## UNIVERSIDAD TECNOLÓGICA NACIONAL – FACULTAD REGIONAL ROSARIO



Integración IV

Trabajo práctico Nº 3: Uso de Componentes

Hipotéticos en HYSYS

#### Introducción

Como pudo verse, Hysys dispone de una importante base de componentes en su librería. No obstante, puede ocurrir que uno o varios de los componentes requeridos para el armado de un caso en particular, no se encuentre disponible.

Para estos casos, hysys dispone de la posibilidad de que el usuario introduzca sus propios componentes, los cuales se consideran "hipotéticos"

Estos componentes hipotéticos puede ser fluidos o sólidos. En ambos caso se requiere el conocimiento de la mayor cantidad de datos de sus propiedades fisicoquímicas.

A continuación se mostraran varios casos de aplicación. Los mismo se harán en condiciones "controladas" esto es, emular vía componentes hipotéticos a algunos existentes en la librería a fines comparativos

## 1. Caso 1: Comparación entre el agua de librería y 2 hipotéticos

Se inicia un caso nuevo, desde File/New/Case, desde el icono de la hoja en blanco o con las teclas rápidas "ctrl+N":



Se agrega una nueva lista de componentes

-

<sup>4</sup> Simulation Basis Mana	zer			
Component Lists Master Component List	View Add Delete Copy Import Export Befresh			
Components Fluid Pkgs	Hypotheticals Oil Manager	Reactions Component Maps	UserProperty	
		Ĺ	Enter Simulation En	vironment

Se va a la opción "Hipothetical" de la pestaña "Selected" y se presiona el botón "Hypo manager"

Component List View: Component List - 1  Add Component Component Components	<add available="" components<="" group="" hypo="" th=""><th>Hypo Manager</th></add>	Hypo Manager
	Remove> Sort List View Component	Quick Create a Hypo Component Quick Create a Solid Component
Selected Component by Type Delete	Name Component List - 1	·

Hacemos clic en el botón "Add":

Add Component	Selected Components	] [	Hypothetical Components Available Available Hypo Groups	
Simulation Basis Manager Hypothetical <u>G</u> roups	Hypothetical Quick R	eference		Hypo Manager
⊻iew	Hypo Name	Group Name	View Нуро	
Add			View Group	
Delete			Move Hypo <u>s</u>	. Create a Hypo Component
Iranslocate			Clone Comps	: Create a Solid Component
Import			_	
Export				
Components Eluid Plas Hunoth	eticals Oil Manager Beac	tions Component Mans	UserPropertu	
		ions _ component maps		

	4 Compo	ent List	View: Compor	nent List -	1		5		
4 Hype Gree	Add C	omponent	Selected Co	omponents			Hypothetical C	Components Available	
Hypo Group C Group <u>N</u> ame Component CM	ontrols HypoG	rol p1		Estimati Estimate <u>i</u>	ion <u>M</u> ethods <u>U</u> nknown Prop	Clone	e Library Comps Notes		Hypo Manager
Name	NBP [K]	MW	Liq Density [kg/m3]	Тс [K]	Pc ber	Vc [m3/kgmole]	Acentricity	D	. Create a Hypo Component
Individual Hype	o Controls Add Hypo	add Solid	Delete	UNIFAC	Base     Reactions	P <u>r</u> operties (C	Vapour Pressure	erty	
		<u></u>	<u></u>				Enter Sin	gulation Environment	

Elegir "Miscelaneous" en "Component Class" y hacer clic en el botón "Add Hypo"

Una vez presionado view se accede al formulario correspondiente a dicho hipotético, en donde se cambia el nombre, en este caso pondremos "Aqua":

Component List View: Component Li	st - 1
Add Component     Selected Component       Hypo Group: HypoCroup1       Hypo Group Controls       Group       Component Identification       Component Identification       Component Name       HypoZ0000*       Chem Formula       Downber       20000       Group Name       HypoGroup1       UNIFAC Structure       Structure Builder       Vie       Use ID Tags	Propurieucal Components Available       Image: Properties       Pc       Vc       Image: Pc       Vc       Acentricity       Pc       Vc       Image: Pc       Vc       Acentricity       Pc       Vc       Image: Pc       Vc       Acentricity       Pc       Vc       Acentricity       Pc       Vc       Acentricity       Pc       Vc       Acentricity       Pc       Vc       Base Properties       Vapour Pressure
Tag Number     Tag Text       1 <empty>       Not Spec'd       ID     Critical       Point     TDep       UserProp       Estimate     Unknown Props       Edit Properties     Edit Visc Curve</empty>	r Reactions Component Maps UserProperty Enter Simulation Environment

Nombre	Aqua	
Peso molecular	18.015	[Kg/Kgmol]
Punto de ebullición normal	373.14	[°K]
Densidad	997.98	$[Kg/m^3]$

En este formulario ingresamos peso molecular, punto normal de ebullición y densidad ideal de líquido y estimamos las propiedades desconocidas,

4 Com	oonent List View: Component Li	.ist - 1		
Add	Component	ents Hypothetical Con	mponents Available	]
4 Hypo Group: Hypo	iroup1			
Hypo Group Controls Group Magua*		hation Methods Clone Library Comps		Hypo Manager
Compc Normal Boiling Ideal Liq Dens Critical Propertie Temperature [ Pressure [bar] Volume [m3/k Acentricity	s ght 18.01 18.01 18.01 197314 997.98 es (] 594.14 50.62 gmole] 0.26356 0.22887	te Unknown Profes     Notes       Pc     Vc       Acentricity     4       50.62     0.2636       0.2636     0.2289           • Base Properties	) ) ) ) 2 ) 25 ) 95	. Create a Hypo Component : Create a Solid Component
ID Critic-	Point TDep UserProp	r <u>Reactions</u> Component Maps UserProperty Enter Simul	ation Environment	

Finalmente se selecciona el componente recién creado y haciendo clic en el botón "←Add Hypo" para agregar el componente recién seleccionado a la lista de componentes.

	🎍 Component List Vi	ew: Component List - 1			🛛
Simuk     Hypothe     HypoG	Add Component Components Traditional Electrolyte Hypothetical Other	Selected Components	<add group<="" th=""><th>Hypothetical Components Available Available Hypo Groups HypoGroup1 Available Hypo Components Aqua*</th><th>Hypo Manager</th></add>	Hypothetical Components Available Available Hypo Groups HypoGroup1 Available Hypo Components Aqua*	Hypo Manager
			Remove>		Quick Create a Hypo Component
			Sort List		Quick Create a Solid Component
			⊻iew Component		
- <u> </u>	Selected Compo	nent by Type			J
	Delete		Name Compo	nent List - 1	

Con el mismo método agregamos otro fluido hipotético con las siguientes propiedades además de las ya empleadas antes:

Nombre	Agua	
Temperatura crítica	647.299	[°K]
Presión crítica	22120.00	[KPa]
Volumen crítico	5.71e-002	[m <sup>3</sup> /Kgmol]
Acentricidad	0.34400	[adim]

Agregar además, el componente "water" de la librería de HYSYS.

Para finalizar, en la pestaña de propiedades fisicoquímicas le asociamos "Antoine" y a continuación vamos al medio ambiente de trabajo.

Se ingresa una corriente de agua de 25 °C y 1 atm y la evaporamos con un heater de caída presión nula.

Repetimos para los dos componentes hipotéticos. Mostramos la tabla de la corriente de salida (a través del menú contextual: botón derecho) y vemos los valores de temperatura y calor calculados.

Puede apreciarse que no hay error en el punto de ebullición, esto es lógico ya que fue un dato ingresado por el usuario.

Vemos también que el calor necesario sí cambia y que para el hipotético "Aqua" el error es mayor porque fue estimado con menos datos que "Agua".

Haciendo clic en las 3 corrientes de salida podemos evaluar otras diferencias o aproximaciones.



#### 2. Caso 2: Agregar el componente Benceno a través del constructor de moléculas

Se repite lo anterior pero en clase de componente seleccionar "Aromatic" y se agrega un hipotético y mediante el botón "View" se sigue hasta acceder al formulario del componente.

I T			1				/				
Component List Vie	ew: Component Lis	t - 1 Simulation	n Basis Manag	er			/		-/= ×		
Components     Traditional     Electrolyte     Hypothetical     Other		Hypothetical (	Hypo Group C     Group Name     Comportent Ck	View Add Delete Delete Delete HypoGro Aroma NBP	Hypothe H	etical Quick Re ypo Name Hypo2000*	ference Group Na HypoC Estimatic Estimate L Tc	n <u>M</u> ethods Inknown Prop	View Hy View Gro Move Hu	po up bos e Library Comps Notes	
Selected Compor	nent by Type	Componer Name		Centrols	Add Solid	[kg/m3] <empty> Delete</empty>	[C] <empty> UNIFAC</empty>	[kPa] <emply></emply>	[m3/kgmole] <empty></empty>	Acentricity <emply></emply>	ure

Para "armar" la molécula hacemos clic en "Structure Builder"

4 Component List View: Component List - 1						
Add Component Selected Componen	tion Basis Manager					
Components Traditional Electrolyte Hypothetical Other	ical <u>G</u> roups oup1 View St Hypo 20000*	Hypothetical Quick Re Hypo Name	eference Group Na HypoG	me iroup1	View Hy View Gro	ро
	Component Identification Component Name Family / Class Chem Formula ID Number Group Name CAS Number ID Num	Hypo20000* Aromatic 20000 HypoGroup1	Estimatio	n <u>M</u> ethods nknown Proj	Move Hu Clon	e Library Comps
Compo	n View D Land	icture Builder.	Tc [C] <empty></empty>	Pc [kPa] <empty></empty>	Vc [m3/kgmole] <empty></empty>	Acentricity
Selected Component by Type	Tag Number	Tag Text Not Spec'd		1		
	Estimate Unknown Props Edit Prop	erties Edit Visc <u>C</u> urve	UN <u>I</u> FAC	]	e P <u>r</u> operties (	Vapour Pressure

Agregamos el grupo 10, ACH, con 3 enlaces (ejemplo: benzene) y elegimos 6 grupos.

Una vez agregado el hipotético estimamos las propiedades desconocidas. Regresando a la lista de componentes seleccionamos el hipotético y lo agregamos. Luego de la base "Traditional" agregamos el benceno de librería.

4 Component List View: Compo	nent List - 1				. 🗆 🗙
Add Component	omponen <sup>4</sup> Simulation	Basis Manager			
Components     Traditional     Electrolyte     Hypothetical     Other	-Hypothetical <u>C</u> HypoGroup1	Troups View Hypo20000*	Hypothetical Quick Refer Hypo Name Builder - Hypo 20000*	ence Group Name HypoGroup1	View Hypo
		UNIFAC Structure Sub Group How Many 10 6 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0 0	<ul> <li>&lt; Add Group(s)</li> <li>Delete Group</li> <li>Free Bonds</li> </ul>	Available UNIFAC Gr Sub Group Bonds 1 CH3 1 2 CH2 2 3 CH 3 4 C 4 5 CH2=CH 1 6 CH=CH 2 7 CH2=C 2 8 CH=C 3	2.2.4.1 rimethylpentane 2.2.4.1 rimethylpentane 2.2.4.1 rimethylpentane 2.2.4.1 rimethylpentane 3.4.4 rimethylpentane 3.4.4 rimethylpentane 3.4.4 rimethylentane 3.4.4 rimethylentane 3.4.4 rimethylentane 3.4.4 rimethylentane
Selected Component by Type		0 0 0 0 0 0 UNIFAC Structure (ACH	)6	9 C=C 4 10 ACH 3 11 AC 4 12 ACCH2 2	3-Methyl-1-Hexene Benzene Benzene
Delete	Nar	UNIFAC Calculated Base Pri Molecular Weight UNIQUAC R UNIQUAC Q	78.11 78.11 3.1878 2.4000	UNIFAC Calculated Crit Temperature [C] Pressure [kPa] Volume [m3/kgmole]	ical Properties 296.56 4769.39 0.2635
	<u> </u>	stimate Unknown Props Eait Pro	percies Earchisc Entre		

Hecho esto le asociamos el paquete "Antoine" y repetimos algo similar al caso del agua

Benceno contra (ACH)<sub>6</sub>



Repetir los pasos anteriores para emular al propano.

Para ello, una corriente de propano a 25 °C y 1 atm con un flujo molar de 100 [Kgmol/h] debe condensarse hasta su punto de burbuja a presión constante.

Calcular la temperatura de la corriente de salida y el calor necesario que debe retirarse.

Propano contra (CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>(CH<sub>2</sub>)



# 3. Caso 3: Sólido hipotético

Ejemplo, carbón

Armar un hipotético sólido con las siguientes características:

Peso molecular	12.0000	[Kg/Kmol]
Densidad	2600.00	[Kg/m <sup>3</sup> ]
Diámetro	1.0000	[mm]
Esfericidad	1.0000	[adim]
área/unidad de volumen	0.9999	$[m^{2}/m^{3}]$

Puntos fijos

Calor de formación a 25 ºC	0.000000	[KJ/Kgmol]
Calor de combustión a 25 ºC	2372.50	[KJ/Kgmol]

Opcional, análisis porcentual

С	70.00
Н	6.00
Ν	0.00
0	22.00
S	2.00
Cl	0.00

Una vez agregado el hipotético incluir además oxígeno y dióxido de carbono de la base "Traditional". Asociarle un paquete fisicoquímico como Antoine

Reacción química

En la pestaña "Reactions" del formulario "Simulation Basis manager" verificar la existencia del listado de componente o buscarlos mediante el botón "Add Comps". Luego agregar una reacción



De los diferentes tipos de reacción elegiremos de conversión:

Simulation Basis Manager     Reactions		- Beaction Sets	
Conversion Equilibrium	View Bgn	Global Rxn Set	View Set
Kinetic Simple Rate	Add <u>B</u> xn		Add Set
	Delete Rxn		Delete Set
Add <u>R</u> eaction	Сору Rx <u>n</u>	I Assoc. Fluid Pkgs	Copy Set
		Basis-1	Export Set
Add Comps			Add to FP
		· · · · · · ·	
Lomponents Fluid Pkgs Hypotheticals	UII Manager _ Heactions	Ret <u>u</u> rn to Simul	ation Environment

En el ítem "\*\*Add Comp\*\*" agregar el hipotético, oxígeno y dióxido de carbono y completar el formulario de acuerdo a la reacción siguiente con un 100 % de conversión:

 $C + O_2 \rightarrow CO_2$ 

Los coeficientes coinciden con la estequeometría y se asumen negativo para los reactantes y positivos para los productos. Verificar siempre que el balance de cero.

Simulation Basis Manage	er n: Rxn-1		3		×
Stoichiometry Info Component Carbón* Oxygen CO2 **Add Comp**	Mole Weight 12.000 32.000 44.010	Stoich Ceff (-1.000 (-1.000 1.000	br <u>Sets</u> al F <i>a</i> n Set . Fluid Pkgs	View Set Add Set Delete Set Copy Set Import Set	
<u>Balance</u> Stoichiometry Basis Delete Name	Balance Error Reaction Heat (25 C)	-3.9e+05 kJ/kgmole	nent Maps Us Ret <u>u</u> rn to Simul	Export Set Agd to FP erProperty ation Environment	_

Vemos que la reacción aun no está lista. Completar con la información faltante asumiendo 100% de conversión y setando en 0 los otros parámetros (dependientes de la temperatura).

Simulation Basis Manager	
Basis Base Component Carbón* Rxn Phase Overal	on <u>S</u> ets <u>I Rxn SetV</u> iew Set 
Co         100.0           C1         0.0000           C2         0.0000           Conversion (%) = Co + C1*T + C2*T^2           (T in Kelvin)	. Fluid Pkgs Import Set
Stoichiometry Basis Delete Name Rxn-1 Ready	Add to FP
	Return to Simulation Environment

Presionar "Add to FP" para asociar la reacción a la base fisicoquímica ya creada.

🌂 Add 'Global Rxn Set' 🖃 🗖 🔀	
Basis-1 NC: 3 PP: Antoine Add Set to Fluid Package	View Rgn       Global Rxn Set       View Set         Add Bxn       Add Set       Add Set         Delete Rxn       Delete Set       Copy Set         Copy Rxn       Assoc. Fluid Pkgs       Import Set         Basis-1       Export Set       Add to FP
Components Fluid Pkgs Hypothetical	s Dil Manager Reactions Component Maps UserProperty Return to Simulation Environment

Ir al entorno de trabajo y armar el flowsheet de la figura. El reactor de conversión se encuentra en el ítem "General Reactor" y luego "Conversion Reactor"



Dentro del reactor, en la pestaña "Reactions", "Reaction Set" elegir la reacción ya creada.



Como flujo de entrada poner solo carbón, flujo másico de 400 Kg/h, temperatura de 25 °C y presión de 1 atm.

Para el oxígeno, flujo másico de 2900 Kg/h, temperatura de 25 °C y presión de 1 atm.

No agregar corriente térmica. Calcular la temperatura de la combustión y composición de salida de gases calientes.

Compararlos valores si en lugar de oxígeno se hubiera quemado con aire seco.