UNIVERSITAT POLITÈCNICA DE CATALUNYA
BARCELONATECH
Escola Politècnica Superior d'Enginyeria de Manresa

9-10-2020

SIMULACIÓ DE PROCESSOS QUÍMICS MITJANÇANT EL SOFTWARE ASPEN PLUS V11.

Treball Final de Grau

Grau en Enginyeria Química

Convocatòria octubre 2020

Autora: Clàudia Izquierdo Estabanell

Director: Xavier Gamisans Noguera

ÍNDEX

ÍNDEX D'IL·LUSTRACIONS 3
ÍNDEX DE TAULES 6
1. RESUM 7
2. ABSTRACT 8
3. OBJECTIUS 9
4. INTRODUCCIÓ 10
4.1. TIPUS DE SIMULADORS 11
4.1.1. HYSYS 11
4.1.2. CHEMCAD 12
4.1.3. CHEMSEP 13
4.1.4. PRO II 14
4.1.5. ASPEN PLUS 15
4.1.6. DWSIM 16
4.1.7. ALTRES TIPUS DE SIMULADORS DE PROCESSOS INDUSTRIALS 17
5. DESCRIPCIÓ DEL FUNCIONAMENT DEL PROGRAMA ASPEN PLUS 18
5.1. LA FINESTRA D'INICI 18
5.2. LES PLANTILLES O TEMPLATES 21
5.3. LA FINESTRA PRINCIPAL 23
5.4. ELS AMBIENTS DEL PROGRAMA 24
5.4.1. AMBIENT PROPERTIES 24
5.4.1.1. SETUP 25
5.4.1.2. COMPONENTS 28
5.4.1.3. METHODS 31
5.4.1.4. CHEMISTRY 32
5.4.1.5. PROPERTY SETS 35
5.4.2. AMBIENT SIMULATION 36
5.4.2.1. FLOWSHEET 36
5.4.2.2. STREAMS 36
5.4.2.3. BLOCKS 37
5.4.2.4. REACTIONS 46
5.4.2.5. CONVERGENCE 48
5.4.2.6. RESULTS SUMMARY 50

5.4.3. EXEMPLES PER A PRACTICAR 51
5.4.3.1. SIMULACIÓ 1 PLANTA QUÍMICA AMB DUES OPERACIONS UNITÀRIES 51
5.4.3.2. SIMULACIÓ 2 PLANTA QUÍMICA AMB UNA OPERACIÓ UNITÀRIA I REACCIONS 67
5.4.3.3. EXEMPLE 1 DE REACCIÓ 93
5.4.3.4. EXEMPLE 2 DE REACCIÓ 99
6. CAS PRÀCTIC: PRODUCCIÓ D'AMONÍAC 107
6.1. ESPECIFICACIONS DEL CAS PRÀCTIC I RESULTATS 108
7. CONCLUSIONS 114
8. REFERÈNCIES 115

ÍNDEX D'IL·LUSTRACIONS

Il·lustració 1: Simulador ASPEN HYSYS. (Font: Elaboració pròpia.) 12
Il·lustració 2: Simulador CHEMCAD. (Font: Chemcad, ComparaSoftware). 13
Il·lustració 3: Problema de torres empacades mitjançant ChemSep. (Font: Simulación de procesos. Astrid Milla.) 14
Il·lustració 4: Software de simulació Pro II. (Font: Pro II, Mercado Libre Chile.) 15
Il·lustració 5: Simulador ASPEN PLUS V11. Simulación de procesos.(Font: AspenTech.) 16
Il·lustració 6: Simulador DWSIM. (Font: Wikipedia.) 17
Il·lustració 7: Finestra d'inici d'ASPEN PLUS V11.(Font: Elaboració pròpia.) 19
Il·lustració 8: Comanda File. (Font: Elaboració pròpia.) 20
Il·lustració 9: Comanda New > Plantilles o Templates. (Font: Elaboració pròpia.) 21
Il·lustració 10: Comanda New. Blank and Recent. (Font: Elaboració propia.) 23
Il·lustració 11: Finestra Aspen Plus. Mostra el menú principal, el secundari, els Ambients del simulador i la comanda Next. (Font: Elaboració pròpia.) 23
Il·lustració 12: Ambient Properties. (Font: Elaboració propia.) 25
Il·lustració 13: Carpeta Setup. (Font: Elaboració pròpia.) 26
Il·lustració 14: Carpeta Components. (Font: Elaboració pròpia.) 29
Il·lustració 15: Comanda Electrolyte Wizard. (Font: Elaboració pròpia.) 30
Il·lustració 16: Carpeta Methods. (Font: Elaboració pròpia.) 31
Il·lustració 17: Blocs. Model Palette. Ambient Simulation. (Font: Elaboració pròpia.) 37
Il·lustració 18: Diagrama de flux del procés. Simulació 1. (Font: AspenTech (2013).) 51
Il·lustració 19: Comanda New. Electrolytes with Metric Units. (Font: Elaboració pròpia.) 52
Il·lustració 20: Menú secundari. Home > Run Mode > Analysis. (Font: Elaboració pròpia.) 52
Il·lustració 21: Especificar Components. Components – Specifications | Selection. (Font: Elaboració pròpia.) 53
Il·lustració 22: Assistent d'Electròlits. Base Components and Reactions Generation Options. (Font: Elaboració pròpia.) 54
Il·lustració 23: Electrolyte Wizard. Generated Species and Reactions. (Font: Elaboració propia.) 55
Il·lustració 24: NaCl(S) sòlid. Components - Specifications | Selection. (Font: Elaboració pròpia.) 56
Il·lustració 25: Pestanya Chemistry. GLOBAL. Reaction. (Font: Elaboració pròpia.) 57
Il·lustració 26: Veure una determinada reacció. (Font: AspenTech (2013).) 57
Il·lustració 27: Equilibrium Constants. (Font: Elaboració pròpia.) 58
Il·lustració 28:Methods - Specifications | Global. (Font: Elaboració pròpia.) 59
Il·lustració 29: Flowsheet Display Options. Desactivar les opcions dels ID's dels blocs i els cabals. (Font: Elaboració pròpia.) 61
Il·lustració 30: Diagrama de flux del procés a simular. (Font: AspenTech (2013).) 61
Il·lustració 31: Setup - Specifications | Global. Flow Basis: Mole. (Font: Elaboració pròpia.) 62
Il·lustració 32: Dades cabal HCl. (Font: AspenTech (2013).) 63
Il·lustració 33: Dades cabal NaOH. (Font: AspenTech (2013).) 63
Il·lustració 34: Property Sets. Selected property sets: TBUBBLE I WXAPP. (Font: AspenTech (2013).) 65
Il·lustració 35: Resultats de la simulació 1. (Font: Elaboració pròpia.) 66
Il·lustració 36: Diagrama de flux del procés. Simulació 2. (Font: AspenTech (2013).) 68
Il·lustració 37: Electrolyte Wizard. Simulació 2. (Font: AspenTech (2013).) 70
Il·lustració 38: Eliminar espècies no desitjades. (Font: Elaboració pròpia.) 71
Il·lustració 39: Components Simulació 2 - 1 Operació Unitària i Reaccions. (Font: Elaboració pròpia.) 72
Il·lustració 40: Chemistry. Reaction. Simulació 2. (Font: Elaboració pròpia.) 73
Il·lustració 41: Methods - Specifications | Global. (Font: Elaboració pròpia.) 73
Il·lustració 42: Quadre de diàleg de Properties Input Complete. (Font: AspenTech (2013).) 74
Il·lustració 43: File - Options - Flowsheet. Desactivar opcions. (Font: Elaboració pròpia.) 75

Il·lustració 44: Diagrama de flux Simulació 2 - 1 Operació unitària i reaccions. (Font: AspenTech (2013).) 76
Il·lustració 45: Setup – Specifications | Global. Simulació 2. Títol. (Font: Elaboracció pròpia.) 76
Il·lustració 46: Dades flux SOURWAT. Simulació 2. (Font: AspenTech (2013).) 77
Il·lustració 47: Dades fraccions màssiques Simulació 2. (Font: AspenTech (2013).) 77
Il·lustració 48: Cabal SOURWAT amb dades introduïdes. (Font: Elaboració pròpia.) 78
Il·lustració 49: Dades flux STEAM Simulació 2. (Font: AspenTech (2013).) 78
Il·lustració 50: Cabal STEAM amb dades introduïdes. (Font: Elaboració pròpia.) 79
Il·lustració 51: Especificacions columna RadFrac. (Font: AspenTech (2013).) 79
Il·lustració 52: Dades de la columna RadFrac introduïdes. (Font: Elaboració pròpia.) 80
Il·lustració 53: B1 Specifications Design Specifications - 1 Completat. (Font: Elaboració pròpia.) 81
Il·lustració 54: Design Specifications STEAM (MATERIAL). (Font: Elaboració pròpia.) 83
Il·lustració 55: PH i XTRUE incloses a Selected property sets. (Font: Elaboració pròpia.) 84
Il·lustració 56: Resultats columna RadFrac. Simulació 2. (Font: Elaboració pròpia.) 85
Il·lustració 57: Resultats de les especifiicacions de disseny. (Font: Elaboració pròpia.) 86
Il·lustració 58: Blocks | B1 | Profiles Compositions. (Font: Elaboració pròpia.) 87
Il·lustració 59: B1 (RadFrac) – Profiles| Properties. Especificació de PH i XTRUE. (Font: Elaboració pròpia.) 87
Il·lustració 60: B1 (RadFrac) - Profiles | K-values Stage 1. Font: Elaboració pròpia. Agost 2020. 88
Il·lustració 61: Properties. Methods - Specifications | Global. Use true components. (Font: Elaboració pròpia.) 89
Il·lustració 62: Nova especificació de disseny aplicada a la composició aparent de NH_3. (Font: Elaboració pròpia.) 90
Il·lustració 63: Comparació de valors amb les dues aproximacions. (Font: AspenTech (2013).) 92
Il·lustració 64: Seleccionant la plantilla adient. Exemple 1 de reacció. (Font: Elaboració propia.) 94
Il·lustració 65: Definint els components que participen en la reacció. (Font: Elaboració propia.) 94
Il·lustració 66: Especificar el mètode adient. Exemple 1 de reacció. (Font: Elaboració propia). 95
Il·lustració 67: Afegint el reactor RGibbs. (Font: Elaboració pròpia.) 96
Il·lustració 68: Diagrama de flux del procés. Exemple 1 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.) 96
Il·lustració 69: Especificant el cabal FEED (MATERIAL). (Font: Elaboració pròpia.) 97
Il·lustració 70: Especificant el reactor RGIBBS. (Font: Elaboració propia.) 97
Il·lustració 71: Especificar a RGIBBS - Products que tots els components es consideren productes. (Font: Elaboració pròpia.) 98
Il·lustració 72: Quadre de diàleg. Totes les dades estan introduïdes. (Font: Elaboració pròpia.) 98
Il·lustració 73: Resultats. Dades del cabal de Products determinades. (Font: Elaboració pròpia.) 99
Il·lustració 74: Seleccionant la plantilla. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració propia.). 100
Il·lustració 75: Especificació dels components. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.) 100
Il·lustració 76: Model termodinàmic NRTL. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.) 101
Il·lustració 77: Reactions - Create New ID. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.) 101
Il·lustració 78: Especificació reacció, estequiometria i exponents. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.) 102
Il·lustració 79: Especificació dades de cinètica de la reacció. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.) 102
Il·lustració 80: Selecció del reactor. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.) 103
Il·lustració 81: Diagrama de flux del procés. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.) 103
Il·lustració 82: Especificacions del reactor RSCTR. (Font: Elaboració pròpia.) 104
Il·lustració 83: Especificacions del reactor RCSTR R1. Font: Elaboració pròpia.) 104
Il·lustració 84: Ecpecificació del flux d'ANILINA. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.) 105
Il·lustració 85: Especificació del flux d'HIDROGEN. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.) 105
Il·lustració 86: Results Summary - All Streams. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.) 106
Il·lustració 87: Diagrama de flux cas pràctic: Producció d'amoníac. (Font: Elaboració pròpia.) 107

*Il·lustració 88: Especificacions corrent d'alimentació **FEED**. (Font: Elaboració pròpia.)* _____ *108*
*Il·lustració 89: Especificacions compressor **COMP1**. (Font: Elaboració pròpia.)* _____ *108*
*Il·lustració 90: Especificacions mesclador **MIXER**. (Font: Elaboració pròpia.)* _____ *109*
*Il·lustració 91: Especificacions canviador de calor **HEAT1**. (Font: Elaboració pròpia.)* _____ *109*
*Il·lustració 92: Especificacions reactor estequiomètric **RSTOIC**. (Font: Elaboració pròpia.)* _____ *110*
*Il·lustració 93: Especificacions reacció reactor **RSTOIC**. (Font: Elaboració pròpia.)*_____ *110*
*Il·lustració 94: Especificacions canviador de calor **HEAT2**. (Font: Elaboració pròpia.)* _____ *110*
*Il·lustració 95: Especificacions separador **FLASH2**. (Font: Elaboració pròpia.)* _____ *111*
*Il·lustració 96: Especificacions divisor **DIV**. (Font: Elaboració pròpia.)*_____ *111*
Il·lustració 97: Resultats planta química sense recirculació, purga i divisor. (Font: Elaboració pròpia.). *112*

ÍNDEX DE TAULES

Taula 1: Setup - Specifications. (Font: Elaboració pròpia.) 26
Taula 2: Calculation Options. (Font: Elaboració propia.) 26
Taula 3: Comp - Groups. (Font: Elaboració pròpia.) 27
Taula 4: Unit – Sets. (Font: Elaboració pròpia.) 28
Taula 5: Components – Specifications. (Font: Elaboració pròpia.). 29
Taula 6: Henry Comps. (Font: Elaboració pròpia.) 30
Taula 7: Methods – Tabs. (Font: Elaboració propia.) 32
Taula 8: Chemistry - Specifications. (Font: Elaboració pròpia.) 33
Taula 9: Types of reactions. Descripció fase components reactius. (Font: Elaboració pròpia.) 34
Taula 10:Tipus de base i descripció. Aspen Plus. (Font: Elaboració pròpia.) 34
Taula 11: Property Sets Forms. (Font: Elaboració pròpia.) 35
Taula 12: Flowsheet - Specifications. (Font: Elaboració pròpia.) 36
Taula 13: Streams - Tipus de fluxos. (Font: Elaboració pròpia.) 37
Taula 14: Mixers and splitters. (Font: Elaboració pròpia.) 37
Taula 15: Separators. (Font: Elaboració pròpia.) 38
Taula 16: Heat Exchangers. (Font: Elaboració pròpia.) 39
Taula 17: Columns. (Font: Elaboració pròpia.) 39
Taula 18: Reactors. (Font: Elaboració pròpia.) 41
Taula 19: Pressure Exchangers. (Font: Elaboració pròpia.) 42
Taula 20: Manipulators. (Font: Elaboració pròpia.) 43
Taula 21: Sòlids. (Font: Elaboració pròpia.) 44
Taula 22: Solids Separators. (Font: Elaboració pròpia.) 45
Taula 23: User Models. (Font: Elaboració pròpia.) 46
Taula 24: Batch Models. (Font: Elaboració pròpia.) 46
Taula 25: Reactions. Tipus de sistemes de reacció. (Font: Elaboració pròpia.) 47
Taula 26: Opcions per estructurar la convergencia del bucle de reciclatge. (Font: Elaboració pròpia.) 48
Taula 27: Opcions de convergencia. (Font: Elaboració pròpia.) 49
Taula 28: Results Summary. (Font: Elaboració pròpia.) 50

1. RESUM

Aquest treball de fi de grau s'ha centrat en fer una exploració general i la resolució de casos de forma detallada mitjançant l'ús del software Aspen Plus V11. Aquest programari està especialment pensat per a la modelització de plantes industrials químiques, i inclou la possibilitat de treballar amb electròlits, essent l'únic software comercial amb aquesta característica.

En el treball es comparen diferents softwares que existeixen per a la simulació de processos químics. Posteriorment es descriu en detall aquest software mencionat anteriorment, tot i explicant detalladament els seus ambients de simulació i les diverses funcions i propietats que conté.

Per tal d'avaluar la capacitat del programari, s'expliquen alguns exemples de simulacions amb electròlits i amb reaccions químiques.

Finalment, s'ha plantejat la resolució d'un cas pràctic, consistent en una planta química de producció d'amoníac, a partir dels coneixements adquirits durant l'estudi d'aquest software tant popularment conegut i utilitzat en la indústria química.

2. ABSTRACT

This final degree project is focused on a general exploration and case resolution in detail using the Aspen Plus V11 software. This software is specially designed for the modeling of chemical industrial plants, and includes the possibility of working with electrolytes, being the only commercial software with this feature.

The work compares different software that exist for the simulation of chemical processes. This software is described in detail below, although it explains in detail its simulation environments and various functions and properties it contains.

In order to evaluate the capacity of the software, some examples of simulations with electrolytes and chemical reactions are explained.

Finally, the resolution of a case study has been proposed, consisting of a chemical plant for the production of ammonia, based on the knowledge acquired during the study of this software so popularly known and used in the chemical industry.

3. OBJECTIUS

El principal objectiu d'aquest projecte és adquirir els coneixements suficients per a la realització de simulacions d'instal·lacions químiques mitjançant el software Aspen Plus V11. Aquest objectiu global s'ha desglossat en els següents objectius parcials:

- Descriure les àrees principals (ambients) del programa i identificar-ne la seva funcionalitat.
- Plantejar exemples simples d'operacions unitàries i reactors químics, elaborant un tutorial per a cada cas.
- Simular una instal·lació que contempli diferents operacions unitàries i reactors.

4. INTRODUCCIÓ

La simulació de processos s'utilitza pel disseny, desenvolupament, anàlisis i optimització de processos tècnics industrials tals com: plantes químiques, processos químics, sistemes ambientals, centrals elèctriques, operacions de fabricació complexes, processos biològics i funcions tècniques similars. El principal principi de la simulació de processos és una representació basada en models de processos químics, físics, biològics i altres processos tècnics i operacions unitàries en software.

El software de simulació de processos descriu els processos en diagrames de flux on les operacions unitàries estan posicionades i connectades per productes o fluxos d'informació. Aquest software ha de resoldre els balanços de matèria i d'energia per trobar un punt d'operació estable. L'objectiu de la simulació de processos és trobar les condicions òptimes per a un procés examinat.

Amb la simulació de processos és possible representar un procés de producció en el qual hi ha transformacions químiques i físiques mitjançant models matemàtics que impliquen equacions de balanços de matèria i energia, relacions d'equilibri entre fases, equacions de transport i cinètiques.

El simulador és el programa informàtic o software que modela el comportament d'un procés químic industrial. Bàsicament ens permet:

1. Predir el comportament d'un procés.
2. Estudiar diferents casos, modificant els valors de les variables d'operació.
3. Optimització dels processos químics industrials.
4. Dissenyar ampliacions o millores en un procés.

Els programes de simulació de processos es divideixen segons l'estratègia utilitzada en dos grups bàsics:

Programes modulars seqüencials: les equacions descriuen cada una de les operacions unitàries del procés (mòdul) i es resolen mòdul per mòdul de manera gradual, usant tècniques iteratives per resoldre els problemes derivats de la recirculació de la informació. Adients per treballar en estat estacionari.

Programes simultanis o orientats per equacions orientades: el procés sencer es descriu com un conjunt d'equacions, i aquestes, es resolen simultàniament. Els programes simultanis poden

simular la operació en estat tant estacionari com dinàmic de processos i equips i poden oferir una convergència més eficaç quan estan presents múltiples recirculacions.

En el passat, la majoria dels programes de simulació disponibles per als dissenyadors eren del tipus modular seqüencial, més senzills de desenvolupar que els programes d'equacions orientades i requerien sols una potència de càlcul moderada. Els mòduls es processen seqüencialment, per això essencialment només les equacions per una unitat en particular estan en la memòria de l'ordinador al mateix temps. A més de les condicions del procés, temperatura, pressió, cabal, etc., son constants amb el temps. Amb l'enfoc de mòduls seqüencials poden sorgir dificultats informàtiques degut als mètodes iteratius usats per resoldre problemes de recirculació i obtenir una convergència. La major limitació dels programes modulars és la incapacitat de simular el comportament dinàmic depenent del temps d'un procés.

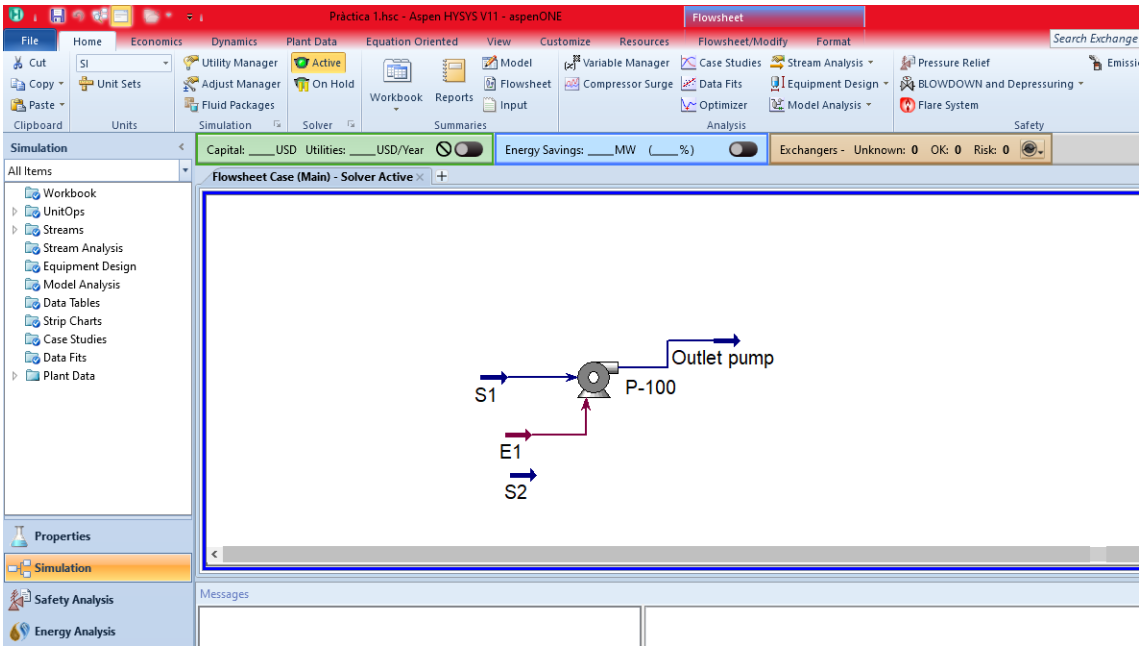
4.1. TIPUS DE SIMULADORS

Hi ha diferents tipus de softwares per a la simulació de processos químics amb els quals es poden dissenyar plantes químiques i modificar-les. Els més comuns són els següents:

4.1.1. HYSYS

Aquest simulador fou adquirit per AspenTech el 2004 pel que és desenvolupat en l'actualitat per Aspen Technology. És un programa interactiu enfocat a l'enginyeria de processos i la simulació, es pot usar per solucionar tota classe de problemes relacionats amb processos químics. Aquest programa compta amb una interfície molt amigable per l'usuari, a més de permetre l'ocupació d'operadors lògics i eines que faciliten la simulació de diversos processos. També interpreta interactivament les comandes segons s'introdueixen en el programa. Per tant, no necessita un botó d'execució (run). No obstant, existeix la possibilitat de plantejar el problema complet sense fer càlculs i després executar-los.

És un simulador bidireccional, ja que el flux d'informació va en dues direccions, cap endavant i cap endarrere, és a dir, pot calcular les condicions d'un corrent d'entrada a una operació unitària a partir dels corresponents corrents de sortida sense necessitat de càlculs iteratius. Posseeix un entorn de simulació modular tant per estat estacionari com per règim dinàmic o no estacionari. És un software adient per a la simulació de plantes petroquímiques i afins.



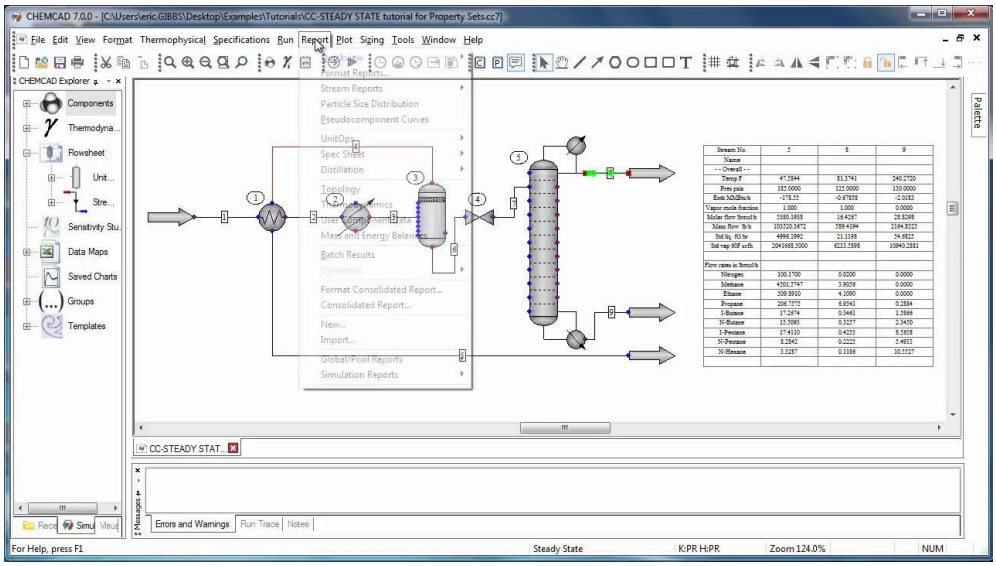
Il·lustració 1: Simulador ASPEN HYSYS. (Font: Elaboració pròpia.)

4.1.2. CHEMCAD

Aquest software va ser creat l'any 1984 quan un professor universitari va formar un equip per desenvolupar un simulador de processos per ordinadors personals. Va ser venut a la secció de software McGraw Hill (COADE) i després va seguir desenvolupant-se i distribuint-se per Chemstations Inc.. CHEMCAD ha anat evolucionant des de llavors i s'ha convertit en un paquet de mòduls que abasten el càlcul i el disseny d'intercanviadors de calor (CC-THERM), simulació de destil·lacions dinàmiques (CC-DCOLUMN), simulació de reactors per lots (CC-ReACS) i destil·lació per lots (CC-BATCH) i simulació de xarxes de canonades (CC-SAFETYNET).

Aquest sistema és molt utilitzat en tot el món pel disseny, operació i manteniment de processos químics en una gran varietat d'indústries incloent l'exploració de petroli i gas i naturalment en processos químics, farmacèutics, producció de biocombustibles i processos industrials en general.

Aquest simulador té molts avantatges, uns quants d'ells són l'increment de la productivitat, maximitzar la rendibilitat de les operacions i la reducció de costos i inversions per l'optimització dels processos.



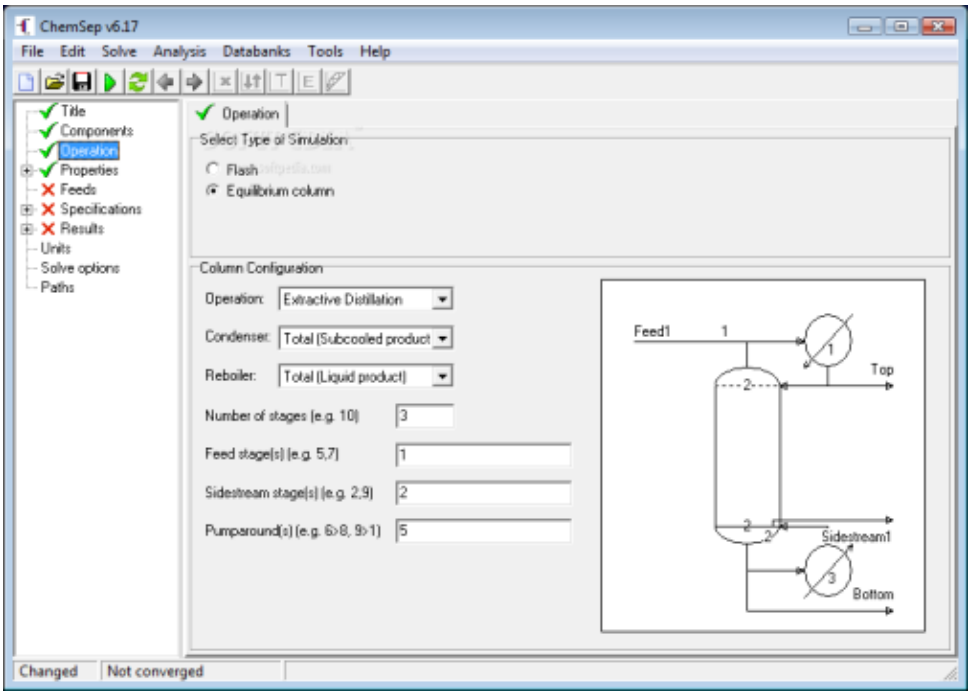
Il·lustració 2: Simulador CHEMCAD. (Font: Chemcad, ComparaSoftware).

4.1.3. CHEMSEP

ChemSep és un software per a la simulació de processos de destil·lació tant d'una mescla de dos components com una mescla multi-component, absorció i extracció.

Aquest simulador integra càlculs flash, el model clàssic de columna en equilibri de fases i models de no equilibri basats en segments. És un programa fàcil d'utilitzar que permet simular qualsevol problema en poc temps i exportar els resultat en una gran varietat de formats com full de càlcul, text i html.

El programa planeja un gran nombre de models de correlacions de transferència de massa i flux així com models d'extracció líquid-líquid i models de columnes de destil·lació de tres fases. Conté una gran base de dades que poden ser útils en els estudis de separació en processos químics.



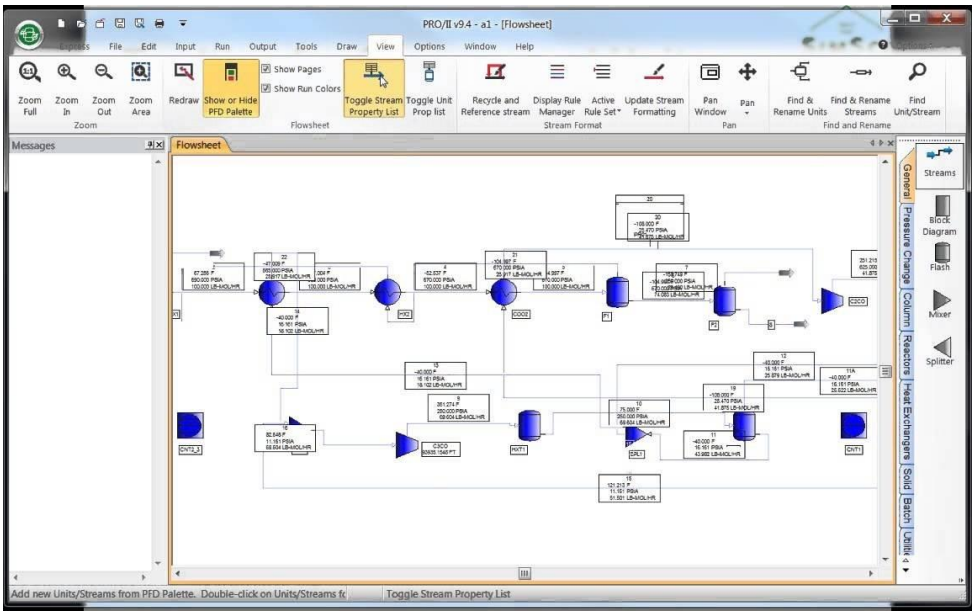
Il·lustració 3: Problema de torres empacades mitjançant ChemSep. (Font: Simulación de procesos. Astrid Milla.)

4.1.4. PRO II

Pro II és un altre programa de simulació de processos que pot ser utilitzat per resoldre un ampli rang de problemes industrials típics amb un tractament rigorós en el balanç tant de matèria com d'energia.

Ofereix el mètode de solució aplicable més compressiva i fàcil d'usar i és l'estàndard industrial per a refineries i processos de gas, incloent processos químics. És usat des de la separació de petroli i gas fins a processos com la destil·lació reactiva.

És un software per l'estudi i l'aplicació de l'enginyeria, tant en el disseny de nous equips com en la simulació dels ja existents. Permet la possibilitat de col·locar controladors en el sistema, realitzar un procés d'optimització, càlculs de canonades, obtenció de corbes d'equilibri, eines de flash en un corrent, exportació de dades en forma de taules i de gràfiques i interfícies amb Microsoft Excel.



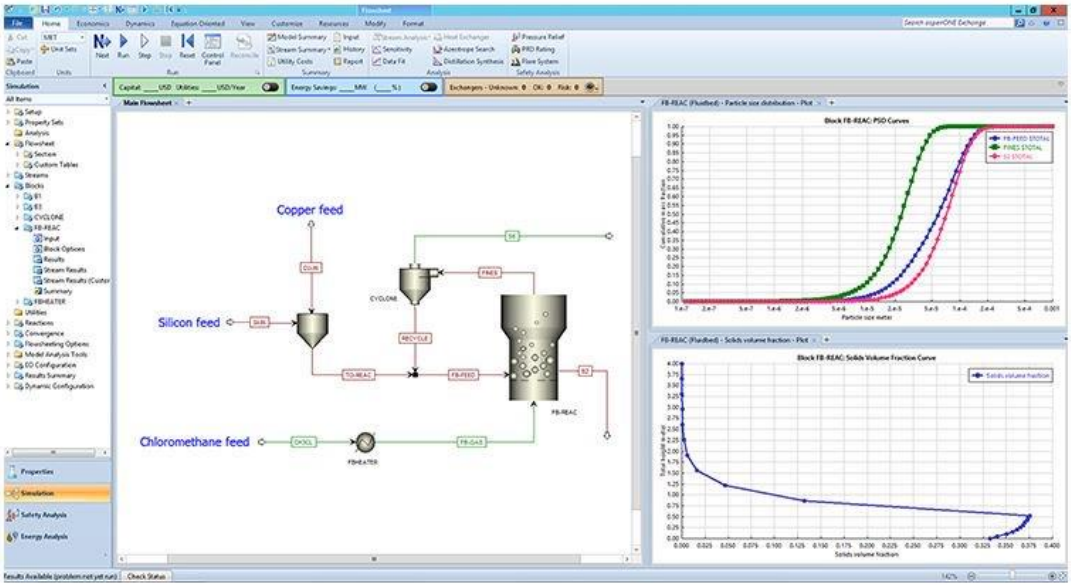
Il·lustració 4: Software de simulació Pro II. (Font: Pro II, Mercado Libre Chile.)

4.1.5. ASPEN PLUS

Aquest serà el software amb el qual el projecte s'enfocarà en entendre i aprendre a utilitzar.

És un simulador original d'AspenTech de processos químics seqüencials i modulars, completament interactiu que permet dur a terme tant simulacions en estat estacionari com en estat dinàmic permetent les seves operacions i propietats modelitzar una àmplia gama de processos i prediu el comportament d'un procés o una sèrie d'operacions unitàries a través de les relacions bàsiques existents entre les mateixes. Té la base de dades més àmplia entre els simuladors de processos comercials i inclou el comportament de ions i electròlits. A més, modelitza i simula qualsevol tipus de procés pel qual hi ha un flux continu de materials i energia d'una unitat de procés a una altra.

Realitza, entre d'altres aplicacions, simulacions de diagrames de flux, estimació de propietats de compostos, l'anàlisi de sensibilitat de variables del procés, obté especificacions de disseny de procés i síntesi i anàlisi de processos químics.



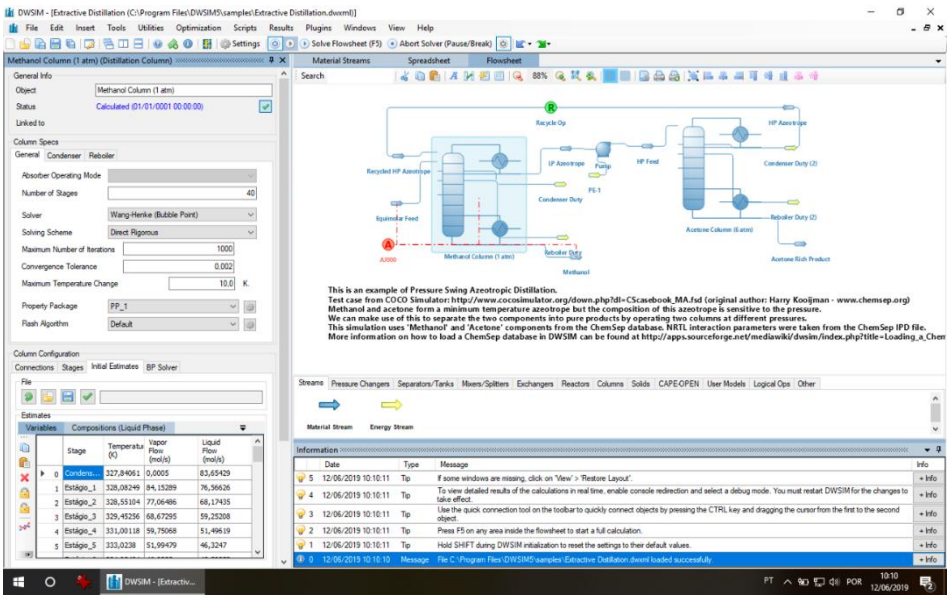
Il·lustració 5: Simulador ASPEN PLUS V11. Simulación de procesos.(Font: AspenTech.)

Aspen Plus i Hysys són molt similars. No obstant, les diferències més rellevants entre ells dos són l'execució del programa i el fet que Hysys es basa en el flux, mentre que Aspen Plus es centra en el procés. Hysys és un simulador bidireccional, és a dir, es pot anar creant la simulació de la planta i simultàniament et va fent el càlcul d'aquesta automàticament. Això facilita el fet de trobar els errors i corregir-los. Amb Aspen Plus, en canvi, la simulació s'ha d'executar manualment.

4.1.6. DWSIM

DWSIM és un simulador de processos químics de codi obert que compleix amb CAPE-OPEN per Windows, Linux i mac iOS. Està construït sobre les plataformes Microsoft, .NET i Mono i presenta una interfície gràfica de l'usuari, càlculs avançats de termodinàmica, suport de reaccions i caracterització de petroli i/o eines de generació de components hipotètics.

Aquest software és capaç de simular processos d'equilibri d'electròlits en estat estacionari, vapor-líquid, vapor-líquid-líquid, sòlid-líquid i aquós amb els típics models termodinàmics que contenen tots els softwares de simulació de processos químics.



Il·lustració 6: Simulador DWSIM. (Font: Wikipedia.)

4.1.7. ALTRES TIPUS DE SIMULADORS DE PROCESSOS INDUSTRIALS

Existeixen altres tipus de simuladors de processos industrials en general que s'enfoquen en altres aspectes de la indústria química. Alguns d'ells són:

- **ProModel:** s'utilitza per a la simulació de processos industrials, processos de manufactura, logística, tallers, entre d'altres aplicacions.
- **CONTROLP:** adient pel disseny de processos industrials i sistemes controlats.
- **Alibre 3D:** pel disseny en 3D de peces mecàniques, plantes químiques, canonades, equips, etc.
- **DIA:** es fa servir per dissenyar diagrames de flux. Conté una biblioteca de símbols de processos químics.

5. DESCRIPCIÓ DEL FUNCIONAMENT DEL PROGRAMA ASPEN PLUS

A l'hora d'iniciar una simulació amb qualsevol programari, s'ha de tenir clar quin és l'objectiu del què es vol simular. Per altra banda, cal tenir un esquema del diagrama de flux amb les seves especificacions de corrents d'entrada i sortida, quins equips industrials es faran servir amb les seves respectives dades, a més de tots els compostos químics que participen i les reaccions que intervenen, si és que n'hi ha.

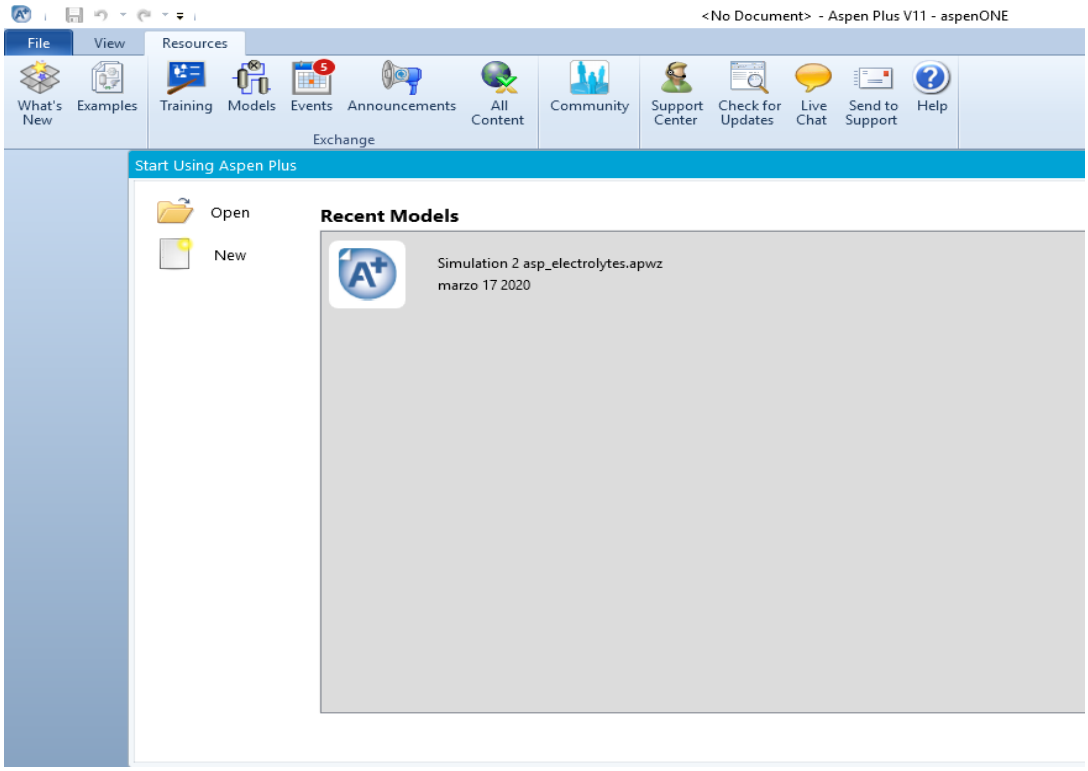
També és important tenir en compte els següents aspectes:

- ✓ Executar la simulació a mesura que es va construint, no esperar a tenir tota la planta química dibuixada. És més fàcil trobar els errors i corregir-los així que no quan es té tota la simulació i s'ha de revisar sencera.
- ✓ Executar la simulació abans de tancar un bucle i afegir opcions al diagrama de flux.
- ✓ Comprovar les especificacions d'entrada de corrents i de blocs.

A continuació s'anirà explicant tota la informació requerida necessària per tal de simular una planta química. No obstant, en aquest projecte es donarà una visió general del funcionament del programa i s'enfocarà més en els electròlits, donat que es vol abordar aquest tema en el treball

5.1. LA FINESTRA D'INICI

Quan s'inicia el programa d'ASPEN PLUS V11, el primer que apareix és la següent pantalla:

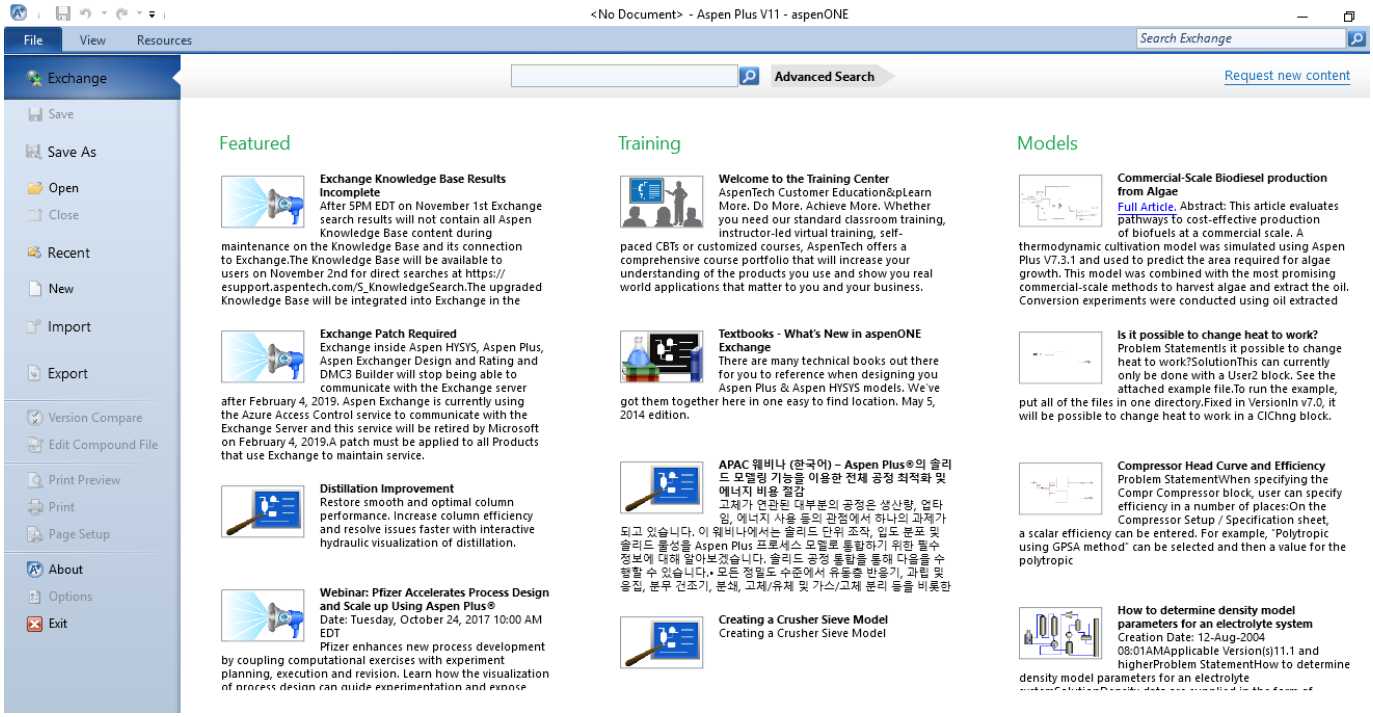


Il·lustració 7: Finestra d'inici d'ASPEN PLUS V11.(Font: Elaboració pròpia.)

Sempre que es vulgui crear un document nou s'ha de clicar a la comanda **New**.

Si es vol obrir un document ja creat per modificar-lo o continuar amb el que ja tenies, s'ha d'anar a **Open**.

A on posa **File**, hi ha les següents comandes:



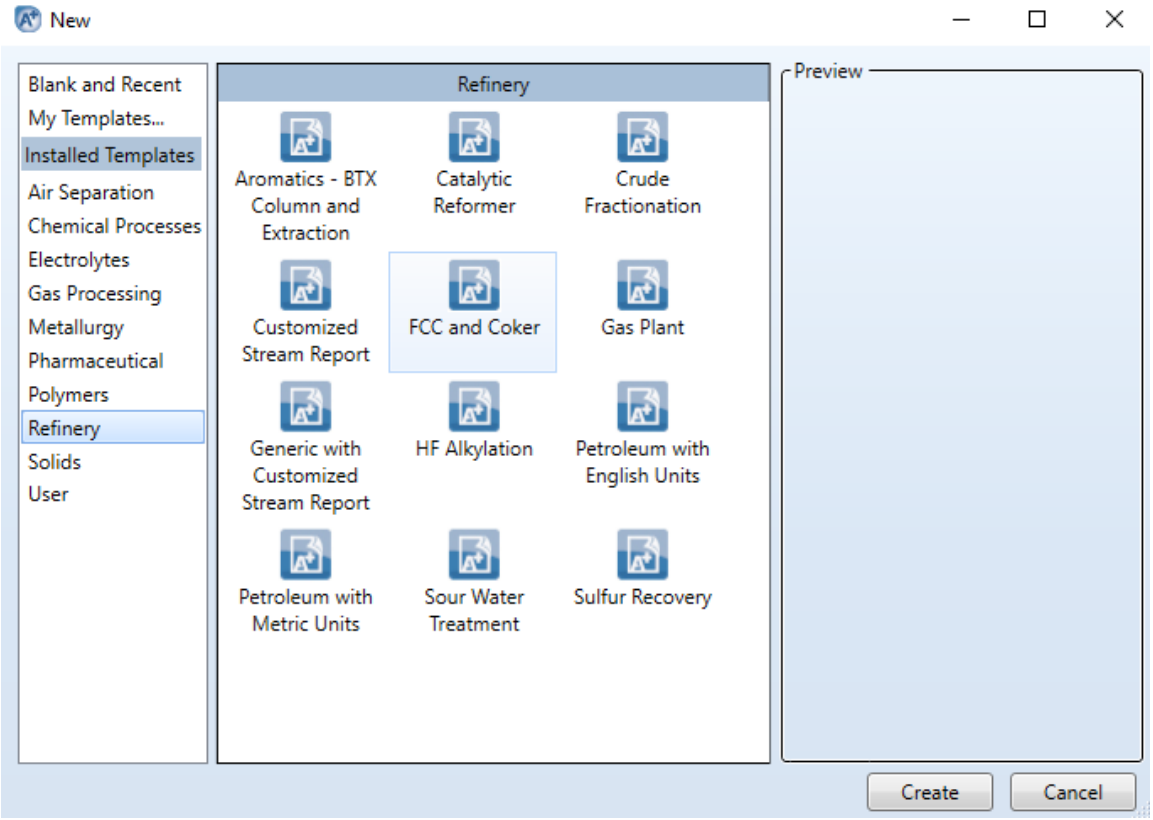
Il·lustració 8: Comanda File. (Font: Elaboració pròpia.)

Les tres columnes de **Featured**, **Training** i **Models** serveixen per buscar informació del més destacat és a dir, notícies sobre el programa, activitats per entrenar o practicar a l'hora de fer simulacions amb ASPEN i dels models que hi ha en aquest programa i es troben a la comanda **File > Exchange**.

La columna blava de l'esquerra de tot és on es pot guardar el document, la comanda **About** és per obtenir més informació d'aquest programa i la comanda de **Exit** és per sortir-ne d'ell.

Tancant aquesta pestanya tornant a clicar a la comanda **File** o bé clicant la comanda **New**, ens surt la següent pestanya on s'escull la plantilla més adient per a la simulació que es vulgui o es necessiti.

5.2. LES PLANTILLES O TEMPLATES



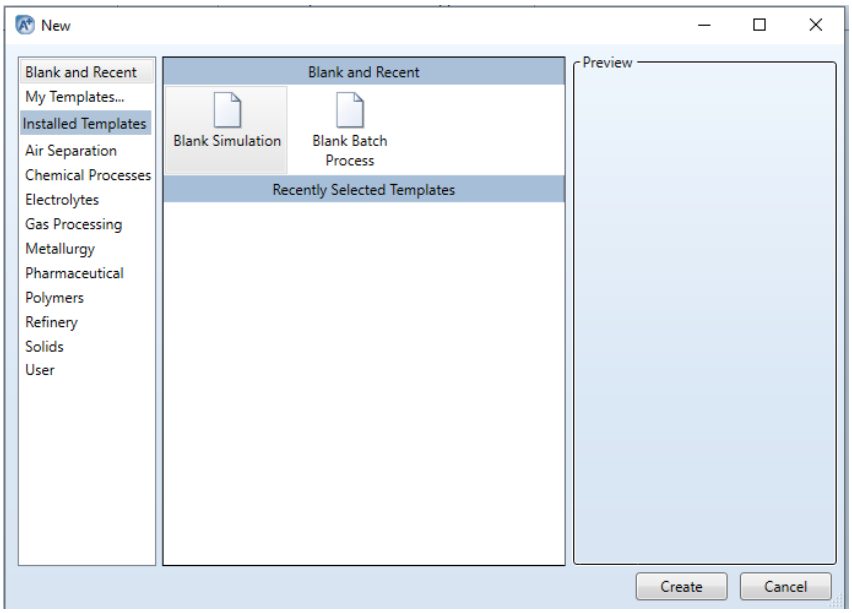
Il·lustració 9: Comanda New > Plantilles o Templates. (Font: Elaboració pròpia.)

ASPEN PLUS V11 té les següents plantilles per simular disponibles:

- **General Template**: s'utilitza aquesta plantilla per un ampli rang d'aplicacions de problemes que incorporen equilibris líquid - vapor.
- **Petroleum Template**: defineix els valors predeterminats comunament utilitzats en la indústria del petroli. També és apropiada per aplicacions petroquímiques com plantes d'etilè, que involucren fraccions de petroli com a matèria primera.
- **Gas Processing:** la plantilla de processament de gas defineix els valors predeterminats comunament utilitzats en la indústria del processament de gas. Per exemple, els fluxos de cabal són fluxos de volum de vapor estàndard en milions de metres cúbics per hora.
- **Air Separation:** es fa servir per a simular separacions d'aire criogèniques.
- **Chemicals:** és adequada per a una àmplia gama d'aplicacions químiques (sense electròlits). També és apropiada per aplicacions petroquímiques com la producció de MTBE (Metil Ter-Butil Èter) i les plantes de VCM (Monòmer de Clorur de Vinil), on les matèries primers es defineixen en termes de components químics.

- **Electrolytes:** aquesta plantilla s'utilitza per aplicacions que requereixen models rigorosos d'espècies d'electròlits. Es pot fer servir aquesta plantilla en qualsevol aplicació on els electròlits són importants.
- **Specialty Chemicals:** és per aplicacions químiques especialitzades amb o sense electròlits.
- **Pharmaceuticals:** utilitza NRTL com a mètode de propietat base predeterminada. Pot usar-se aquest mètode per sistemes de dues fases líquides o sistemes vapor – líquid a baixa pressió.
- **Hydrometallurgy Template:** s'utilitza per modelar electròlits i sòlids en processos hidrometal·lúrgics.
- **Pyrometallurgy:** es fa servir per modelar aplicacions de processament de metalls a temperatures elevades.
- **Solids:** Aspen Plus pot modelar sòlids en qualsevol part d'un diagrama de flux del procés. Es troba disponible una àmplia gama de models d'unitats d'operació per equips de maneig de sòlids que inclouen cristal·litzadors, trituradores, cribadores i ciclons.

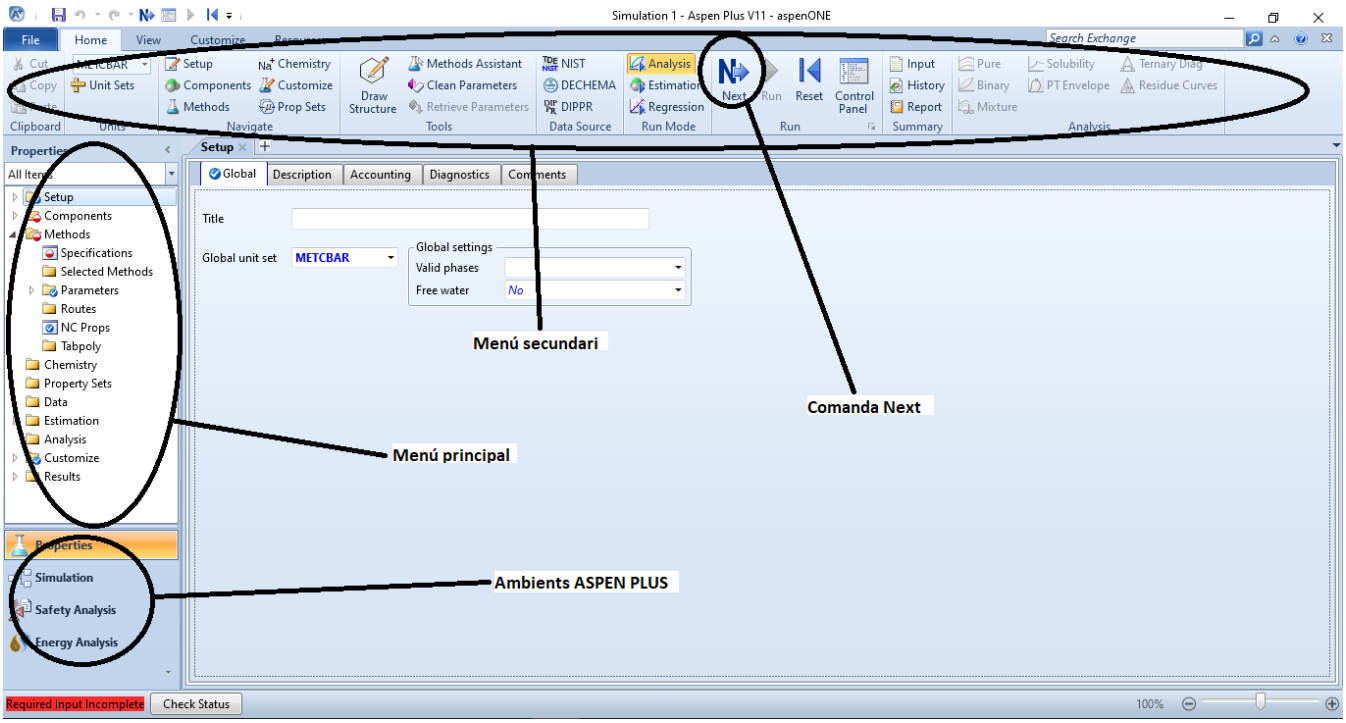
En aquest projecte es farà servir la plantilla d'electròlits en quant a la simulació del cas pràctic que s'explica en el punt 6. La figura 9 mostra la pantalla de les diferents plantilles. A l'esquerra d'aquesta surten els tipus de plantilla en les quals el programa pot fer simulacions, el **Blank Simulation** és un altre tipus de plantilla que, tal com diu el nom, és com un full en blanc per a la simulació mentre que el **Blank Batch Process** és una plantilla en blanc per a la simulació del processos en discontinu (batch). Els blocs són cada un dels equips que conformen el procés que es vol simular.



Il·lustració 10: Comanda New. Blank and Recent. (Font: Elaboració propia.)

5.3. LA FINESTRA PRINCIPAL

La figura següent mostra la pantalla principal del programa amb la informació d'alguns apartats del menú principal.



Il·lustració 11: Finestra Aspen Plus. Mostra el menú principal, el secundari, els Ambients del simulador i la comanda Next. (Font: Elaboració pròpia.)

El menú principal és el menú que té cada ambient. En la figura, aquest menú és de l'ambient de **Properties**.

La comanda **Next** invoca al sistema expert del programa, una guia a través dels passos per a completar la simulació.

5.4. ELS AMBIENTS DEL PROGRAMA

Hi ha quatre diferents ambients corresponents en els quals hi ha les diferents àrees de treball i temàtiques en aquest software:

- Ambient **Properties**
- Ambient **Simulation**
- Ambient **Safety Analysis**
- Ambient **Energy Analysis**

Els que més s'utilitzen per a fer la simulació de la planta que es vol fer, són el de **Properties** i el de **Simulation**. Els altres dos són per quan ja s'ha creat la planta i s'ha executat correctament sense errors o advertències.

Aquest projecte s'enfocarà amb els ambients de **Properties** i **Simulation**.

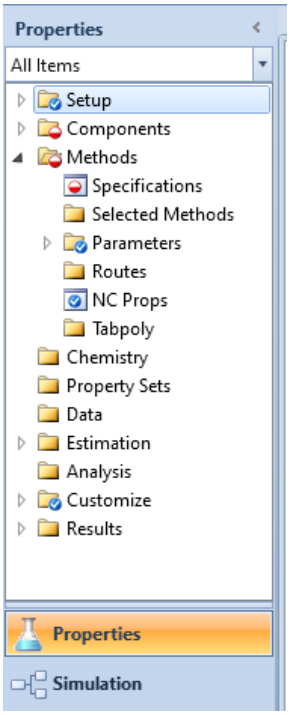
5.4.1. AMBIENT PROPERTIES

Aquest ambient consisteix en un conjunt de finestres on es mostra la informació sobre sistemes d'unitats, propietats termodinàmiques i de transport dels compostos purs i les seves mescles i els models termodinàmics per estimar aquestes propietats.

El menú principal d'aquest ambient es mostra en la següent figura:

Quan a la carpeta hi ha aquesta senyal, significa que l'apartat no està complet, i que, per tant, cal afegir informació.

Quan a la carpeta hi ha aquesta senyal, vol dir que aquest apartat està complet.

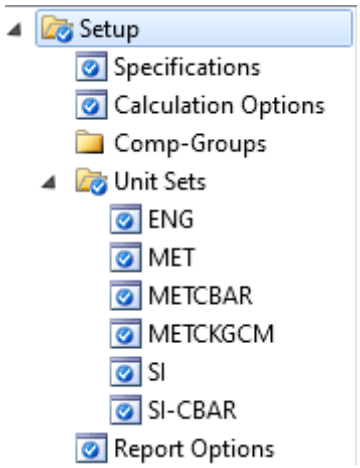


Il·lustració 12: Ambient Properties. (Font: Elaboració propia.)

5.4.1.1. SETUP

En el **Setup** s'especifiquen les següents característiques:

- Un títol d'execució que apareix a cada pàgina del fitxer de l'informe.
- Les unitats de mesura per defecte. Quan es canvien les unitats globals, Aspen Properties converteix els valors en formularis introduïts anteriorment, tret de les variables que utilitzen conjunts d'unitats locals especificats al full de comentaris.
- La configuració global, que inclou les fases vàlides (**Liquid – Only**, **Vapor – Only**, **Vapor – Liquid**, **Vapor – Liquid – Liquid**) i l'aigua lliure.



Il·lustració 13: Carpeta Setup. (Font: Elaboració pròpia.)

En **Specifications** s'introdueixen especificacions globals com el títol, informació d'informes de comptabilitat, nivells de diagnòstic i una descripció d'execució dels informes.

Taula 1: Setup - Specifications. (Font: Elaboració pròpia.)

Utilitzar aquests fulls	Per especificar el següent
Global	Executar el títol, les unitats de mesura i la configuració global.
Description	Introduir una descripció d'execució pels informes.
Accounting	Aspen Properties executa la informació comptable.
Diagnostics	El nivell de missatge de diagnòstic al tauler de control i al fitxer Historial durant una execució.
Comments	Veure o especificar comentaris pel model.

En **Calculation Options** es substitueixen els valors predeterminats per a les opcions de càlcul establertes per Aspen Properties. Aspen Properties proporciona valors determinats per realitzar balanços d'energia i càlculs de convergència. També té límits de temps predeterminats. Es pot utilitzar aquest formulari per substituir aquests valors per defecte. També es poden especificar les opcions de càlcul a nivell de bloc individual.

Taula 2: Calculation Options. (Font: Elaboració propia.)

Utilitzar aquests fulls	Per especificar el següent:
Calculations	Les opcions de càlcul per calcular el pes molecular del component, ignorar el càlcul de conjunt de propietats (Property Set) si falla el Flash; calcula els derivats de propietats.

Flash Convergence	Els límits de temperatura i pressió superiors i inferiors, així com les opcions de Flash.
System	Les opcions del sistema.
Limits	Els límits de temps o d'error abans que s'acabi el càlcul, així com el nombre màxim d'error o advertència que s'ha d'imprimir al fitxer d'historial.
Reactions	La comprovació d'estequiometria de reacció.

En la carpeta de **Comp - Groups** es defineixen grups de components per a conjunts de propietats o per representar perfils de composició i valor K. Aquesta carpeta conté les següents finestres:

Les propietats representades per a un grup de components es basen en la suma de propietats de components individuals. Per exemple, la fracció molar d'un grup de components és la suma de les fraccions molars dels components individuals del grup. Els valors del grup molar – K són relacions de fraccions molars sumades.

Taula 3: Comp - Groups. (Font: Elaboració pròpia.)

Utilitzar aquests fulls	Per especificar el següent:
Component List	Definir una llista de components que cal incloure al grup de components. Primer s'especifica una sub-relació i després es seleccionen els components.
Component Range	Per definir una gamma de components que cal incloure al grup de components. Els components seleccionats en la **Component List** no poden estar dins del rang de components.
Comments	Consultar o especificar la descripció i els comentaris d'un objecte.

La carpeta de **Unit – Sets** serveix per crear nous conjunts d'unitats definides per l'usuari i per veure els conjunts d'unitats ja existents. Un conjunt d'unitats és una col·lecció d'unitats per a cada quantitat dimensional a Aspen Plus.

Els conjunts d'unitats ja existents són els següents: ENG, MET, METCBAR, METCKGCM, SI i SI-CBAR.

Si es vol crear un conjunt d'unitats diferent s'ha d'anar a aquesta carpeta i clicar a **New**.

La següent taula descriu el formulari d'aquesta carpeta:

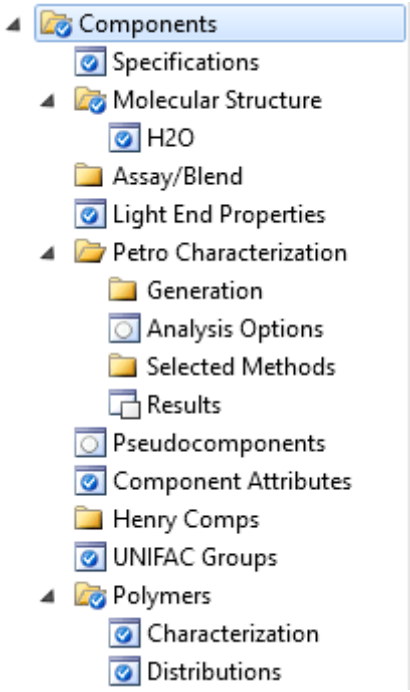
Taula 4: Unit – Sets. (Font: Elaboració pròpia.)

Pestanya	Informació
Standard	Enumerar i seleccionar les unitats existents com a base per a un nou conjunt d'unitats; cercar alfabèticament totes les quantitats dimensionals; especificar les unitats relacionades amb el cabal, la temperatura i la pressió.
Heat	Especificar l'entalpia, la calor, la capacitat de calor i les unitats relacionades amb l'entropia.
Transport	Especificar les unitats de volum, densitat, relacionades amb el transport i termodinàmiques diverses.
Concentration	Especificar unitats relacionades amb l'energia i/o la potència, el temps, la concentració i la composició.
Size	Especificar la mida, el dimensionament dels equips, el cost i la mida de les columnes.
Currency	Especificar la moneda predeterminada per a les unitats relacionades amb aquesta.
Miscellaneous	Especificar unitats diverses.

Finalment, la finestra de **Report Options** serveix per especificar quines seccions de l'informe s'inclouen o es suprimeixen. L'informe documenta totes les dades d'entrada i els valors predeterminats utilitzats en Aspen.

5.4.1.2. COMPONENTS

En l'apartat de **Components** s'especifiquen els components o compostos químics que participen en la simulació. Primer es defineixen els components generals, els més comuns o coneguts. A continuació es mostra tot el contingut que hi ha en la carpeta de Components:



Il·lustració 14: Carpeta Components. (Font: Elaboració pròpia.)

La finestra de **Specifications** s'utilitza per identificar tots els components que s'inclouen en el càlcul del que es vol simular. S'ha d'identificar almenys un component. El sistema de propietat física Aspen emmagatzema dades de propietats físiques per a molts components químics en bancs de dades de components. En aquesta finestra, es troba el següent contingut:

Taula 5: Components – Specifications. (Font: Elaboració pròpia.).

Utilitzar aquests fulls	Per identificar el següent:
Selection	Tots els components que cal incloure al càlcul.
Petroleum	Assajos de petroli, barreges i pseudocomponents definits per l'usuari.
Nonconventional	Components sòlids no convencionals.
Databanks	Bases de dades del component pur per cercar i l'ordre de cerca.
Comments	Consultar o especificar la descripció i els comentaris d'un objecte.

En la pestanya de **Selection** hi ha una comanda anomenada **Elec Wizard**. Aquesta comanda serveix per generar de forma ràpida components i reaccions per a sistemes en els quals intervenen electròlits. L'assistent segueix els següents passos:

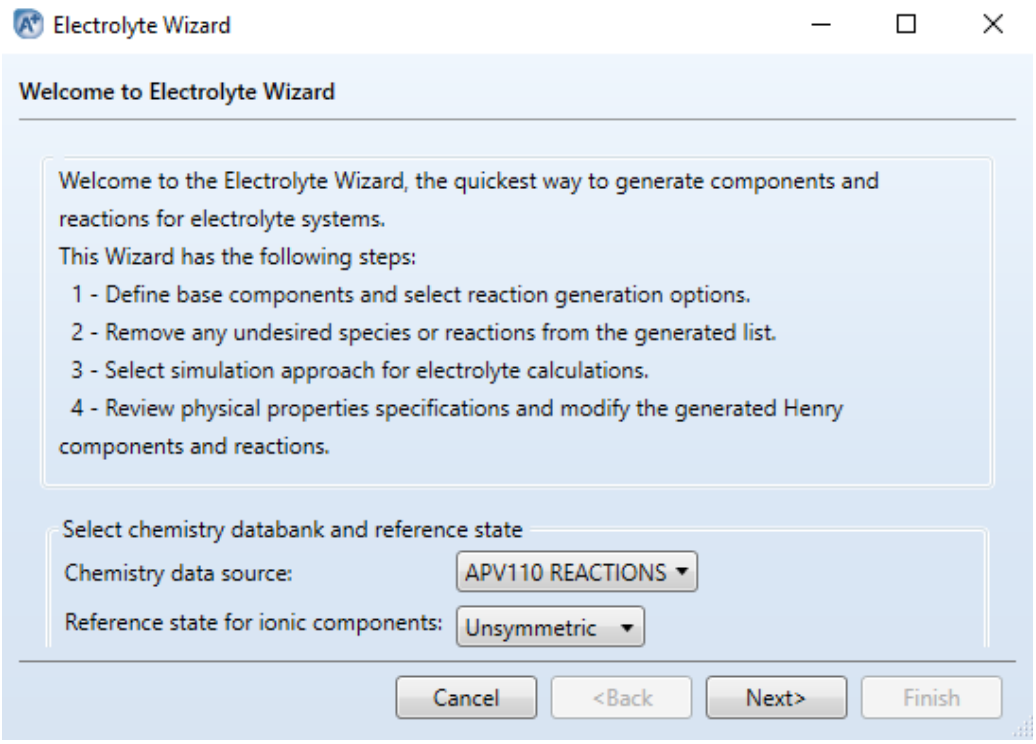
1. Definir els components de base i seleccionar les opcions de generació de reaccions.

2. Suprimir les espècies o reaccions no desitjades de la llista generada.
3. Seleccionar l'enfocament de simulació per als càlculs d'electròlits.
4. Revisar les especificacions de propietats físiques i modificar els components i reaccions de Henry generats.

S'han de tenir clars quins components són els que participen, quins components es formen, les reaccions que es volen i si inclouen la formació de sals, la reacció de dissociació de l'aigua o bé formació de gel.

L'ió hidrogen es pot representar com a protó (H+) o bé com a ió hidroni (H_3O+).

També es poden incloure o excloure la reacció de dissociació de l'aigua de la llista de reaccions generades. Per defecte, aquesta reacció de dissociació de l'aigua s'exclou de la llista. També es pot incloure la formació de gel.



Il·lustració 15: Comanda Electrolyte Wizard. (Font: Elaboració pròpia.)

La carpeta de **Henry Comps** s'utilitza per seleccionar una llista de components supercrítics o bé components no condensables als quals se'ls hi aplica la llei de Henry. Aquesta carpeta conté les següents pestanyes:

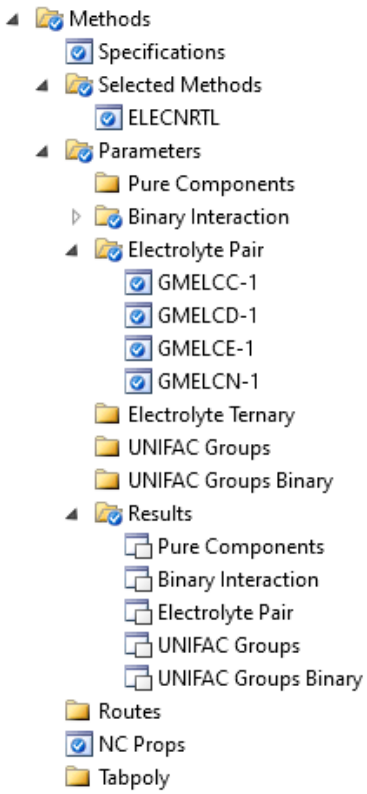
Taula 6: Henry Comps. (Font: Elaboració pròpia.)

Utilitza aquestes pestanyes	Per especificar el següent:

Selection	Seleccionar una llista de components supercrítics o no condensables als quals s'aplica la llei de Henry.
Comments	Consultar o especificar la descripció i els comentaris d'algun objecte d'aquest apartat.

5.4.1.3. METHODS

En l'apartat de **Methods** es seleccionen els mètodes o models de les propietats físiques. Aspen utilitza aquest apartat per definir el model termodinàmic necessari per a les estimacions o als càlculs de les propietats termodinàmiques i de transport dels compostos purs i les seves mescles que intervenen en la simulació. Els models termodinàmics poden ser emmagatzemats com una entitat completament separada i poden ser utilitzats múltiples models en una mateixa simulació.



Il·lustració 16: Carpeta Methods. (Font: Elaboració pròpia.)

Definir el model termodinàmic és molt important, ja que defineix la base de la simulació. En aquesta carpeta es mostren les següents pestanyes amb les respectives propietats:

Taula 7: Methods – Tabs. (Font: Elaboració propia.)

Utilitza aquesta pestanya	Per especificar el següent:
Global	Els mètodes i models de propietat global per al càlcul. Per defecte, el sistema de propietat física Aspen utilitza aquesta informació en tots els càlculs.
Flowsheet Sections	Els mètodes de propietat per a una secció d'un diagrama de flux. El sistema d'Aspen usarà els mètodes especificats per a tots els models d'operació d'unitats de la secció del diagrama de flux. Aquests mètodes anul·len els mètodes globals. També s'han d'identificar els components que es tractin com a components de Henry. Per a aplicacions amb electròlits, s'ha d'especificar la química de les solucions i si és una aproximació del càlcul amb components vertaders o amb components aparents.
Referenced	Els mètodes i models de propietat per utilitzar-los en qualsevol model d'operació d'unitat o en anàlisi de propietats.
Comments	Per deixar comentaris o dades importants en la pestanya de Methods.

En l'aproximació del càlcul amb components vertaders (**True component calculation approach**), el resultat s'informa en termes de ions, sals i espècies moleculars presents després de considerar la química de la solució. En el cas de l'aproximació del càlcul amb components aparents (**Apparent component calculation approach**), el resultat comunicat està en termes de components base presents abans de considerar la química de la solució, els ions i les sals precipitats no poden ser components aparents i les especificacions s'han de fer en termes de components aparents en comptes de ions o sals sòlides. De les dues maneres els resultats que s'obtenen són equivalents.

5.4.1.4. CHEMISTRY

Chemistry serveix per definir la química de la planta que es desitja simular. Es pot definir la química especificant cada reacció que es produeix, especificant els components reactius, els inerts (en aquest cas s'assumeix que els altres components són reactius) o especificant que tots els components són reactius. Quan qualsevol dels últims tres mètodes s'especifiquen com a

reactius els components, el sistema de propietat física Aspen determina automàticament els productes entre els components especificats en la vostra simulació.

En el cas dels sistemes d'electròlits, aquests impliquen components i reaccions iòniques que s'han de definir. Especificar les reaccions i espècies adequades requereix, en general, un coneixement raonable de la química de les solucions.

El formulari "**Química**" o "**Chemistry**" es fa servir per definir la química de la solució, incloent les reaccions d'equilibri, dissociació completa o precipitació de sal per problemes d'electròlits. Cada conjunt de reaccions que es defineix s'identifica amb una identificació que proporciona l'usuari.

L'assistent d'electròlits és útil per simplificar aquesta tasca. La química de la solució d'electròlits s'utilitza en connexió amb mètodes de propietat d'electròlits com **ELECNRTL** o **PITZER**.

En la carpeta **Chemistry**, s'hi troben les següents pestanyes:

Taula 8: Chemistry - Specifications. (Font: Elaboració pròpia.)

Utilitza aquestes pestanyes	Per especificar el següent:
Chemistry	Definir reaccions en fase líquida d'electròlits o components reactius.
Specifications	Entrar especificacions pels càlculs d'equilibri. Es pot especificar la concentració base per les constants d'equilibri, la temperatura aproximada per l'equilibri, entre d'altres.
Equilibrium Constants	Entrar les constants d'equilibri (en fraccions molars, molaritats o pressió parcial base) per cada equilibri i sal.
Comments	La descripció i els comentaris d'un objecte.

Quan s'especifiquen reaccions, hi ha tres tipus de reaccions en fase líquida disponibles per electròlits. Quan s'especifiquen els components, també es pot especificar la fase en que espereu que existeixi cada component:

Taula 9: Types of reactions. Descripció fase components reactius. (Font: Elaboració pròpia.)

Tipus reaccions	Fase components reactius	Descripció
Equilibrim	Mescla o mixta	Reaccions d'equilibri degudes a la dissociació parcial d'electròlits febles o reaccions iòniques entre espècies iòniques i moleculars.
Salt	Sals	Dissolució o precipitació de sals.
Dissociation	Dissociacions	Dissociació completa d'electròlits forts.

Quan s'especifica que tots els components són reactius o s'especifiquen components inerts, el programa de Aspen Physical Property System decideix en quina fase cada component participa en la simulació basant-se en altres especificacions.

A l'hora d'especificar reaccions, hi ha tres funcions determinades:

- **NEW:** per crear una nova reacció.
- **EDIT:** per editar o modificar la reacció seleccionada.
- **DELETE:** per eliminar una reacció.

ESTAT DE REFERÈNCIA PER COMPONENTS IÒNICS

L'estat de referència per espècies iòniques pot ser o simètrica o asimètrica. Aquesta funció permet especificar la base pels coeficients d'activitat dels components iònics. Això afecta a les interpretacions de les constants d'equilibri de la química d'electròlits. Després de canviar aquesta opció s'hauria de regenerar qualsevol química generada mitjançant el **Electrolyte Wizard** i tornar a entrar una altra química i escollir un mètode de propietats compatible.

Taula 10:Tipus de base i descripció. Aspen Plus. (Font: Elaboració pròpia.)

Tipus de base	Descripció
UNSYMMETRIC	Els coeficients d'activitat d'espècies iòniques són calculats en base la dilució infinita del solut en aigua pura. Aquesta base és coherent amb el sistema tradicional pels càlculs de la propietat d'electròlits a Aspen Plus.

SYMMETRIC	Els coeficients d'activitat d'espècies iòniques són calculats en base un estat de sals pures fusionades. Aquesta base és compatible amb el model de coeficient d'activitat de l'electròlit simètric NRTL.

Quan es canvia aquesta base, s'ofereix una opció sobre com gestionar les constants d'equilibri existents.

Per modificar aquesta base s'ha d'anar a l'ambient **Properties > Chemistry > Specifications**.

5.4.1.5. PROPERTY SETS

Aquesta carpeta és útil per a definir un conjunt de propietats termodinàmiques, de transport i d'altres. Aquestes propietats estan integrades i també es poden definir mitjançant la finestra de Personalització | Propietats d'Usuari (**Customize | User Properties**).

Taula 11: Property Sets Forms. (Font: Elaboració pròpia.)

Utilitzar aquesta fulla:	Per especificar el següent:
Properties	Per a calcular propietats.
Qualifiers	Qualificadors per a les propietats seleccionades.
Comments	Veure o especificar la descripció i els comentaris d'un objecte.

Es pot utilitzar el **Property Set** en:

- Informes de la corba de calefacció i refrigeració del bloc de funcionament de la unitat.
- Informes de propietats de l'etapa de la columna de destil·lació i especificacions de rendiment.
- Especificacions de disseny.
- Blocs FORTRAN.
- Blocs de sensibilitat.
- Transmetre informes.
- Informes d'escalat.

5.4.2. AMBIENT SIMULATION

En el **Simulation Environment** és on es construeix el diagrama de flux o PFD (**Process Flow Diagram**) que es vol simular. També en la carpeta de **Setup**, es pot posar títol a l'arxiu o a la simulació.

5.4.2.1. FLOWSHEET

Aspen Plus proporciona dos mètodes per construir el diagrama de flux del procés:

- Finestra/es del diagrama de flux gràfic i la paleta d'objectes per a la creació del model per permetre a l'usuari construir el diagrama gràficament.
- Aquest formulari permet construir el diagrama de flux especificant els seus respectius blocs i les seves respectives connexions.

La pestanya de **Flowsheet | Section** permet crear, canviar, editar i eliminar seccions del diagrama de flux. També pot establir la secció actual (la secció a la que s'afegeixen nous blocs agregats en la finestra de la fulla de flux del procés) i canviar la classe de flux per a les seccions del diagrama de flux.

Aquest formulari conté les següents pestanyes:

Taula 12: Flowsheet - Specifications. (Font: Elaboració pròpia.)

Utilitzar aquesta pestanya:	Per especificar el següent:
Specifications	Afegir, eliminar o renombrar els blocs dins de la secció **Flowsheet** o canviar els corrents connectats a aquests blocs.
Comments	Veure o especificar la descripció i comentaris d'un objecte.

5.4.2.2. STREAMS

Els corrents (streams) connecten els models d'operacions unitàries i transfereixen material o flux d'energia. Els fluxos també poden connectar diferents seccions del mateix model d'operació unitària. Els corrents poden:

- Introduir material d'alimentació o energia al diagrama de flux (corrents d'alimentació).
- Transferir material o energia entre models d'operació unitària (blocs).

- Representar els fluxos interns d'un model d'operació unitari (fluxos de pseudo-productes).

L'usuari pot utilitzar **Streams** per introduir dades pels fluxos d'alimentació i proporcionar estimacions inicials per qualsevol flux intern que sigui un flux de llàgrimes.

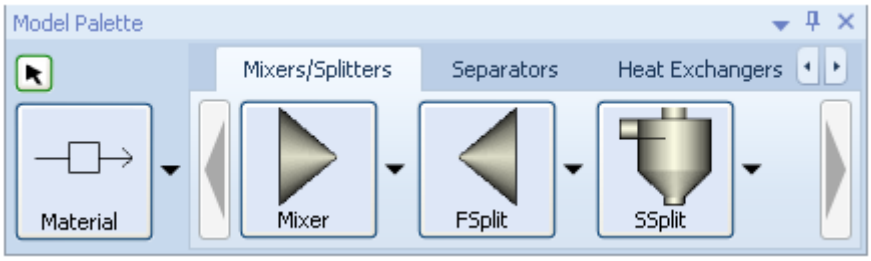
Taula 13: Streams - Tipus de fluxos. (Font: Elaboració pròpia.)

Utilitzar aquests tipus de flux:	Pel següent:
Material Stream	Transferir flux de material cap a o des dels blocs d'operació de la unitat.
Heat Stream	Transferir calor cap a o des dels blocs d'operació de la unitat.
Work Stream	Transferir energia cap a o des de bombes i compressors.

5.4.2.3. BLOCKS

En aquest apartat, s'especifiquen els blocs (operacions unitàries) que el programa ofereix, i s'expliquen breument quina utilitat o funció tenen cada un.

Abans de mencionar-los, la finestreta on es troben els blocs s'anomena **Model Palette**, i està situada a la part inferior de l'ambient de simulació, per tal de poder construir la planta química que es vol.



Il·lustració 17: Blocs. Model Palette. Ambient Simulation. (Font: Elaboració pròpia.)

A continuació es descriuen els blocs existents i més utilitzats com a tal.

- **MIXERS I SPLITTERS / MESCLADORS I DIVISORS**

Taula 14: Mixers and splitters. (Font: Elaboració pròpia.)

Model	Descripció	Utilitzar-lo per:
Mixer	Mesclador de corrents. Combina diferents cabals per transformar-lo en un de sol.	Operacions de mescla de flux. Afegint corrents de calor o fluxos de treball.

FSplit	Divisor de corrents. Divideix l'alimentació en funció de les separacions especificades per als fluxos de sortida.	Divisors de flux. Vàlvules de purga.
SSplit	Divisors de sub-corrents. Divideix l'alimentació en funció de les divisions especificades per a cada sub-transmissió.	Divisors de flux. Separadors fluid-sòlids perfectes.

SEPARATORS / SEPARADORS

Taula 15: Separators. (Font: Elaboració pròpia.)

Model	Descripció	Utilitzar-lo per:
Flash2	Flash de dues sortides. Separa l'alimentació en dos fluxos de sortida, mitjançant un rigorós equilibri vapor – líquid o vapor – líquid – líquid.	Tambors flash, evaporadors, tambors knock-out, separadors d'una sola etapa.
Flash3	Flash de 3 sortides. Separa l'alimentació en 3 corrents de sortida, mitjançant un equilibri rigorós vapor – líquid – líquid.	Decantadors, separadors d'una sola etapa amb dues fases líquides.
Decanter	Decantador líquid – líquid. Separa l'entrada en 2 corrents de sortida líquids.	Decantadors, separadors d'una sola etapa amb dues fases líquides i sense fase vapor.
Sep	Separador de components. Separa els components del cabal d'entrada en diversos fluxos de sortida, segons els fluxos especificats o les fraccions dividides.	Operacions de separació de components (destil·lació i absorció) quan els detalls de la separació són desconeguts o poc importants.
Sep2	Separador de components de 2 sortides. Separa components del flux d'entrada en 2 fluxos de sortida, segons els fluxos, fraccions dividides o pureses especificades.	Operacions de separació de components (destil·lació i absorció) quan els detalls de la separació són desconeguts o poc importants.

HEAT EXCHANGERS / INTERCANVIADORS DE CALOR

Taula 16: Heat Exchangers. (Font: Elaboració pròpia.)

Model	Descripció	Utilitzar-lo per:
Heater	Escalfador o refrigerador. Determina les condicions tèrmiques i de fase del flux de sortida.	Heaters, Coolers Condensers, etc.
HeatX	Intercanviador de calor de 2 corrents. Intercanvia calor entre dos fluxos. Valoració dels intercanviadors de calor de tubs i carcasses quan es coneix la geometria.	Modelatge de bescanviadors de carcassa i tubs, refrigerats per aire i intercanviadors de plaques amb programes rigorosos.
MHeatX	Intercanviador de calor multi-corrent. Múltiples intercanviadors de calor de corrents freds i calents.	Two – stream heat exchangers. LNG exchangers.
HXFlux	Càlcul de la transferència de calor. Realitzar càlculs de transferència de calor entre un dissipador de calor i una font de calor, mitjançant transferència de calor per convecció.	Two single – sided heat exchangers.

COLUMNS / COLUMNES

Taula 17: Columns. (Font: Elaboració pròpia.)

Model	Descripció	Utilitzar-lo per:
ConSep	Drecera de destil·lació mitjançant Aspen Distillation Synthesis. Realitza càlculs plat a plat per determinar si és possible un disseny de columna. La funció de disseny interactiu permet modificar el disseny mentre s'examina el mapa ternari.	Columnes amb un canal d'informació i dos fluxos de productes i tres components principals.
DSTWU	Disseny de destil·lació aproximat mitjançant el mètode Winn-Underwood-Gilliland. Determina la relació mínima de reflux, el	Columnes amb una alimentació i dos fluxos de productes.

	nombre mínim d'etapes i la relació de reflux real o el nombre real d'etapes.	
DistI	Classificació de destil·lació de càlcul aproximat mitjançant el mètode Edmister. Determina la separació en funció de la relació de reflux, el nombre d'etapes i la proporció destil·lat – aliment.	Columnes amb un aliment i dos fluxos de productes.
SCFrac	Destil·lació de càlcul aproximat per a unitats complexes de fraccionament de petroli. Determina la composició i el flux del producte, el nombre d'etapes per secció i el rendiment tèrmic mitjançant índexs de fraccionament.	Columnes complexes, com ara unitats de cru i torres de buit.
RadFrac	Fraccionament rigorós. Realitza càlculs de qualificació i disseny rigorosos per a columnes individuals.	Destil·lació ordinària, absorbents, decapants, destil·lació extractiva i azeotròpica, destil·lació trifàsica, destil·lació reactiva.
MultiFrac	Fraccionament rigorós per a columnes complexes. Realitza càlculs de classificació i disseny rigorosos per a diverses columnes de qualsevol complexitat.	Columnes integrades per calor, columnes de separació d'aire, combinacions absorbents / decapants Combinacions de torre de trencament del fraccionador primari de la planta d'etilè, aplicacions de refinació de petroli.
PetroFrac	Fraccionament de refinació de petroli. Realitza càlculs rigorosos de qualificació i disseny de columnes complexes en aplicacions de refinació de petroli.	Torre pre – flash, unitat de cru atmosfèric, unitat de buit, fraccionador principal de cracker catalític, fraccionador principal de cocció retardat, fraccionador de lubricants al buit, fraccionador primari de plantes d'etilè i combinacions de torres.

Extract	Extracció rigorosa líquid-líquid. Models d'extracció en contracorrent d'un corrent líquid mitjançant un dissolvent.	Extractors líquid-líquid.

REACTORS

Taula 18: Reactors. (Font: Elaboració pròpia.)

Model	Descripció	Utilitzar-lo per:
RStoic	Reactor estequiomètric. Models de reactors estequiomètrics amb abast o conversió de reacció especificada.	Reactors on la cinètica de la reacció és desconeguda o poc important, però es coneix aquesta estequiometria i l'extensió de la reacció.
RYield	Reactor de rendiment. Models de reactor amb rendiment especificat.	Reactors on l'estequiometria i la cinètica són desconegudes o poc importants, però es coneix una distribució del rendiment.
REquil	Reactor d'equilibri. Realitza equilibri químic i de fases mitjançant càlculs estequiomètrics.	Reactors amb equilibri químic i fase simultanis.
RGibbs	Reactor d'equilibri amb minimització d'energia de Gibbs. Realitza l'equilibri químic i de fases mitjançant la minimització d'energia de Gibbs.	Reactors amb equilibri de fase o fase simultània i equilibri químic. Càlcul de l'equilibri de fase per a solucions sòlides i sistemes vapor-líquid-sòlid.
RCSTR	Reactor de tanc agitat continu. Models de reactor de tanc agitat continu.	Reactors de dipòsit agitat d'una, dues o tres fases amb reaccions d'equilibri i control de velocitat en qualsevol fase basats en estequiometria i cinètica conegudes.
RPlug	Reactor de flux de pistó.	Reactors de flux endollats d'una, dues o tres fases amb reaccions controlades per velocitat en qualsevol fase basats en estequiometria i cinètica conegudes.

RBatch	Reactor batch. Models de reactor discontinu o semi-discontinu.	Reactors de lot i semi-lot de una, dues o tres fases amb reaccions controlades per velocitat en qualsevol fase basats en estequiometria i cinètica conegudes.

PRESSURE CHANGERS / VARIADORS DE PRESSIÓ

Taula 19: Pressure Exchangers. (Font: Elaboració pròpia.)

Model	Descripció	Utilitzar-lo per:
Pump	Bomba o turbina hidràulica. Canvia la pressió del corrent quan es necessita o es coneix la necessitat d'energia.	Bombes i turbines hidràuliques.
Compr	Compressor o turbina. Canvia la pressió del corrent quan es necessita o es coneix el requisit d'energia.	Compressors i turbines politròpics, compressors i turbines de desplaçament positiu politròpics, compressors i turbines isentròpics.
MCompr	Compressor o turbina de diverses etapes. Canvia la pressió del flux en diverses etapes amb inter-coolers. Permet que es produeixin corrents d'eliminació de líquids procedents d'inter-coolers.	Compressors i turbines politròpics politròpics, compressors polivalents de desplaçament positiu, compressors isentròpics, turbines isentròpic.
Valve	Caiguda de pressió de la vàlvula. Models caiguda de pressió per una vàlvula.	Vàlvules de control i canviadors de pressió.
Pipe	Tub de segment únic. Models caiguda de pressió a través d'un sol segment de canonada.	Tub de diàmetre constant (pot incloure accessoris).
Pipeline	Canalització de diversos segments. Models caiguda de pressió a través d'una canonada o espai anular.	Conducte amb diverses longituds de diferent diàmetre o alçada.

MANIPULATORS / MANIPULADORS

Taula 20: Manipulators. (Font: Elaboració pròpia.)

Model	Descripció	Utilitzar-lo per:
Mult	Multiplicador de flux. Components multiplica i cabals totals per factor.	Ampliar els fluxos per un factor.
Dupl	Duplicador de flux. Copia el flux d'entrada a qualsevol nombre de fluxos de sortida duplicats.	Duplicant canals d'informació o fluxos interns.
ClChng	Canviador de classe de corrent. Canvia la classe de flux entre blocs i seccions de fulls de flux.	Afegir o suprimir sub-fluències sòlides buides entre seccions del full.
Analyzer	Calculadora de propietats de flux EO. Calcula els valors de les fraccions dels components del flux de material i les propietats del flux.	Càlcul de propietats de flux en simulacions i optimitzacions orientades a equacions (EO).
Selector	Selector de flux. Copia un flux d'entrada seleccionat al flux de sortida.	Selecció d'un flux de qualsevol nombre de fluxos d'entrada.
Qtvec	Manipulador de flux de càrrega. Crea i modifica fluxos de càrrega.	Combinació de diversos fluxos de calor en un sol flux de càrrega o afegint una temperatura i un punt de treball addicionals a un flux de càrrega existent.
Chargebal	Saldo de la càrrega. Facilita l'electro-neutralitat dins dels bucles de reciclatge	Convergència de fulls de flux d'espècies reals amb bucles de reciclatge on els algoritmes de convergència convergeixen a una solució amb fluxos fora del saldo de càrrega.
Measurement	Mesura de la planta. Incorpora dades de plantes mesurades a una simulació.	Definició de mesures de plantes a efectes de conciliació de dades.

SOLIDS / SÒLIDS

Taula 21: Sòlids. (Font: Elaboració pròpia.)

Model	Descripció	Utilitzar-lo per:
Crystallizer	Cristal·litzador. Produeix cristalls a partir de la solució basada en la solubilitat.	Cristal·litzador de suspensió mixta, eliminació de producte mixt (MSMPR).
Crusher	Trituradora de sòlids. Trenca partícules sòlides per reduir la mida de les partícules.	Trituradores humides i seques, trituradores primàries i secundàries.
Screen	Separador de sòlids. Separa partícules sòlides en funció de la mida de les partícules.	Pantalles seques i humides superiors i inferiors.
SWash	Rentadora de sòlids d'una sola etapa. Recupera models de components dissolts a partir d'un líquid arrossegat d'un corrent de sòlids mitjançant un líquid de rentat.	Rentadora de sòlids en una sola etapa (Single – stage sòlids washer).
CCD	Decantador de contracorrent. Modela la recuperació en diverses etapes de components dissolts d'un líquid arrossegat d'un corrent de sòlids mitjançant un líquid de rentat	Rentadores de sòlids de diverses etapes (Multi-stage solids washers).
Dryer	Assecador de sòlids. Evapora components humits volàtils de sòlids humits.	Qualsevol tipus d'assecador continu.
Granulator	Granulador o aglomerador. Augmenteu la mida de les partícules sòlides.	Granuladors, aglomeradors i altres dispositius de creixement de la mida de les partícules.
Classifier	Classificador de sòlids. Separeu partícules sòlides en funció de la velocitat de decantació.	Separadors basats en la gravetat, com ara elutriadors (elutriators) i tamisadors.
FluidBed	Elutriador / intercanviador / reactor de llit fluïditzat. Separar les	Unitats de llit fluïditzat amb o sense reaccions.

	partícules en funció de la velocitat de decantació i canviar la temperatura dels sòlids.	

SOLIDS SEPARATORS / SEPARADORS DE SÒLIDS

Taula 22: Solids Separators. (Font: Elaboració pròpia.)

Model	Descripció	Utilitzar-lo per:
Cyclone	Separador tipus cicló. Separa els sòlids del gas mitjançant un vòrtex gasós en un cicló.	Valoració i dimensionament dels ciclons.
VScrub	Rentador Venturi. Separa els sòlids del gas per contacte directe amb un líquid atomitzat.	Valoració i dimensionament de rentadors Venturi.
CFuge	Filtre centrífug. Separa els sòlids del líquid mitjançant una cistella giratòria.	Valoració o dimensionament de les centrífugues.
Filter	Filtre de buit rotatiu. Separa els sòlids del líquid mitjançant un filtre rotatiu de buit continu.	Classificació o dimensionament dels filtres rotatius de buit.
CFFilter	Filtre de flux creuat. Concentració de sòlids en suspensió.	Classificació o mida dels filtres de flux creuat.
HyCyc	Hidro-cicló. Separa els sòlids del líquid mitjançant un vòrtex líquid en un hidro-cicló.	Valoració o dimensionament dels hidro-ciclons.
FabFl	Filtre de tela. Separa els sòlids del gas mitjançant filtres de teixit.	Classificació i dimensionament de cases de maletes.
ESP	Precipitador electroestàtic. Separa els sòlids del gas mitjançant una càrrega elèctrica entre dues plaques.	Classificació i dimensionament dels precipitadors electroestàtics secs.

- **USER MODELS / MODELS D'USUARI**

Taula 23: User Models. (Font: Elaboració pròpia.)

Model	Descripció	Utilitzar-lo per:
User	Model d'operació d'unitat definit per l'usuari. Modeleu una operació d'unitat mitjançant una subrutina Fortran subministrada per l'usuari.	Operacions d'unitat amb quatre (o menys) corrents d'entrada i sortida.
User2	Model d'operació d'unitat definit per l'usuari. Modeleu una operació d'unitat mitjançant una subrutina Fortran subministrada per l'usuari.	Operacions d'unitats sense límit de nombre de corrents.
User3	Model de funcionament de la unitat definit per l'usuari o extern. Executeu models integrats de RT-Opt, models Aspen EO de la biblioteca de models PML o models escrits per un usuari que puguin contenir models propietaris.	Operacions d'unitats amb formulacions orientades a l'equació.
ACMModel	Model Aspen Custom Modeler. Importa un model construït amb Aspen Custom Modeler amb accés a variables del model.	Models de funcionament de la unitat creats amb Aspen Custom Modeler.

- **BATCH MODELS / MODELS PER OPERACIONS EN DISCONTINU**

Taula 24: Batch Models. (Font: Elaboració pròpia.)

Model	Descripció	Utilitzar-lo per:
BatchOP	Reactor batch i cristal·litzador. Modeleu les operacions batch que poden incloure reaccions i / o cristal·lització.	Reactors batch i cristal·litzadors batch.

5.4.2.4. REACTIONS

En aquest apartat, hi ha dos tipus de sistemes de reacció i Aspen Plus utilitza diferents mètodes per simular-les:

Taula 25: Reactions. Tipus de sistemes de reacció. (Font: Elaboració pròpia.)

Tipus de sistema de reacció	Descripció	Utilitzar aquest formulari:
Electrolytes solution chemistry	Reaccions que inclouen la formació d'espècies iòniques.	Chemistry (Properties Environment o Ambient).
Non – electrolyte reactions	Reaccions controlades per velocitat o limitades en equilibri per a reactors i modelatge de destil·lació reactiva.	Reactions (Simulation Environment o Ambient).

En Chemistry (Ambient Propietats), la química de la solució d'electròlits (**Electrolytes Solution Chemistry**) s'especifica com un identificador químic (Chemistry IDs) que es pot fer referència a **Methods – Specifications | Global** i a **Block Options | Properties** per blocs de funcionament de cada unitat individual. A diferència de **Non – Electrolyte Reactions** que s'especifiquen i s'executen només dins de determinats blocs de funcionament de les unitats i els càlculs de descàrrega de pressió, les definicions de química dels electròlits passen a formar part de les especificacions de propietats físiques d'una secció de simulació o diagrama de flux (**Flowsheet**). S'usen per a tots els càlculs (en qualsevol bloc d'operacions de flux o unitat) que utilitzen aquesta especificació de propietat.

Les **Non – Electrolyte Reactions** s'especifiquen com a identificadors de reacció (Reactions IDs) que es poden fer referència en reactors cinètics, columnes i càlculs d'alleujament de pressió. Aquestes reaccions poden ser usades per:

- **RadFrac** per a la destil·lació reactiva.
- **RBatch**, **RCTR** i **RPlug**, els models de reactors basats en la cinètica.
- Model i descàrrega de pressió (**Pressure Relief**) per a càlculs de descàrrega de pressió en sistemes reactius.

La cinètica de reacció per a les reaccions controlades per velocitat poden ser representades utilitzant qualsevol de les següents expressions:

- **Power Law kinetic model**.
- **Langmuir – Hinshelwood – Hougen – Watson (LHHW) kinetic model** (no és aplicable en sistemes de destil·lació reactius)
- **User – defined kinetic model escrit en Fortran o Aspen Custom Modeler.**

En tot tipus de reaccions especificades amb estequiometria, es permeten coeficients estequiomètrics fraccionats sempre que els es compleixin els balanços de matèria a les reaccions.

5.4.2.5. CONVERGENCE

Selecció de les opcions de convergència en els mètodes numèrics

Aspen Plus ha de resoldre iterativament els diagrames de flux amb bucles de reciclatge, especificacions de disseny o optimitzacions. Pot determinar la selecció del flux de llàgrimes, els mètodes de convergència i la seqüència de càlcul que s'utilitzen per resoldre el diagrama de flux automàticament. O bé, l'usuari pot proporcionar una part o totes les especificacions de convergència. La majoria d'usuaris consideren satisfactòria la seqüenciació automàtica.

Hi ha cinc opcions disponibles per estructurar la convergència del bucle de reciclatge:

Taula 26: Opcions per estructurar la convergencia del bucle de reciclatge. (Font: Elaboració pròpia.)

Si s'especifica:	En el formulari següent:	Aspen Plus genera el següent:
No convergence specifications	-	Tear streams, blocs de convergència, seqüència de càlcul.
Paràmetres i/o mètodes de convergència predeterminats per a blocs de convergència generats pel sistema	Options	Tear streams, blocs de convergència, seqüència de càlcul.
Tear streams	Tear	Blocs de convergència, seqüència de càlcul.
Blocs de convergència	Convergence	Seqüència de càlcul.

Per a cada bloc de convergència que es defineix, seleccionar el mètode de convergència, els fluxos de trencament (tear streams) i / o les especificacions de disseny que es volen convergir simultàniament amb aquest bloc. Opcionalment, es pot proporcionar paràmetres de convergència, com ara el nombre màxim d'iteracions.

Taula 27: Opcions de convergencia. (Font: Elaboració pròpia.)

Usar aquest formulari:	Per fer el següent:
Options Defaults	Especificar els paràmetres de convergència de trencament, paràmetres seqüencials i mètodes predeterminats de convergència.
Options Methods	Especificar paràmetres predeterminats de convergència pels mètodes de convergència. Aquests valors es poden substituir especificant-los dins del bloc de convergència.
EO Options Setup	Especificar el solucionador a utilitzar, paràmetres generals d'inicialització i paràmetres de retrocés entre solucions modulars seqüencials i orientades a l'equació.
EO Options DMO Basic	Especificar els paràmetres que s'utilitzen habitualment i que controlen la precisió, el rendiment i la robustesa del solucionador DMO.
EO Options DMO Adv	Especificar paràmetres relacionats amb el solucionador DMO avançat.
EO Options LSSQP Basic	Especificar els paràmetres que s'utilitzen habitualment que controlen la precisió, el rendiment i la robustesa del solucionador LSSQP.
EO Options LSSQP Adv	Especificar paràmetres avançats relacionats amb el solucionador LSSQP.
EO Options NSOLVE Basic	Especificar els paràmetres que s'utilitzen habitualment i que controlen la precisió, el rendiment i la robustesa del solucionador NSOLVE.
EO Options NSOLVE Adv	Especificar paràmetres avançats relacionats amb NSOLVE.
EO Options XSLP Basic	Especificar els paràmetres que s'utilitzen habitualment que controlen la precisió, el rendiment i la robustesa del solucionador XSLP.
EO Options XSLP Adv	Especificar paràmetres avançats relacionats amb XSLP.
Batch Options Setup	Especificar es opcions per controlar l'execució d'un diagrama de flux per lots o batch.

Batch Options Sequential Modular	Especificar les opcions que s'apliquen durant les execucions seqüencials-modulars de diagrames de flux de lots.
Tear	Especificar corrents de trencament i paràmetres de convergència per a aquests corrents.
Convergence	Crear i especificar blocs de convergència individuals per convergir elements com ara reciclatge de diagrames de flux, especificacions de disseny i problemes d'optimització.
Nesting Order	Especificar l'ordre de nidificació dels bucles de convergència.
Sequence	Especificar els blocs de seqüència de càlcul.
Scaling	Substituir els factors d'escala dels atributs del component predeterminat.

5.4.2.6. RESULTS SUMMARY

En **Results Summary**, es poden consultar els resultats de la simulació i la convergència d'aquesta. Utilitzar aquests formularis per veure el resum de la convergència i transmetre informació resumida dels resultats.

Taula 28: Results Summary. (Font: Elaboració pròpia.)

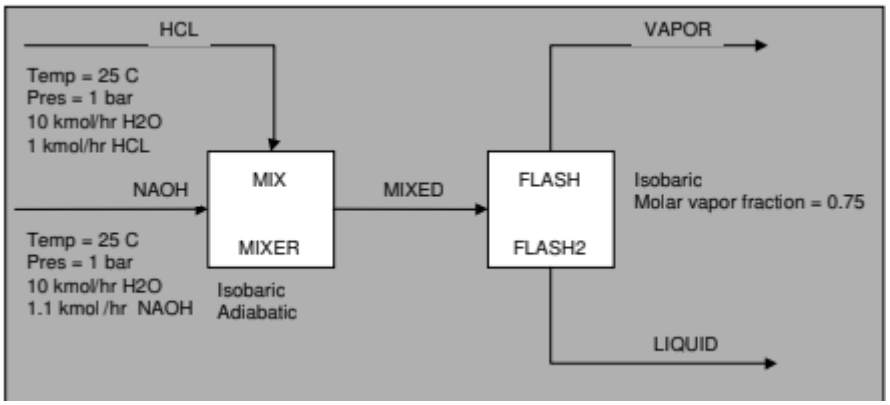
Usar aquest formulari:	Per veure el següent:
Run – Status	L'estat de convergència i la finalització d'una execució.
Streams	Reproduir els resultats.
Operating Costs	Resultats d'utilitat d'anàlisi de costos.
Convergence	Resultats de convergència.
CO_2 Emissions	Equivalents de CO_2 produïts per tota la planta o qualsevol jerarquia.
Models	Un resum de variables importants en tots els models.
Equipment	Entrada de resultats i resultats.

5.4.3. EXEMPLES PER A PRACTICAR

En aquest apartat s'expliquen dos exemples per practicar i per poder saber més o menys quin és el procediment a seguir per tal de realitzar una simulació amb el programa d'Aspen Plus V11.

5.4.3.1. SIMULACIÓ 1 PLANTA QUÍMICA AMB DUES OPERACIONS UNITÀRIES

En aquest primer exemple pràctic es simularà el següent diagrama de flux del procés amb les respectives condicions d'operació:



Il·lustració 18: Diagrama de flux del procés. Simulació 1. (Font: AspenTech (2013).)

Es tracta de dos corrents d'alimentació: un conté aigua i clorur d'hidrogen i l'altre conté sosa càustica i aigua. Aquests s'alimenten a un mesclador (**Mixer**). La sortida del mesclador, s'evapora ràpidament per evaporar l'aigua i fer que precipiti el clorur de sodi. S'utilitza el model **MIXER** pel mesclador i el model **FLASH2** per l'evaporador flash.

INICIANT ASPEN PLUS

1. Des de l'escriptori, seleccionar **Inici** i després Programes.

2. Seleccionar Aspen Plus V11. Apareix la finestra de començar a utilitzar Aspen Plus.

En aquesta pàgina, Aspen Plus mostra enllaços per comandes i casos per a que es pugui introduir informació ràpidament o fer una selecció abans de continuar. En aquesta simulació, es comença un nou cas utilitzant una plantilla d'aquest programa.

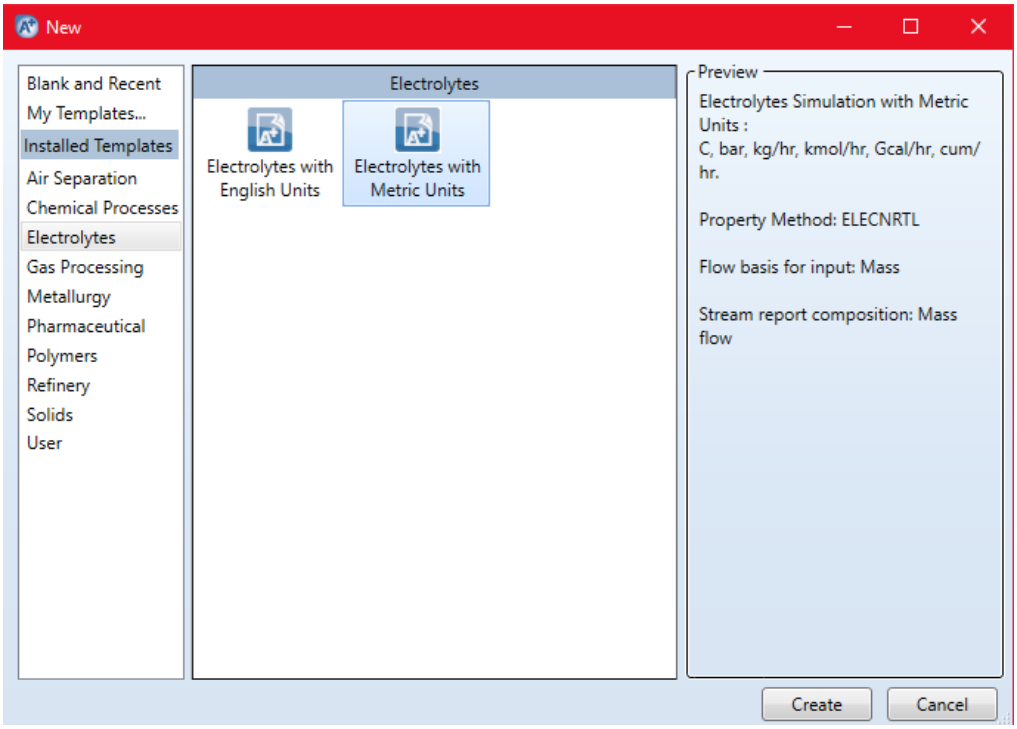
3. Fer clic a la comanda **New** en la finestra de començar a utilitzar el programa.

Apareix el quadre de diàleg **New**. Utilitzar aquest quadre de diàleg per especificar la plantilla per a la nova execució. Amb la plantilla, Aspen Plus estableix automàticament diversos valors predeterminats apropiats per a la seva aplicació.

ESPECIICAR LA PLANTILLA PER A LA NOVA EXECUCIÓ

1. En les Plantilles instal·lades en el panel del costat esquerre del Nou quadre de diàleg, fer clic en **Electrolytes**. Després fer clic en la plantilla de **Electrolytes With Metric Units**.

La informació pels conjunts d'unitats, el mètode de propietat, etc. Que han estat pre-definits en la plantilla es mostren en el lateral dret, en el camp de **Preview field**.



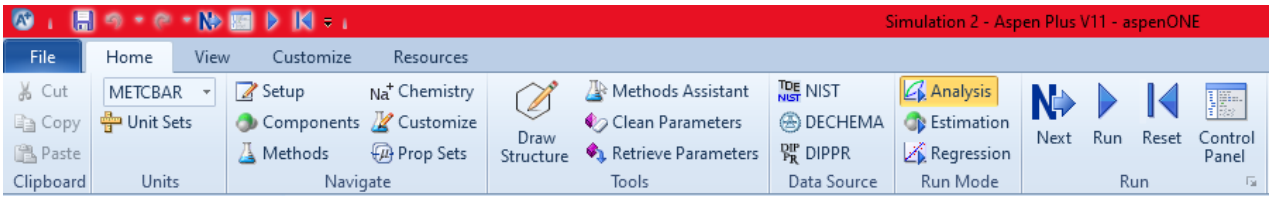
Il·lustració 19: Comanda New. Electrolytes with Metric Units. (Font: Elaboració pròpia.)

2. Clicar **Create** per utilitzar aquesta plantilla.

El programa tarda pocs segons per aplicar aquestes opcions. Ara la finestra principal està activa.

ESPECIFICANT ELS COMPONENTS

En la pestanya **Home** de la cinta, es selecciona la comanda **Analysis** del quadre de **Run Mode**, que és apropiada per aquesta simulació, tal i com es mostra en la Il·lustració 20.

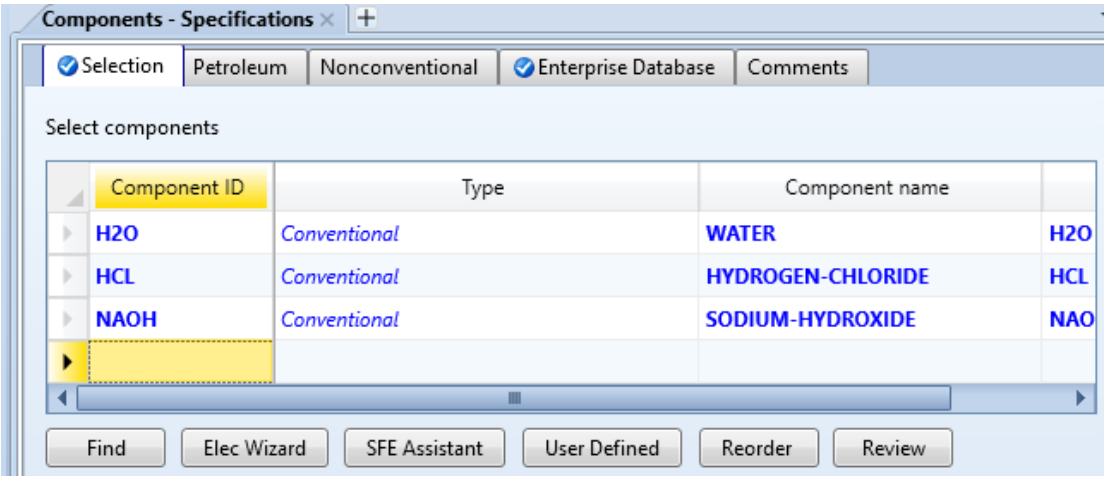


Il·lustració 20: Menú secundari. Home > Run Mode > Analysis. (Font: Elaboració pròpia.)

A continuació apareix la pestanya de **Components – Specifications | Selection** en la zona de treball.

Els components aparents (o base) per aquesta simulació són H_2O, HCl i NaOH. Com que s'ha escollit la plantilla **Electrolytes**, l'aigua ja apareix en la pestanya.

1. S'especifiquen els components restants introduint HCl i NaOH a les dues files següents de la columna ID de components.
   Aspen Plus omple automàticament la resta de dades d'aquests components.



Il·lustració 21: Especificar Components. Components – Specifications | Selection. (Font: Elaboració pròpia.)

Si es vol renombrar un component, es va al camp de **Component ID**, es selecciona el nom del component i es substitueix pel nom que se li vulgui donar.

2. Clicar **Enter**.

El diàleg d'Aspen Plus apareix, preguntat si l'usuari vol renombrar el component.

3. Clicar **Rename**.

THE ELECTROLYTE WIZARD (ASSISTENT D'ELECTRÒLITS)

Utilitzar Electrolyte Wizard per definir les espècies i les sals que es poden generar a partir dels components base generats a la pestanya de **Components – Specifications | Selection**, i per generar les reaccions que es produeixen entre aquests components en fase líquida.

1. Clicar **Elec Wizard**.

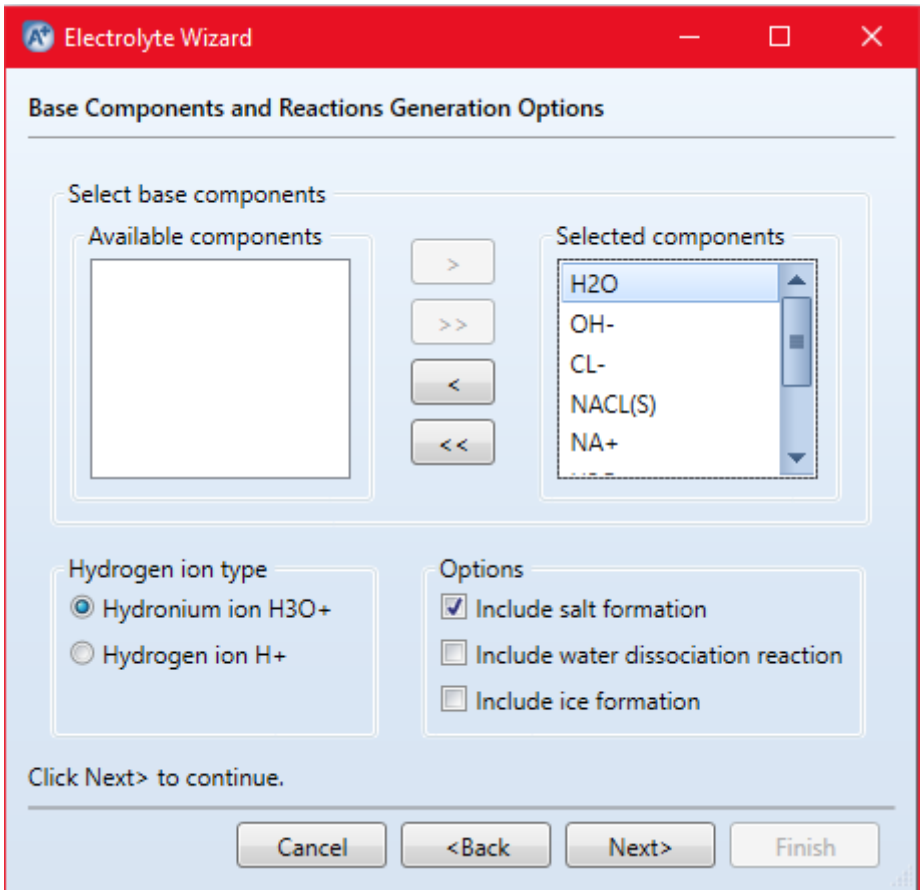
El quadre de diàleg de **Electrolyte Wizard** apareix. Utilitzar aquest quadre per definir la generació automàtica de la química.

A sota de la llista de passos, la secció **Select chemistry databank and reference State** mostra la font de dades de la reacció de l'assistent.

2. Al quadre de diàleg **Electrolytes Wizard**, fer clic a **Next**.

Apareix **Base Components and Reactions Generation Options**. Hi ha un conjunt d'opcions per al tipus de l'ió hidrogen. El valor per defecte és l'ió hidroni (H_3O^+), però també està disponible l'ió hidrogen (H^+). Aspen Plus pot tractar espècies àcides com aquests dos ions. No obstant això, es recomana fortament l'ús de H_3O^+, ja que la presència d'aquest ió en la química de la solució és més capaç de representar l'equilibri de fase i química de gairebé tots els sistemes d'electròlits.

3. Clicar **>>** per moure tots els components de la columna de **Available components** a la columna de **Selected components**.



Il·lustració 22: Assistent d'Electròlits. Base Components and Reactions Generation Options. (Font: Elaboració pròpia.)

4. Clicar **Next** per continuar.

La generació d'espècies i reaccions (**Generated Species and Reactions**) apareix. Aspen Plus genera totes les possibles espècies tant iòniques com sals i les reaccions pel sistema Aigua – Sosa Càustica – Clorur d'Hidrogen.

A la secció de **Reactions**, hi ha dos tipus d'estils de fletxes que denoten els següents tipus de reacció:

<===> Indica equilibri iònic o precipitació de sal

----> Indica completa dissociació

En aquest exemple, es generen tres tipus de reaccions: equilibri iònic, dissociació completa i precipitació de sal.

La dissociació d'aigua (H_2O) i la dissociació de clorur d'hidrogen (HCl) són reaccions d'equilibri. La precipitació o dissolució de clorur de sodi (NaCl) també és una reacció d'equilibri. En canvi, la sosa càustica (NaOH) es dissocia completament i irreversiblement en Na^+ i OH^-.

PER ELIMINAR LES SALS DE LA QUÍMICA DE LA SOLUCIÓ

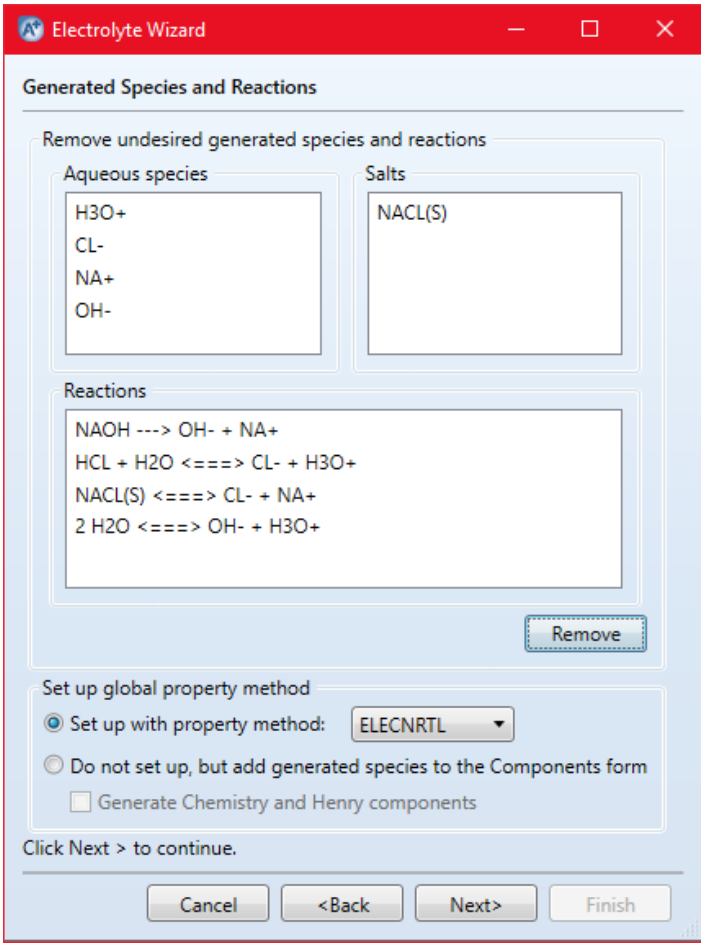
En aquesta simulació, les sals de NaOH i NaOH*W no són rellevants, per tant s'eliminen aquestes dues espècies innecessàries i les seves respectives reaccions

5. Des de la llista **Salts**, seleccionar **NaOH(S)** i **NaOH*W(S)**.
6. Clicar **Remove**.

Ara que ja les sals ja s'han eliminat del sistema, Aspen Plus automàticament elimina les reaccions de la llista de **Reactions** en les que aquestes dues espècies participen.

Nota: en qualsevol moment que es sàpiga que es pot negligir una reacció per les condicions esperades del procés, s'ha d'eliminar de llista de **Reactions** per així poder reduir el temps d'execució de la simulació.

7. Al costat de **Set up with property method**, seleccionar **ENRTL-RK**.



Il·lustració 23: Electrolyte Wizard. Generated Species and Reactions. (Font: Elaboració propia.)

8. Clicar **Next** per acceptar la resta d'espècies i reaccions generades.

A continuació, apareix l'aproximació de simulació, que permet triar entre l'enfocament de components reals i l'enfocament dels components aparents.

9. Seleccionar **True Component Approach**.

Quan s'utilitza aquest tipus d'aproximació o enfocament, Aspen Plus soluciona les equacions que descriuen la química de les solucions simultàniament amb les equacions de funcionament de la unitat. Les operacions de les unitats tracten directament amb els ions i sals formats per la química de la solució. A més, l'aproximació de components real defineix com Aspen Plus informa dels resultats de la simulació. Es reporten resultats en termes de ions, sals i components moleculars que estan realment presents, no quant als components base originals.

Per exemple, la química generada per aquest sistema especifica que NaOH es dissocia totalment en Na^+ i OH^-. Si s'escull el **True Component Approach**, Aspen informarà del flux NaOH en termes de Na^+ i OH^-.

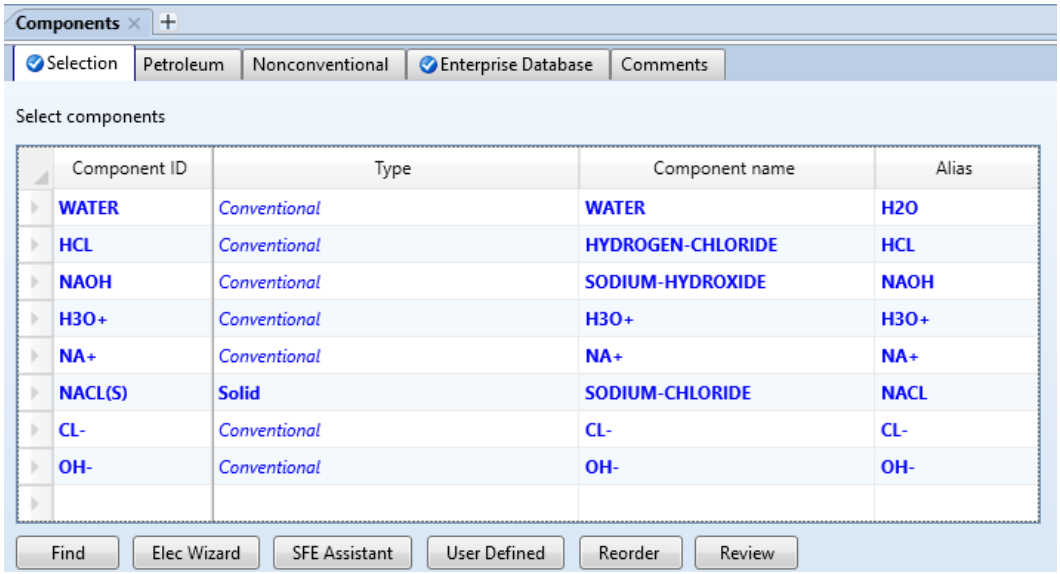
Es pot sol·licitar que la composició i els fluxos també es notifiquin en termes dels components aparents. Això es farà més endavant en aquesta simulació.

10. Clicar **Next** per fer el següent pas.

Si el quadre de diàleg **Update Parameters** apareix, clicar **Yes** per actualitzar els paràmetres.

11. Apareix el **Summary** (Resum). Clicar **Finish** per tancar el quadre de diàleg.

En la pestanya de **Components – Specifications | Selection**, Aspen Plus ha afegit els components d'electròlits generats. Com que tots els components estan al banc de dades del programa, Aspen automàticament recupera tots els paràmetres de propietats físiques rellevants. Tenir en compte que la sal NaCl (S) està identificada com a **Solid** (Sòlid).



Il·lustració 24: NaCl(S) sòlid. Components - Specifications | Selection. (Font: Elaboració pròpia.)

12. Clicar per continuar.

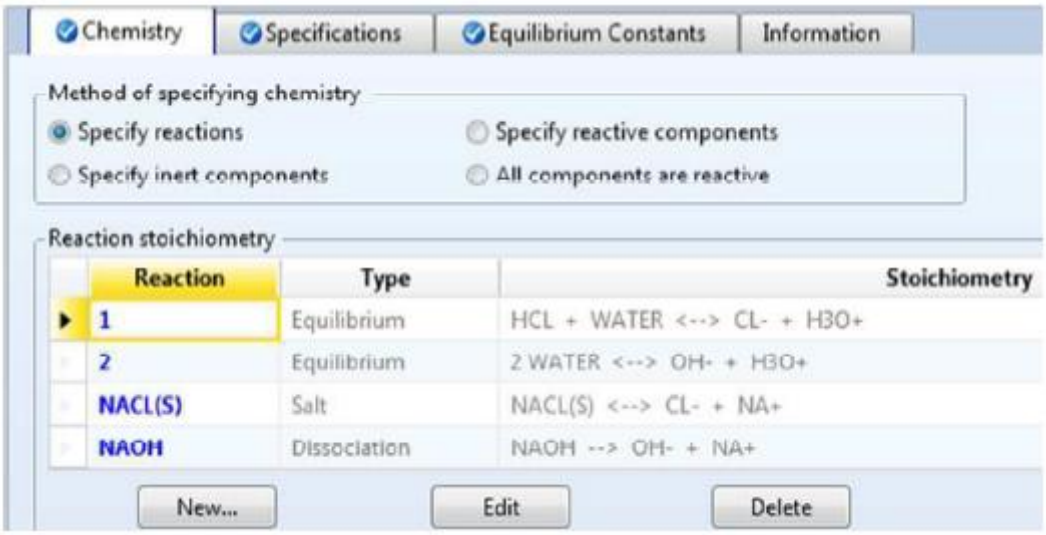
Apareix la fulla de **Henry Comps – Global | Selection.** L'assistent d'electròlits ja ha omplert aquest camp. Utilitzar aquesta fitxa per veure quins components han estat declarats com a components de la Llei de Henry per l'assistent d'electròlits. Si hi haguessin més components que segueixen aquesta llei i no estan a la llista, s'han d'afegir.

EXAMINANT LA QUÍMICA GENERADA

En els passos anteriors, Aspen Plus Electrolytes Expert System automàticament ha generat la química per a aquesta simulació i l'ha nombrat **GLOBAL**. Per examinar la química generada:

1. En **Navigation Pane** (panell de navegació), seleccionar la carpeta **Chemistry**.

2. Des de la carpeta **Chemistry**, seleccionar **GLOBAL**.

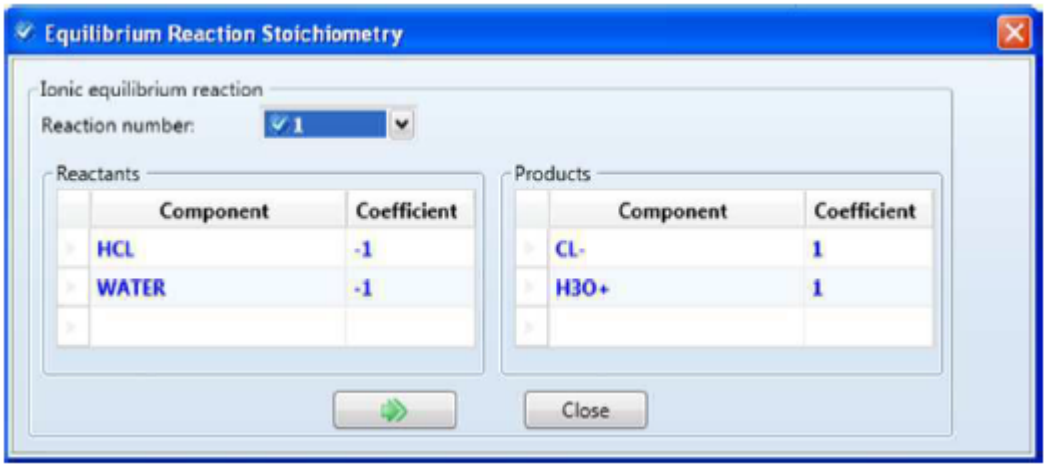


Il·lustració 25: Pestanya Chemistry. GLOBAL. Reaction. (Font: Elaboració pròpia.)

Per veure una determinada reacció:

1. Clicar en l'estequiometria de la reacció (**Reaction Stoichiometry**) i després clicar **Edit**.

Apareix el quadre de diàleg de **Equilibrium Reaction Stoichiometry** (l'estequiometria de la reacció d'equilibri) amb les dades de la reacció seleccionada.



Il·lustració 26: Veure una determinada reacció. (Font: AspenTech (2013).)

Es mostra la primera reacció d'equilibri iònica de la dissociació de l'aigua.

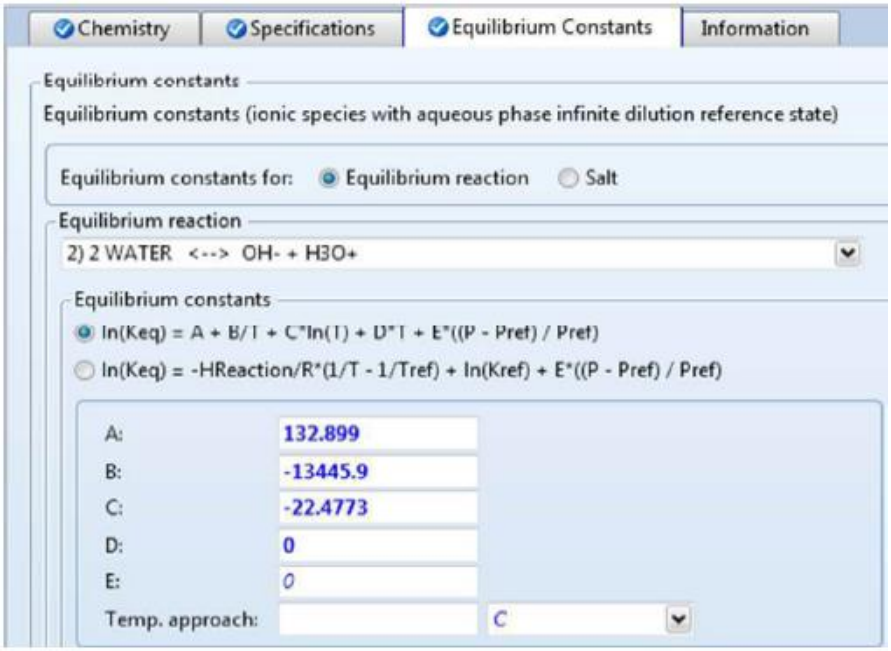
2. Tancar el quadre de diàleg clicant **Close**. Veure les altres reaccions seguint els mateixos passos.

3. Clicar en la pestanya **Equilibrium Constants**.

S'han recuperat automàticament els coeficients opcionals de les constants d'equilibri de la base de dades de reaccions del software.

La primera reacció iònica d'equilibri és per la dissociació del clorur d'hidrogen. En aquesta reacció no hi ha coeficients constants d'equilibri. Aspen Plus, en comptes de calcular la constant d'equilibri directament, calcularà l'equilibri químic a partir de l'energia lliure de Gibbs dels components participants.

4. Fer clic a la dreta de **Equilibrium reaction** per seleccionar una altra reacció d'equilibri i veure les seves constants d'equilibri.



Il·lustració 27: Equilibrium Constants. (Font: Elaboració pròpia.)

PER VEURE LES CONSTANTS D'EQUILIBRI PER A LES REACCIONS DE SALS

La reacció de precipitació del NaCl (S) i els seus coeficients de constants també estan disponibles en aquesta pestanya.

1. Seleccionar **Salt** en **Equilibrium constants for**.

2. Si es tenen reaccions addicionals de sals, es pot clicar en i en per veure-les. En el cas que només hi hagi una sola sal, aquests botons no estan disponibles.

Per a la dissociació completa de la sosa càustica o NaOH, no es mostren constants. Com que es tracta d'una dissociació completa, no es requereixen constants d'equilibri.

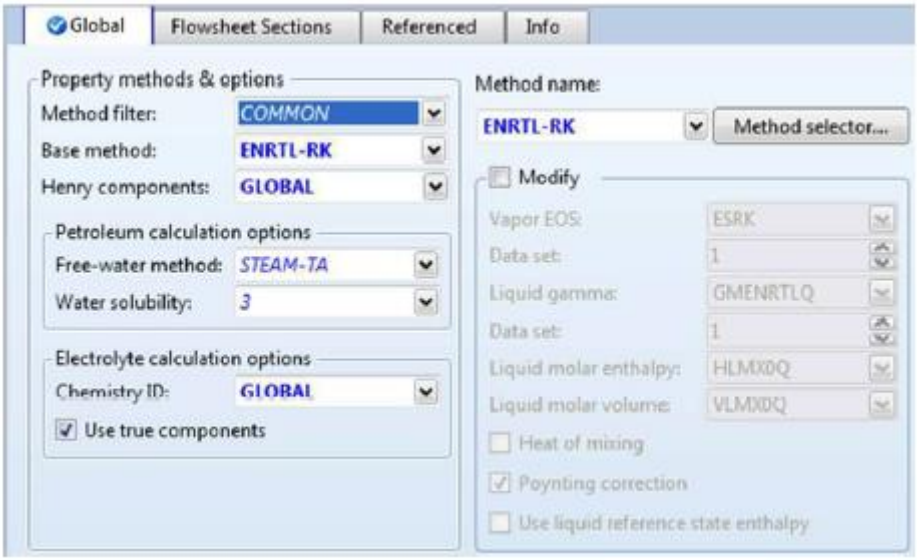
Si l'usuari té els seus propis coeficients constants d'equilibri, s'entren directament en aquesta pestanya. Si es tenen reaccions addicionals per incloure, s'han d'entrar a la pestanya **Chemistry** i després potser cal afegir dades d'equilibri.

SELECCIONANT ELS MODELS DE PROPIETATS D'ELECTRÒLITS

En **Method – Specifications | Global** s'entren els mètodes termodinàmics utilitzats per a calcular les propietats utilitzades en la simulació.

1. Des del **Navigation Pane**, obrir la carpeta de **Methods** i seleccionar **Specifications**.

L'assistent d'electròlits (**Electrolyte Wizard**) ja ha completat la pestanya.



Il·lustració 28:Methods - Specifications | Global. (Font: Elaboració pròpia.)

El model de coeficients d'activitat ENRTL- RK és la opció recomanada pel conjunt de simulacions amb electròlits. Aquest model calcula les propietats en fase líquida a partir del model de coeficient d'activitat Electrolyte – NRTL. Les propietats de la fase de vapor es calculen a partir de l'equació d'estat de Redlich – Kwong.

ENRTL-RK pot representar sistemes d'electròlits aquosos i aquosos/orgànics en tot el rang de concentracions d'electròlits amb un sol conjunt de paràmetres d'interacció binària. En absència d'electròlits, el model es redueix al model NRTL estàndard.

2. Clicar N→ per continuar.

Apareix la pestanya de **Binary Interaction – HENRY – 1 (T – DEPENDENT) | Input**.

S'utilitza aquesta pestanya per veure els paràmetres de la Llei de Henry recuperats per el sistema d'electròlits. Si l'usuari té els seus propis paràmetres d'aquesta llei, s'han d'introduir en aquesta mateixa pestanya.

3. Clicar per continuar.

Apareix de **Binary Interaction – VLCLK – 1 (T – DEPENDENT) | Input**, aquesta pestanya serveix per veure els paràmetres de la densitat de Clarke recuperats pel sistema. En el cas que l'usuari tingui els seus propis paràmetres de densitat de Clarke, s'han d'introduir aquí.

4. Des del **Navigation Pane**, seleccionar **Methods | Parameters | Electrolyte Pair**.

El full de **Electrolyte Pair** defineix els parells de paràmetres d'electròlits: GMELCC, GMELCD, GMELCE, GMELCN, GMENCC, GMENCD, GMENCE i GMENCN.

5. Fer clic a vàries vegades al mateix botó que el pas anterior per veure totes les fulles d'entrada de parells d'electròlits.

La representació correcta de les propietats físiques és essencial pel modelatge de processos. Per a moltes simulacions, la única especificació de propietat física que ha de proporcionar és la selecció d'un mètode de propietat.

Ara que les especificacions de **Components** i **Methods** ja estan completes, s'han de completar la resta de les especificacions del diagrama de flux de la mateixa manera que per a les especificacions de no electròlits. No hi ha restriccions de flux o bloc en l'ús d'electròlits Aspen Plus. Es poden utilitzar tots els models de funcionament de la unitat d'Aspen plus en una simulació d'electròlits.

ENTRANT EN L'AMBIENT DE SIMULACIÓ

1. Clicar per continuar.

Apareix el quadre de diàleg de **Properties Input Complete**:

Aspen Plus pot executar el càlcul de propietats si l'usuari selecciona l'opció de **Run Properties Analysis / Setup** en el quadre de diàleg de **Required Properties Input Complete**.

2. Seleccionar **Go to Simulation environament** i clicar **OK**. També es pot anar a l'ambient de Simulació a través del **Navigation Pane**.

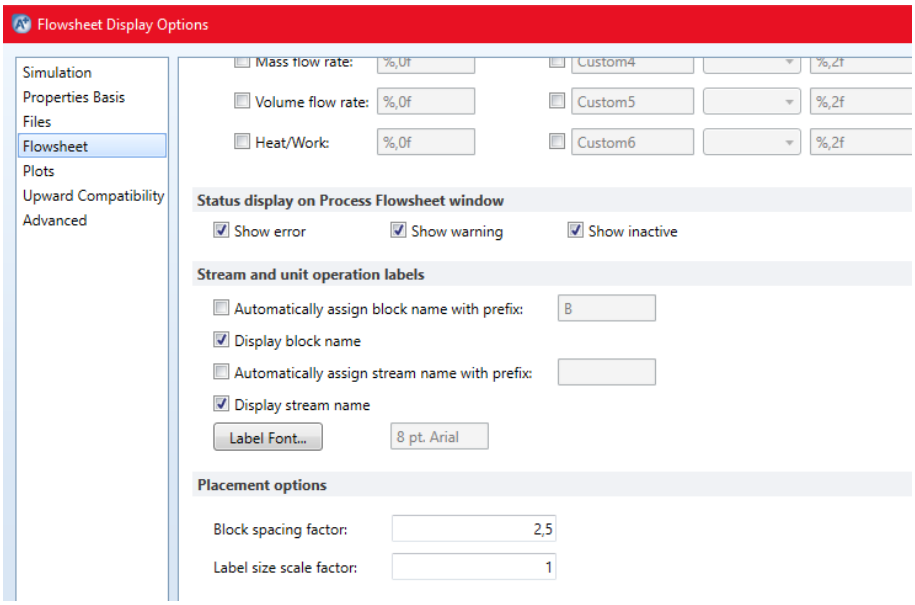
DIBUIXANT EL DIAGRAMA DE FLUX DE LA SIMULACIÓ

Ara es comença a dibuixar el diagrama del procés de la simulació que es vol crear. Com que l'usuari mateix entrarà els propis noms dels cabals i les operacions unitàries del procés, s'han de desactivar les opcions per defecte que designen automàticament els ID dels blocs i cabals.

1. Clicar **File** a la part superior a l'esquerra de la pantalla i a continuació clicar **Options**.

2. Seleccionar **Flowsheet** des del panell de la part esquerra del quadre de diàleg.

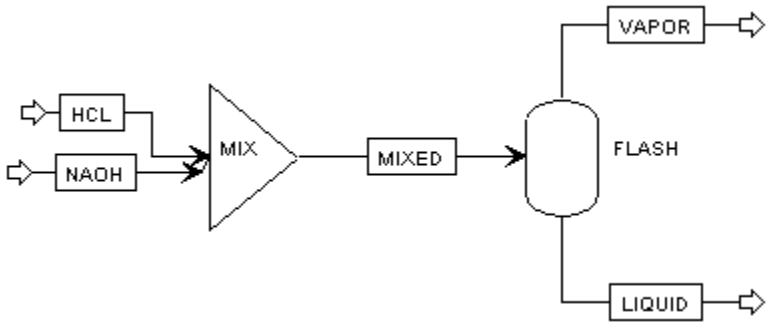
3. Desactivar les opcions **Automatically Assign Block Name with Prefix** i **Automatically Assign Stream Name with Prefix** que estan a sota de **Stream and unit operation labels**.



Il·lustració 29: Flowsheet Display Options. Desactivar les opcions dels ID's dels blocs i els cabals. (Font: Elaboració pròpia.)

4. Clicar **Apply** i després **OK** per aplicar els canvis i tancar el quadre de diàleg.

5. Ara s'ha de col·locar un **Mixer**, un **Flash2** i cinc fluxos de material per crear el diagrama de flux de la simulació gràfica de la següent manera:



Il·lustració 30: Diagrama de flux del procés a simular. (Font: AspenTech (2013).)

6. Des del **Navigation Pane**, expandir la carpeta de **Setup** i després clicar a **Specifications**.

ESPECIFICANT TÍTOL, PROPIETATS DELS CABALS I GLOBAL OPTIONS

En **Setup – Specifications | Global** se li pot donar un títol a la simulació, revisar les propietats dels cabals i les opcions globals que es van configurar quan l'usuari va seleccionar la plantilla de **Electrolytes with Metric Units**.

Per posar un títol a la simulació només cal seguir dos passos:

1. En el camp de **Title**, entrar **Simulació 1 - 2 Operacions Unitàries**.

2. Després clicar **Intro** des del teclat.

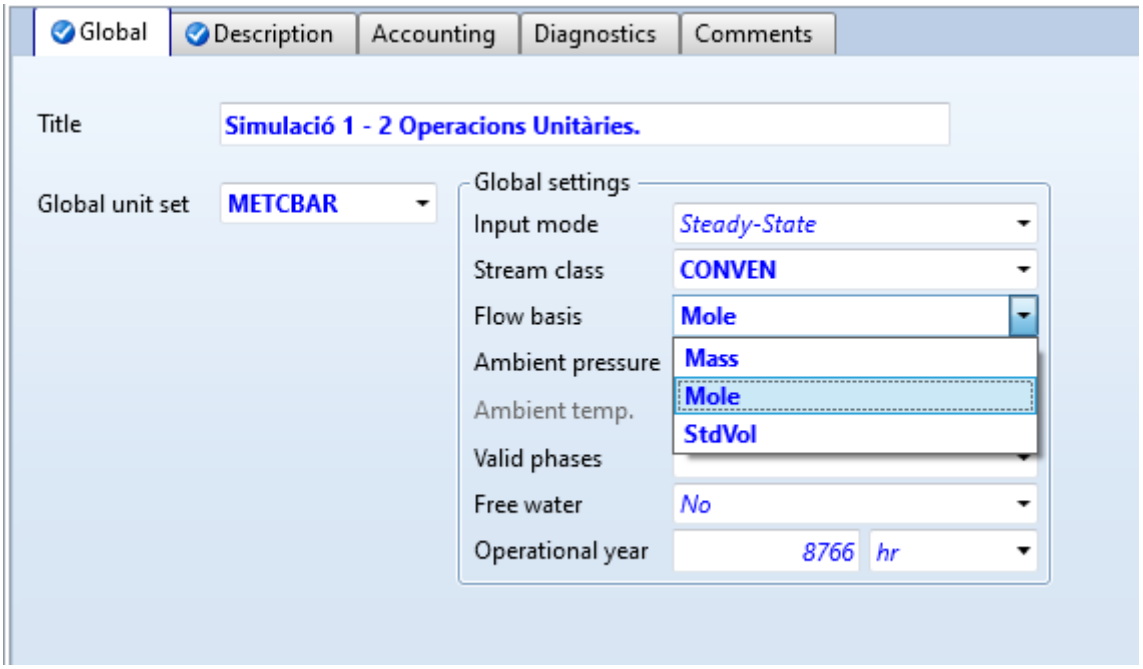
La plantilla que s'ha escollit inicialment, estableix els següents valors predeterminats globals per a les aplicacions d'electròlits:

- Els camps de **Input data** i **Output results** estan configurats en unitats **METCBAR** (unitats mètriques amb temperatura en graus Centígrads i la pressió en bars).
- El camp **Flow Basis** està configurada en **Mass** per a totes les entrades de flux de corrent.

En aquesta simulació, en comptes d'utilitzar una base de flux en massa, es farà servir una base de flux en mols.

ESPECIFICANT FLUXOS AMB BASE MOLAR

En el camp de **Flow Basis**, canviar **Mass** per **Mole**. A la il·lustració 30 es mostra com fer-ho.



Il·lustració 31: Setup - Specifications | Global. Flow Basis: Mole. (Font: Elaboració pròpia.)

REVISANT LES OPCIONS DELS INFORMES

Per revisar les opcions de l'informe especificades a la plantilla seleccionada:

1. En el **Navigation Pane**, seleccionar **Setup | Report Options**.

2. Clicar a la pestanya **Stream**.

Basat en la plantilla d'electròlits amb unitats mètriques, Aspen Plus mostra els següents valors predeterminats per calcular i reportar propietats de flux:

- **Flow Basis: Mole** i **Mass**. Aspen Plus reportarà les tasses de flux dels components sobre una base de flux màssic i molar. Tot i això, no informarà la composició per fracció o per flux de volum de líquid estàndard.
- **Stream Format: ELEC_M**. Aspen Plus formateja la fulla de resum de flux per electròlits utilitzant unitats mètriques.

S'ha de tornar a aquesta fulla i especificar les propietats dels corrents més endavant en aquesta simulació.

3. Clicar en el **Quick Access Toolbar**.

ENTRANT DADES DE FLUXOS

La finestra del corrent de **HCl (MATERIAL) – Input | Mixed** apareix. Aspen Plus requereix dues especificacions termodinàmiques i informació suficient per a calcular el cabal de cada component present en la simulació.

1. En aquesta fulla del flux d'HCl, s'han d'introduir les següents dades:

Parameter	Value
Temperature	25 C
Pressure	1 bar
WATER flow value	10 kmol/hr
HCL flow value	1 kmol/hr

Il·lustració 32: Dades cabal HCl. (Font: AspenTech (2013).)

S'han introduït les especificacions de flux per a aquest corrent en termes dels components base (components aparents). Encara que s'està utilitzant una aproximació de components reals en aquesta simulació, Aspen Plus pot acceptar especificacions en termes de components aparents i components reals. Aspen Plus converteix les especificacions de flux aparent dels components en especificacions reals d'aquests.

2. Clicar per continuar.

Apareix la finestra del flux de **NaOH (MATERIAL) – Input |Mixed**.

3. S'entren les següents dades del corrent:

Parameter	Value
Temperature	25 C
Pressure	1 bar
WATER flow value	10 kmol/hr
NAOH flow value	1.1 kmol/hr

Il·lustració 33: Dades cabal NaOH. (Font: AspenTech (2013).)

4. Clicar per continuar.

ESPECIFICANT EL BLOC DE FLASH2

La finestra de **FLASH (Flash2) – Input | Specifications** apareix. En aquest full, s'especifica la caiguda de pressió (**Pressure drop**) i la fracció de vapor (**Vapor fraction**).

1. En el camp de **Flash Type**, clicar la fletxa cap a baix al costat de l'entrada de dades i seleccionar **Vapor Fraction**.

2. En el camp de **Pressure**, entrar **0** (indicant que no hi ha cap caiguda de pressió).

3. En el camp de **Vapor Fraction**, entrar **0.75**.

4. Clicar per continuar.

El quadre de diàleg **Required Input Complete** apareix informant a l'usuari que tota la informació necessària ja està introduïda i el programa pregunta si es vol executar la simulació.

Abans d'executar la simulació, l'usuari ha de sol·licitar que certes propietats opcionals estiguin incloses en l'informe del flux.

1. Fer clic a **Cancel** per tancar el quadre de diàleg sense executar la simulació.

ESPECIFICANT PROPIETATS ADDICIONALS DEL FLUX

Per defecte, les úniques propietats dels components que Aspen Plus calcula i informa per a aquesta simulació són els fluxos màssics dels components.

Donat que s'està utilitzant l'aproximació de components vertaders, els fluxos dels components estan en termes dels components realment presents en l'equilibri, no els components aparents o els components de base.

1. Des del **Navigation Pane**, seleccionar la carpeta de **Setup** i a continuació seleccionar **Report Options**.

2. Seleccionar la pestanya de **Stream**.

En aquesta fulla, s'especifiquen les propietats del cabal per ser calculades i reportades. Per aquesta simulació, s'ha de sol·licitar que les fraccions màssiques dels components siguin calculades i reportades.

3. A sota de **Fraction basis**, seleccionar la caseta de verificació **Mass**.

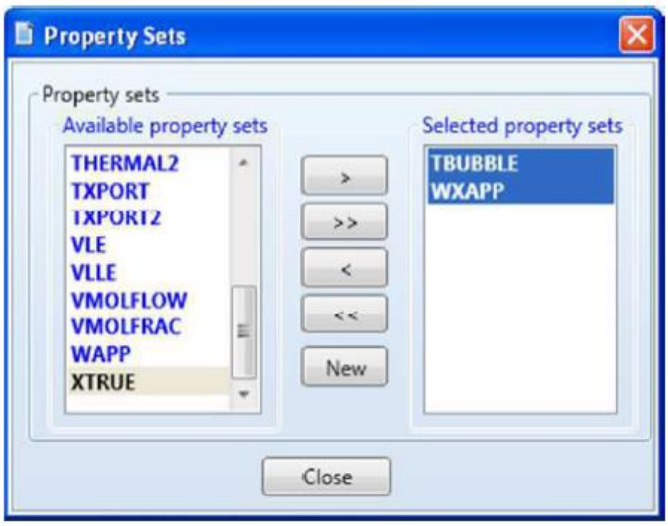
També es poden definir propietats de flux addicionals per calcular-les i reportar-les, utilitzant conjunts de propietats d'Aspen Plus. Aspen proporciona una sèrie de conjunts de propietats integrats en funció del mode d'execució que s'ha seleccionat.

L'usuari també pot definir els seus propis conjunts de propietats. En aquesta simulació s'utilitzarà un conjunt de propietats integrat per informar el punt de bombolla de cada flux, i un segon conjunt de propietats integrat per a informar les fraccions de massa dels components aparents en cada flux.

4. Clicar **Property Sets**.

5. Des de la columna de **Available property sets**, seleccionar **TBUBBLE** i **WXAPP**.

6. Clicar per moure aquestes dues propietats des de la columna de **Available property sets** a la columna de **Selected property sets**.



Il·lustració 34: Property Sets. Selected property sets: TBUBBLE I WXAPP. (Font: AspenTech (2013).)

7. Clicar **Close**.

8. Clicar per continuar.

EXECUTANT LA SIMULACIÓ

El quadre de diàleg de **Required Input Complete** apareix.

1. Clicar **OK** per executar la simulació.

Apareix el panell de control (**Control Panel**). A mesura que l'execució avança, van apareixent missatges d'estat en el panell de control. Aspen Plus té un banc de dades especial que busca sols

2. Utilitzar la barra de desplaçament vertical a la dreta de la finestra del panell de control per veure els missatges.

Quan finalitzen els càlculs, apareix el missatge de ***Results Available*** al lateral esquerre de la barra d'estat.

3. Tancar el quadre de diàleg de **Economic Analysis**. Examinar els resultats de l'execució.

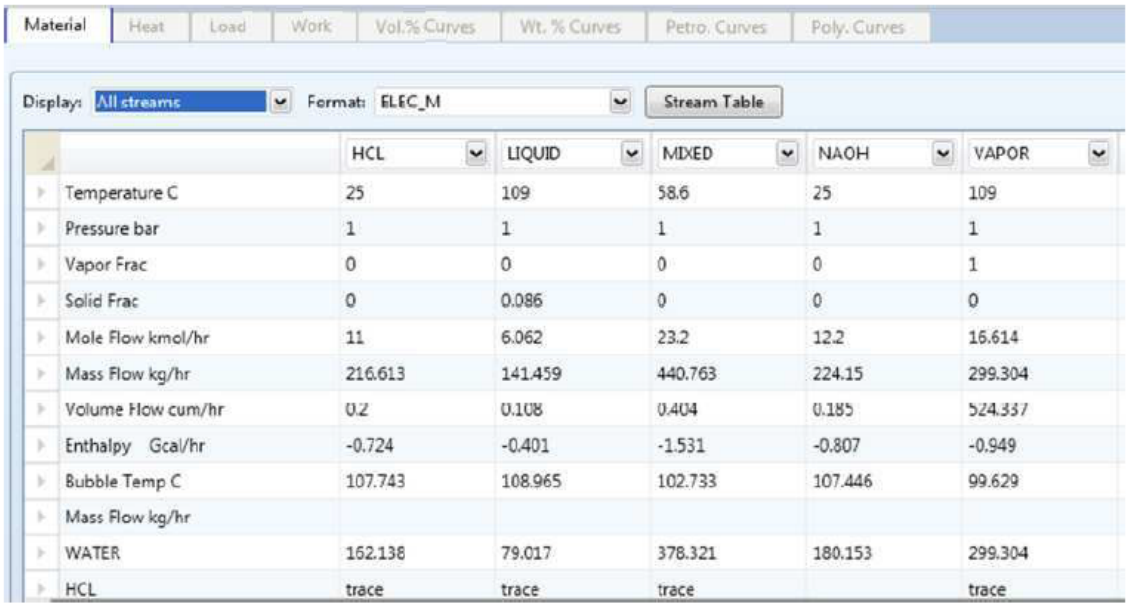
EXAMINANT ELS RESULTATS DE LA SIMULACIÓ

1. En el panell de control, clicar **Check Status**.

La fulla de **Results Summary – Run Status | Status** apareix, indicant que la simulació s'ha completat correctament.

2. En la pestanya **Home** de la cinta, en **Summary**, clicar **Stream Summary**.

3. Revisar els resultats d'aquesta fulla.



	HCL	LIQUID	MIXED	NAOH	VAPOR
Temperature C	25	109	58.6	25	109
Pressure bar	1	1	1	1	1
Vapor Frac	0	0	0	0	1
Solid Frac	0	0.086	0	0	0
Mole Flow kmol/hr	11	6.062	23.2	12.2	16.614
Mass Flow kg/hr	216.613	141.459	440.763	224.15	299.304
Volume Flow cum/hr	0.2	0.108	0.404	0.185	524.337
Enthalpy Gcal/hr	-0.724	-0.401	-1.531	-0.807	-0.949
Bubble Temp C	107.743	108.965	102.733	107.446	99.629
Mass Flow kg/hr					
WATER	162.138	79.017	378.321	180.153	299.304
HCL	trace	trace	trace		trace

Il·lustració 35: Resultats de la simulació 1. (Font: Elaboració pròpia.)

Utilitzar les barres de desplaçament horitzontal i vertical per revisar els resultats que estan fora de la pantalla.

Donat que s'ha seleccionat una aproximació de components vertaders, els resultats de flux màssic i fraccionament de massa s'expressen en termes de components reals.

Encara que s'han especificat els índex de flux en termes dels components aparents (1kmol / h de HCl i 10 kmol / h de H_2O), Aspen Plus ha calculat els índex de flux dels components reals. En el corrent de HCl, només queda un rastre de HCl molecular. Pràcticament tot l'HCl es dissocia en OH^+ i Cl^-.

Com que la dissociació de HCl consumeix un mol d'aigua, el cabal total de H_2O es redueix de 180 kg / h (10 kmol / h) a 162 kg / h (9 kmol / h).

També s'ha especificat el corrent de NaOH en termes de components aparents (1,1 kmol / h de NaOH i 10 kmol / h de H_2O). El NaOH es dissocia completament en Na^+ i OH^-. Això es reflexa en la completa desaparició del NaOH molecular en aquest corrent.

Els fluxos de HCl i NaOH s'agreguen junts al bloc MIX per formar el flux MIXED. Degut a que la dissociació de l'aigua s'inclou com una de les reaccions d'electròlits, el MIX permet que H_3O^+ i OH^- es recombinin per formar aigua. La calor d'aquesta reacció eleva la temperatura del corrent MIXED de 25 ºC (les entrades de les dues alimentacions) a 58,6 ºC. Això demostra que la calor de les reaccions d'electròlits (incloent la calor del mesclat) s'inclou automàticament en els càlculs d'electròlits d'Aspen Plus.

El corrent MIXED s'alimenta a un bloc FLASH2 on l'aigua es fa bullir. Degut a que els ions i les sals precipitades no son volàtils, el corrent de VAPOR només conté aigua pura. A mesura que els ions es concentren al corrent LIQUID, s'excedeix el límit de solubilitat del NaCl en aigua, el que fa que precipitin 30 kg / h de NaCl (S) molecular.

Examinar la temperatura de la bombolla pel corrent MIXED i el corrent LIQUID. El corrent MIXED està subsaturat en NaCl i el corrent LIQUID esta saturat amb NaCl. Aspen Plus calcula correctament el punt d'ebullició del LIQUID (109 ºC) com major que el punt de bombolleig del corrent MIXED (103 ºC), que és major que el punt d'ebullició de l'aigua pura a la pressió de 1 bar (99,6 ºC).

Comparar les fraccions de massa aparent per la fase líquida amb les fraccions de massa del component real en el corrent LIQUID. Encara que el LIQUID de la corrent ha precipitat NaCl (S), la fracció de massa aparent de NaCl (S) és zero perquè Aspen Plus no considera que les sals precipitades siguin components aparents. Les fraccions de massa aparent dels ions Na^+, H_3O^+, OH^- i Cl^- també són zero. Les sals i ions precipitats només poden ser components vertaders.

Donat que el NaCl (S) precipitat no és un component aparent, es representa en l'aproximació o enfocament del component aparent en termes de l'espècie original que s'ha combinat per formar NaCl (S): NaOH i HCl. Aquesta és la raó per la qual la fracció de massa base aparent del component de NaOH és 0,209 encara que la vertadera fracció de massa base d'aquest component és zero. Ara s'han vist els resultats més rellevants per a una simulació amb electròlits.

4. Aquesta simulació té unes altres fulles de resultats. Utilitzar el panell de navegació per veure'ls, si es desitja.

SORTINT DEL PROGRAMA ASPEN PLUS

En acabar, com que ja s'ha fet la simulació i s'han revisat els resultats, s'ha de sortir del programa. Per tal de fer-ho, es seguiran aquests passos:

1. Des de la cinta a la part superior, clicar **File** i a continuació seleccionar **Exit**.

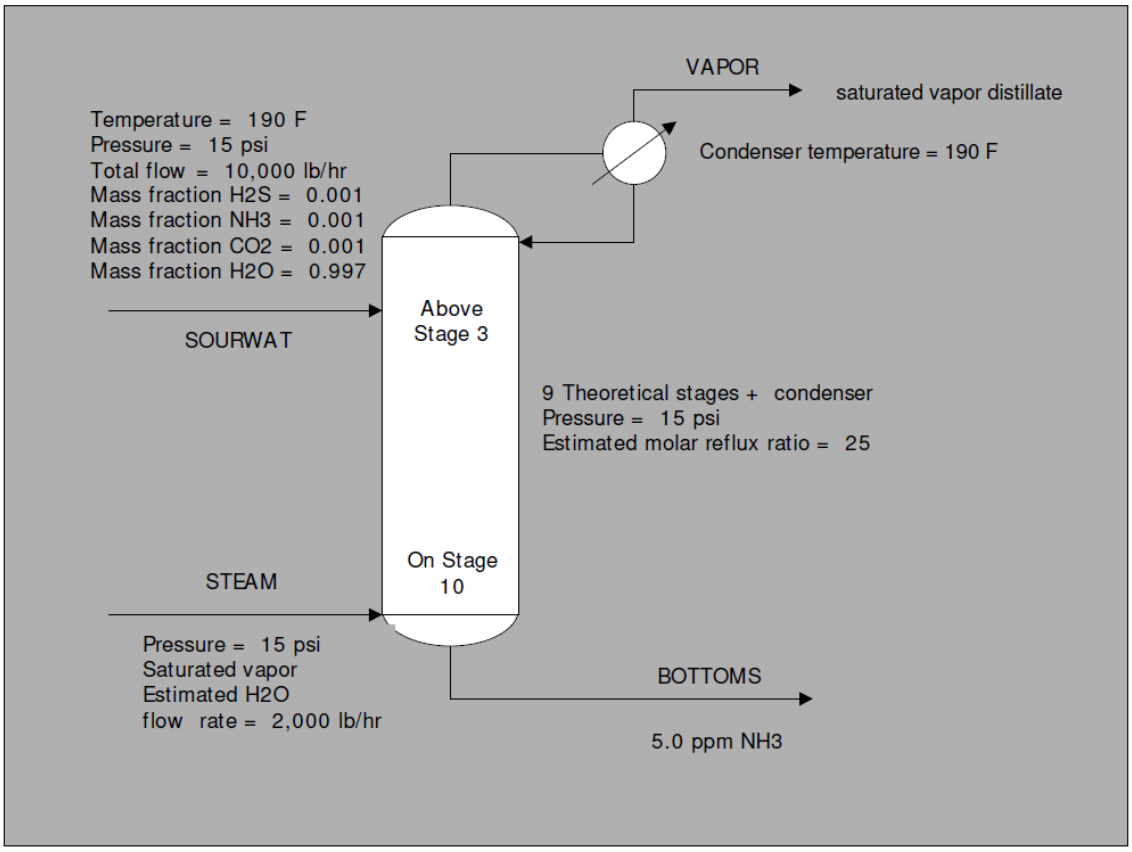
Apareix el quadre de diàleg del programa.

2. Clicar **No**.

O bé clicar **Yes** si es vol guardar l'execució i ingressar un ID d'execució quan es sol·liciti.

5.4.3.2. SIMULACIÓ 2 PLANTA QUÍMICA AMB UNA OPERACIÓ UNITÀRIA I REACCIONS

En aquest segon exemple, la simulació es basarà en el següent procés: Dos corrents d'alimentació, on un conté aigua àcida i l'altre conté vapor que s'alimenten a un separador per eliminar el diòxid de carboni, el sulfur d'hidrogen i l'amoníac de l'aigua àcida. S'ha d'utilitzar el bloc **RedFrac** per simular el separador.



Il·lustració 36: Diagrama de flux del procés. Simulació 2. (Font: AspenTech (2013).)

Les especificacions de la columna són:

- 10 etapes teòriques en total, incloent-ne una pel condensador.
- El producte de destil·lat com vapor saturat (condensador parcial)
- Estimació inicial de la relació de reflux = 25.
- Sense bullidor.
- Flux d'alimentació SOURWAT per sobre de l'etapa 3.
- Alimentar el corrent de VAPOR a l'etapa 10.
- Pressió de la columna de 15 psia (isobàrica)
- Variar la relació de reflux i el cabal d'alimentació de VAPOR per aconseguir un producte de fons amb 5 ppm (massa) d'amoníac i una temperatura del condensador de 190 F.

INICIANT ASPEN PLUS

1. Seleccionar el programa ASPEN PLUS V11 de l'escriptori o des d'on es tingui guardat.

SELECCIONANT L'OPCIÓ DE PLANTILLA O TEMPLATE

1. Clicar **New**.

2. Utilitzar el quadre de diàleg de **New** per especificar la plantilla per a la nova execució.

Aspen Plus utilitza la plantilla que l'usuari escull per automàticament configurar varis valors predeterminats apropiats per a la seva aplicació.

ESPECIFICANT LA PLANTILLA PER A LA NOVA EXECUCIÓ

1. Clicar **Electrolytes** a la part esquerra del panell per veure les opcions per Electròlits.

2. Seleccionar la plantilla **Electrolytes With English Units**.

3. Clicar **Create**.

Aspen tarda uns segons en aplicar la plantilla que s'ha seleccionat.

ESPECIFICANT ELS COMPONENTS

Apareix la pestanya de **Components – Specifications | Selection**.

Els components aparents (o base) per a aquesta simulació són H_2O, NH_3, H_2S i CO_2. Com que s'ha escollit la plantilla d'electròlits, l'aigua ja apareix a la fulla de components.

1. Entrar els següents components a més de l'aigua, que ja està pre-definida.

Component	Component name
NH3	Ammonia
H2S	Hydrogen-Sulfide
CO2	Carbon-Dioxide

Il·lustració 1: Components Simulació 2: Separador d'aigua àcida. (Font: Elaboració pròpia.)

Clicar **Yes** si apareix el quadre de diàleg de **Update Parameters**.

2. Clicar **Elec Wizard** un cop introduïts aquests components.

L'ASSISTENT D'ELECTRÒLITS O ELECTROLYTE WIZARD

Aquest assistent, tal com s'ha mencionat en l'exemple anterior, defineix les espècies iòniques que poden ser generades a partir dels components base que s'han especificat a la pestanya prèvia de **Components – Specifications | Selection**, i també per generar les reaccions que es produeixen a partir d'aquests components en fase líquida.

1. En el quadre de diàleg de **Elec Wizard**, clicar **Next**.

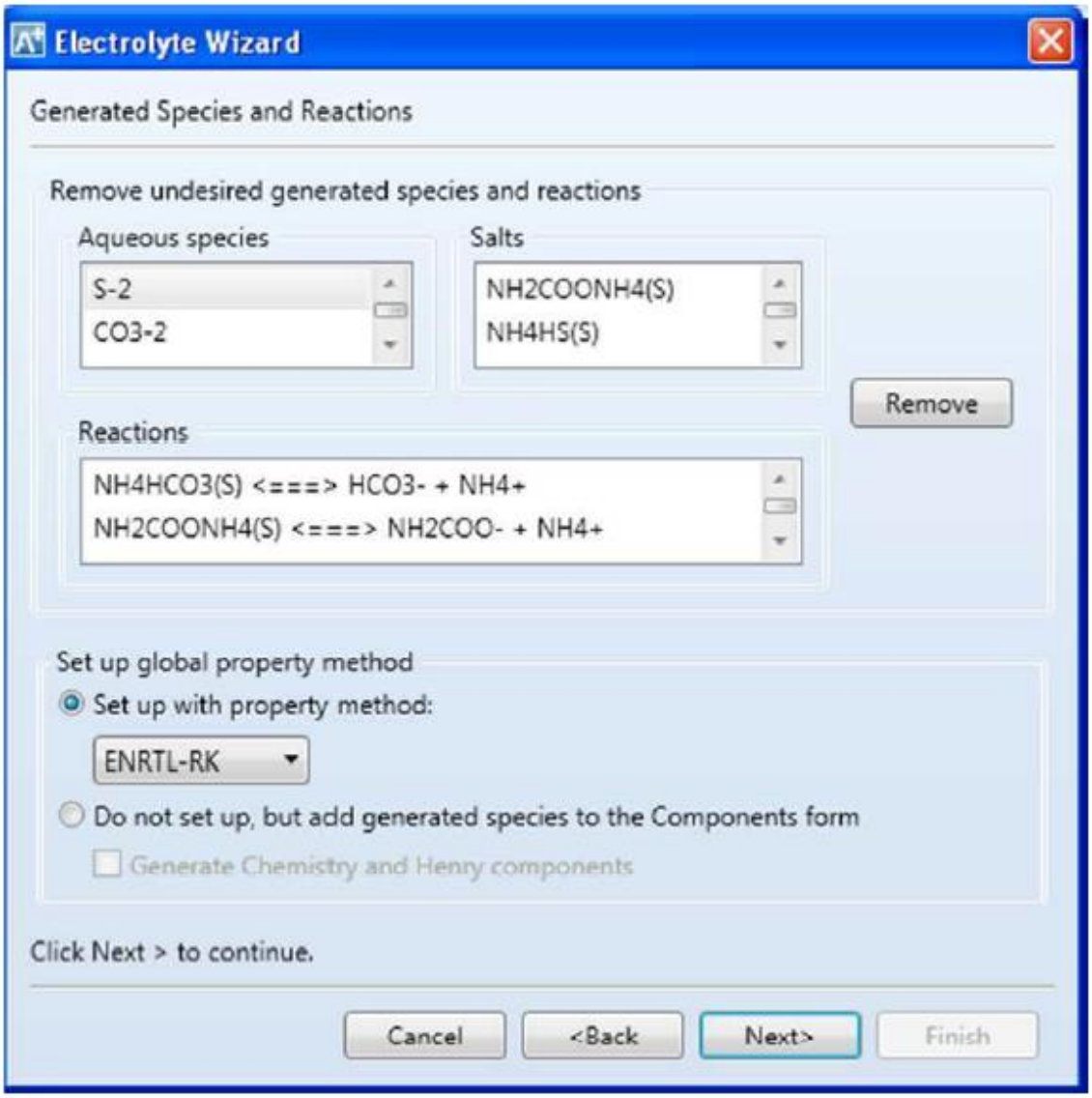
2. Clicar

per moure tots els components de la columna de **Available components** cap a la columna de **Selected components**.

3. Clicar **Next** per continuar.

Apareix **Generated Species and Reaction**.

4. Al costat de **Set up with property method**, seleccionar **ENRTL – RK**.



Il·lustració 37: Electrolyte Wizard. Simulació 2. (Font: AspenTech (2013).)

Aspen Plus genera totes les possibles espècies iòniques i reaccions pel sistema H_2ONH_3 - H_2S - CO_2.

En la llista de reaccions generada, les següents fletxes indiquen diferents tipus de reaccions:

<==> Denota equilibri iònic i precipitació de sal.

--> Denota dissociació completa.

Per aquesta simulació, es pot negligir la formació de carbamat d'amoni.

ELIMINANT LA FORMACIÓ DE NH2COO- DE LA QUÍMICA DE LA SOLUCIÓ

5. Seleccionar NH_2COO^- de la llista d'espècies aquoses.

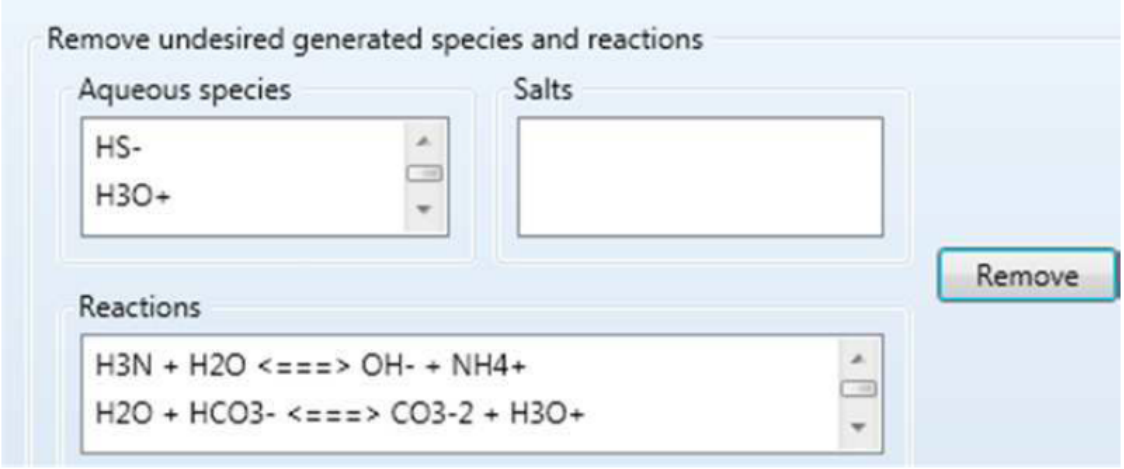
6. Clicar **Remove**.

Ara que ja s'ha eliminat aquest component de la llista, Aspen Plus automàticament elimina totes les reaccions que inclouen aquest component de la llista de **Reactions**.

Les sals tampoc són rellevants. Per conseqüent, també s'eliminen:

7. Seleccionar **$NH_4HS(S)$** i **$NH_4HCO_3(S)$** de la llista de **Sals**.

8. Clicar **Remove**.



Il·lustració 38: Eliminar espècies no desitjades. (Font: Elaboració pròpia.)

Nota: En qualsevol moment que es cregui que una reacció pot ser negligida a causa de les condicions del procés esperades, s'ha d'eliminar de la química de la solució per tal de poder reduir el temps d'execució de la simulació.

En aquest exemple, només es generen reaccions d'equilibri iòniques. Les 6 reaccions restants representen dissociació parcial de l'aigua, del H_2S en HS^- i S^{-2}, del CO_2 en HCO_3^- i CO_3^- i del NH_3 en NH_4^+.

9. Clicar **Next** per acceptar les espècies i reaccions generades.

Simulation Approach apareix, permetent a l'usuari que triï entre l'aproximació d'espècies vertaderes o aparents. En aquesta simulació es farà servir l'aproximació d'espècies aparents (**Apparent Component Approach**).

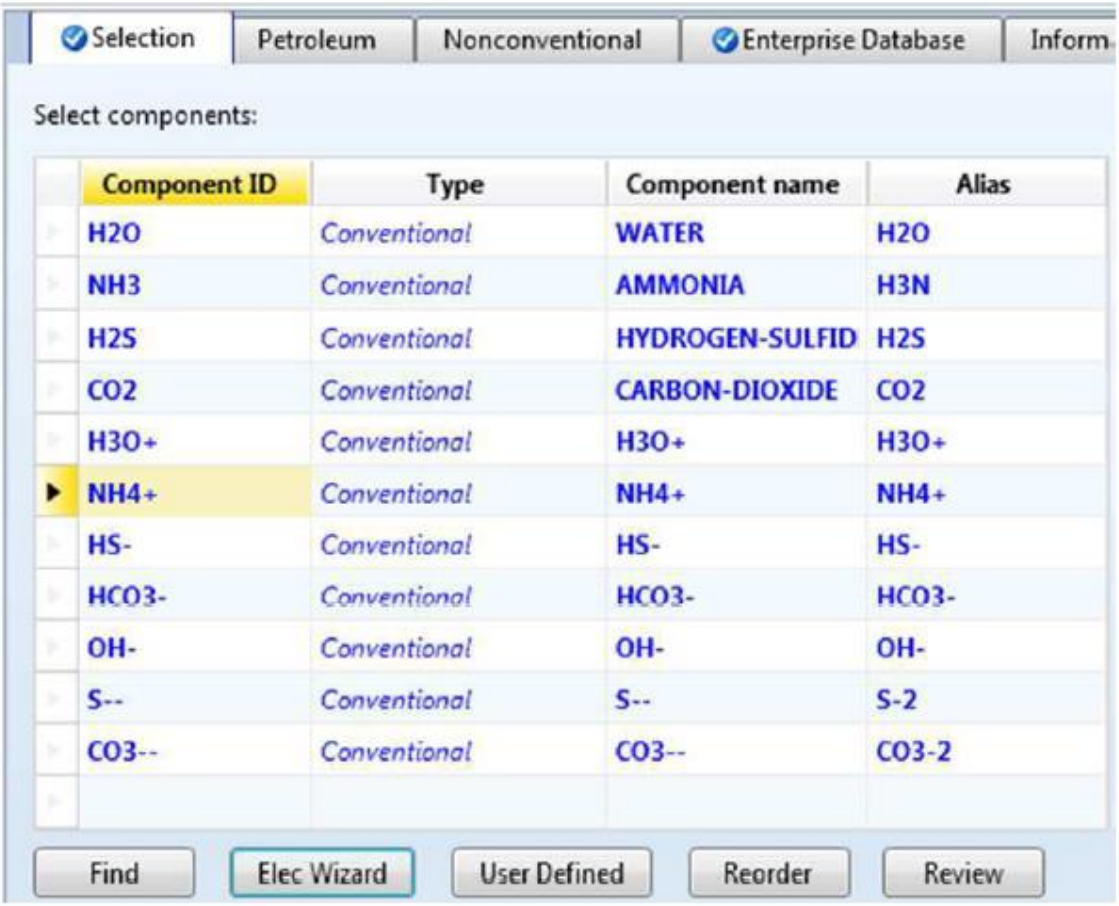
10. Seleccionar **Apparent Component Approach**.

11. Clicar **Next** per continuar al següent pas.

Nota: Clicar **Yes** si apareix el quadre de diàleg **Update Parameters** per actualitzar els paràmetres.

12. Clicar **Finish** per tancar el quadre de diàleg.

En **Components – Specifications | Selection**, Aspen plus ha afegit els components electrolítics generats. Com que tots els components estan a la base de dades del programa, Aspen recupera tots els paràmetres de propietats físiques rellevants.



Il·lustració 39: Components Simulació 2 - 1 Operació Unitària i Reaccions. (Font: Elaboració pròpia.)

EXAMINANT LA QUÍMICA GENERADA

En els passos anteriors, Aspen Plus Electrolytes Expert System automàticament ha generat la química per a aquesta simulació i l'ha nombrat **GLOBAL**. Per examinar la química generada:

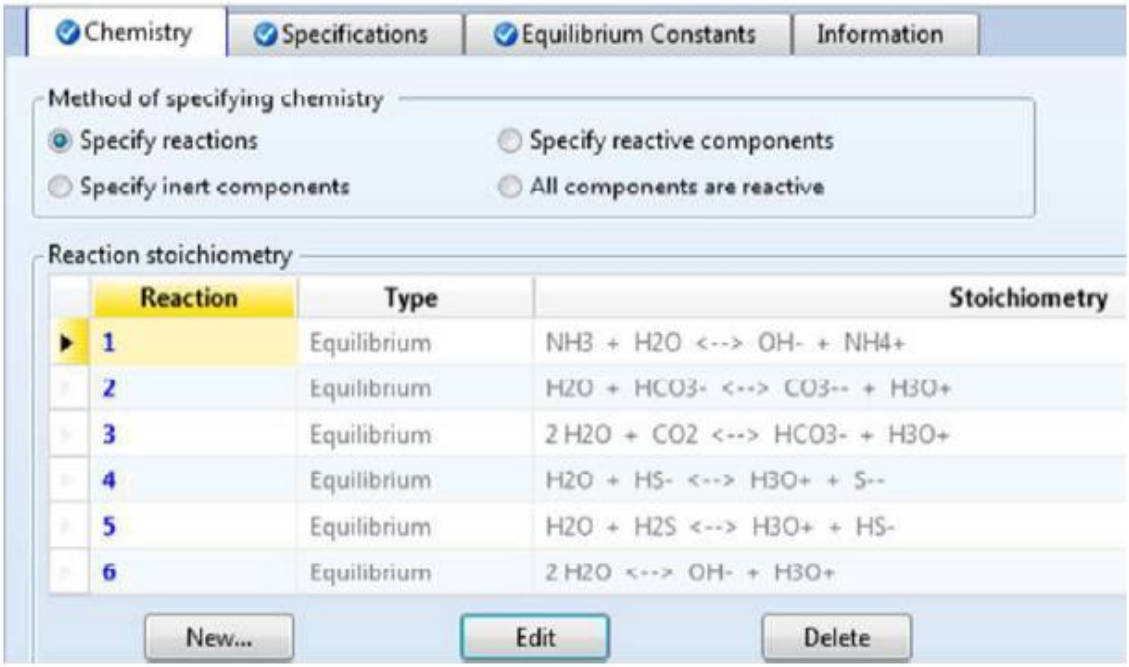
1. En **Navigation Pane** (panell de navegació), seleccionar la carpeta **Chemistry**.
2. Des de la carpeta **Chemistry**, seleccionar **GLOBAL – Input | Chemistry**.

PER VEURE LA QUÍMICA GENERADA

1. Seleccionar una reacció i clicar **Edit**.

Apareix el quadre de diàleg de **Equilibrium Reaction Stoichiometry**, amb les dades de la reacció seleccionada.

2. Tancar el quadre de diàleg i veure les altres reaccions utilitzant els mateixos passos.

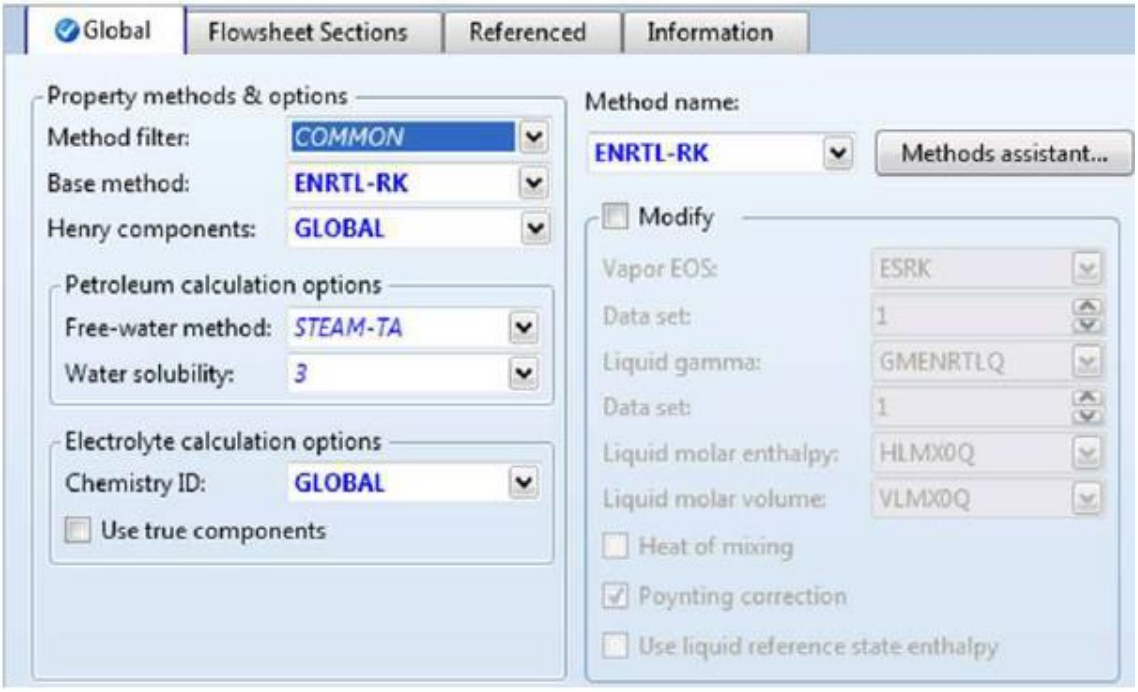


Il·lustració 40: Chemistry. Reaction. Simulació 2. (Font: Elaboració pròpia.)

3. Clicar en la pestanya **Equilibrium Constants.**

Seleccionar les diferents reaccions en **Equilibrium reaction**. Totes les sis reaccions tenen constants d'equilibri que s'han recuperat de la base de dades del programa.

4. Des de **Navigation Pane**, seleccionar la carpeta de **Methods** i després seleccionar **Specifications**.



Il·lustració 41: Methods - Specifications | Global. (Font: Elaboració pròpia.)

5. Assegurar que la casella de selecció **Use true components** està desactivada.

6. Fer clic a **Next** per continuar.

Apareix el full de paràmetres d'Interacció binària per als paràmetres binaris HENRY-1. Utilitzar aquest full per veure els paràmetres de Henry's Law recuperats pel sistema expert en electròlits. Si es tenen els propis paràmetres de la Llei de Henry, es poden introduir en aquest full.

7. Fer clic a **Next** per continuar.

Apareix el full d'interacció binària per als paràmetres binaris NRTL-1. Utilitzar aquest full per veure els paràmetres d'interacció molècula-molècula recuperats pel sistema expert en electròlits. Si es tenen els propis paràmetres d'interacció molècula-molècula, s'introdueixen en aquest full.

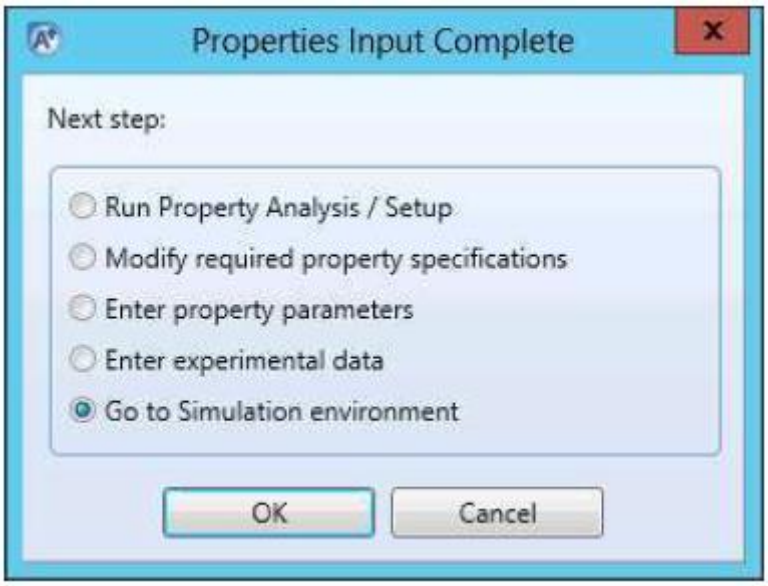
8. Al **Navigation Pane**, seleccionar la carpeta **Electrolyte** Pair a sota de **Methods | Parameters**.

El **Electrolyte Pair** defineix els paràmetres del parell electrolític: GMELCC, GMELCD, GMELCE, GMELCN, GMENCC, GMENCD, GMENCE i GMENCN. Si es tenen els propis paràmetres de parell, s'introdueixen en aquest full.

9. Utilitzar o desplegar la carpeta **Electrolyte Pair** al **Navigation Pane** per veure cada full d'entrada de parells d'electròlits.

10. Fer clic a **Next** per continuar.

Apareix el quadre de diàleg **Properties Input Complete**:



Il·lustració 42: Quadre de diàleg de Properties Input Complete. (Font: AspenTech (2013).)

La representació correcta de les propietats físiques és essencial per a la modelització de processos. Per a moltes simulacions, l'única especificació de propietat física que heu de proporcionar és la selecció d'un mètode de propietat. Aquest quadre de diàleg mostra que el sistema de propietats físiques de Aspen Plus té moltes funcions opcionals per augmentar la precisió dels càlculs de propietats físiques.

Com que la base de dades d'electròlits d'Aspen Plus conté dades per a tots els components i parells d'aquest sistema, no cal que es proporcioni cap dada o especificació opcional.

Ara que s'han completat les especificacions de components i propietats, completar la resta d'especificacions del diagrama de flux a l'entorn de simulació. Utilitzar tots els models de funcionament de la unitat Aspen Plus en una simulació d'electròlits.

11. Seleccionar **Go to Simulation environment** i fer clic a **OK**.

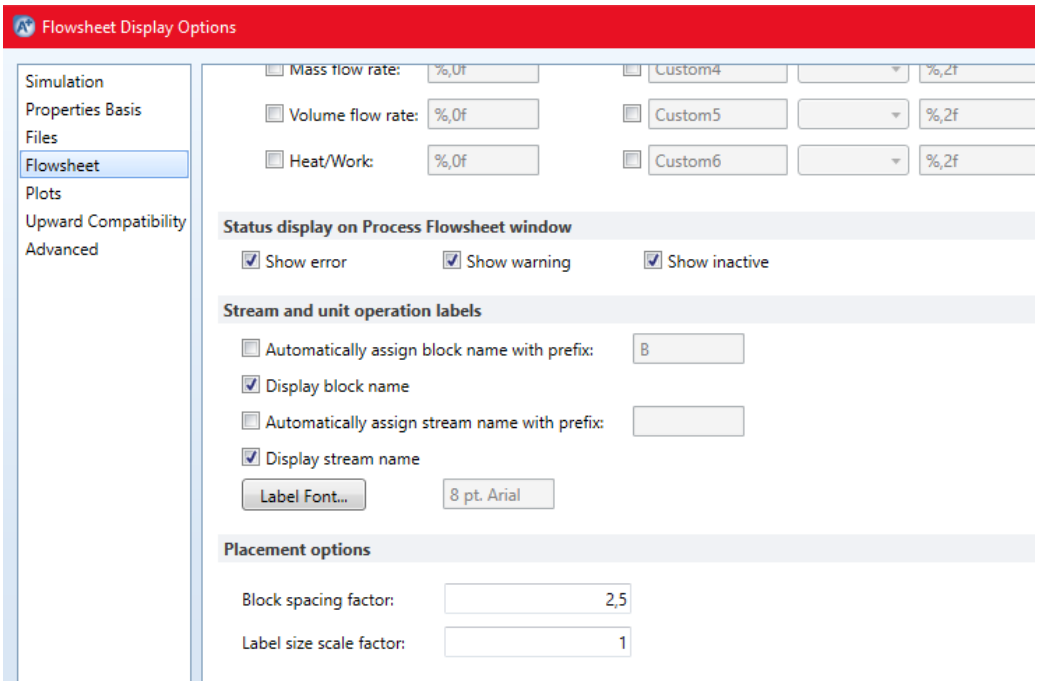
ENTRANT EN L'AMBIENT DE SIMULACIÓ

Ara es comença a dibuixar el diagrama del procés de la simulació que es vol crear. Com que l'usuari mateix entrarà els propis noms dels cabals i les operacions unitàries del procés, s'han de desactivar les opcions per defecte que designen automàticament els ID dels blocs i cabals.

1. Clicar **File** a la part superior a l'esquerra de la pantalla i a continuació clicar **Options**.

2. Seleccionar **Flowsheet** des del panell de la part esquerra del quadre de diàleg.

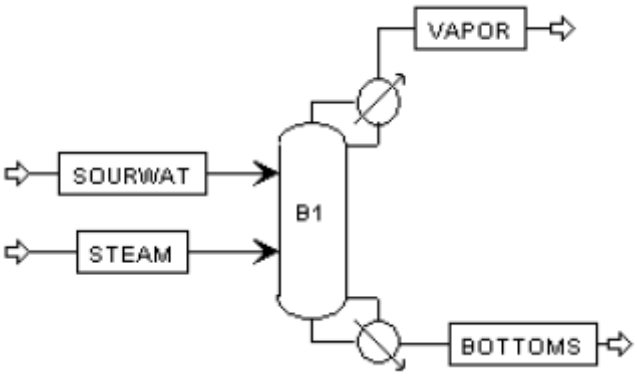
3. Desactivar les opcions **Automatically Assign Block Name with Prefix** i **Automatically Assign Stream Name with Prefix** que estan a sota de **Stream and unit operation labels**.



Il·lustració 43: File - Options - Flowsheet. Desactivar opcions. (Font: Elaboració pròpia.)

4. Clicar **Apply** i després **OK** per aplicar els canvis i tancar el quadre de diàleg.

5. Ara s'ha de col·locar un **RadFrac** i crear el diagrama de flux de la simulació gràfica de la següent manera:



Il·lustració 44: Diagrama de flux Simulació 2 - 1 Operació unitària i reaccions. (Font: AspenTech (2013).)

6. Anar a **Setup – Specifications | Global**.

ESPECIFICANT TÍTOL, PROPIETATS DELS CABALS I GLOBAL OPTIONS

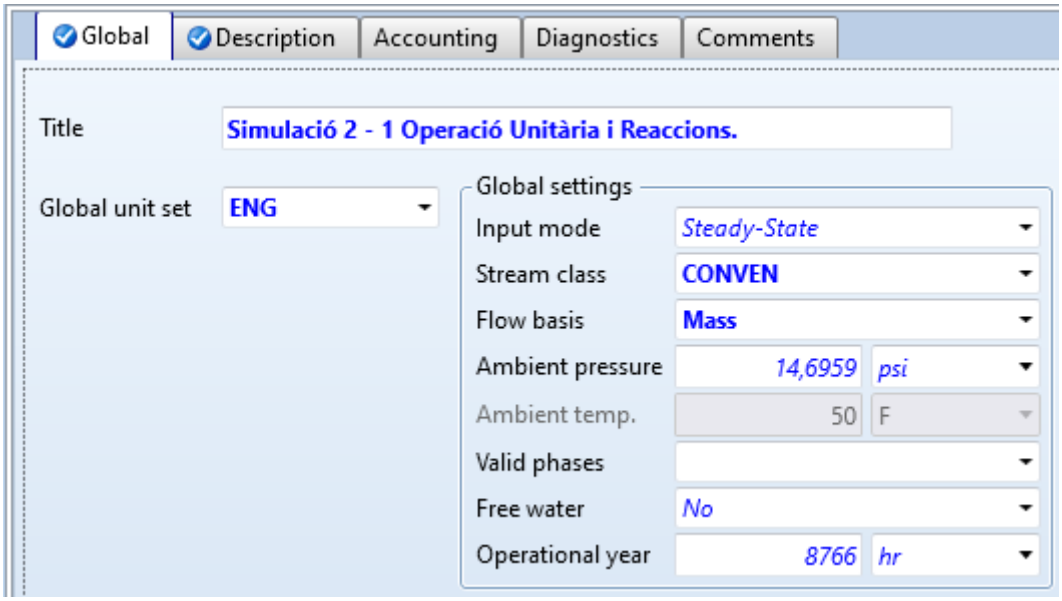
En **Setup – Specifications | Global** se li pot donar un títol a la simulació, revisar les propietats dels cabals i les opcions globals que es van configurar quan l'usuari va seleccionar la plantilla de **Electrolytes with English Units**.

Aquesta plantilla determinada configura les següents aplicacions globals predeterminades per electròlits:

- ENG units (unitats angleses).
- Mass Flow base per a tots els fluxos (cabal màssic).

Per posar un títol a la simulació només cal seguir dos passos:

1. En el camp de **Title**, entrar **Simulació 2 – 1 Operació Unitària i Reaccions.**



Il·lustració 45: Setup – Specifications | Global. Simulació 2. Títol. (Font: Elaboracció pròpia.)

REVISANT LES OPCIONS DELS INFORMES

Per revisar les opcions de l'informe especificades a la plantilla seleccionada:

4. En el **Navigation Pane**, seleccionar **Setup | Report Options**.
5. Clicar a la pestanya **Stream**.

Basat en la plantilla d'electròlits amb unitats angleses, Aspen Plus mostra els següents valors predeterminats per calcular i reportar propietats de flux:

- **Flow Basis of Mass**: Aspen Plus reportarà els cabals dels components sobre una base de flux màssic.
- **Stream Format: ELEC_E**. Aspen Plus formateja la fulla de resum de flux per electròlits utilitzant unitats angleses.

S'ha de tornar a aquesta fulla i especificar les propietats dels corrents més endavant en aquesta simulació.

6. Clicar per moure's al següent requeriment d'entrada.

ENTRANT DADES DE FLUXOS

La finestra del corrent de **SOURWAT (MATERIAL) – Input | Mixed** apareix. Aspen Plus requereix dues especificacions termodinàmiques i informació suficient per a calcular el cabal de cada component present en la simulació.

5. En aquesta fulla, s'han d'introduir les següents dades:

Parameter	Value
Temperature	190 F
Pressure	15 psia
Total flow Mass	10000 lb/hr

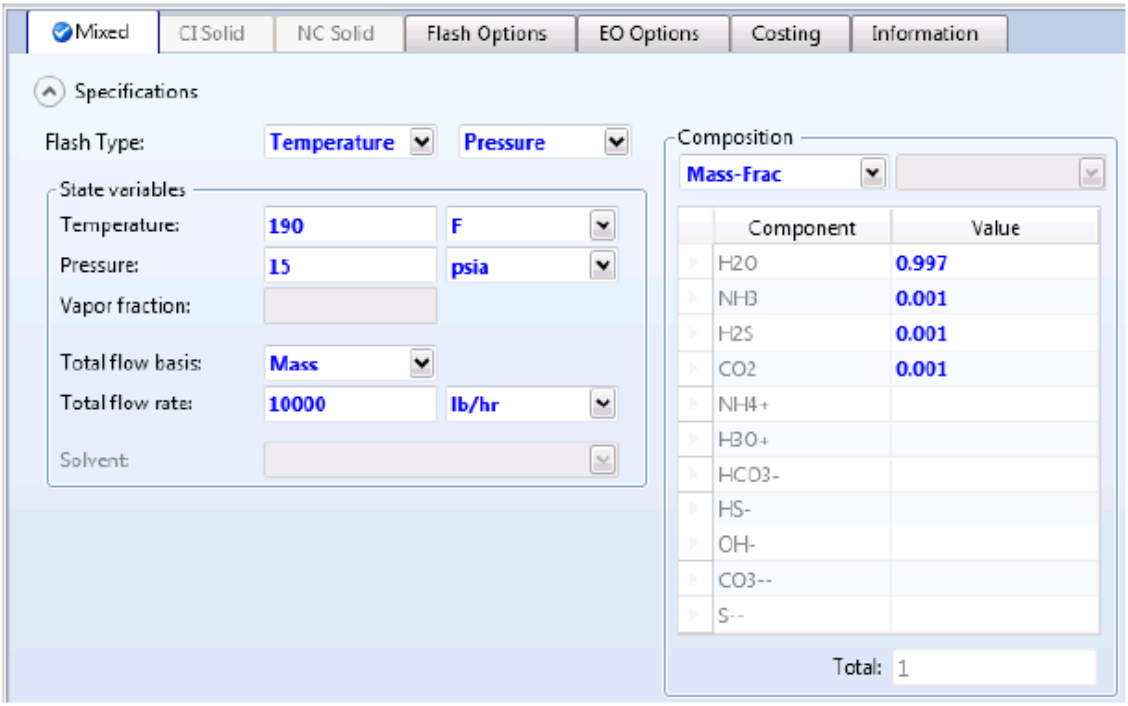
Il·lustració 46: Dades flux SOURWAT. Simulació 2. (Font: AspenTech (2013).)

6. En el camp de **Composition** clicar i seleccionar **Mass – Frac**

7. Entrar els valors de fracció màssica següents:

Component	Value
H2O	0.997
NH3	0.001
H2S	0.001
CO2	0.001

Il·lustració 47: Dades fraccions màssiques Simulació 2. (Font: AspenTech (2013).)



Il·lustració 48: Cabal SOURWAT amb dades introduïdes. (Font: Elaboració pròpia.)

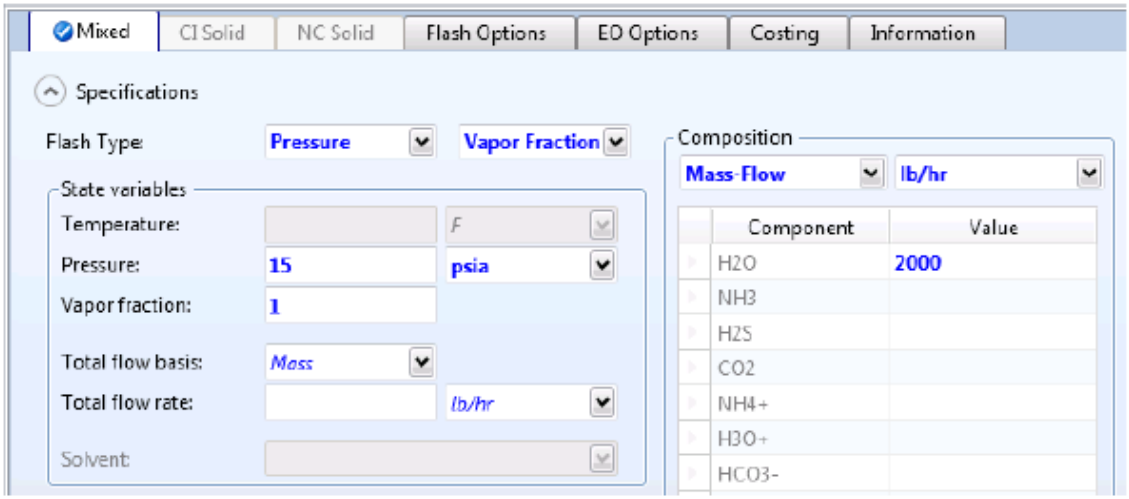
8. Clicar per continuar.

Apareix el full del següent cabal, **STEAM (MATERIAL) – Input | Mixed**.

9. En el camp de **Temperature**, clicar i seleccionar **Vapor Fraction**.
10. Entrar les següents dades:

Field	Value
Vapor fraction	1
Pressure	15 psia
Composition	Mass-Flow
H2O Mass flow value	2000 lb/hr

Il·lustració 49: Dades flux STEAM Simulació 2. (Font: AspenTech (2013).)



Il·lustració 50: Cabal STEAM amb dades introduïdes. (Font: Elaboració pròpia.)

11. Clicar N per continuar.

ESPECIFICANT EL BLOC DE RadFrac

El bloc **B1 (RadFrac) - Setup | Configuration** apareix.

REVISANT ESPECIFICACIONS QUE ES PODEN FER PER RadFrac

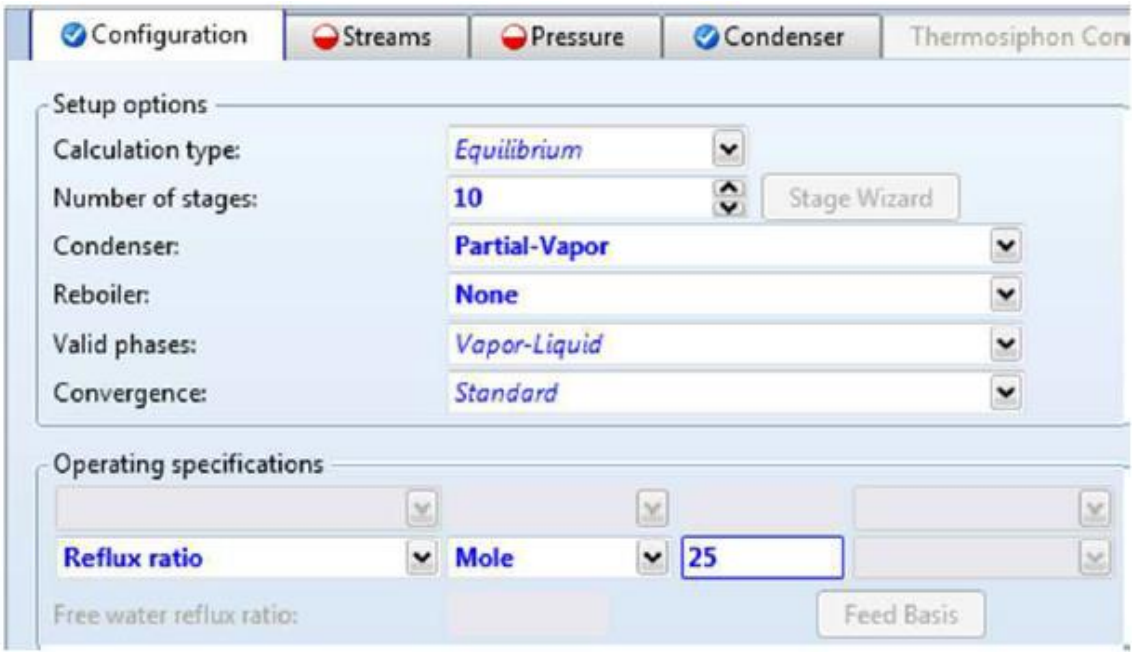
1. En la fulla de **B1 Specifications – Setup | Configration**, s'introdueixen les següents dades:

Field	Value
Number of stages	10 (9 theoretical stages and condenser)
Condenser	Partial-Vapor
Reboiler	None

Il·lustració 51: Especificacions columna RadFrac. (Font: AspenTech (2013).)

2. A la secció de **Operating Specifications**, el camp **Reflux Ratio**, seleccionar **Mole** i especificar **25** com a estimació inicial de la relació de reflux. L'altra especificació de funcionament esta desactivada ja que només es pot triar una especificació quan **no** hi ha **Reboiler**.

3. La fulla esta completa:



Il·lustració 52: Dades de la columna RadFrac introduïdes. (Font: Elaboració pròpia.)

4. Clicar N per continuar.

El **B1 (RadFrac) – Setup | Streams** apareix. Utilitzar aquesta fulla per descriure com estan connectats els fluxos a la columna RadFrac.

5. Pel cabal d'alimentació de SOURWAT, introduir **3** en el camp de **Stage** i **Above** en el camp de **Convention**.
6. Pel cabal d'alimentació de STEAM, introduir **10** en el camp de **Stage** i **On – Stage** en el camp de **Convention**.

Com que el flux VAPOR està connectat al port de destil·lat de vapor, Aspen Plus assigna automàticament el flux VAPOR com a producte de fase vapor des de l'etapa 1. De la mateixa manera, Aspen Plus assigna el flux BOTTOMS com a producte en fase líquida des de l'etapa 10. El full **Streams** no permet les especificacions de flux per a productes destil·lats o fluxos de productes inferiors.

7. Clicar N per continuar.

ESPECIFICANT QUE LA COLUMNA TREBALLA ISOBÀRICAMENT A 15 PSIA

1. En el camp de **Stage 1 / Condenser pressure**, introduir **15 psia**.
2. Clicar N per continuar.

Apareix el quadre de diàleg de **Required Input Complete**, indicant que tota la informació requerida a les especificacions ja s'ha introduït.

3. Fer clic a **Cancel** per tancar el quadre de diàleg sense executar la simulació.

Ara es poden introduir especificacions opcionals. Aquestes especificacions inclouen configurar 2 especificacions de disseny. La primera serà una concentració de 5 ppm de NH_3 en el BOTTOMS i la segona serà la temperatura del condensador de 190 F.

DEFININT LES ESPECIFICACIONS DE DISSENY

1. Clicar el formulari de **Blocks | B1 | Specifications | Design Specifications** des del **Navigation Pane**.
2. Clicar **New**.
3. En el camp de **Type** clicar i seleccionar **Mass Purity**.
4. En el camp de **Target** introduir el valor **5E-6**.
5. Clicar per continuar.

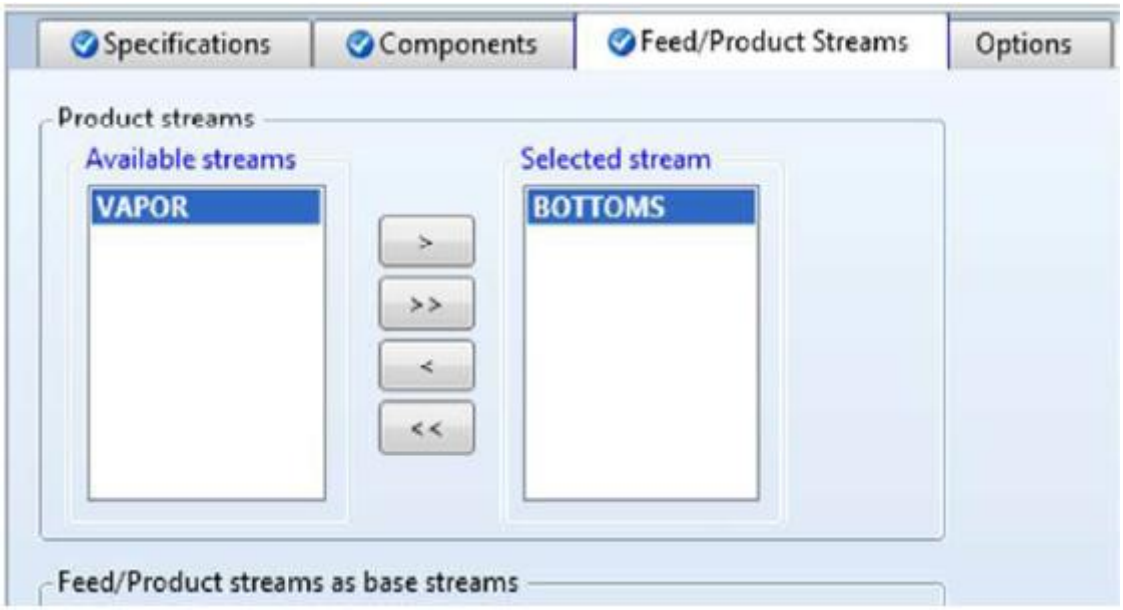
Apareix el formulari **B1 Specifications Design Specifications – 1 | Components**. Utilitzar aquest formulari per especificar on s'ha d'aplicar l'especificació i a quins component i fase s'aplica.

6. A l'àrea de **Components**, des de la columna de **Available components**, seleccionar **NH3** (ammonia) i clicar .
7. Clicar per continuar.

Apareix el formulari **B1 Specifications Design Specifications – 1 |Feed / Product Streams**.

8. Des de la columna de **Available components**, seleccionar **BOTTOMS** i clicar .

Ara el formulari **B1 Specifications Design Specifications – 1** ja està complet:



Il·lustració 53: B1 Specifications Design Specifications - 1 Completat. (Font: Elaboració pròpia.)

DEFININT UNA ALTRA ESPECIFICACIÓ DE DISSENY

1. Des de **Navigation Pane**, Seleccionar un altre cop **Design Specifications**.

Apareix el formulari de **B1 Specifications Design Specifications**.

2. Clicar **New**.
3. En el camp de **Type**, seleccionar **Stage temperature**.
4. En el camp de **Target**, introduir la temperatura de **190 F**.
5. En el camp de **Stage**, introduir el valor **1**.
6. Clicar per continuar.

Apareix el formulari de **B1 Vary**.

S'han de definir dues variables manipulades per complir les dues especificacions de disseny. En aquesta simulació es mantenen lliures la velocitat d'alimentació del vapor i les especificacions de la relació de reflux proporcionades en el formulari de **B1 Specifications – Setup**. Aspen Plus ajusta la velocitat d'alimentació de vapor i la relació de reflux per aconseguir l'especificació de concentració de fons NH3 i l'especificació de temperatura del condensador.

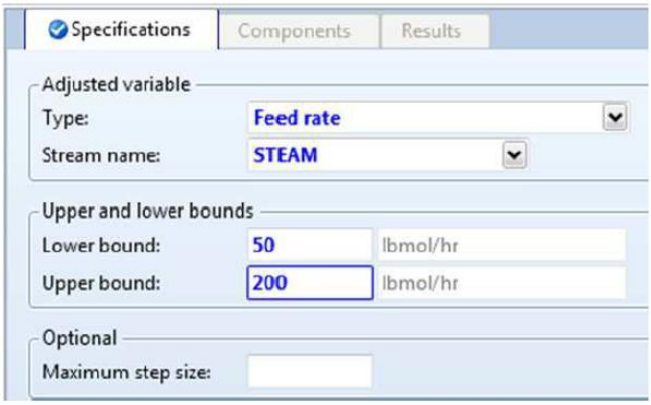
DEFININT LA PRIMERA VARIABLE MANIPULADA

1. Clicar **New** i després clicar **OK**.

Apareix el formulari de **B1 Specifications Vary – 1 | Specifications**. En aquest formulari s'especifica quina de les variables l'usuari vol mantenir lliure per tal de complir les especificacions de disseny que es proporcionen.

2. En el camp **Type**, seleccionar **Feed rate** (velocitat d'alimentació).
3. En **Stream name**, seleccionar **STEAM**.
4. En **Lower bound**, introduir 50 **lbmol/hr**.
5. En **Upper bound**, introduir **200 lbmol/hr**.

Al formulari **STEAM (MATERIAL)** s'ha especificat un flux màssic per al corrent STEAM. Tanmateix, quan es selecciona la variable tipus Feed rate en el formulari **Vary**, Aspen Plus assumeix que la velocitat d'alimentació serà amb base molar. En aquest cas, variar la velocitat d'alimentació en mols entre 50 – 200 (lbmol/hr) equival a varia el flux màssic de 900 – 3600 (lb/hr).



Il·lustració 54: Design Specifications STEAM (MATERIAL). (Font: Elaboració pròpia.)

DEFININT LA SEGONA VARIABLE MANIPULADA

1. Des del **Navigation Pane**, clicar la carpeta de **B1 | Specifications | Vary** un altre cop.
2. Clicar **New**.
3. En el camp de **Type**, seleccionar **Reflux ratio**.
4. En el camp **Lower bound**, introduir **15**.
5. En el camp **Upper bound**, introduir **50**.

Com en el cas del Feed rate, Aspen Plus sempre varia la relació de reflux en una base molar, encara que s'especifiqui una relació de reflux en base màssica en el formulari de **B1 Specifications – Setup**.

6. Clicar per continuar.

Apareix el quadre de diàleg de **Required Input Complete**, indicant que totes les especificacions estan completades.

7. Clicar **Cancel**.

Per defecte, Aspen Plus només mostra resultats per a etapes que tenen alimentacions, productes, escalfadors o un cabal màxim o mínim, i per a les etapes immediatament superiors i inferiors a aquestes etapes. Es modifica l'informe d'etapes predeterminades perquè es notifiquin els resultats de totes les etapes.

PER CANVIAR O MODIFICAR L'INFORME

1. Des del **Navigation Pane**, seleccionar **Blocks | B1 | Analysis | Report**.
2. Clicar la pestanya de **Profile Options**.
3. En aquest formulari, en la secció de **Stages to be included in report**, seleccionar **All Stages**.

Per defecte, Aspen Plus informa només de temperatura, pressió, fluxos de mols totals, entalpia, fraccions de mol i valors K per a les safates seleccionades.

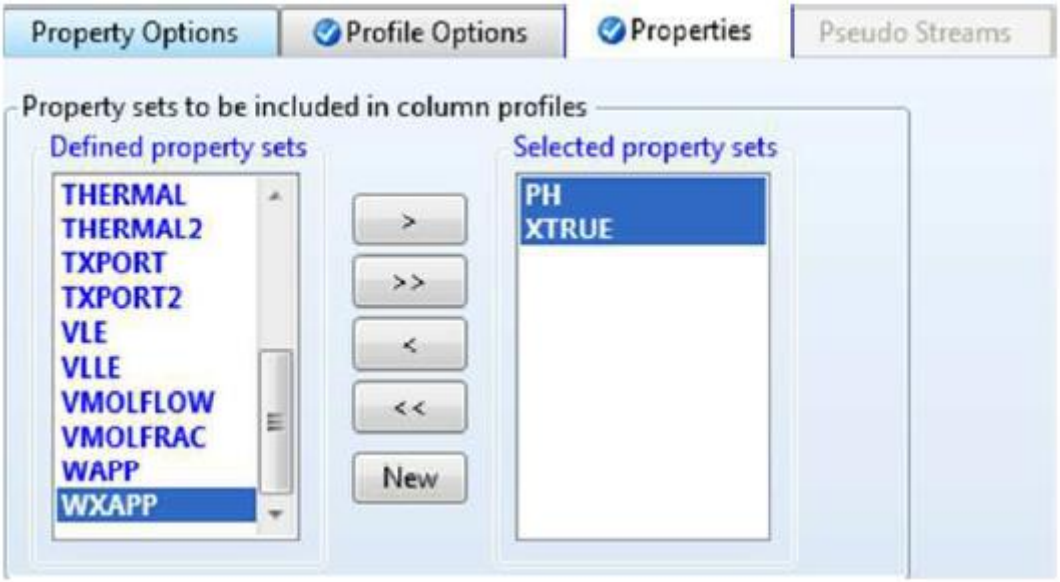
Per sol·licitar que s'informin propietats addicionals, s'han de seleccionar els conjunts de propietats addicionals al full de **Properties.**

Mitjançant dos conjunts de propietats integrats, es pot especificar que Aspen Plus informi del pH i de les fraccions molars dels components reals.

4. Clicar la pestanya de **Properties**.

5. En la columna de **Defined property sets**, seleccionar **PH** i **XTRUE** i clicar > per moure les dues configuracions de propietats a la columna de **Selected property sets**.

   El paràmetre "**XTRUE**" es defineix com la fracció molar real o vertadera dels components.



Il·lustració 55: PH i XTRUE incloses a Selected property sets. (Font: Elaboració pròpia.)

EXECUTANT LA SIMULACIÓ

1. Clicar N per continuar.

Apareix el quadre de diàleg de **Required Input Complete**.

2. Clicar **OK** per executar la simulació.

Apareix el **Control Panel**.

Mentre l'execució procedeix, van apareixent missatges en el panell de control. Aspen Plus tarda uns segons per processar les especificacions d'entrada i realitzar la simulació.

Com en la simulació 1, Aspen Plus mostra missatges indicant que algunes propietats s'han recuperat de la base de dades especials.

Quan els càlculs han acabat, apareix el missatge de ***Results Available*** en la part esquerra del Status bar a la part inferior de la finestra principal.

3. Quan apareix ***Results Available***, clicar **Check Status** per veure els resultats de l'execució.

EXAMINANT ELS RESULTATS DE LA SIMULACIÓ

Aspen Plus genera uns quants resultats d'aquesta simulació. Es pot examinar qualsevol resultat que sigui de l'interès de l'usuari. Aquest exemple guia a l'usuari per a que revisi alguns dels resultats d'aquesta simulació.

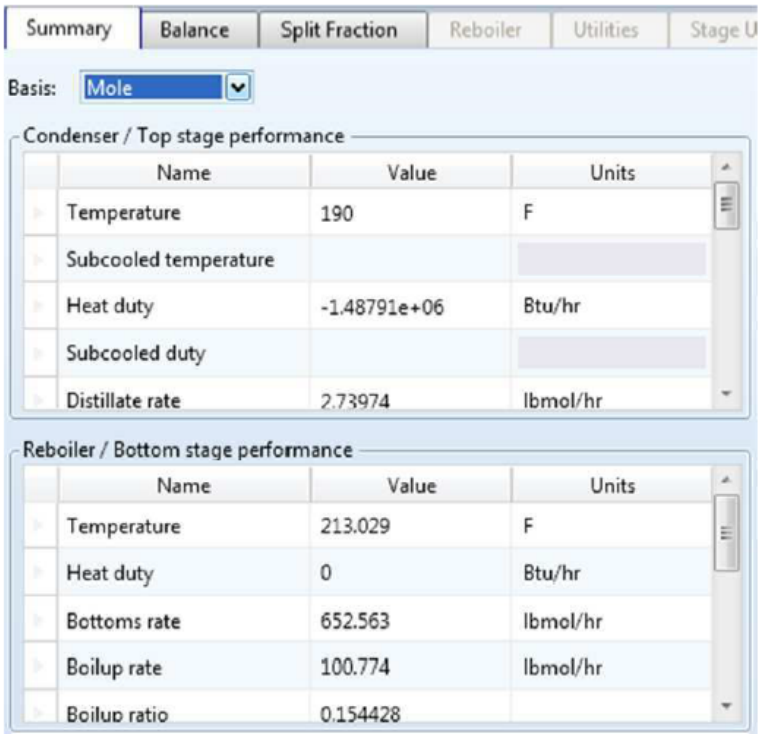
PER VEURE ELS RESULTATS DE LA COLUMMNA RadFrac

1. En la zona de treball o workspace, clicar a la pestanya de **Main Flowsheet**.

2. En el full del diagrama de flux, seleccionar el bloc de RadFrac.

3. Clicar al botó dret del ratolí i seleccionar **Results**.

Apareix el formulari de **B1 (RadFrac) – Results | Summary**. Aquest formulari mostra els fluxos, les temperatures, i els "duty" de l'etapa superior o "top" i inferior o "bottom" de la columna. El concepte "duty" en anglès, es refereix a la quantitat d'energia que s'ha d'extreure o incorporar per tal que la unitat o l'operació dissenyada pugui funcionar correctament.



Il·lustració 56: Resultats columna RadFrac. Simulació 2. (Font: Elaboració pròpia.)

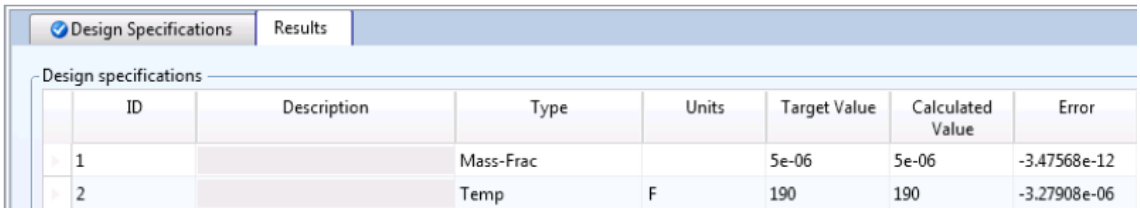
4. Clicar a les pestanyes en el formulari de **B1 (RadFrac) – Results** per veure més resultats.

Apareix el full de balanços. El bloc esta en balanç màssic, no esta en balanç d'entalpia perquè s'està eliminant la calor del bloc **RadFrac** en el condensador. L'entalpia s'hauria equilibrat si s'hagués assignat un flux de calor al servei del condensador.

Hi ha un resum dels resultats de les especificacions de disseny en el formulari **B1 Specifications Design Specifications | Results**. Aquest formulari mostra els valors per a totes les especificacions de disseny.

PER VEURE ELS RESULTATS DE LES ESPECIFICACIONS DE DISSENY

1. Des del **Navigation Pane**, seleccionar la carpeta de **Blocks | B1 | Specifications | Design Specifications**.
2. Clicar a la pestanya **Results** per veure els resultats de les especificacions de disseny.



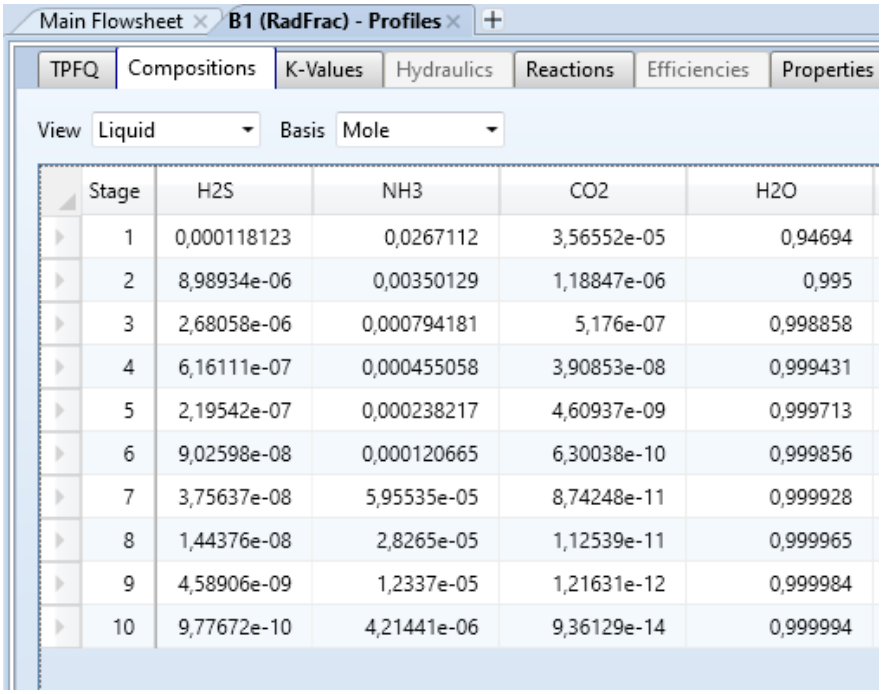
Il·lustració 57: Resultats de les especifiicacions de disseny. (Font: Elaboració pròpia.)

El formulari de **B1 (RadFrac) – Profiles | Compositions** mostra una llista de les fraccions molars per a cada component per cada etapa. Com que s'ha escollit l'aproximació de component aparent per a aquesta simulació, només es mostren els components aparents.

Els valors exactes que determinen la variació poden variar lleugerament en funció del camí de convergència.

PER VEURE ELS PERFILS DE COMPOSICIÓ

1. Des del **Navigation Pane**, seleccionar el formulari **Blocks | B1 | Profiles**.
2. Clicar la pestanya de **Compositions** per veure els resultats.
3. En el camp de **View**, clicar i seleccionar **Liquid**.



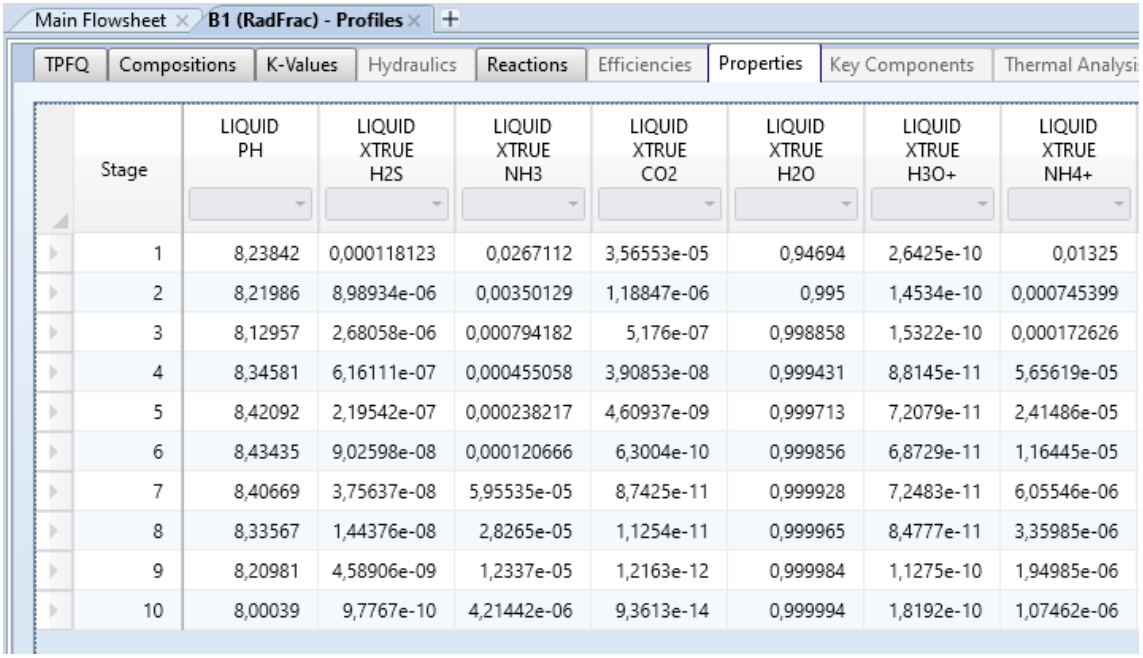
Stage	H2S	NH3	CO2	H2O
1	0,000118123	0,0267112	3,56552e-05	0,94694
2	8,98934e-06	0,00350129	1,18847e-06	0,995
3	2,68058e-06	0,000794181	5,176e-07	0,998858
4	6,16111e-07	0,000455058	3,90853e-08	0,999431
5	2,19542e-07	0,000238217	4,60937e-09	0,999713
6	9,02598e-08	0,000120665	6,30038e-10	0,999856
7	3,75637e-08	5,95535e-05	8,74248e-11	0,999928
8	1,44376e-08	2,8265e-05	1,12539e-11	0,999965
9	4,58906e-09	1,2337e-05	1,21631e-12	0,999984
10	9,77672e-10	4,21441e-06	9,36129e-14	0,999994

Il·lustració 58: Blocks | B1 | Profiles Compositions. (Font: Elaboració pròpia.)

El formulari que es mostra a la il·lustració 58 mostra l'actual composició dels components moleculars i iònics.

PER VEURE AQUESTS RESULTATS

1. Clicar a la pestanya **Properties**. L'usuari pot necessitar les fletxes a l'extrem dret de la fila de pestanyes per arribar-hi.



Stage	LIQUID PH	LIQUID XTRUE H2S	LIQUID XTRUE NH3	LIQUID XTRUE CO2	LIQUID XTRUE H2O	LIQUID XTRUE H3O+	LIQUID XTRUE NH4+
1	8,23842	0,000118123	0,0267112	3,56553e-05	0,94694	2,6425e-10	0,01325
2	8,21986	8,98934e-06	0,00350129	1,18847e-06	0,995	1,4534e-10	0,000745399
3	8,12957	2,68058e-06	0,000794182	5,176e-07	0,998858	1,5322e-10	0,000172626
4	8,34581	6,16111e-07	0,000455058	3,90853e-08	0,999431	8,8145e-11	5,65619e-05
5	8,42092	2,19542e-07	0,000238217	4,60937e-09	0,999713	7,2079e-11	2,41486e-05
6	8,43435	9,02598e-08	0,000120666	6,3004e-10	0,999856	6,8729e-11	1,16445e-05
7	8,40669	3,75637e-08	5,95535e-05	8,7425e-11	0,999928	7,2483e-11	6,05546e-06
8	8,33567	1,44376e-08	2,8265e-05	1,1254e-11	0,999965	8,4777e-11	3,35985e-06
9	8,20981	4,58906e-09	1,2337e-05	1,2163e-12	0,999984	1,1275e-10	1,94985e-06
10	8,00039	9,7767e-10	4,21442e-06	9,3613e-14	0,999994	1,8192e-10	1,07462e-06

Il·lustració 59: B1 (RadFrac) – Profiles| Properties. Especificació de PH i XTRUE. (Font: Elaboració pròpia.)

Es consideren els resultats per l'etapa 1. La composició real de l'amoníac (NH_3) i el ió amoni (NH_4^+) sumen 0.0400164 a l'etapa 1. Aquest valor es relativament diferent de la composició aparent de l'amoníac (NH_3) mostrats a la fulla de Composicions: 0.0398379. Aquesta petita diferència són causades per la química de la solució.

En general, el nombre total de mols no es conserva en la química de la solució. En aquesta simulació, la quarta reacció d'equilibri consumeix 3 mols de reactius i genera 2 mols de productes:

$$CO_2 + 2H_2O \leftrightarrow H_3O^+ + HCO_3^-$$

El nombre total de mols amb base a components aparents, serà diferent del nombre total de mols amb base a components reals. Així, la fracció molar d'amoníac (X_{NH_3}) en base aparent, no és exactament la mateixa que $X_{NH_3} + X_{NH_4^+}$ en base real.

La composició en fase líquida del component aparent NH_3 a l'etapa 1 és $X_{NH_3} = 0.0248897$.

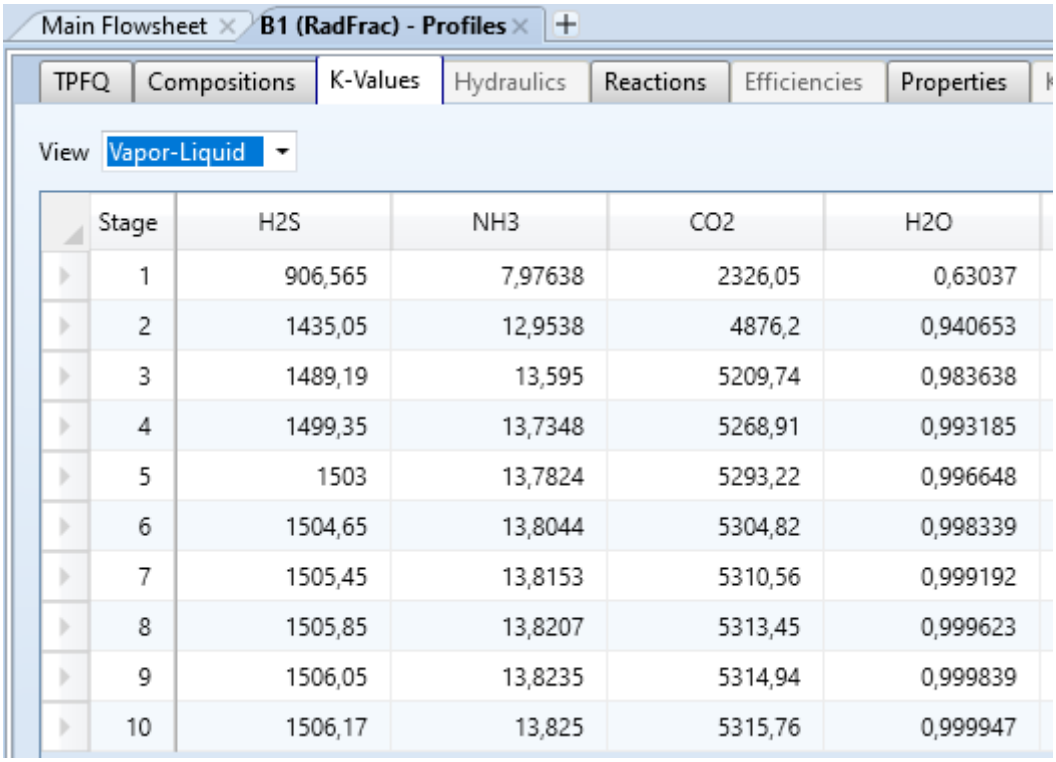
2. Seleccionar la fulla o el formulari de **Compositions**.
3. En el camp de **View**, seleccionar **Vapor**.

La composició en fase vapor del component aparent NH_3 a l'etapa 1 és $Y_{NH_3} = 0.167351$.

Amb aquests dos valors, es pot calcular el valor K per NH_3 en l'etapa 1:

$$K = \frac{Y_{NH_3}}{X_{NH_3}} = 7.97638$$

4. Seleccionar la fulla de **K-values**.



Stage	H2S	NH3	CO2	H2O
1	906,565	7,97638	2326,05	0,63037
2	1435,05	12,9538	4876,2	0,940653
3	1489,19	13,595	5209,74	0,983638
4	1499,35	13,7348	5268,91	0,993185
5	1503	13,7824	5293,22	0,996648
6	1504,65	13,8044	5304,82	0,998339
7	1505,45	13,8153	5310,56	0,999192
8	1505,85	13,8207	5313,45	0,999623
9	1506,05	13,8235	5314,94	0,999839
10	1506,17	13,825	5315,76	0,999947

Il·lustració 60: B1 (RadFrac) - Profiles | K-values Stage 1. Font: Elaboració pròpia. Agost 2020.

El valor K per NH_3 a l'etapa 1 és de 7,97638. Aquests resultats demostren que quan s'utilitzen components aparents, Aspen Plus també mostra els valors K calculats per, en aquest cas, el **RadFrac** (o qualsevol altre flash) en una base de components aparents.

CONVERTIR LA BASE DE COMPONENT APARENT A BASE DE COMPONENT REAL

Escollir entre l'aproximació de components aparents i l'aproximació de components reals és un tema de preferència personal. Per a totes les simulacions, els resultats d'aquestes haurien de ser equivalents. Per demostrar això, es convertirà la simulació amb aproximació de components aparents a tenir la simulació amb l'aproximació de components reals.

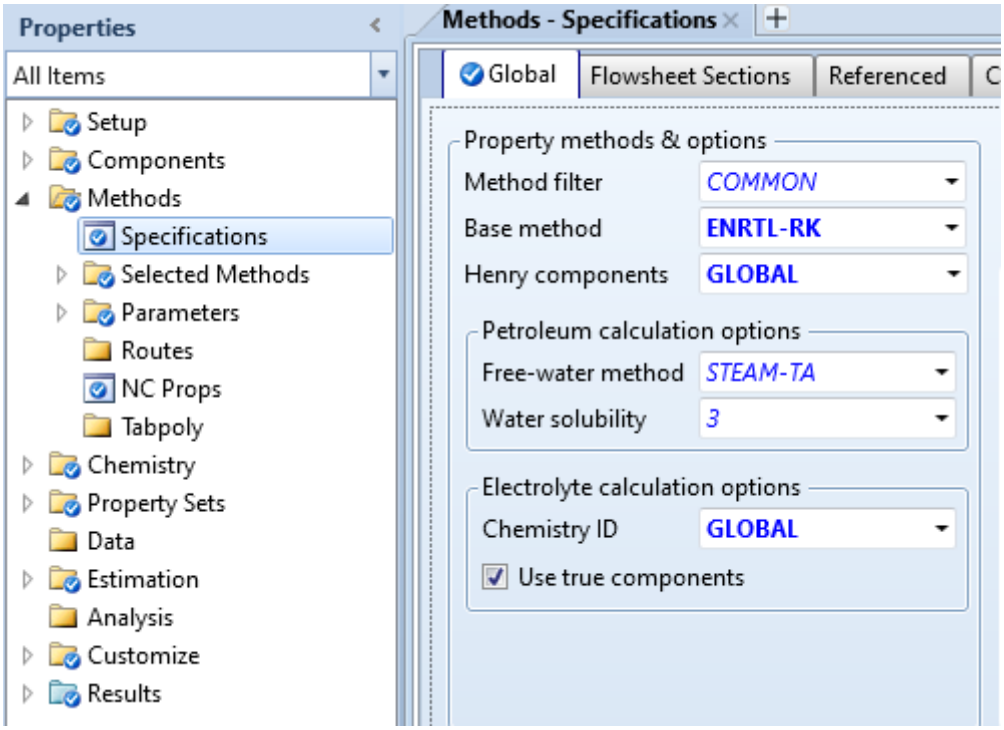
Per fer tal tasca, s'ha de dir a Aspen Plus que faci servir l'aproximació de components reals i s'han d'adaptar les especificacions de disseny al bloc **RadFrac** (5 ppm del component aparent NH3 en massa a la part inferior de la columna, també anomenada "**bottoms**").

ESPECIFICANT QUE ASPEN PLUS HA DE FER SERVIR L'APROXIMACIÓ DE COMPONENTS REALS

1. Clicar l'ambient de **Properties** en el **Navigation Pane**.

2. Des del **Navigation Pane**, clicar **Methods | Specifications**.

3. En el formulari de **Methods – Specifications | Global**, seleccionar la casella de selecció que es troba al costat de **Use true components.**



Il·lustració 61: Properties. Methods - Specifications | Global. Use true components. (Font: Elaboració pròpia.)

Pel bloc de **RadFrac**, s'ha introduït l'especificació desitjada de 5 ppm (en massa) del component aparent NH_3 a la part inferior o **bottoms**. No obstant, l'especificació és incorrecte per a l'aproximació de components reals, ja que una porció significant del component aparent NH_3 està present en forma de NH_4^+.

REVISANT LES ESPECIFICACIONS DE DISSENY DEL RadFrac PER APLICAR A LA COMPOSICIÓ APARENT DEL NH_3

1. Clicar l'ambient de **Simulation** en el **Navigation Pane**. Clicar a la pestanya de **Main Flowsheet** en el workspace.

2. En el diagrama de flux o flowsheet, clicar al botó dret del ratolí en el bloc de **RadFrac** i seleccionar **Input**.

3. Des del **Navigation Pane**, a sota de la carpeta de **Specifications**, seleccionar la carpeta de **Design Specifications**.

4. Seleccionar **Design Spec ID 1**, i clicar **Edit**.

Es modifica l'especificació de disseny 1 per especificar una propietat de flux per a la fracció màssica del component aparent de NH_3.

5. En el camp de **Type**, clicar i seleccionar **Property value**.

6. En el camp de **Target**, introduir **5E-6**.

7. En el camp de **Property set**, clicar el botó dret del ratolí i seleccionar **New**.

8. En el quadre de diàleg de **New Item**, entrar **XNH3APP** com a nom del nou conjunt de propietats.

9. Clicar **OK**.

Il·lustració 62: Nova especificació de disseny aplicada a la composició aparent de NH_3. (Font: Elaboració pròpia.)

10. Clicar a la pestanya de **Feed/Product Streams**.

11. A la columna de **Available streams**, seleccionar **BOTTOMS** i clicar per moure aquest flux a la columna de **Selected stream**.

12. Des del **Navigation Pane**, clicar **Property Sets | XNH3APP**.

Apareix el formulari de **Property Sets – XNH3APP | Properties**. Aspen Plus utilitza aquest conjunt de propietats per a calcular la fracció màssica aparent del component NH_3 en la fase líquida.

13. Clicar **Search**.

14. En el quadre de diàleg de **Search Physical Properties**, introduir **apparent component mass fraction** a la casella de selecció sota el **1 Type physical property** que es vol trobar.

15. Clicar **Search**.

El sistema cerca propietats físiques vàlides i les mostra al camp de **2 Click one or more properties** que l'usuari vulgui i a continuació, clicar **Add**.

16. Seleccionar **Apparent component mass fraction** (àlies **WXAPP**) des dels resultats de la cerca.

17. Clicar **Add**.

El sistema afegeix la propietat física seleccionada i la mostra a sota del camp de **Click OK to accept the Selection**.

18. Clicar **OK**.

19. Seleccionar el formulari de **Qualifiers**,
20. En el camp de **Phase**, clicar i seleccionar **Liquid**.
21. En el camp de **Component**, clicar i seleccionar **NH_3**.
22. Clicar per continuar.

Apareix el quadre de diàleg de **Required Properties Input Complete**.

EXECUTANT LA SIMULACIÓ AMB L'APROXIMACIÓ DE COMPONENTS REALS

23. Clicar **Run Flowsheet / Analysis**, i després clicar **OK**.

Quan els càlculs acaben, apareix el missatge de ***Results Available*** al Status bar a la part inferior de la finestra principal.

PER VEURE ELS RESULTATS SELECCIONATS DE LA SIMULACIÓ DE COMPONENTS REALS

1. Clicar a la pestanya de **Main Flowsheet** en el workspace. En el diagrama de flux o flowsheet, seleccionar el bloc de RadFrac.
2. Clicar al botó dret del ratolí a dins del bloc de **RadFrac** i seleccionar **Results**.
3. Des del **Navigation Pane**, seleccionar el formulari de **Profiles**.
4. Seleccionar la fulla de **Compositions** per veure els resultats.
5. En el camp de **View**, clicar i seleccionar **Liquid**.

Aquesta fulla mostra la fracció molar en fase líquida de tots els components, incloent els ions. L'etapa 1 mostra les següents composicions:

$$X_{\mathrm{NH_3}} = 0.0267113$$

$$X_{NH_4^+} = 0.0132501$$

6. En el camp de **View**, clicar i seleccionar **Vapor**.

Anotar que tots els ions tenen una fracció molar igual a zero a la fase de vapor. L'etapa 1 mostra la següent composició:

$$Y_{\mathrm{NH_3}} = 0.213057$$

A partir d'aquests valors, es pot calcular el valor K de l'etapa 1 del component NH3.

$$K = \frac{Y_{\mathrm{NH_3}}}{X_{\mathrm{NH_3}}} = 7.796$$

7. Seleccionar el formulari de **K-values**.

En l'etapa 1, el valor K notificat per NH_3 coincideix amb el que s'ha acabat de calcular. Això demostra que quan s'utilitzen components reals, els valors K calculats pel **RadFrac** (o qualsevol flaix) també s'informen sobre una base real.

S'ha de tenir en compte que el valor K calculat a la simulació aparent no és igual al valor K calculat a la simulació real a causa de la dissociació parcial de l'amoníac.

La il·lustració 63 compara una sèrie de valors calculats a la simulació de components reals i la simulació de components aparents.

Parameter	Apparent	True
Condenser duty (btu/hr)	-1.46E6	-1.46E6
Condenser Temperature (F)	190	190
Bottom Stage Temperature (F)	213	213
Steam Feed Rate (lb/hr)	1787	1787
Molar Reflux Ratio	29.5	29.4

Il·lustració 63: Comparació de valors amb les dues aproximacions. (Font: AspenTech (2013).)

Tots els valors són virtualment idèntics. Això demostra que els resultats calculats amb l'aproximació de components reals i de components aparents són equivalents, encara que no siguin numèricament iguals.

SORTINT DE ASPEN PLUS

1. Des de la cinta, seleccionar **File | Exit**.

Apareix el quadre de diàleg de **Aspen Plus**.

2. Clicar **No**.

O clicar **Yes** si es vol guardar o salvar la simulació, i introduir un ID d'execució quan es sigui requerit. Aquesta simulació (utilitzant l'aproximació de component aparent) es guarda com a fitxer de seguretat amb el nom corresponent a la biblioteca d'exemples d'Aspen Plus.

5.4.3.3. EXEMPLE 1 DE REACCIÓ

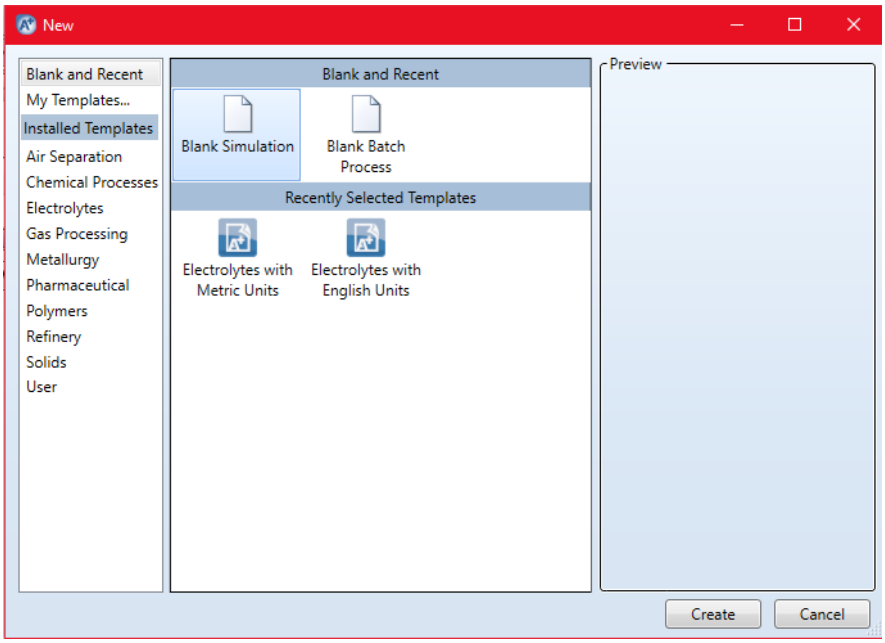
En un reactor químic entra una alimentació de 100 kmol/h a una temperatura de 300 K i una pressió de 470 psia amb les següents fraccions molars: 0,2368 CO, 0,7172 H_2, 0,0001 H_2O, 0,0098 CH_4 i 0,0361 CO_2. Determinar la composició del corrent de sortida utilitzant el model termodinàmic de NRTL. Utilitzar un reactor del tipus **RGibbs**. Les reaccions que participen són les següents:

$$CO + 3H_2 \leftrightarrow CH_4 + H_2O$$

$$CO_2 + 4H_2 \leftrightarrow CH_4 + 2H_2O$$

$$CO + H_2O \leftrightarrow CO_2 + H_2$$

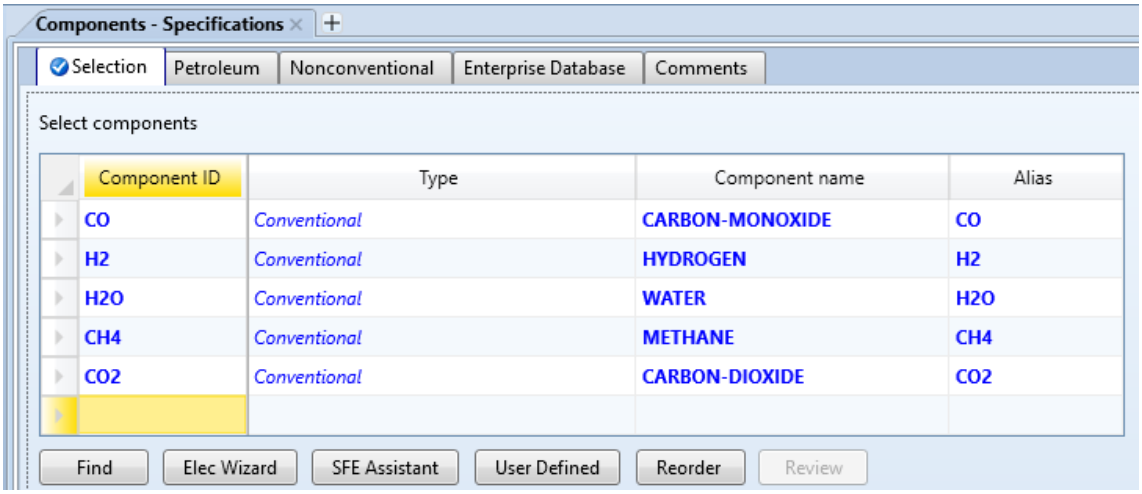
Primerament, s'inicia Aspen Plus. Es selecciona **Blank Simulation** i a continuació es clica **OK**.



Il·lustració 64: Seleccionant la plantilla adient. Exemple 1 de reacció. (Font: Elaboració propia.)

Apareix automàticament la carpeta de **Components**. S'introdueixen els components de l'exemple: **CO, H_2, H_2O, CH_4, CO_2**.

Es pot observar que quan s'entra directament a la carpeta de **Components**, el programa situa a l'usuari a l'entorn de **Properties**.



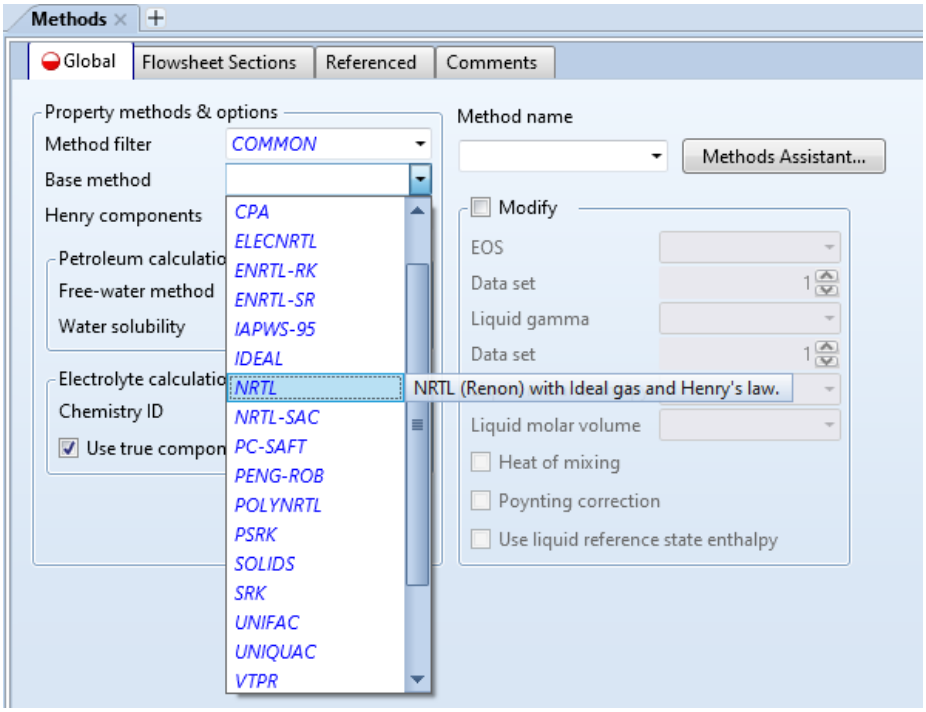
Il·lustració 65: Definint els components que participen en la reacció. (Font: Elaboració propia.)

NOTA: Respecte a les reaccions de l'exemple, es poden definir o no. En el cas que es defineixin, s'ha d'anar en aquest mateix entorn de **Properties**, clicar la carpeta **Chemistry**, clicar **New**, i es van afegint en el formulari manualment. Totes són reaccions d'equilibri. Quan es posen els reactius, el coeficient estequiomètric sempre serà negatiu, ja que els reactius es converteixen

en productes. Els productes sempre tindran valors de coeficient estequiomètrics positius, excepte en el cas que es mencioni el contrari, que en aquest exemple no és així.

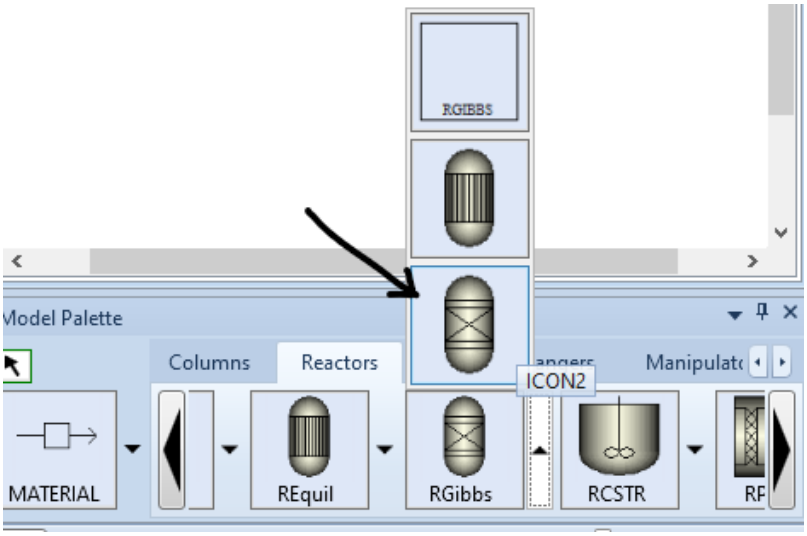
En aquest exemple, no s'han de definir les reaccions, ja que el reactor **RGibbs**, determina la composició del flux de sortida o dels productes de la reacció mitjançant la minimització de l'energia lliure de Gibbs.

Tot seguit es va a la carpeta de **Methods** per especificar el model termodinàmic d'aquest exemple, que és el model **NRTL**.



Il·lustració 66: Especificar el mètode adient. Exemple 1 de reacció. (Font: Elaboració propia).

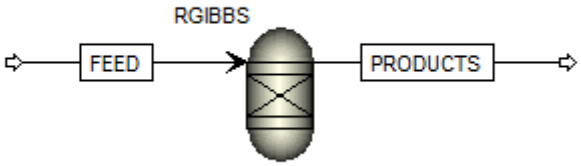
Un cop fet això, es va a l'entorn **Simulation**. En aquest entorn, des del **Model Palette** es busca l'apartat de **Reactors** i es selecciona un reactor **RGibbs** del tipus que es mostra a la il·lustració 67 **(ICON2)**.



Il·lustració 67: Afegint el reactor RGibbs. (Font: Elaboració pròpia.)

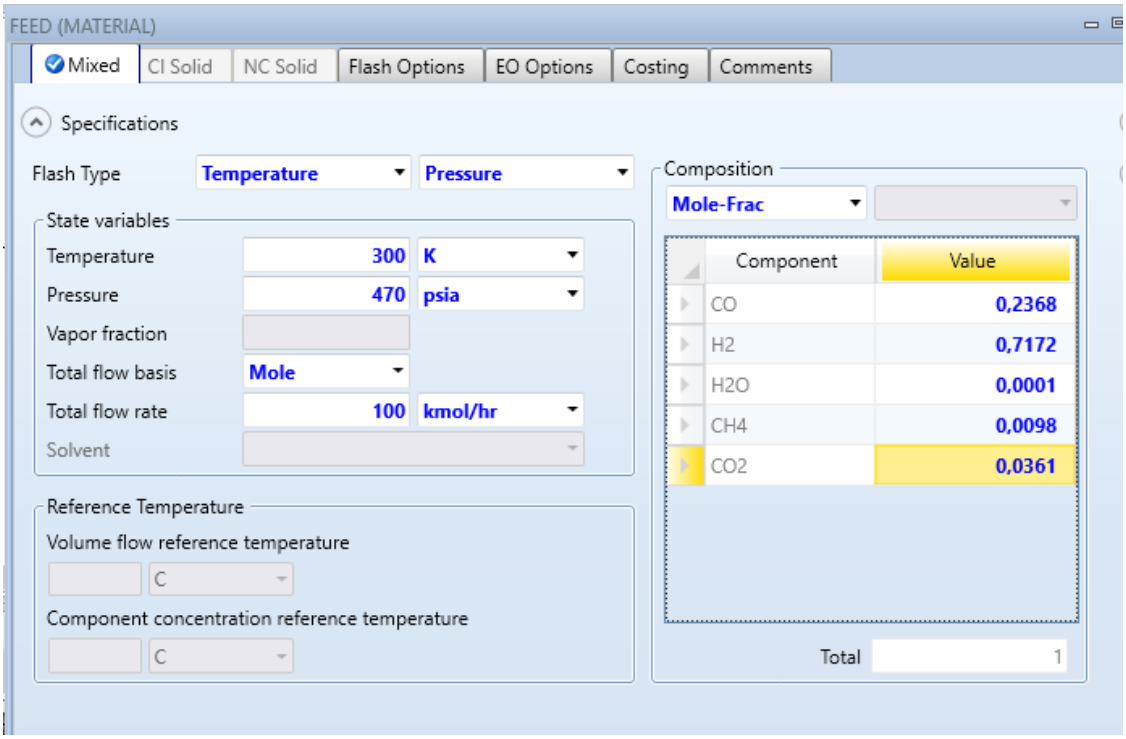
Al reactor l'anomenem **RGIBBS**. Es clica **OK**. Després es clica a **MATERIAL** en el **Model Palette** i s'afegeix un cabal d'entrada i de sortida del **RGIBBS**. El d'entrada s'anomena **FEED** i el de sortida **PRODUCTS**.

En la il·lustració 68 es mostra com queda el diagrama de flux d'aquest exemple.



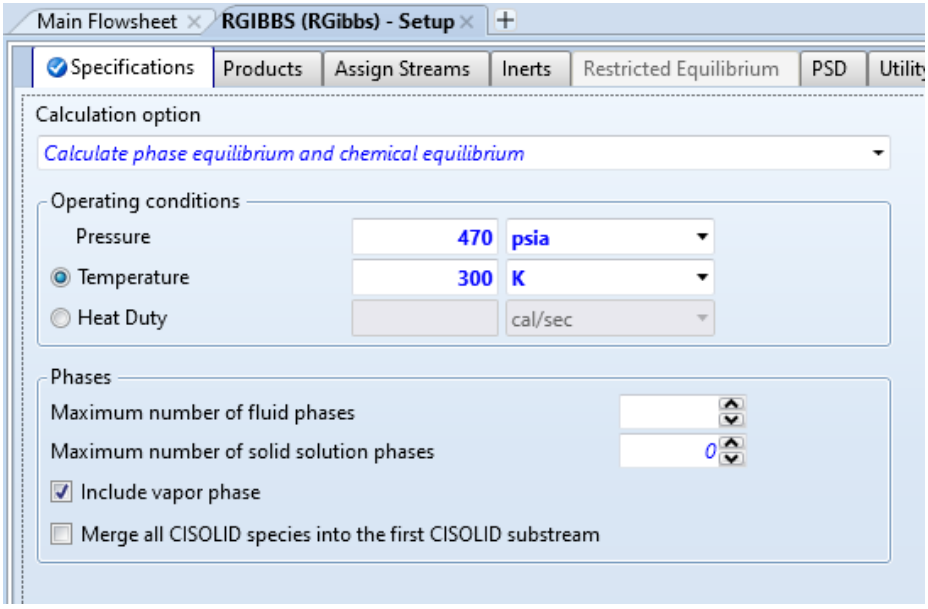
Il·lustració 68: Diagrama de flux del procés. Exemple 1 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.)

A continuació, especifiquem les dades del cabal **FEED** amb les dades de temperatura, pressió i les fraccions molars dels components.

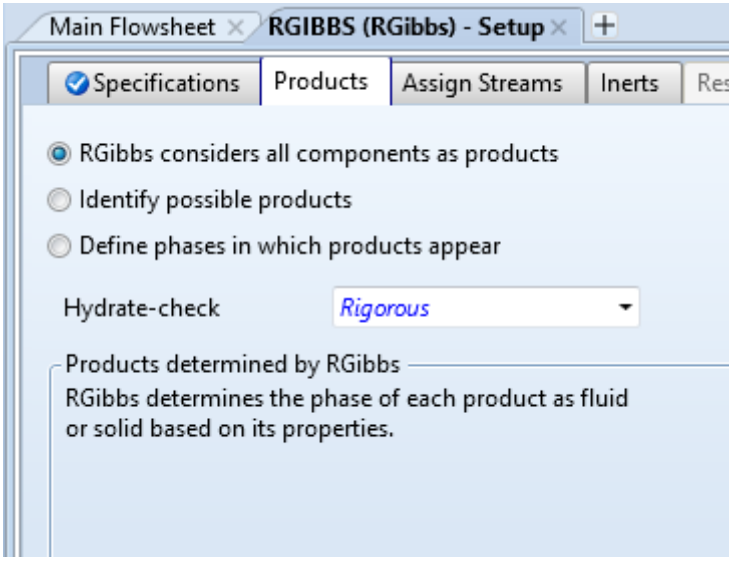


Il·lustració 69: Especificant el cabal FEED (MATERIAL). (Font: Elaboració pròpia.)

Ara s'especifiquen les dades del reactor **RGIBBS**.

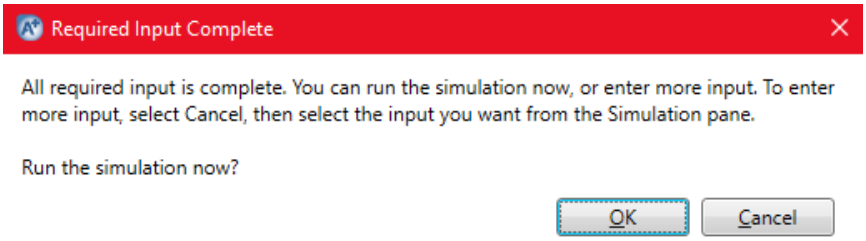


Il·lustració 70: Especificant el reactor RGIBBS. (Font: Elaboració propia.)



Il·lustració 71: Especificar a RGIBBS - Products que tots els components es consideren productes. (Font: Elaboració pròpia.)

En acabat, ja es tenen totes les dades per determinar la composició del cabal **PRODUCTS**. Es clica que es troba a la part superior del programa i apareix el quadre de diàleg de **Required Input Complete**. Clicar **OK** ja que totes les dades requerides estan introduïdes.



Il·lustració 72: Quadre de diàleg. Totes les dades estan introduïdes. (Font: Elaboració pròpia.)

Per examinar els resultats de la simulació, des del **Navigation Pane**, es clica la carpeta de **Results Summary – Streams** i es mostren totes les dades dels cabals de **FEED** i **PRODUCTS**.

Com que a l'enunciat es demanava determinar la composició del corrent de sortida, és a dir, del cabal de **Products**, en aquest formulari ja es mostren els resultats d'aquest.

Results Summary - Streams (All)

Material | Heat | Load | Work | Vol.% Curves | Wt. % Curves | Petroleum | Polymers | Solids

	Units	FEED	PRODUCTS	
MIXED Substream				
Phase		Vapor Phase	Vapor Phase	
Temperature	C	26,85	26,85	
Pressure	bar	32,4054	32,4054	
Molar Vapor Fraction		1	1	
Molar Liquid Fraction		0	0	
Molar Solid Fraction		0	0	
Mass Vapor Fraction		1	1	
Mass Liquid Fraction		0	0	
Mass Solid Fraction		0	0	
Molar Enthalpy	cal/mol	-9811,69	-41154,1	
Mass Enthalpy	cal/gm	-998,501	-2190,38	
Molar Entropy	cal/mol-K	-0,472337	-19,0318	
Mass Entropy	cal/gm-K	-0,048068	-1,01294	
Molar Density	mol/cc	0,00129918	0,00129918	
Mass Density	gm/cc	0,0127663	0,0244097	
Enthalpy Flow	cal/sec	-272547	-597879	
Average MW		9,82643	18,7886	
Mole Flows	**kmol/hr**	**100**	**52,3001**	
Mole Fractions				
Mass Flows	**kg/hr**	**982,643**	**982,643**	
Mass Fractions				
Volume Flow	l/min	1282,86	670,938	

Il·lustració 73: Resultats. Dades del cabal de Products determinades. (Font: Elaboració pròpia.)

En acabat, per guardar la simulació, es clica la comanda per guardar l'arxiu, que es troba a la part superior a l'esquerra i es guarda amb el nom que l'usuari prefereixi.

5.4.3.4. EXEMPLE 2 DE REACCIÓ

En un reactor continu de tanc agitat (**CSTR**) entren 100 lbmol/h d'anilina i 400 lbmol/h d'hidrogen a una temperatura de 100 F i una pressió de 650 psia. S'ha de tenir en compte la reacció irreversible i exotèrmica que s'indica a continuació i la resta de característiques tèrmiques.

$$C_6H_7N + 3H_2 \rightarrow C_6H_{13}N \qquad \Delta H = -41{,}09\ \frac{kJ}{mol}$$

Dades del reactor:

Treballa a una temperatura de 250 F i una pressió de 595 psia. Reactor de vas cilíndric vertical amb un volum de 1200 ft^3 i el nivell del líquid arriba fins a un 80%.

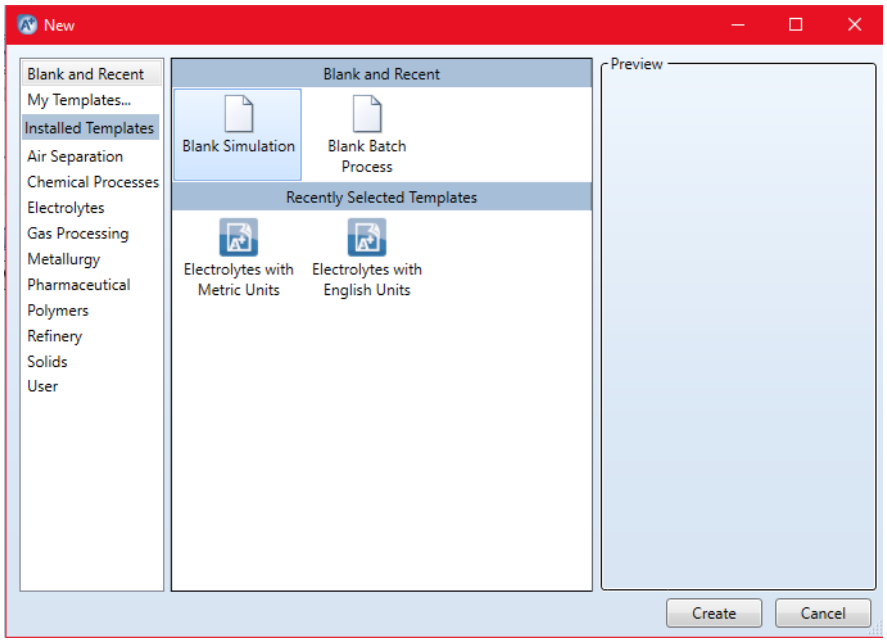
Equació de la cinètica o velocitat de formació del CHA:

$$CHA = k \cdot V_R \cdot C_A \cdot C_H$$

$$k = 1750 \cdot e^{\frac{-11.111}{RT}} \qquad E_A = \left[\frac{cal}{mol}\right]$$

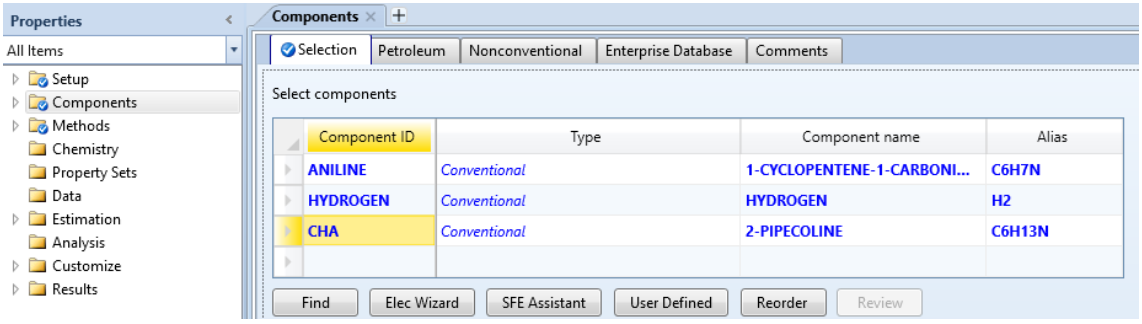
$$V_R = Volum\ reactor \quad C_A = Concentració\ anilina \quad C_H = Concenctració\ hidrogen$$

Com en l'apartat 5.4.3.3. EXEMPLE 1 DE REACCIÓ, primerament s'obre el programa ASPEN PLUS V11. A continuació apareix la finestra per a seleccionar la plantilla més adient per a la simulació que es vol fer. En aquest cas, es seleccionarà el **Blank Simulation** i a continuació es clica **Create**.



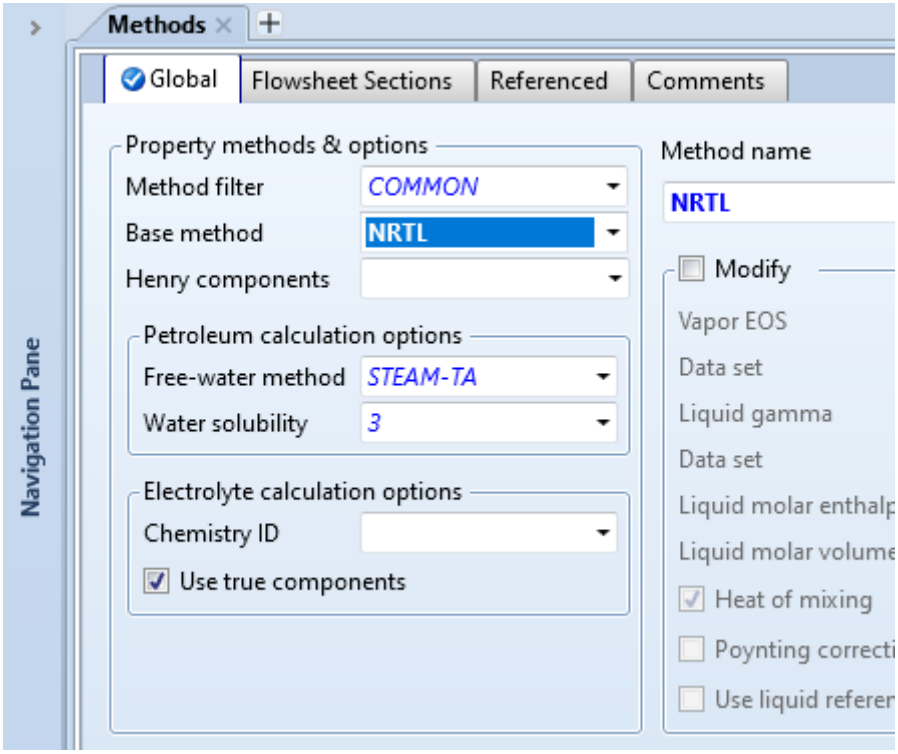
Il·lustració 74: Seleccionant la plantilla. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració propia.).

A continuació, apareix la carpeta de definició dels components. S'especifiquen tant els reactius (Anilina i Hidrogen) com el producte que s'obté (Ciclohexilamina). Tal com es mostra a la Il·lustració 75.



Il·lustració 75: Especificació dels components. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.)

Fet això, es va a **Methods** i s'especifica el model termodinàmic base que es vol utilitzar, que és el **NRTL**.



Il·lustració 76: Model termodinàmic NRTL. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.)

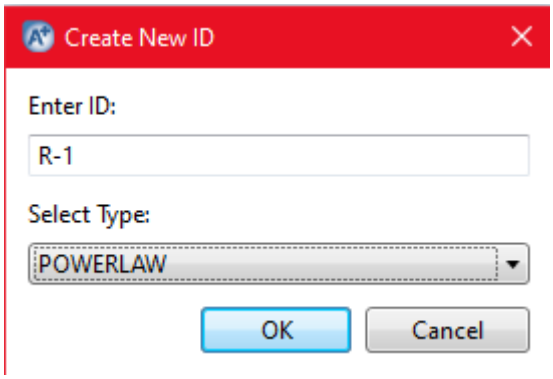
Tot seguit, des del **Navigation Pane**, es va a l'entorn de simulació i es clica la carpeta de **Reactions**, on s'especifica l'estequiometria i la cinètica de la reacció que es mostra a l'enunciat.

1. Clicar a **New**.

Apareix el quadre de diàleg **Create New ID**. S'introdueix el ID que es prefereixi. En aquest cas se li posarà **R-1**.

2. A **Select Type**, es selecciona **POWERLAW**.

3. Clicar **OK**.

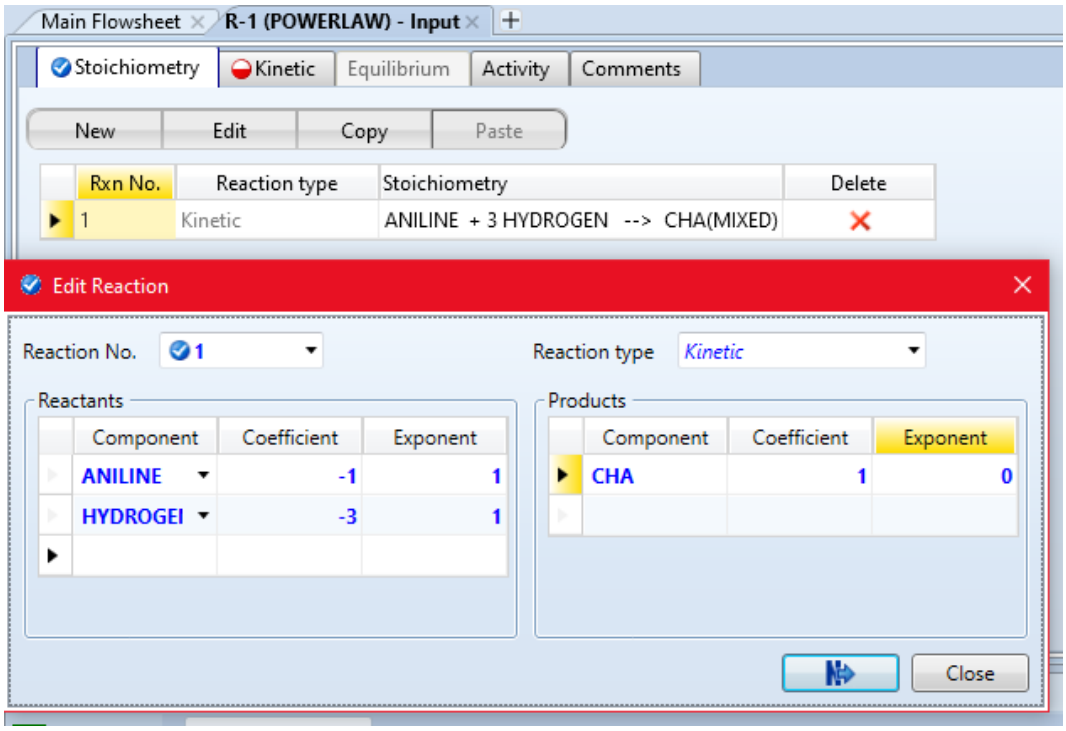


Il·lustració 77: Reactions - Create New ID. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.)

4. Clicar **New** un altra vegada.

S'especifica la següent reacció juntament amb l'estequiometria de cada component.

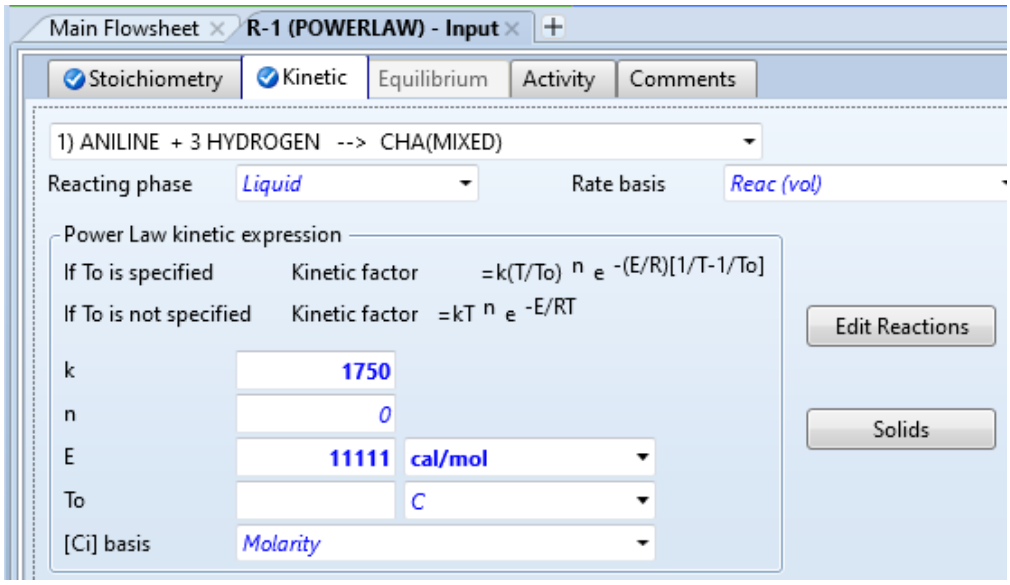
$$C_6H_7N + 3H_2 \rightarrow C_6H_{13}N$$



Il·lustració 78: Especificació reacció, estequiometria i exponents. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.)

5. Anar a la pestanya de **Kinetic**.

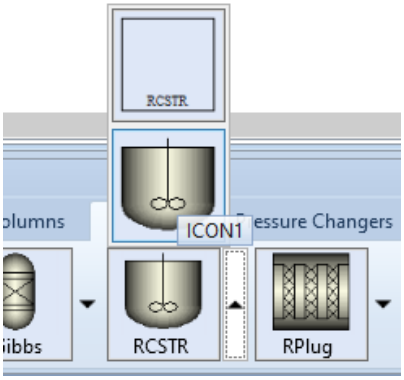
S'introdueixen les dades de la cinètica de la reacció.



Il·lustració 79: Especificació dades de cinètica de la reacció. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.)

Havent fet això, es va a **Main Flowsheet** a l'entorn de simulació i es munta el diagrama de flux d'aquest procés.

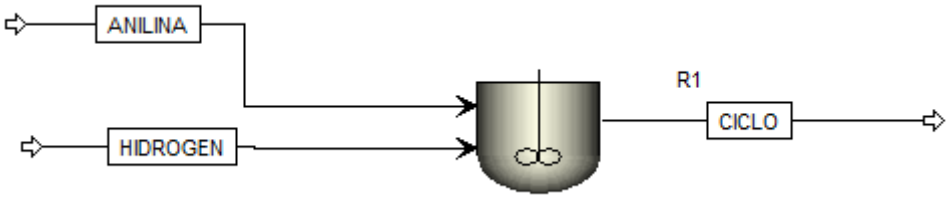
1. Des del **Model Palette** es selecciona el reactor **RCSTR** (Reactor Continu de Tanc Agitat) (Il·lustració 80).



Il·lustració 80: Selecció del reactor. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.)

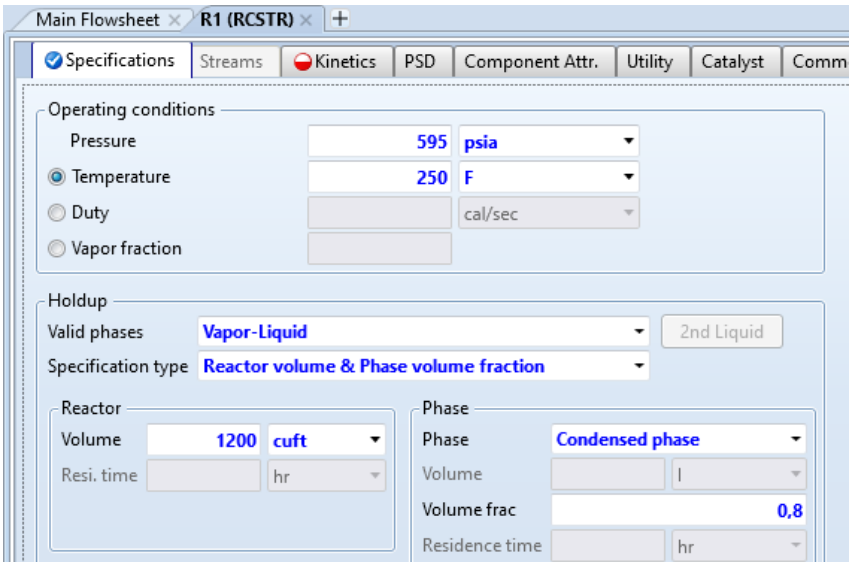
2. Es clica a **MATERIAL** en el **Model Palette** i s'afegeixen dos fluxos d'entrada (**ANILINA** i **HIDROGEN**) i un flux de sortida (**CICLO**).

El diagrama de flux definitiu d'aquest exemple es mostra a la il·lustració 81.



Il·lustració 81: Diagrama de flux del procés. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.)

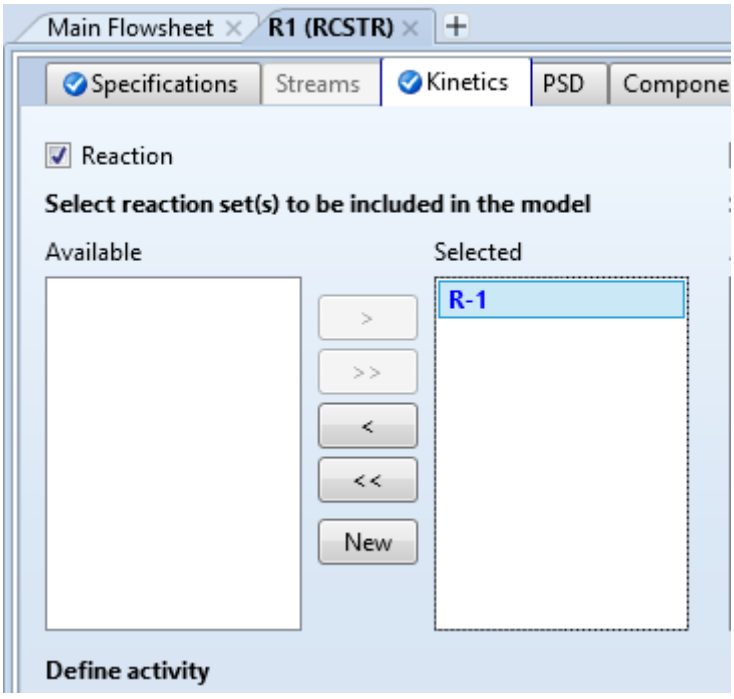
Tot seguit, es fa doble clic al sobre del reactor en el diagrama de flux i s'especifiquen les dades d'aquest.



Il·lustració 82: Especificacions del reactor RSCTR. (Font: Elaboració pròpia.)

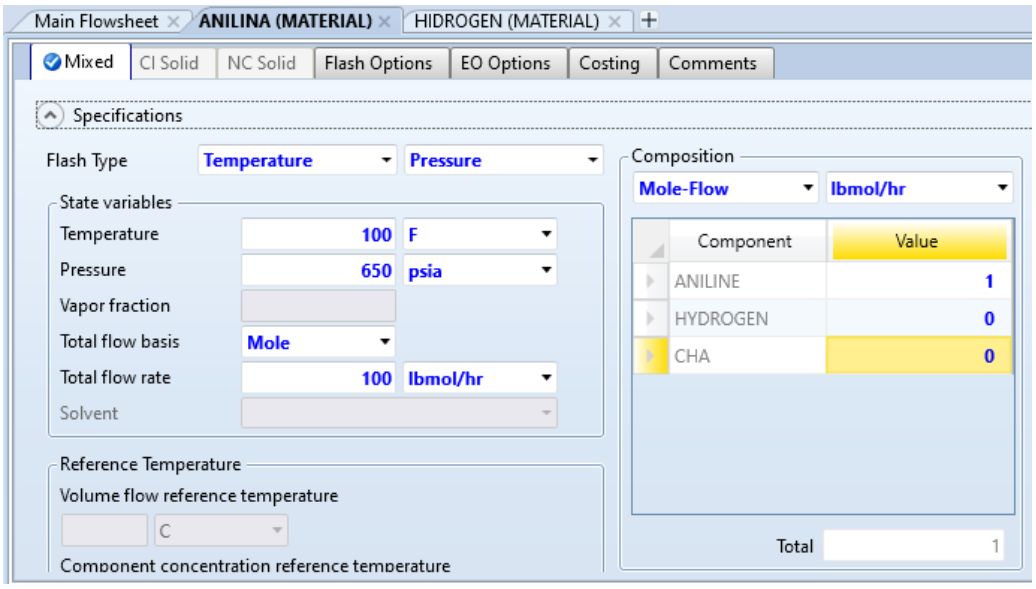
Com es pot observar, l'enunciat d'aquest exemple explica que el reactor treballa a 250 F, i a una pressió de 595 psia. El volum del reactor és de 1200 cubft (cubicfeet) i s'aconsegueix un nivell de líquid del 80%.

També, per acabar de completar totes les dades del reactor que es requereixen, es va a la pestanya de **Kinetics** i es mou la reacció **R-1** de la columna de **Available** a la columna de **Selected**.

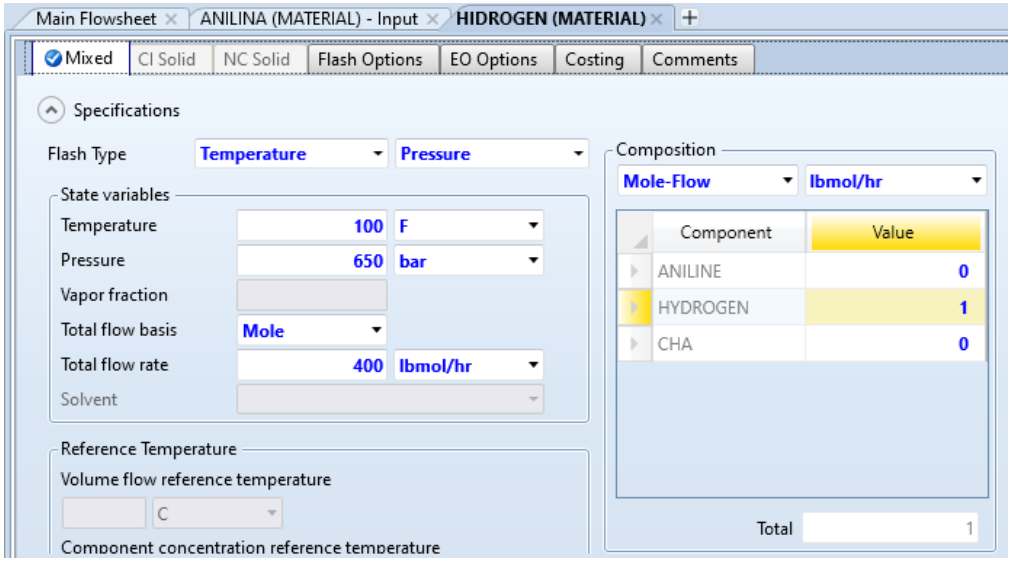


Il·lustració 83: Especificacions del reactor RCSTR R1. Font: Elaboració pròpia.)

Ara que ja s'ha especificat el reactor del diagrama de flux, s'acaben d'especificar els cabals d'entrada amb la informació que es té de l'enunciat.



Il·lustració 84: Ecpecificació del flux d'ANILINA. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.)



Il·lustració 85: Especificació del flux d'HIDROGEN. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.)

En acabar, es clica l'icone i apareix el quadre de diàleg de **Required Input Complete**.

Com que ja es tenen totes les dades necessàries per executar la simulació, es clica **OK** i es fa l'execució. Un cop feta, es va a la carpeta de **Results Summary** i es clica a **Streams**.

	Units	ANILINA	CICLO	HIDROGEN
Description				
From			R1	
To		R1		R1
Stream Class		CONVEN	CONVEN	CONVEN
Maximum Relative Error				
Cost Flow	$/hr			
− **MIXED Substream**				
Phase		Liquid Phase		Vapor Phase
Temperature	C	37,7778	121,111	37,7778
Pressure	bar	44,8159	41,0238	650
Molar Vapor Fraction		0	0,751899	1
Molar Liquid Fraction		1	0,248101	0
Molar Solid Fraction		0	0	0
Mass Vapor Fraction		0	0,0942347	1
Mass Liquid Fraction		1	0,905765	0
Mass Solid Fraction		0	0	0
Molar Enthalpy	cal/mol	28596,6	3403,51	87,9415
Mass Enthalpy	cal/gm	307,066	130,763	43,6244
Molar Entropy	cal/mol-K	107,444	0,00906944	-12,5473
Mass Entropy	cal/gm-K	1,15372	0,000348449	-6,22423
Molar Density	mol/cc	0,011766	0,00159071	0,0251435
Mass Density	gm/cc	1,09574	0,041403	0,0506864
Enthalpy Flow	cal/sec	360311	166723	4432,18
Average MW		93,1283	26,028	2,01588
+ **Mole Flows**	**kmol/hr**	**45,3592**	**176,348**	**181,437**

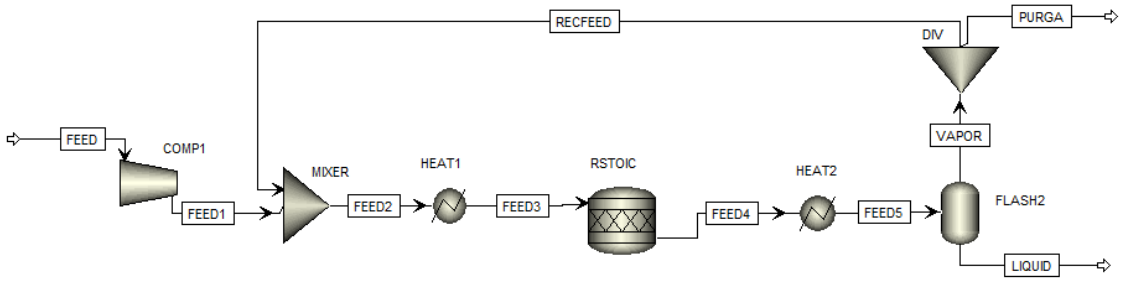
Il·lustració 86: Results Summary - All Streams. Exemple 2 de reacció. (Font: Elaboració pròpia.)

Finalment, un cop es tenen els resultats i s'observa que són correctes, es guarda la simulació anant a l'icone de la part superior a l'esquerra del programa o sinó també es pot anar directe a **File** i després clicar **Save**, es nomena com l'usuari prefereixi i es clica **Save**.

6. CAS PRÀCTIC: PRODUCCIÓ D'AMONÍAC

En aquest apartat es fa una breu mostra de simulació basada en la producció d'amoníac.

A continuació, es mostra el diagrama de flux de la planta química que es simula per a la producció d'aquest component que actualment és un dels productes de major tonatge en la indústria química:



Il·lustració 87: Diagrama de flux cas pràctic: Producció d'amoníac. (Font: Elaboració pròpia.)

Aquest diagrama de flux està constituït pels següents equips:

- Compressor (**COMP1**).
- Dos canviadors de calor (**HEAT1**, **HEAT2**).
- Un reactor estequiomètric (**RSTOIC**).
- Un separador Flash (**FLASH2**).
- Un divisor (**DIV**).
- Un mixer o mesclador (**MIXER**).

Per a la producció d'amoníac, NH_3, s'ha d'esdevenir la reacció exotèrmica següent:

$$N_2 + 3H_2 \leftrightarrow NH_3 \qquad \Delta H°_{298} = -92{,}4\ kJ$$

Per poder mantenir en l'equilibri una millor concentració d'amoníac, com diu el principi de Le Chatelier, s'opera amb baixes temperatures i un augment de la pressió. En el cas que s'operés amb baixes temperatures es produiria una disminució de la velocitat de la reacció i el procés no seria rentable.

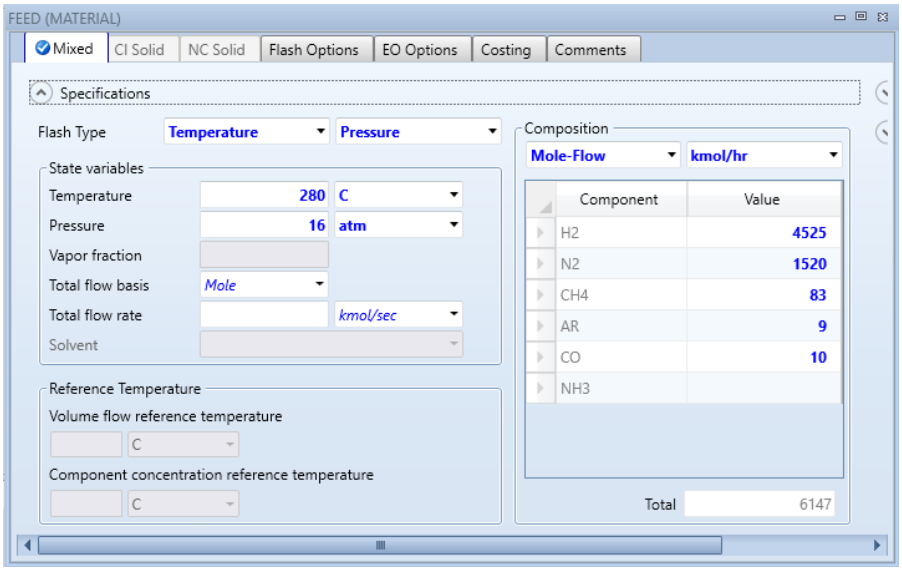
Per tal d'evitar aquest succés i la reacció es produeixi de forma ràpida, és convenient treballar a unes temperatures d'entre 400 i 550 ^{o}C. Respecte a la pressió passa el mateix; a baixes pressions hi ha una disminució de la conversió, per la qual cosa també s'ha de treballar a pressions elevades d'entre 100 – 1.000 atm. En aquest cas, es treballarà a una pressió de280 atm.

També s'utilitza un catalitzador de ferro (Fe_3O_4) amb òxids promotors que augmenten l'àrea superficial activa, milloren l'activitat i la resistència a l'enverinament (CO i S).

Cal tenir en compte que, com que la conversió no és del 100%, això pot comportar que els reactius (N_2 i H_2) es vagin acumulant i la seva concentració vagi augmentant, per la qual cosa la pressió parcial dels dos reactius disminuiria i per conseqüent, també disminuiria la conversió. Per tal d'evitar-ho, s'afegirà una recirculació pels gasos no convertits i també una purga, per mantenir en el reactor una concentració constant de gasos inerts.

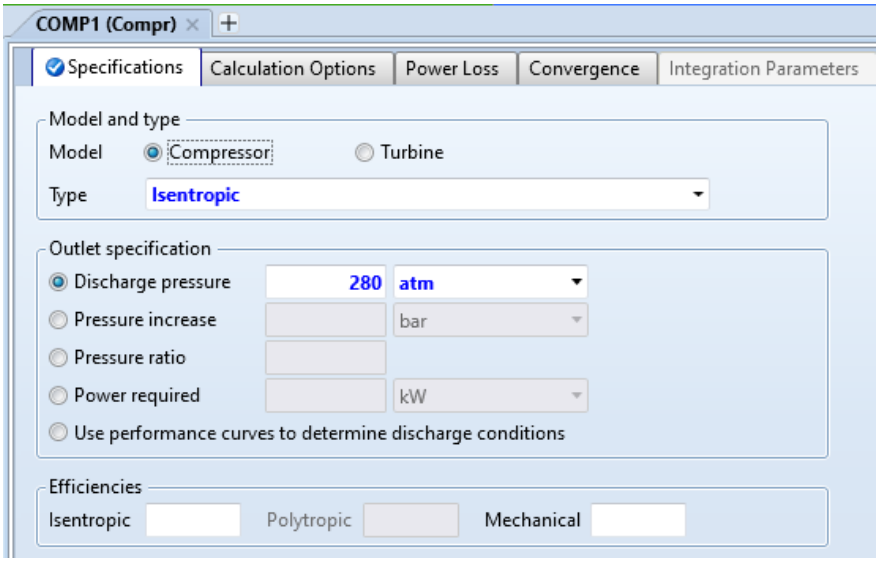
6.1. ESPECIFICACIONS DEL CAS PRÀCTIC I RESULTATS

ESPECIFICACIONS DEL CORRENT D'ALIMENTAICÓ FEED

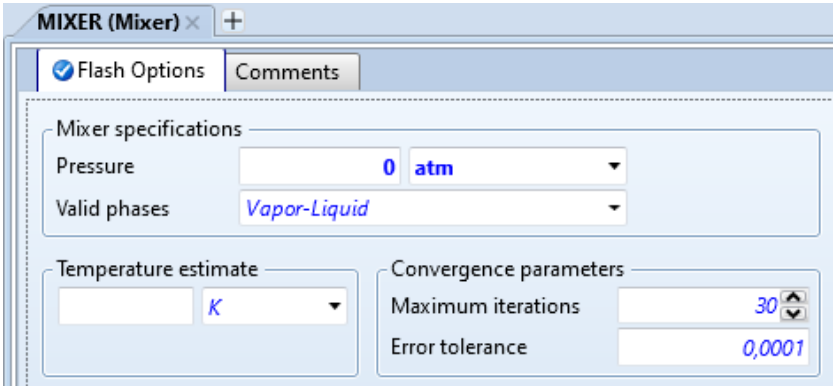


*Il·lustració 88: Especificacions corrent d'alimentació **FEED**. (Font: Elaboració pròpia.)*

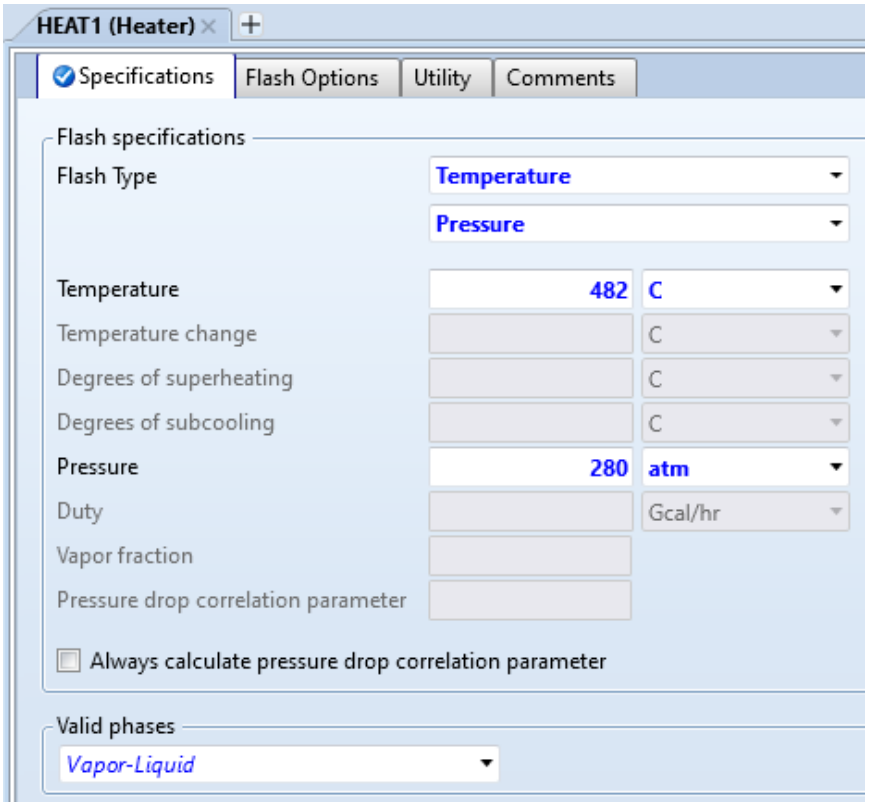
ESPECIFICACIONS DELS EQUIPS



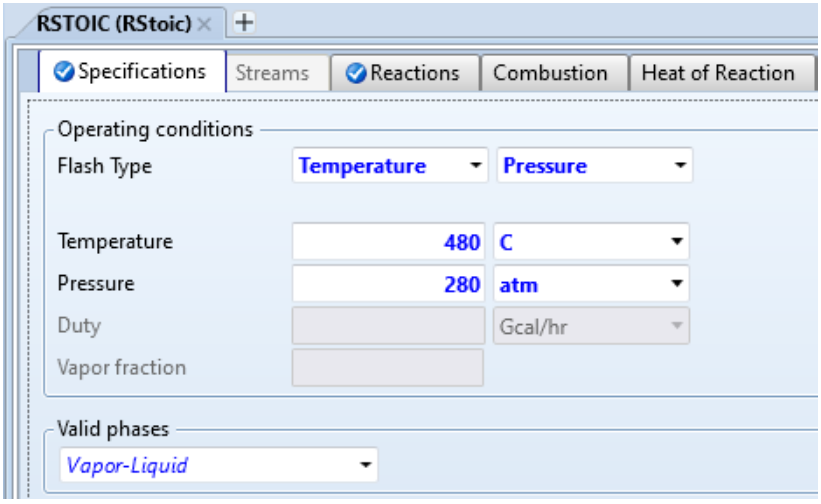
*Il·lustració 89: Especificacions compressor **COMP1**. (Font: Elaboració pròpia.)*



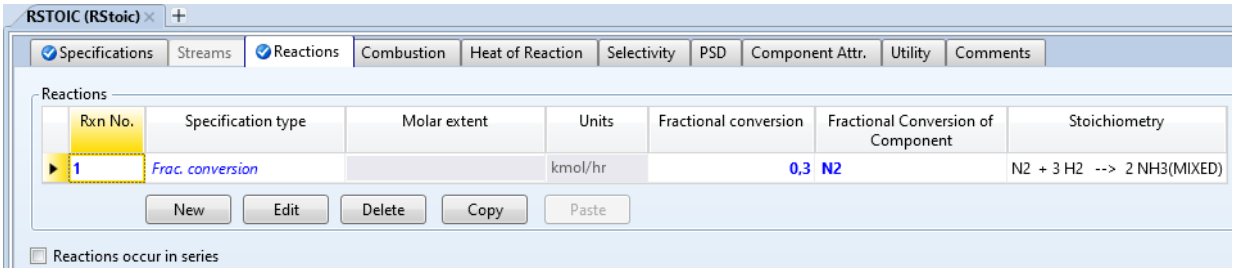
*Il·lustració 90: Especificacions mesclador **MIXER**. (Font: Elaboració pròpia.)*



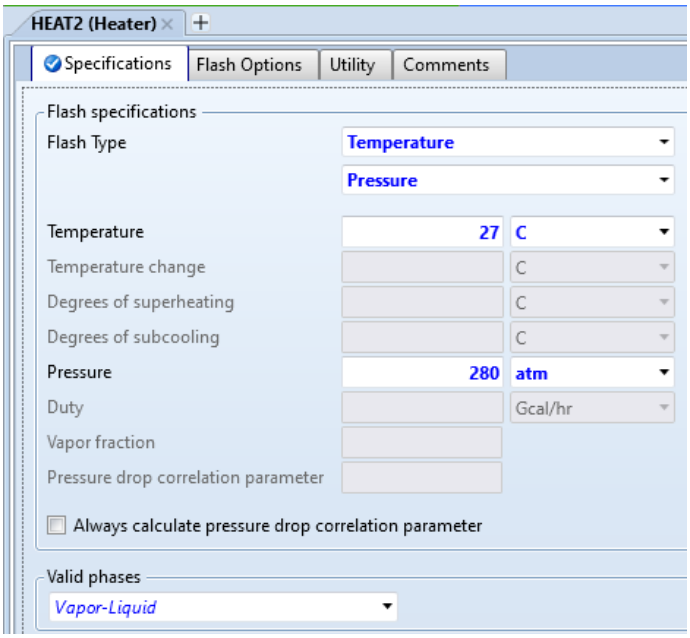
*Il·lustració 91: Especificacions canviador de calor **HEAT1**. (Font: Elaboració pròpia.)*



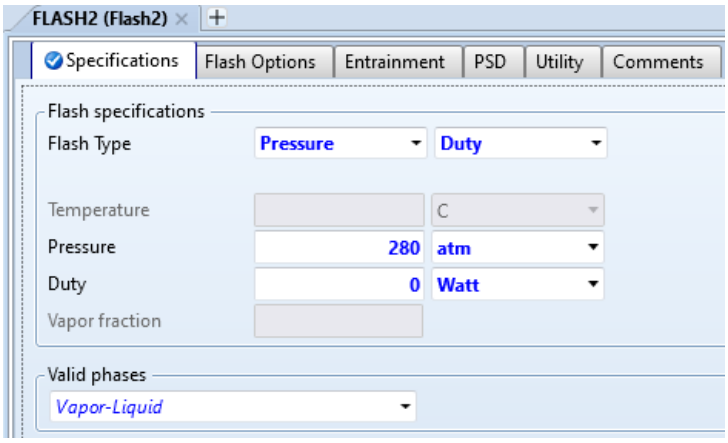
*Il·lustració 92: Especificacions reactor estequiomètric **RSTOIC**. (Font: Elaboració pròpia.)*



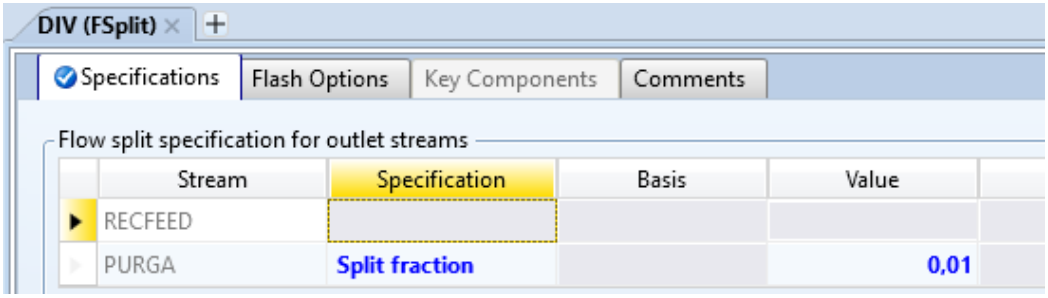
*Il·lustració 93: Especificacions reacció reactor **RSTOIC**. (Font: Elaboració pròpia.)*



*Il·lustració 94: Especificacions canviador de calor **HEAT2**. (Font: Elaboració pròpia.)*



*Il·lustració 95: Especificacions separador **FLASH2**. (Font: Elaboració pròpia.)*



*Il·lustració 96: Especificacions divisor **DIV**. (Font: Elaboració pròpia.)*

RESULTATS PLANTA QUÍMICA DE PRODUCCIÓ D'AMONÍAC

Results Summary - Streams (All)

Material | Heat | Load | Work | Vol.% Curves | Wt. % Curves | Petroleum | Polymers | Solids

	Units	FC	FCR	FCR1	FCR2	FEED	LIQUID	VAPOR
Phase		Vapor Phase	Vapor Phase	Vapor Phase		Vapor Phase	Liquid Phase	Vapor Phase
Temperature	C	1168,25	482	480	27	280	26,9998	26,9998
Pressure	bar	283,71	283,71	283,71	283,71	16,212	283,71	283,71
Molar Vapor Fraction		1	1	1	0,912299	1	0	1
Molar Liquid Fraction		0	0	0	0,0877009	0	1	0
Molar Solid Fraction		0	0	0	0	0	0	0
Mass Vapor Fraction		1	1	1	0,857186	1	0	1
Mass Liquid Fraction		0	0	0	0,142814	0	1	0
Mass Solid Fraction		0	0	0	0	0	0	0
Molar Enthalpy	kcal/mol	8,2714	3,03372	1,2725	-2,75973	1,49732	-15,2386	-1,56008
Mass Enthalpy	kcal/kg	947,288	347,439	124,112	-269,167	171,482	-912,72	-161,945
Molar Entropy	cal/mol-K	1,29827	-3,61848	-6,62981	-15,1677	-0,142596	-43,6433	-12,4303
Mass Entropy	cal/gm-K	0,148685	-0,414409	-0,646633	-1,47937	-0,0163309	-2,61402	-1,29033
Molar Density	kmol/cum	2,26993	4,19855	4,23202	11,1895	0,350737	32,1893	10,5292
Mass Density	kg/cum	19,8203	36,6603	43,3901	114,724	3,06251	537,428	101,432
Enthalpy Flow	Gcal/hr	50,8443	18,6483	6,66155	-14,4472	9,20403	-6,99646	-7,45076
Average MW		8,73166	8,73166	10,2528	10,2528	8,73166	16,6959	9,63343
− Mole Flows	**kmol/hr**	**6147**	**6147**	**5235**	**5235**	**6147**	**459,126**	**4775,87**
H2	kmol/hr	4525	4525	3157	3157	4525	12,366	3144,63
N2	kmol/hr	1520	1520	1064	1064	1520	2,513	1061,49
CH4	kmol/hr	83	83	83	83	83	1,57674	81,4233
AR	kmol/hr	9	9	9	9	9	0,234775	8,76522
CO	kmol/hr	10	10	10	10	10	0,0529665	9,94703
NH3	kmol/hr	0	0	912	912	0	442,382	469,618

Il·lustració 97: Resultats planta química sense recirculació, purga i divisor. (Font: Elaboració pròpia.).

Results Summary - Streams (All)

Material | Heat | Load | Work | Vol.% Curves | Wt. % Curves | Petroleum | Polymers | Solids

	U...	FEED	FEED1	FEED2	FEED3	FEED4	FEED5	LIQUID	PURGA	RECFEED	VAPOR
Mass Vapor Fraction		1	1	1	1	1	0,769389	0	1	1,00002	1
Mass Liquid Fraction		0	0	0	0	0	0,230611	1	0	0	0
Mass Solid Fraction		0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
Molar Enthalpy	...	1,49732	8,2714	-0,267268	0,721047	-1,52198	-6,33405	-15,3044	-4,25267	-4,25268	-4,25267
Mass Enthalpy	...	171,482	947,288	-22,9203	61,8354	-110,737	-460,855	-909,367	-326,421	-326,429	-326,421
Molar Entropy	...	-0,142596	1,29827	-6,20409	-4,77941	-8,62522	-19,0031	-43,1244	-13,4063	-13,406	-13,4063
Mass Entropy	...	-0,0163309	0,148685	-0,532049	-0,409871	-0,627557	-1,38263	-2,56239	-1,02902	-1,02902	-1,02902
Molar Density	...	0,350737	2,26993	4,9462	4,19217	4,23598	12,4326	31,8138	10,8929	10,8931	10,8929
Mass Density	...	3,06251	19,8203	57,6765	48,8839	58,2199	170,876	535,419	141,915	141,915	141,915
Enthalpy Flow	...	9,20403	50,8443	-5,16277	13,9283	-24,9433	-103,807	-47,2369	-0,565701	-56,0071	-56,5701
Average MW		8,73166	8,73166	11,6608	11,6608	13,7441	13,7441	16,8298	13,0282	13,0279	13,0282
− Mole Flows	**...**	**6147**	**6147**	**19316,8**	**19316,8**	**16388,7**	**16388,7**	**3086,48**	**133,022**	**13169,8**	**13302,2**
H2	...	4525	4525	10879,3	10879,3	6487,2	6487,2	69,106	64,181	6354,34	6418,1
N2	...	1520	1520	4880,15	4880,15	3416,1	3416,1	22,0297	33,9407	3360,15	3394,07
CH4	...	83	83	1506,13	1506,13	1506,13	1506,13	68,712	14,3742	1423,13	1437,42
AR	...	9	9	125,909	125,909	125,909	125,909	7,82697	1,18082	116,909	118,082
CO	...	10	10	421,34	421,34	421,34	421,34	5,86337	4,15476	411,34	415,476
NH3	...	0	0	1503,95	1503,95	4432,04	4432,04	2912,95	15,1909	1503,95	1519,09

Il·lustració 98: Resultats planta química amb recirculació, purga i divisor. (Font: Elaboració pròpia.)

Es pot comprovar que, en la Il·lustració 97, simulant la planta química sense recirculació, purga ni divisor, la producció d'amoníac (corrent "LIQUID") és més aviat baixa, 442 kmol/hora. No obstant, quan se li afegeixen aquests components mencionats anteriorment, la recirculació de matèries primeres implica un increment molt important en la producció d'amoníac. Així, per una purga de només el 1% del total de vapor produït, la producció d'amoníac augmenta fins assolir els 2923 kmol/h.

7. CONCLUSIONS

Es pot concloure que s'ha fet una extensa investigació en el funcionament del software ASPEN PLUS, tant amb el tema dels ambients de simulació, el contingut de cada ambient, els mètodes d'avaluació de propietats que es poden fer servir per a treballar amb una simulació determinada, entre d'altres, com amb el tema de treballar amb electròlits i amb reaccions químiques.

S'ha realitzat una sèrie de simulacions de sistemes simples per adquirir el coneixement necessari per afrontar problemes de major complexitat.

S'ha modelitzat i simulat una planta de producció d'amoníac emprant els coneixements adquirits en els casos simples.

El software presenta una elevada dificultat quan s'han de barrejar en el mateix procés reaccions amb substàncies iòniques i no iòniques, requerint un aprofundiment major en aquestes casuístiques per afrontar processos de major complexitat.

8. REFERÈNCIES

[1] ASPEN TECHNOLOGY, 2013. Getting Started Modeling Processes with Electrolytes. Aspen Plus. [en línia], pp. 60. Disponible a: http://www.aspentech.com.

[2] Chemenguy, 2020. Aspen Plus vs. HYSYS? What's the Difference? [en línia]. [Consulta: 9 març 2020]. Disponible a: https://www.chemicalengineeringguy.com/the-blog/process-simulation/aspen-plus-vs-hysys-whats-the-difference/.

[3] EcuRed, 2020. Simuladores de procesos. [en línia]. [Consulta: 2 març 2020]. Disponible a: https://www.ecured.cu/Simuladores_de_Procesos.

[4] GARCÍA J., RODRIGUEZ A., ABARCA P., G.D., 2020. Definiciones de Simulación. [en línia]. Disponible a: https://iupsmsimulacion.wordpress.com/definiciones-de-simulacion/.

[5] Inc. Aspen Technology., 2020. Simulación de procesos.

[6] Inc. Aspen Technology., 2004. Electrolytes Process Modeling Using Aspen Plus.

[7] Inc. Aspen Technology., 2013. Aspen Plus Getting Started Modeling Processes with Electrolytes.

[8] Inc. Aspen Technology., 2000. Aspen Plus User Guide. ISSN 00161152. DOI 10.1007/BF00447266.

[9] Lozano, F.E., 2015. *Tutorial de Aspen Plus. Introducción y modelos simples de operaciones unitarias.* S.l.: s.n. ISBN 5856420187.

[10] Martínez Rojas, Y., 2013. *Tipos y modelos de simulación.* [en línia]. S.l.: s.n. Disponible a: https://prezi.com/_1vawverb61m/tipos-y-modelos-de-simulacion/.

[11] MILLA, A., 2016. *Simulación de procesos. Tipos de software de simulación* [en línia]. 2016. S.l.: s.n. Disponible a: https://astridmll.wordpress.com/2016/09/07/tipos-de-software-de-simulacion/.

[12] Inc. Aspen Technology. 2000. Aspen Plus ®. Getting Started Modeling Processes with Electrolytes.

[13] Rodríguez, M., 2003. 4. Introducción a Aspen Plus.

[14] Rosalenaa, 2020. Software de Simulación para Ingeniería Química. [en línia]. [Consulta: 2 març 2020]. Disponible a: https://rosaelenaa.wordpress.com/software-de-simulacion-para-ingenieria-quimica/.

[15] Simulación, I., 2020. Definiciones de Simulación. [en línia]. [Consulta: 27 febrer 2020]. Disponible a: https://iupsmsimulacion.wordpress.com/definiciones-de-simulacion/.

[16] Simulador Chemcad - Búsqueda de Google. [en línia], [2020]. [Consulta: 6 març 2020]. Disponible a: https://images.app.goo.gl/oM77fxLo5LBgvZrv9

[17] Simulador Pro II – Búsqueda de Google. [en línia], [2020]. [Consulta: 15 març 2020]. Disponible a: https://www.google.com/search?q=simulador+pro2&sxsrf=ALeKk00R6dznate8d0SYpf34XWibJhmwGg:1602014823596&source=lnms&tbm=isch&sa=X&ved=2ahUKEwj7tfCj4qDsAhUdDmMBHdOuDbkQ_AUoA3oECAsQBQ&biw=1242&bih=568#imgrc=W5Tn5lTuQuKrfM

[18] Steemit, 2018. Simulación de Procesos Industriales mediante el uso del simulador PRO/II [Guía de aprendizaje, nivel básico 1/2]. [en línia]. [Consulta: 5 març 2020]. Disponible a: https://steemit.com/stem-espanol/@ennyta/simulacion-de-procesos-industriales-mediante-el-uso-del-simulador-pro-ii-guia-de-aprendizaje-nivel-basico-1-2.

[19] Anònim, 2015. Reacciones Químicas y simuladores: Simuladores de Procesos Químicos. [en línia]. [Consulta: 27 febrer 2020]. Disponible a: http://reaccionesquimicasysimuladoresacevedo.blogspot.com/2015/09/simuladores-de-procesos-quimicos.html.

[20] Wikipedia, 2019. *Simulación de procesos* [en línia]. [Consulta: 5 abril 2020]. S.l.: s.n. Disponible a: https://es.wikipedia.org/wiki/Simulación_de_procesos.

[21] Wikipedia, 2019. Simulador DWSIM. [en línia]. [Consulta: 9 març 2020]. Disponible a: https://en.wikipedia.org/wiki/DWSIM.

[22] Wikipedia, 2019. Simulación de procesos. [en línia]. [Consulta: 27 febrer 2020]. Disponible a: https://es.wikipedia.org/wiki/Simulación_de_procesos.