4. Introducción a Aspen Plus

Desarrollado en el MIT por L. Evans. Actualmente posiblemente sea el más extendido en la industria. (Compró a HYSIM/HYSIS en 2003)

QUÉ ES ASPEN PLUS

• Aspen Plus es un simulador estacionario.

•Simulador secuencial modular (en las últimas versiones permite la estrategia orientada a ecuaciones)

• Orientado a la industria de proceso: Química y petroquímica.

•Modela y simula cualquier tipo de proceso para el cual hay un flujo continuo de materiales y energía de una unidad de proceso a otra.



¿DE QUÉ SE COMPONE ASPEN PLUS?

El paquete de simulación se puede dividir en *tres bloques* fundamentales:

► Simulation Engine.

Es el núcleo del programa, escrito en Fortran es el que soporta todo el modelo desde la lectura del archivo de entrada que describe el proceso hasta su resolución por algoritmos numéricos. Tiene diferentes módulos aparte del de simulación: optimización, estimación, regresión, ...

► Graphic User Interface.

Es el entorno gráfico de modelado.

Propiedades físicas.

Bancos de datos con modelos termodinámicos y propiedades de un gran un número de componentes: orgánicos, inorgánicos, electrolitos y sólidos.



Graphic User Interface:

• Es la *interface gráfica de usuario* para la creación de modelos.

• Posee una *sistema experto* que va guiando en la construcción de un modelo.

• Posee *ayuda con hiperlinks*, de forma que se accede de forma rápida a los diferentes menús.

• Menú de *iconos* que se identifican con los modelos de su librería.

• Posee un *modo de dibujo* en el cual se puede 'adornar' la descripción del modelo (lo que se haga aquí no afecta al modelo)



Physical Properties:

Son los métodos y modelos empleados para el cálculo denominados Option Sets.

Las propiedades más empleadas son: Coeficientes de fugacidad, Entalpías, Densidades, Entropías, Energías libres.

Seleccionas directamente a los métodos que quieres emplear: NRTL Wilson Redlich-Kwong UNIFAC UNIQUAC ...

Se deben seleccionar *según el tipo de componentes y condiciones* de operación de trabajo:

Mezclas ideales, Hidrocarburos y gases de hidrocarburos, Mezclas no polares Mezclas altamente no ideales, Asociación y dimerización en fase vapor, Mezclas polares, Aminas, Petróleo.



Simulation Engine:

Librería de modelos:

Aspen divide los modelos en las siguientes categorías: .Alimentaciones y productos .Mezcladores y Separadores .Flashes y Cambiadores .Destilación Shortcut .Separaciones rigurosas (destilación, extracción, absorción) .Reactores .Bombas y compresores .Tuberías .Sólidos .Cristalización Para cada modelo escogido existen diferentes iconos.

Algoritmos de resolución:

De *simulación*: Broyden, Wegstein, Newton, Secante, directo De *optimización*: SQP (Programación cuadrática) De *regresión*: Britt-Luecke, Deming (WLS)



¿QUÉ ES UN MODELO DE SIMULACIÓN DE PROCESOS EN ASPEN PLUS?

Un Proceso consiste en componentes que se mezclan, separan, calientan, enfrian y convierten en unidades de operacion.

Un proceso se modela en Aspen siguiendo los siguientes pasos:

- 0. Definir la *topología* de la flowsheet del proceso: Definiendo las unidades de operación del proceso Definiendo las corrientes de proceso que fluyen entre las diferentes unidades Seleccionando modelos de unidades de operación de la librería de Aspen.
- 1. Especificar los *componentes químicos* en el proceso.
- 2. Elegir los *modelos termodinámicos* del banco de Aspen para representar las propiedades físicas.
- 3. Especificar los *caudales de flujo y las condiciones termodinámicas* de las corrientes alimentación al proceso.
- 4. Especificar las *condiciones de operación* para las unidades de la Flowsheet.
- 5. (Opcional) Imponer condiciones de diseño de especificación: variar una expresión (varaiable o relación entre ellas) para alcanzar una especificación.
- 6. (Opcional) Realizar estudios de sensibilidad o 'case studies'.
- 7. (Opcional) Introducir sentencias Fortran para adecuar el modelo de la librería al modelo necesitado.



Otras tareas que permite ASPEN PLUS:

.Estimación y regresión de propiedades físicas.

.Reconciliación de datos de planta con los modelos de simulación

.Calculos de costes de la planta

.Optimizaciones del proceso

.Generación de resultados de forma gráfica y en tablas

.Exportar los resultados a hojas de calculo.

.Operaciones con electrolitos

.Operaciones con sólidos



Usos de Aspen Plus.

El Aspen se ha empleado para modelar procesos en industrias: químicas y petroquímicas, refino de petroleo, procesamiento de gas y aceites, fueles sintéticos, generación de energía, metales y minerales, industrias del papel y la pulpa, alimentación, farmaceúticas y biotecnología.

Los modelos se emplean en todas las fases de la vida de una planta. *-En el desarrollo del proceso*: Para estudiar los costes de un proceso conceptual, cambios tecnológicos,...

-En el diseño del proceso: Estudiar tendencias, estudiar la flexibilidad de la planta para diferentes alimentaciones,...

-En la planta existente: Mejorar operaciones de la planta, reducir consumos de energía, establecer cambios en condiciones de operación para diferentes especificaciones,...Nuevos cambios en la planta (revamping)





DIO(IIMA

VENTANAS PRINCIPALES Menús



DATA BROWSER I

4 Aspen Plus - Simulation 1		
File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help		
	> > 🕨 🔳 🔣 🕍 🔀 R⁄ 🖉	
Data Browser		
	→ >>	
Setup Components Properties Streams Blocks Reactions Convergence Flowsheeting Options Model Analysis Tools Configuration Results Summary		
A		
Mixers/Splitters Separators Heat Exchangers Columns Rea	ctors Pressure Changers Manipulators	Solids User Models
		A A A A A A A A A A A A A A A A A A A
Material		
STREAMS Mixer FSplit SSplit		/
For Help, press F1	F:\a Folders\Aspen Plus 11.1	Flowsheet Not Complete 💋



DATA BROWSER y II

Setup

Streams

Blocks



Especificaciones generales y selección de sistema de unidades.

- Components Especificación de los componentes que participan.
- Properties Selección de los métodos y modelos de propiedades físicas
 - Definición de las corrientes de proceso (normalmente se hace en la zona de trabajo)
 - Definición de los bloques de proceso (se puede hacer en la zona de trabajo)
- Reactions Definición de las reacciones, si hay en el proceso.
- **CONVERGENCE** Selección de opciones de convergencia en los métodos numéricos.
- Flowsheeting Options Opciones de la hoja de flujo (diseño de especificaciones,...)
- Model Analysis Tools Herramientas de análisis: sensibilidad, optimización, ajuste de parámetros,...
- EO Configuration Modo orientado a ecuaciones

Results Summary Resumen de resultados: convergencia, corrientes, balances de masa/energía...



indica que ese apartado está completo.

El 🗧 indica que ese apartado NO está completo.



OPCIONES DEL SIMULADOR





SELECCIÓN DE SISTEMA DE UNIDADES

Selección de unidades entre las preconstruidas, el usuario puede definir su propio sistema de unidades.



OPCIONES DEL INFORME

K Aspen Plus - aire_prob1.bkp - [Setup Report Options - Data Browser]						
	☐ File Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help □ ☞ ■					
	General Flowsheet Block Specifications General Flowsheet Block Specifications					
Qué variables son	Simulation Options					
interesantes para	Stream Class Items to be included in stream report					
mostrar en los	Units-Sets Flow basis Fraction basis Stream format					
resultados.	Custom Units V Mole Mole TFF: FULL					
	Components Mass Mass Standard (80 column)					
	Properties Std.liq.volume Std.liq.volume Std.liq.volume Std.liq.volume C Wide (132 column)					
	Streams Veilbloc					
	Contres Contres Contres Contres Contres Contres Contres Contres Contres Contres					
	Flowsheeting Options Stream Names Batch Operation Supplementary Stream					
	Results Summary					
	Print the standard stream report. Supplementary reports may still be generated					
	i nink the standard stream report. Supplementary reports may still be generated.					
	Input Complete					
	Mixers/Splitters Separators Heat Exchangers Columns Reactors Pressure Changers Manipulators Solids					
	Material V					



SELECCIÓN DE COMPONENTES





SELECCIÓN DE PROPIEDADES FÍSICAS



Selección de un método entre los disponibles.



interacción

REACCIONES





SELECCIÓN DE MODELOS I



Diferentes modelos de columnas



SELECCIÓN DE MODELOS II





SELECCIÓN DE MODELOS III

•Doble click o con el databrowser se accede al menú de especificación del equipo.





SELECCIÓN DE MODELOS y IV





DEFINIENDO CORRIENTES





DEFINIENDO CORRIENTES II





DEFINIENDO CORRIENTES y III





EJECUCIÓN DE LA SIMULACIÓN I





EJECUCIÓN DE LA SIMULACIÓN y II





RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN I

DIO(IIMA



Resultados pueden ser: azul=OK, amarillo=Warnings, rojo=errores.

RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN II

🚸 Aspen Plus - intro_aspen - [Block REACTOR (RGibbs) Results - Data Browser]								
📃 File Edit View Data Tools Run Plo	t Library Window Help	_ 8 ×						
Results								
Components Streams Blocks COOLER REACTOR COOLER	Summary Balance Phase Composition Pure Solids Atom Matrix Keg RGibbs results Outlet temperature: 800,000006 C Image: Composition Image: Composite Image: Composition Image: Composition<							
Results Available								
Mixers/Splitters Separators	Heat Exchangers Columns Reactors Pressure Changers Manipulators Solids User Models							
For Help, press F1	G:\docs\Edu\doctorado_modysim Result	s Available 🏼 🎵						



RESULTADOS DE LA SIMULACIÓN y III





OPCIONES AVANZADAS





PROYECTO PRODUCCIÓN DE ACETATO DE METILO



82

Heat and Material Balance Table									
Stream ID		1	2	3	4	5	6		
Temperature	с	50,0	60,0	68,9	55,2	60,0	60,0		
Pressure	bar	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000		
Vapor Frac		0,000	0,000	0,000	0,000	1,000	0,189		
Mole Flow	kmol/hr	105,000	85,116	60,000	45,000	19,884	105,000		
Mass Flow	kg/hr	4904,999	3653,800	1871,622	3033,377	1251,199	4904,999		
Volume Flow	cum/hr	5,303	3,955	2,033	3,364	550,772	554,736		
Enthalpy	MMkcal/hr	-8,805	-7,283	-4,664	-4,489	-1,764	-9,047		
Mass Frac									
METANOL		0,327	0,043	0,047	0,034	0,028	0,039		
ACETI		0,673	0,178	0,353	trace	0,008	0,135		
METHY-01			0,577	0,205	0,949	0,919	0,665		
AGUA			0,202	0,395	0,017	0,045	0,162		
Mole Flow	kmol/hr								
METANOL		50,000	4,907	2,773	3,214	1,079	5,987		
ACETI		55,000	10,816	10,987	trace	0,171	10,987		
METHY-01			28,484	5,172	38,841	15,529	44,013		
AGUA			40,909	41,068	2,945	3,104	44,013		



-3----c>

_____ _____



PLANTA DE PRODUCCIÓN DE CICLOHEXANO I





PLANTA DE PRODUCCIÓN DE CICLOHEXANO II



