MANUALES DE ASPENONE. TERMODINÁMICA

Este documento describe la creación de un nuevo archivo, la selección de componentes, la selección de la ecuación de estado y métodos de convergencia.

DGAPA / PAPIME / PEI 103325

CREACIÓN DE UN ARCHIVO NUEVO

Creación de un Archivo Nuevo

Este documento describe la creación de un nuevo proyecto en Aspen Plus en la versión 12.1. Para este ejemplo se seleccionan tres componentes presentes en la base de datos y se muestran diferentes formas de como buscarlos en la pestaña de selección:

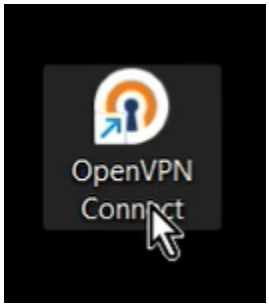
Componente
Dióxido de Carbono
Estireno
Divinil Benceno

El siguiente procedimiento está ampliamente descrito en un video al final de este documento. Se insertan videos que describen menús desplegables y casillas de selección.

Procedimiento

El video que a continuación se muestra abarca los siguientes puntos:

1) Inicio de sesión de ASPEN.
    a. Abrir aplicación VPN. Esto conectará el dispositivo con el servidor de la Facultad de Química.

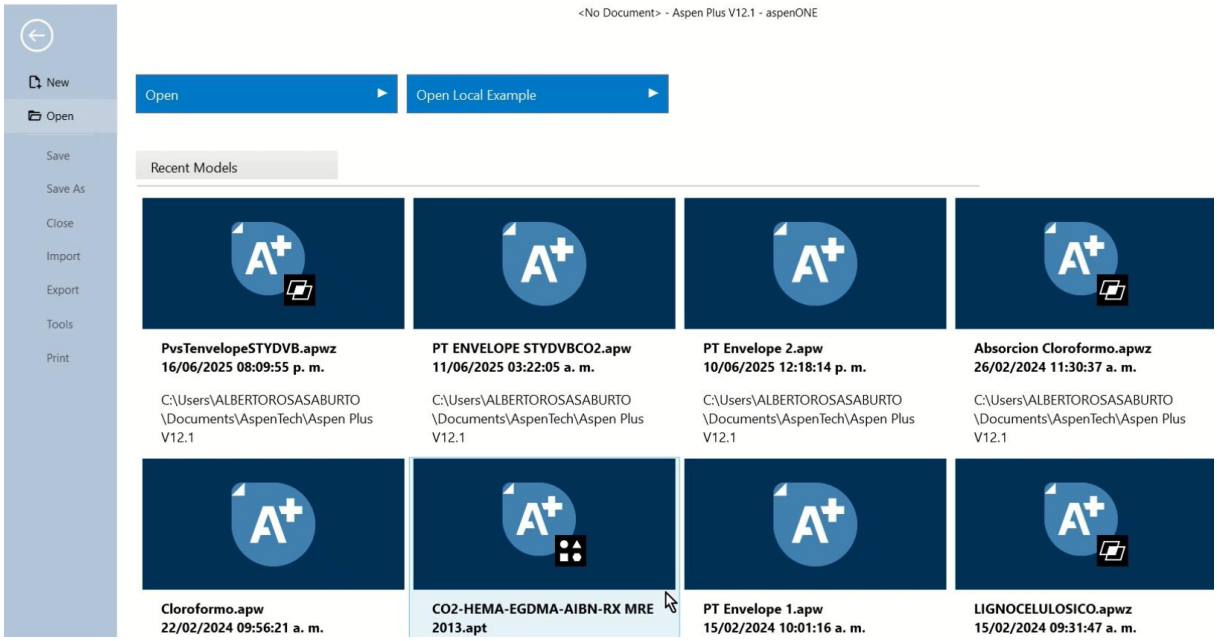


    b. Al dar abrir el ícono, se abrirá una ventana donde se muestra un interruptor.

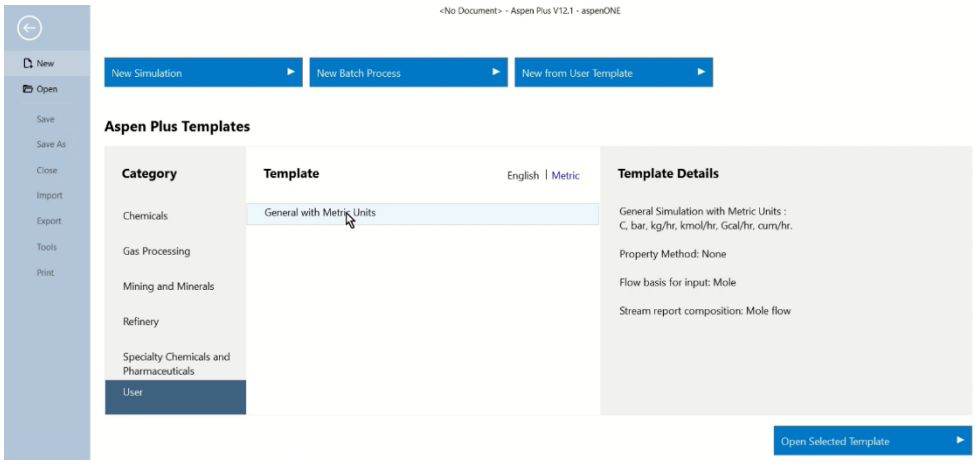
    c. Una vez activado el interruptor se observará que el dispositivo entra en comunicación con el servidor de la Facultad de Química.

d. Una vez que el dispositivo se conectó con el servidor de la Facultad de Química, se procede a abrir ASPEN Plus (en este caso versión 12.1).

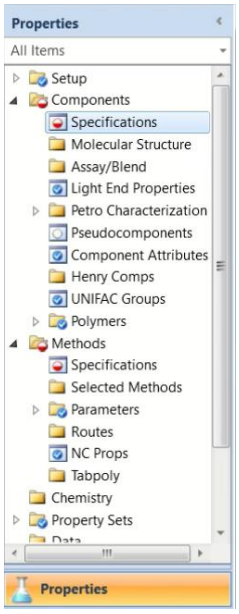
e. Al abrir ASPENONE se observa un menú con los últimos proyectos que se han trabajado.



2) Crear un archivo nuevo, seleccionándolo de distintos formatos.
   a. En este ejemplo se crea un archivo nuevo:



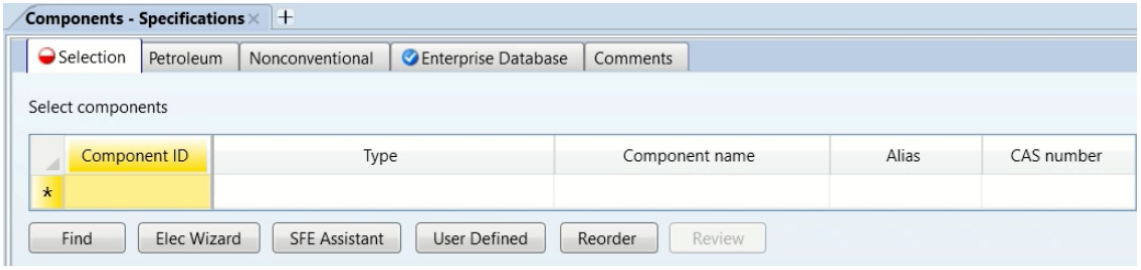
b. En el video se muestran diferentes partes de ASPENONE:
   i. Módulo de propiedades:



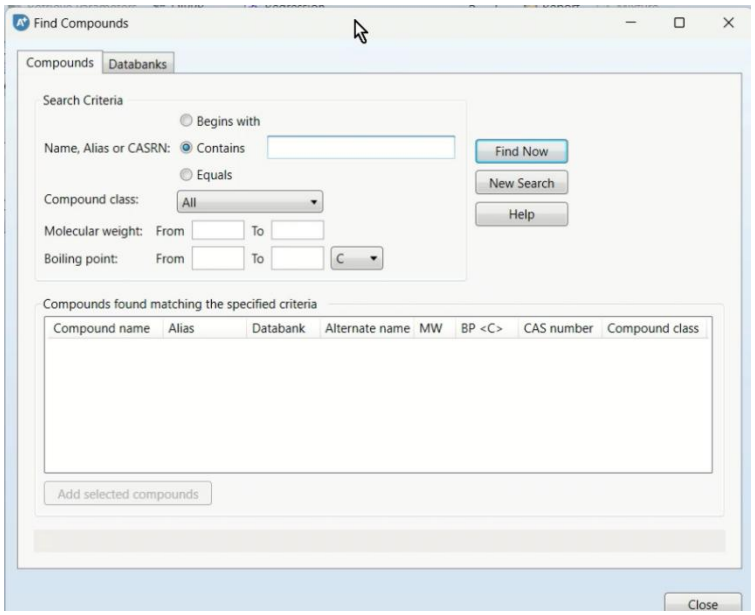
   ii. Cada sección para llenar o incompleta se muestra como una media luna roja y blanca.

   iii. Lo primero por llenar es el listado de los componentes:

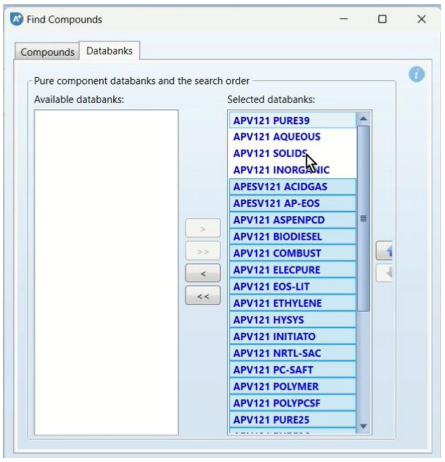
   iv. Al seleccionar este menú de “Specifications” se observa una tabla:



   v. En esta tabla se deben ir llenando con los componentes a emplear. Para ello se deberá seleccionar el botón “Find”. Esto despliega un menú emergente:

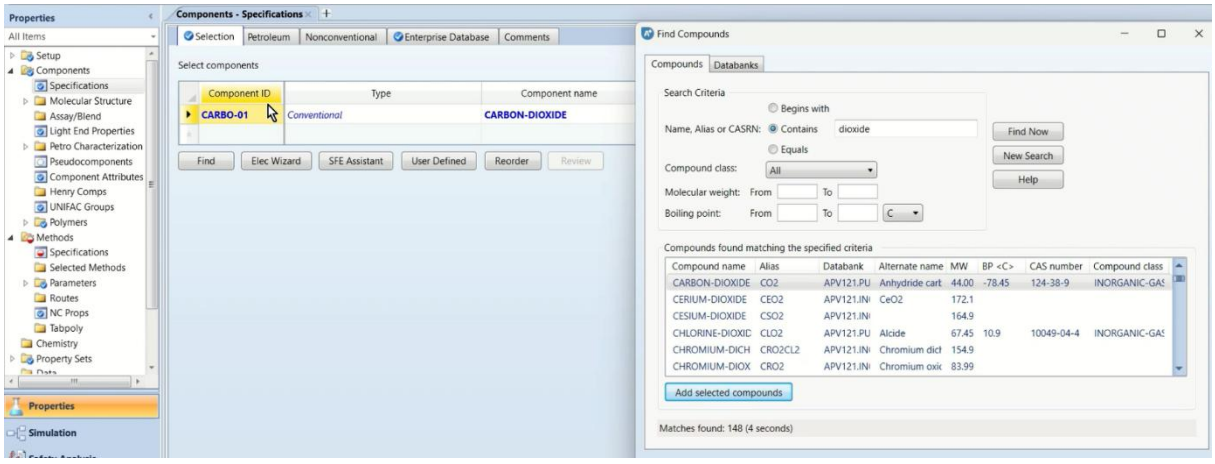


vi. En este menú seleccionamos la pestaña “Databanks”. En esta pestaña elegimos las bases de datos a emplear seleccionándolas y pasándolas de la columna “Available databanks” hacia “Selected databanks” con las flechas botón.

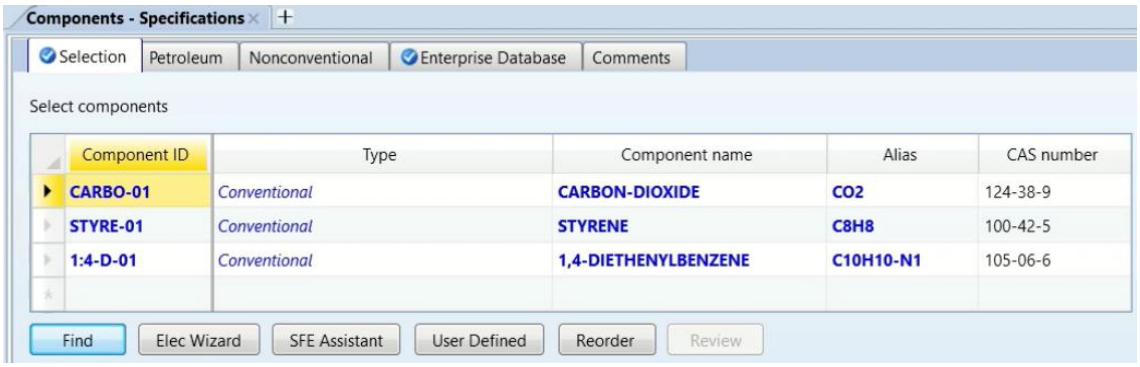


vii. Regresamos a la pestaña “Compounds” para buscar los componentes.

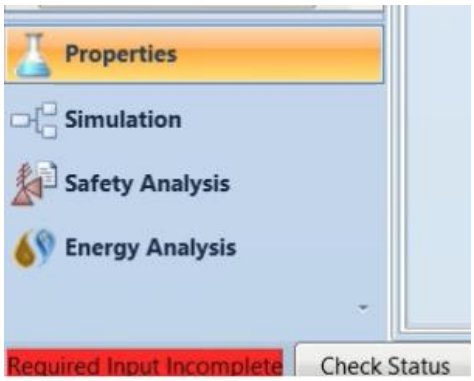
viii. En dicho menú buscamos por las diferentes opciones de búsqueda el componente deseado y lo agregamos a la lista de componentes.



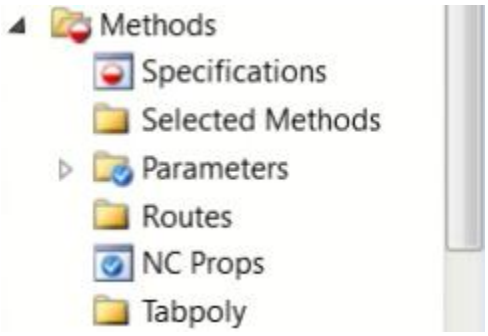
ix. Repetir la búsqueda de componentes hasta completar la lista.



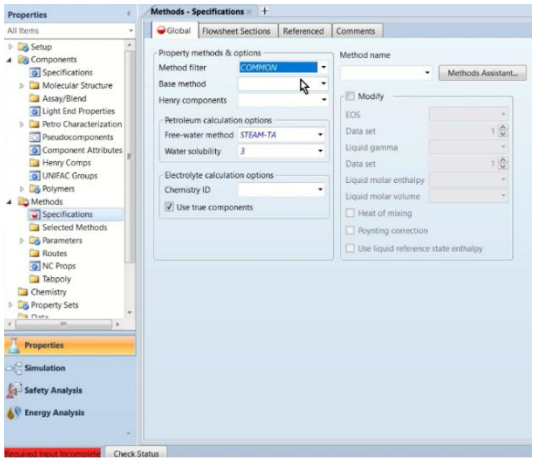
3) En la parte inferior izquierda sigue apareciendo en rojo en el estatus del proceso “Required input incompleted”.



a. Para completar la primera parte es necesario ahora establecer las ecuaciones de estado y tipo de cálculo para este proceso. Esto se hace en el menú de “Properties” en la carpeta de “Methods”, en la aplicación “Specifications”.

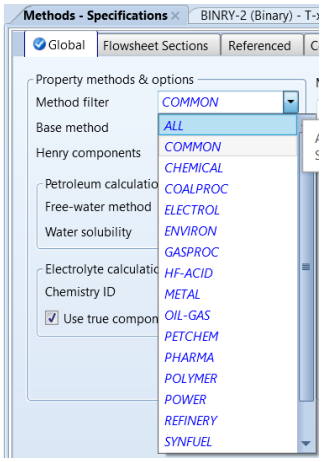


b. Al seleccionar “Specifications” se despliega el siguiente menú:

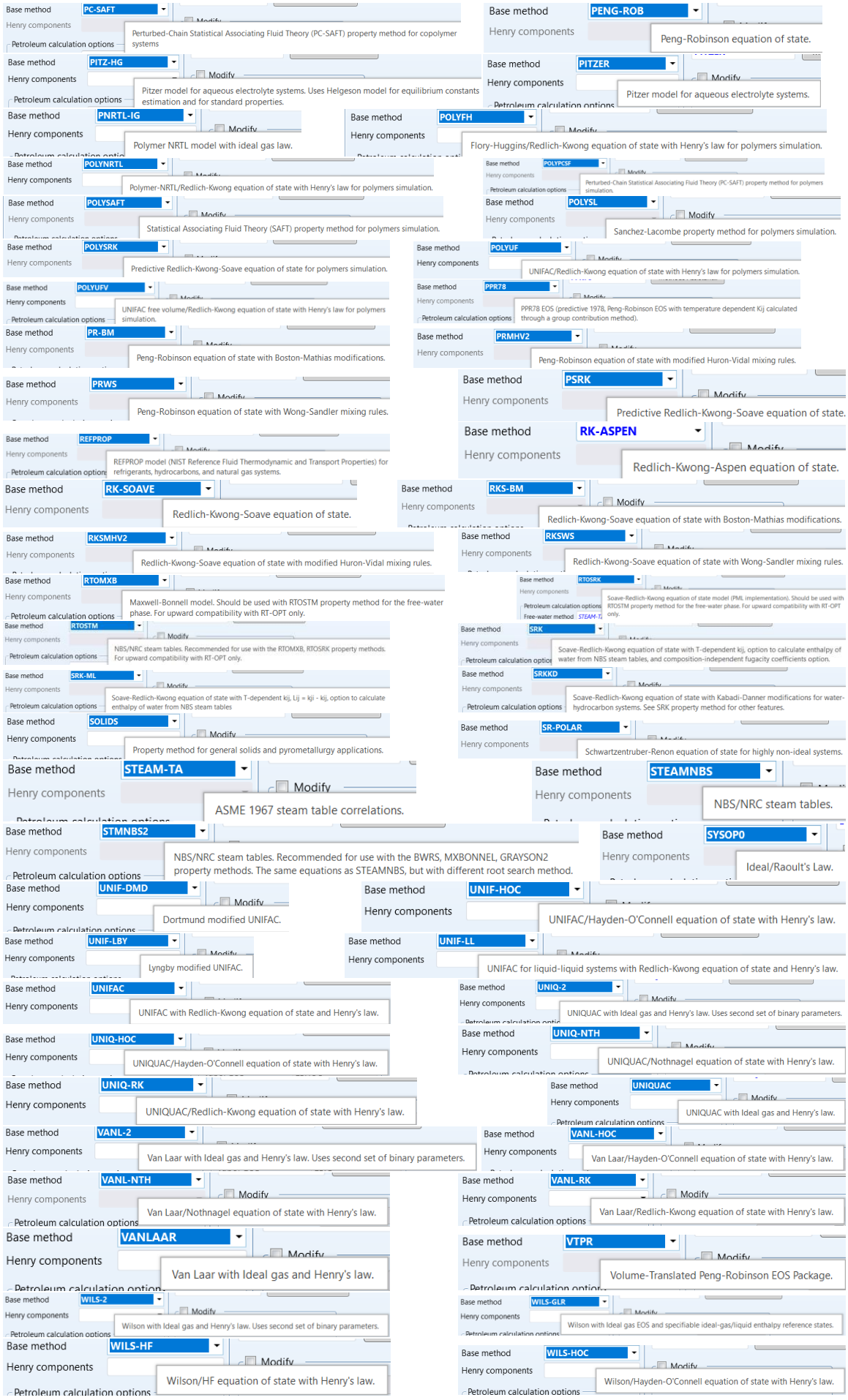


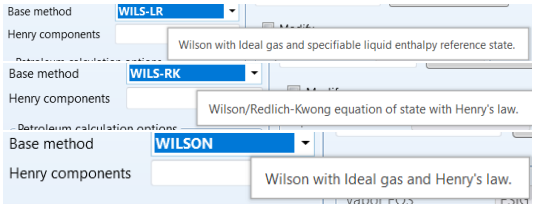
c. En la pestaña de “Methods-Specifications” se observan diferentes casillas a llenar:
    i. Method filter: Es un filtro para reducir la lista de ecuaciones de estado en la lista desplegable “Base Method”. Este filtro reduce el número de ecuaciones de estado a desplegar según la

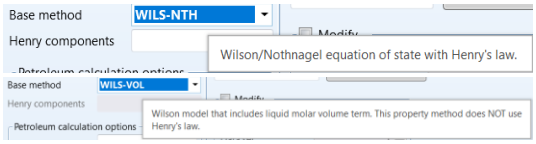
aplicación o proceso a simular. Si no se elige ningún proceso el valor predeterminado que se muestra es “COMMON” (selección de ecuaciones más comunes). Si se desea ver todo el catálogo de ecuaciones de estado se selecciona “ALL”.



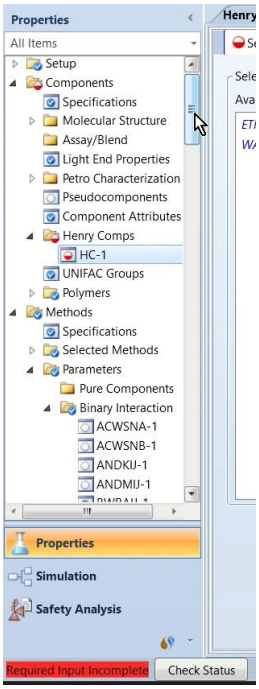
ii. Base method: Define la ecuación de estado a usar. A continuación mostramos en el menú desplegable cada cartela emergente con su explicación:


Base method PC-SAFT
Henry components
Petroleum calculation options
Perturbed-Chain Statistical Associating Fluid Theory (PC-SAFT) property method for copolymer systems
Base method PENG-ROB
Henry components
Peng-Robinson equation of state.
Base method PITZ-HG
Henry components
Petroleum calculation options
Modify
Pitzer model for aqueous electrolyte systems. Uses Helgeson model for equilibrium constants estimation and for standard properties.
Base method PITZER
Henry components
Petroleum calculation options
Modify
Pitzer model for aqueous electrolyte systems.
Base method PNRTL-IG
Henry components
Modify
Polymer NRTL model with ideal gas law.
Base method POLYFH
Henry components
Modify
Flory-Huggins/Redlich-Kwong equation of state with Henry's law for polymers simulation.
Base method POLYNRTL
Henry components
Modify
Polymer-NRTL/Redlich-Kwong equation of state with Henry's law for polymers simulation.
Base method POLYPCSF
Henry components
Petroleum calculation options
Modify
Perturbed-Chain Statistical Associating Fluid Theory (PC-SAFT) property method for polymers simulation.
Base method POLYSAFT
Henry components
Modify
Statistical Associating Fluid Theory (SAFT) property method for polymers simulation.
Base method POLYSL
Henry components
Modify
Sanchez-Lacombe property method for polymers simulation.
Base method POLYSRK
Henry components
Modify
Predictive Redlich-Kwong-Soave equation of state for polymers simulation.
Base method POLYUF
Henry components
Modify
UNIFAC/Redlich-Kwong equation of state with Henry's law for polymers simulation.
Base method POLYUFV
Henry components
Petroleum calculation options
Modify
UNIFAC free volume/Redlich-Kwong equation of state with Henry's law for polymers simulation.
Base method PPR78
Henry components
Petroleum calculation options
Modify
PPR78 EOS (predictive 1978, Peng-Robinson EOS with temperature dependent Kij calculated through a group contribution method).
Base method PR-BM
Henry components
Modify
Peng-Robinson equation of state with Boston-Mathias modifications.
Base method PRMHV2
Henry components
Modify
Peng-Robinson equation of state with modified Huron-Vidal mixing rules.
Base method PRWS
Henry components
Modify
Peng-Robinson equation of state with Wong-Sandler mixing rules.
Base method PSRK
Henry components
Modify
Predictive Redlich-Kwong-Soave equation of state.
Base method REFPROP
Henry components
Petroleum calculation options
Modify
REFPROP model (NIST Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties) for refrigerants, hydrocarbons, and natural gas systems.
Base method RK-ASPEN
Henry components
Modify
Redlich-Kwong-Aspen equation of state.
Base method RK-SOAVE
Henry components
Modify
Redlich-Kwong-Soave equation of state.
Base method RKS-BM
Henry components
Modify
Redlich-Kwong-Soave equation of state with Boston-Mathias modifications.
Base method RKSMHV2
Henry components
Modify
Redlich-Kwong-Soave equation of state with modified Huron-Vidal mixing rules.
Base method RKSWS
Henry components
Modify
Redlich-Kwong-Soave equation of state with Wong-Sandler mixing rules.
Base method RTOMXB
Henry components
Petroleum calculation options
Modify
Maxwell-Bonnell model. Should be used with RTOSTM property method for the free-water phase. For upward compatibility with RT-OPT only.
Base method RTOSRK
Henry components
Petroleum calculation options
Free-water method STEAM-TA
Modify
Soave-Redlich-Kwong equation of state model (PML implementation). Should be used with RTOSTM property method for the free-water phase. For upward compatibility with RT-OPT only.
Base method RTOSTM
Henry components
Petroleum calculation options
Modify
NBS/NRC steam tables. Recommended for use with the RTOMXB, RTOSRK property methods. For upward compatibility with RT-OPT only.
Base method SRK
Henry components
Petroleum calculation options
Modify
Soave-Redlich-Kwong equation of state with T-dependent kij, option to calculate enthalpy of water from NBS steam tables, and composition-independent fugacity coefficients option.
Base method SRK-ML
Henry components
Petroleum calculation options
Modify
Soave-Redlich-Kwong equation of state with T-dependent kij, Lij = kji - kij, option to calculate enthalpy of water from NBS steam tables
Base method SRKKD
Henry components
Petroleum calculation options
Modify
Soave-Redlich-Kwong equation of state with Kabadi-Danner modifications for water-hydrocarbon systems. See SRK property method for other features.
Base method SOLIDS
Henry components
Modify
Property method for general solids and pyrometallurgy applications.
Base method SR-POLAR
Henry components
Modify
Schwartzentruber-Renon equation of state for highly non-ideal systems.
Base method STEAM-TA
Henry components
Modify
ASME 1967 steam table correlations.
Base method STEAMNBS
Henry components
Modify
NBS/NRC steam tables.
Base method STMNBS2
Henry components
Petroleum calculation options
NBS/NRC steam tables. Recommended for use with the BWRS, MXBONNEL, GRAYSON2 property methods. The same equations as STEAMNBS, but with different root search method.
Base method SYSOP0
Henry components
Modify
Ideal/Raoult's Law.
Base method UNIF-DMD
Henry components
Petroleum calculation options
Modify
Dortmund modified UNIFAC.
Base method UNIF-HOC
Henry components
Modify
UNIFAC/Hayden-O'Connell equation of state with Henry's law.
Base method UNIF-LBY
Henry components
Modify
Lyngby modified UNIFAC.
Base method UNIF-LL
Henry components
Modify
UNIFAC for liquid-liquid systems with Redlich-Kwong equation of state and Henry's law.
Base method UNIFAC
Henry components
Modify
UNIFAC with Redlich-Kwong equation of state and Henry's law.
Base method UNIQ-2
Henry components
Modify
UNIQUAC with Ideal gas and Henry's law. Uses second set of binary parameters.
Base method UNIQ-HOC
Henry components
Modify
UNIQUAC/Hayden-O'Connell equation of state with Henry's law.
Base method UNIQ-NTH
Henry components
Modify
UNIQUAC/Nothnagel equation of state with Henry's law.
Base method UNIQ-RK
Henry components
Modify
UNIQUAC/Redlich-Kwong equation of state with Henry's law.
Base method UNIQUAC
Henry components
Petroleum calculation options
Modify
UNIQUAC with Ideal gas and Henry's law.
Base method VANL-2
Henry components
Modify
Van Laar with Ideal gas and Henry's law. Uses second set of binary parameters.
Base method VANL-HOC
Henry components
Modify
Van Laar/Hayden-O'Connell equation of state with Henry's law.
Base method VANL-NTH
Henry components
Modify
Van Laar/Nothnagel equation of state with Henry's law.
Base method VANL-RK
Henry components
Modify
Van Laar/Redlich-Kwong equation of state with Henry's law.
Base method VANLAAR
Henry components
Modify
Van Laar with Ideal gas and Henry's law.
Base method VTPR
Henry components
Modify
Volume-Translated Peng-Robinson EOS Package.
Base method WILS-2
Henry components
Petroleum calculation options
Modify
Wilson with Ideal gas and Henry's law. Uses second set of binary parameters.
Base method WILS-GLR
Henry components
Petroleum calculation options
Modify
Wilson with Ideal gas EOS and specifiable ideal-gas/liquid enthalpy reference states.
Base method WILS-HF
Henry components
Modify
Wilson/HF equation of state with Henry's law.
Base method WILS-HOC
Henry components
Modify
Wilson/Hayden-O'Connell equation of state with Henry's law.

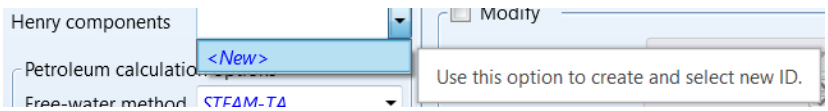




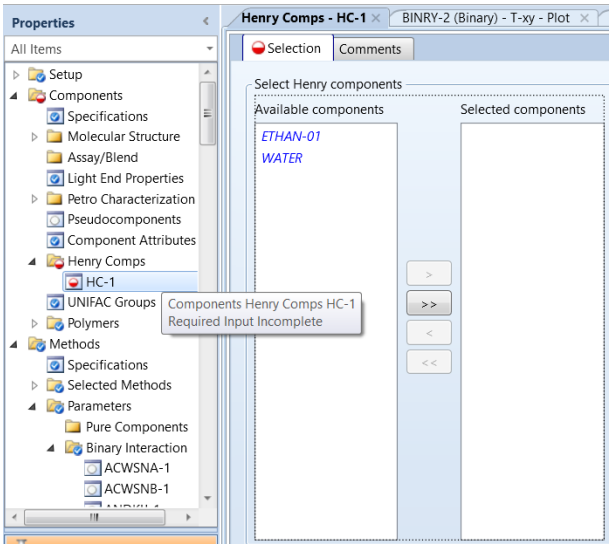
iii. Cada vez que se seleccione una ecuación de estado en el menú “Properties” aparecerá en la carpeta de “Parameters\Binary Interaction” aparecerán aplicaciones donde se estimarán o se solicitarán valores para distintos parámetros de interacción.



iv. En la selección “Henry components” se adicionan componentes a través de una ventana emergente. En diferentes modelos esta opción no se habilita o se deja en blanco.

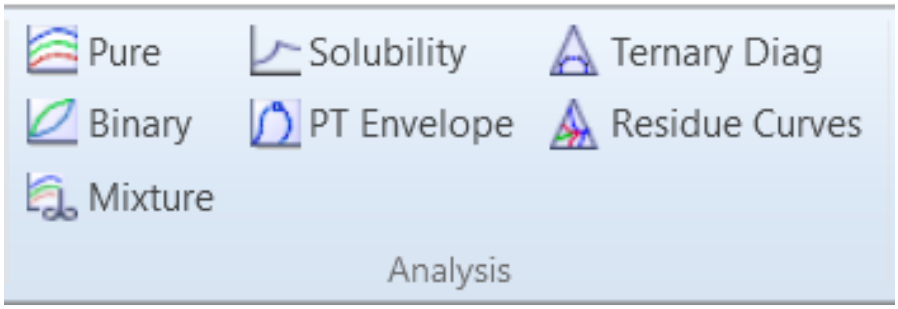


v. Si se selecciona la opción de crear un grupo de componentes que sigan el modelo de Henry se deben de seleccionar los componentes en la siguiente pestaña.



vi. Una vez seleccionados los componentes, la ecuación de estado y que se han revisado o llenado los campos de los parámetros y coeficientes binarios, se observará el siguiente letrero en la parte inferior izquierda: “Required Properties Input Complete”.

vii. Una vez que se tiene completada esta parte se procede a seleccionar el tipo de cálculo termodinámico a realizar en el submenú “Análysis”. En el menú “File” hay una sección en la parte superior derecha donde se puede seleccionar el tipo de cálculo:



Referencias:

1. Segovia-Hernández, J. G., & Gómez-Castro, F. I. (2017). *Stochastic process optimization using Aspen Plus®*.
2. Schefflan, R. (2016). *Teach yourself the basics of Aspen Plus*. John Wiley & Sons.
3. Sandler, S. I. (2015). *Using Aspen Plus in thermodynamics instruction: A Step-by-Step Guide*. John Wiley & Sons.
4. Al-Malah, K. I. M. (2016). *Aspen Plus: Chemical Engineering Applications*. John Wiley & Sons.
5. Haydary, J. (2019). *Chemical Process design and simulation: Aspen Plus and Aspen HySys applications*. John Wiley & Sons.
6. Luyben, W. L. (2013). *Distillation design and control using Aspen simulation*. John Wiley & Sons.
7. Medeiros, M. (2024). *Equilibrio de Fases y Químico* (2nd ed.). Facultad de Química, UNAM.

Agradecimientos:

PROGRAMA DE APOYO A PROYECTOS PARA INNOVAR Y MEJORAR LA EDUCACIÓN 2023.

DGAPA / PAPIME / PE103523

INCORPORACION DE TIC'S PARA LA ENSEÑANZA Y EVALUACION DELDESEMPEÑO DE LOS ALUMNOS EN ASIGNATURAS COMPARTIDAS DE DOS CARRERAS DE LA FACULTAD DE QUIMICA.