selection Assistant

Welcome to the property package selection assistant.

The purpose of the assistant is to help you select the most appropriate property packages for use with Aspen HYSYS.

The assistant will ask you a number of questions which it uses to suggest one or more property packages to use.

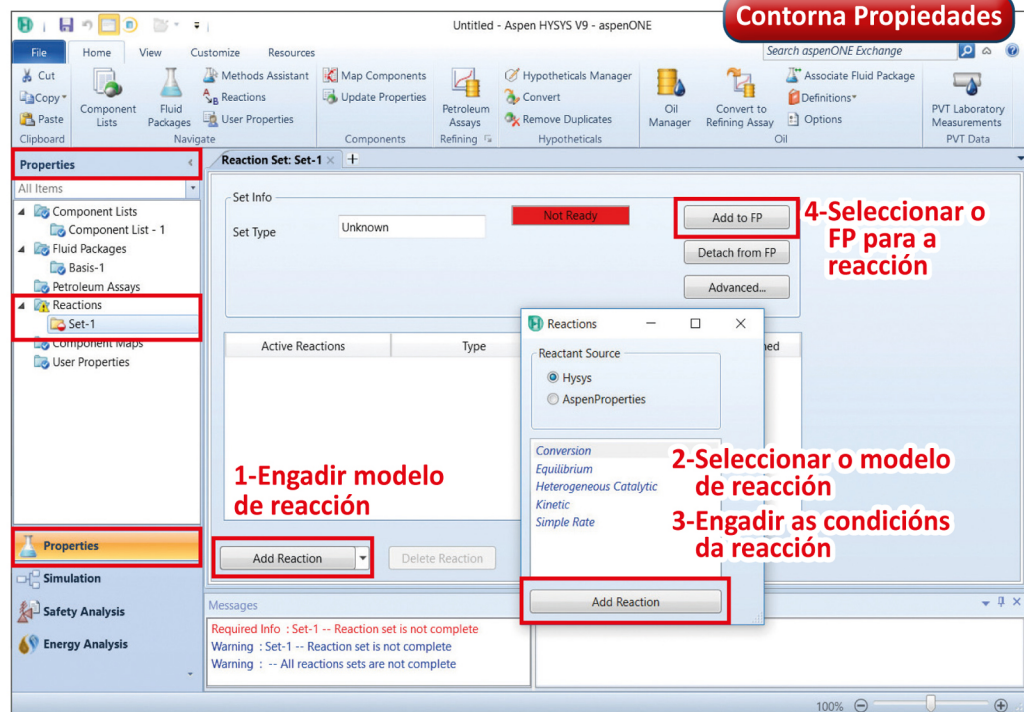
Start by selecting one of the following options:

- Specify component type
- Specify process type

## Química e reaccións

### Modelos de reaccións no HYSYS:

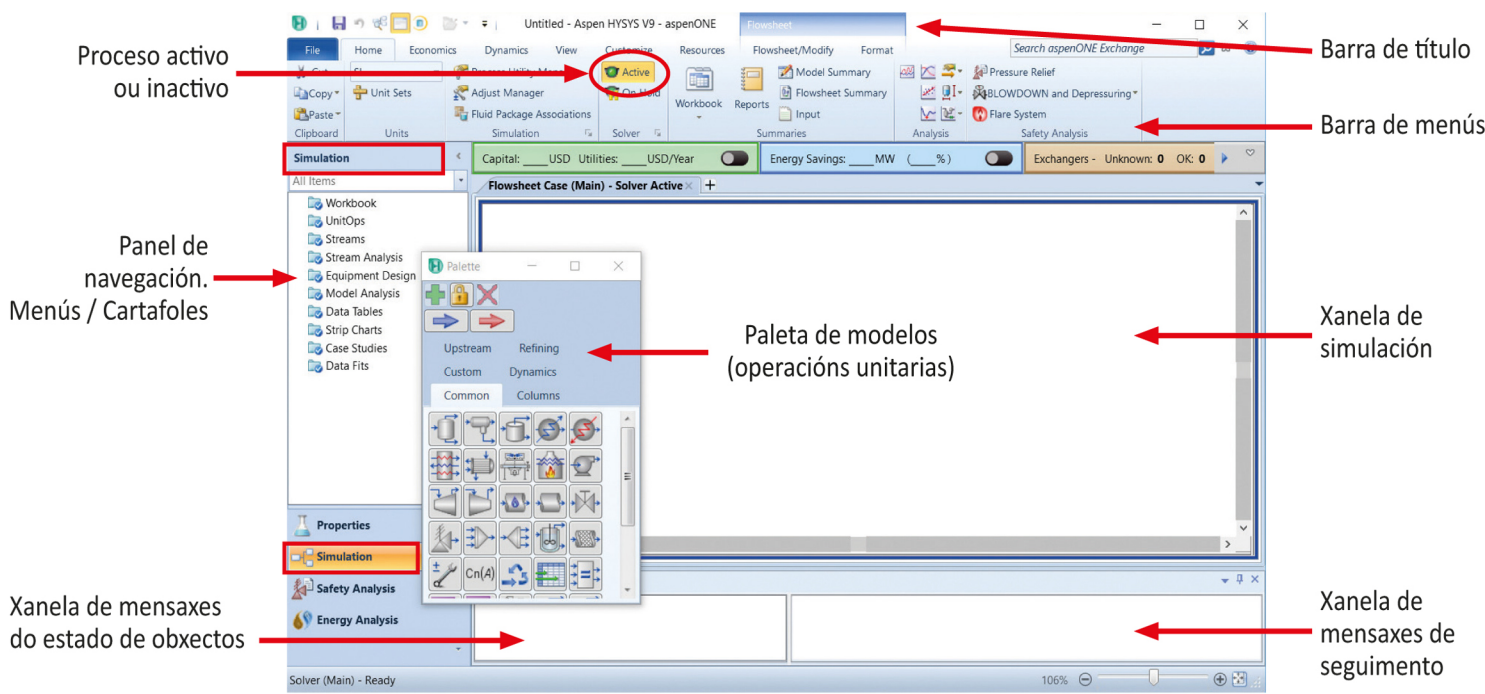
- Modelos de conversión que non empregan parámetros cinéticos:
  - » Conversión
  - » Equilibrio
- Modelos de reacción que empregan parámetros cinéticos:
  - » Heteroxéneas catalíticas
  - » Cinéticas
  - » *Simple Rate*



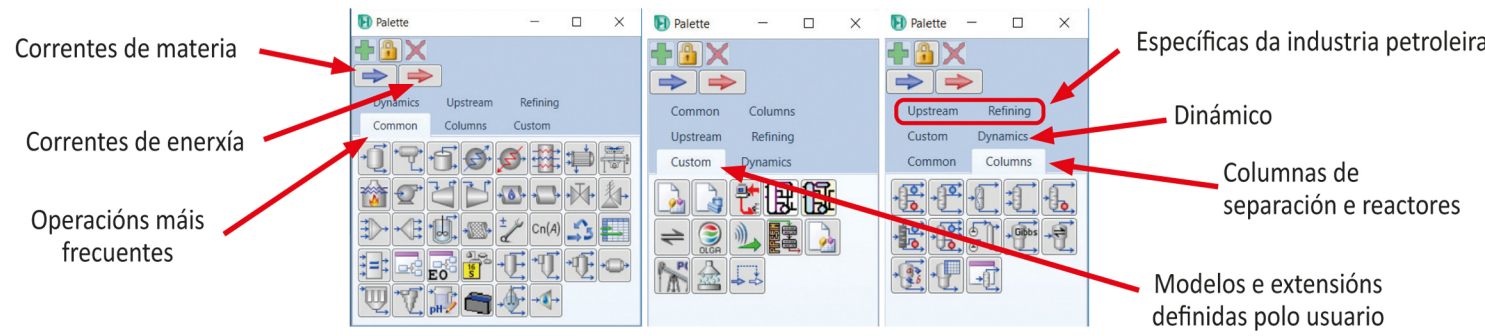
- 1-Engadir modelo de reacción
- 2-Seleccionar o modelo de reacción
- 3-Engadir as condicións da reacción
- 4-Seleccionar o FP para a reacción

## Contorna de Simulación no Aspen HYSYS

### Contorna Simulación



### As operacións unitarias da paleta de modelos están organizadas en seis separadores:



### Secuencia de pasos na Contorna de Simulación:



## • Correntes de materia

1-Seleccionar a corrente

2-Agregar as condicións á corrente

Corrente sen definir

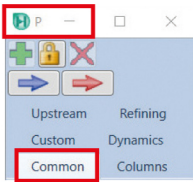
Propiedades das correntes: **Contorna Simulación**

- Nome da corrente
- Vapor/Fracción de fase
- Temperatura
- Presión
- Fluxo molar / composición
- Etc...

Worksheet	Stream Name	1	Aqueous Phase
Conditions	Vapour / Phase Fraction	0.0000	1.0000
Properties	Temperature [C]	25.00	25.00
Composition	Pressure [kPa]	101.3	101.3
Oil & Gas Feed	Molar Flow [kgmole/h]	5.551	5.551
Petroleum Assay	Mass Flow [kg/h]	100.0	100.0
K Value	Std Ideal Liq Vol Flow [m3/h]	0.1002	0.1002
User Variables	Molar Enthalpy [kJ/kgmole]	-2.849e+005	-2.849e+005
Notes	Molar Entropy [kJ/kgmole-C]	6.559	6.559
Cost Parameters	Heat Flow [kJ/h]	-1.581e+006	-1.581e+006
Normalized Yields	Liq Vol Flow @Std Cond [m3/h]	9.854e-002	9.854e-002
	Fluid Package		Basis-1
	Utility Type		

Corrente definida

## • Equipos para balances de materia e enerxía



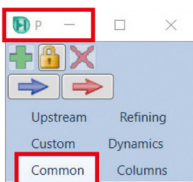
- Mesturador (Mixer) →
- Balance →

Exemplo Mestrador

1-Conexións

2-Parámetros

## • Equipos de cambio de presión



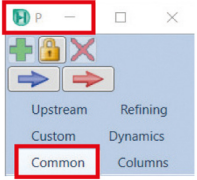
- Bombas (Pump) →
- Válvulas (valve) →
- Compresores e turbinas (Compressors & Gas Turbines) →
- Tubaxes (Pipes) →

Exemplo Bomba

1-Conexións

2-Parámetros

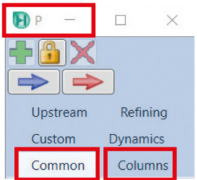
## Equipos para intercambio de calor



- Arrefriamiento e quecemento de correntes (Heater & Cooler) →
- Intercambiador de calor (Heat Exchanger) →
- Intercambiador de calor LNG (LNG Exchanger) →
- Aerorrefrigerador (Air Cooler) →
- Forno (Fired Heater) →

### Exemplo Quecemento de correntes

## Reactores

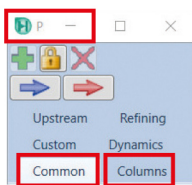









- Modelo de reactor estequiométrico
  - Reactor de conversión (Conversion reactor) →
- Modelo de reactor de equilibrio químico
  - Reactor de equilibrio (Equilibrium Reactor) →
  - Enerxía libre de Gibbs (Gibbs free energy) →
- Modelo de reactor cinético
  - Reactor de tanque axitado (Continuous stirred tank reactor) →
  - Reactor de fluxo en pistón (Plug Flow Reactor, PFR) →
- Modelo de reactor de cambio de rendemento
  - Reactor de cambio de rendemento (Yield shift reactor) →

### Exemplo Reactor de conversión

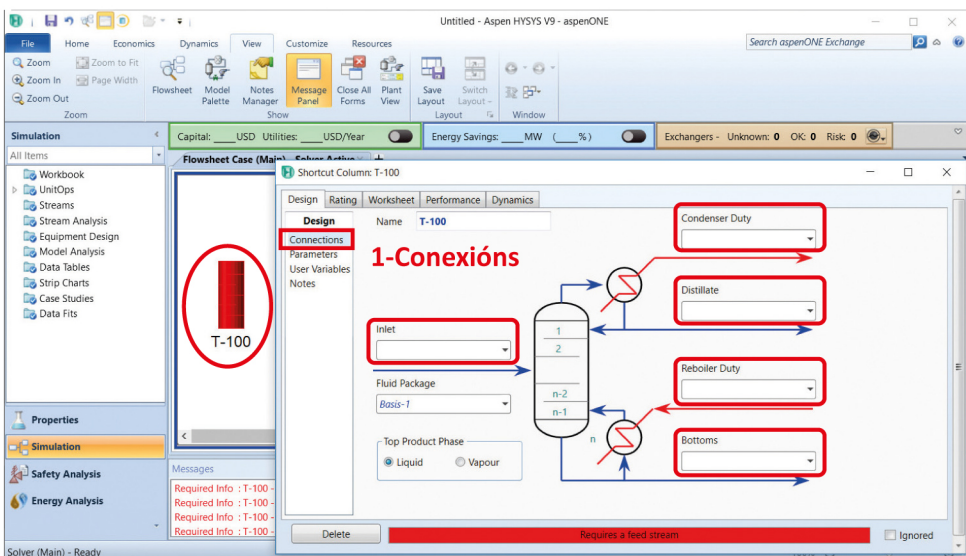
Component	Mole Wgt.	Stoich Coeff
E-Benzene	106.166	-1.000
Styrene	104.152	1.000
Hydrogen	2.016	0.999
**Add Comp**		

## Equipos de Separación






- Destilación súbita ou flash (Separator) 
- Destilación métodos simplificados (Shortcut distillation method) 
- Destilación métodos rigorosos (Distillation column) 
- Destilación extractiva, azeotrópica e reactiva (Distillation column) 
- Absorción e desabsorción (Absorber Column) 
- Extracción nunha etapa (Three-Phase Separator) 
- Extracción (Extraction column) 

### Exemplo Shortcut




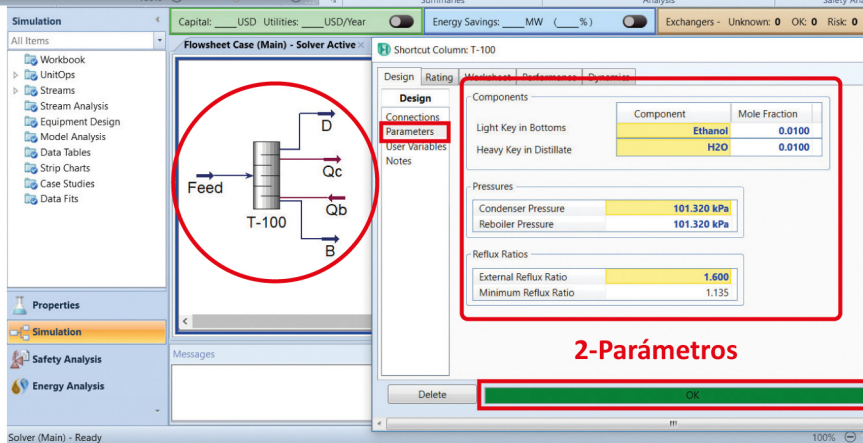
## Unidades lóxicas e folia de cálculo

### Unidades lóxicas

-  **Fixar (Set):** Permite fixar o valor dunha variable nunha corrente ou un equipo para partir do valor que ten esa variable noutra corrente ou equipo.
-  **Reciclo (Recycle):** Unidade necesaria sempre que se queira reciclar unha corrente. Permite estimar as propiedades dunha corrente de recirculación dentro dun proceso químico.
-  **Axuste (Adjust):** Permite axustar unha variable dalgunha corrente para que unha variable obxectivo teña un valor determinado.

### Folla de Cálculo

-  **SpreadSheet:** Permite realizar operacións matemáticas cos valores numéricos presentes en celas e permite incorporar nas devanditas celas calquera variable ou valor incluído no programa (datos de correntes e de equipos, propiedades físicas, etc).



### Bibliografía de consulta:

- Juma Haydari. Chemical Process Design and simulation: Aspen Plus and Aspen HYSYS Applications, 1ªEd. 2019 John Wiley & Sons.
- Warren D. Seider, Daniel R. Lewin, J. D. Seader, Soemantri Widagdo, Rafiqul Gani, Ka Ming Ng. Product and Process Design Principles. Synthesis Analysis and Design, 4ªEd. 2016 John Wiley & Sons.
- Aspen HYSYS V9 Help. Burlington, M.A: Aspen Technology, Inc.; 2016. www.aspentech.com.

