



MINICURSO DE ASPEN PLUS

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
PET ENGENHARIA QUÍMICA





UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
SETOR DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA
PET – PROGRAMA DE EDUCAÇÃO TUTORIAL



MINICURSO DE ASPEN PLUS 2025/01

GRUPO PET ENGENHARIA QUÍMICA

<i>Arthur Demio Padilha</i>	<i>Lara Ventorini</i>
<i>Eduardo de Oliveira Santos</i>	<i>Luiza de Oliveira Witcel</i>
<i>Evangelos Thalys Raftopoulos</i>	<i>Maria Luiza Gassner</i>
<i>Gabriel Seiji Takehata</i>	<i>Marina Canizella Terluk</i>
<i>Gabriella Charneski</i>	<i>Pablo Magarinos Rossari Filho</i>
<i>Guilherme Tupan Frare Moreira</i>	<i>Rafael Gobetti da Silva</i>
<i>Júlia Mafioletti</i>	<i>Raul Bertin de Oliveira</i>
<i>Vinícius Antônio Carletto Guzzo</i>	

TUTOR

Prof. Dr. Vitor Renan da Silva

Curitiba
2025

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

GRUPO PET ENGENHARIA QUÍMICA

1ª Edição - 2012

Ana Queren Azevedo
Annelorie Knesebeck
Carolina Lopes
Emili Emilha Lucht
Felipe Gomes Camacho
Fillemon Edillyn
Jéssica Cristina Consolin
Kimberly Pasqualin

Klayton Marcel Prestes Alves
Laura Luiza Zaia
Mariana Jorba Sainz Ravaglio
Mayara Costantin
Nina Monteiro
Paulo Affonso Lato de Souza
Priscilla Turkot
Vitor Takashi Kawazoe

Edições posteriores

Ana Carla Corrêa Machado
Arthur Predebon
Bianca Pierosan Hugem
Caroline Inacio da Silva
Daniel Ravazzani Ribeiro Vieira
Daniela Yuri Mori
Eloisa dos Santos
Enzo Sennhauser
Felipe Silva Narvas
Geovana Mara Cieslinski
Giovana Dusi
Giovanni Arcari Pereira
Guilherme Araujo dos Santos
Guilherme Augusto Surek
Henrique Thomaz Saravia
José Carlos Cordeiro Junior
João Vitor Ramires Luz
Louseane Silva de Lima
Luan Fetter

Luana Medeiros do Amaral
Lucas Nazar Moreira
Louseane Silva de Lima
Luís Felipe Bussola
Marcelo Yuji Tamura
Mariana Vila Real Destefani
Marianna Carlesso
Marina Mazuroski
Mateus de Oliveira Nespolo
Mateus Mendes
Patricia Cristina Pagnoncelli
Paulo Hiroshi Kato Filho
Paulo Vitor de Lima Carvalho
Pedro Henrique Bonato Kuss
Rafael Schwambach
Sabrina Ishikawa
Thiago Nishimura
Vitor Lazzarotto Heck
Yane Ogido Zerbetto

Última Revisão

Pablo Magarinos Rossari Filho

Vinícius Antônio Carletto Guzzo

Sumário

APRESENTAÇÃO	9
CAPÍTULO 1	11
1. NOÇÕES BÁSICAS DE SEPARAÇÃO SÓLIDO-GÁS	11
1.1 OBJETIVO	11
1.2 PRIMEIROS PASSOS	11
1.2.1 Iniciando o Aspen Plus	11
1.2.2 Conhecendo o ambiente de simulações do Aspen Plus	13
1.2.3 Barra de menus e barra de ferramentas	13
1.3 ARQUIVO DE AJUDA	14
1.4 CONSTRUÇÃO DE FLUXOGRAMAS	15
1.4.1 Selecionando resultados exibidos na janela do fluxograma	15
1.4.2 Linhas ou correntes de processo	16
1.4.3 Biblioteca de modelos	17
1.4.4 Organizando o fluxograma	18
1.5 CONFIGURAÇÕES GLOBAIS DA SIMULAÇÃO	19
1.5.1 Sistemas de unidades	20
1.5.2 Parâmetros globais	21
1.5.3 Classificação das correntes do processo	22
1.5.4 Personalizando os intervalos de distribuição granulométrica	23
1.6 EXECUTANDO UMA SIMULAÇÃO	24
1.6.1 Especificações dos componentes em uma simulação	25
1.6.2 Especificando o modelo termodinâmico	26
1.6.3 Especificação das correntes do processo	27
1.6.4 Especificando os modelos de operações unitárias ou blocos	29
1.6.5 Execução e análise dos resultados da simulação	30
1.6.6 Tabela dos resultados	32
1.6.7 Considerações finais	33
1.7 SEPARAÇÃO SÓLIDO-GÁS	33
1.7.1 Ciclones	35
1.7.2 Precipitadores eletrostáticos	38
1.8 BOMBAS E COMPRESSORES	40
CAPÍTULO 2	70
2 TERMODINÂMICA APLICADA EM OPERAÇÕES DE SEPARAÇÃO	70
2.1 OBJETIVOS	70
2.2 ESCOLHA DO MODELO TERMODINÂMICO	70
2.1.1 Especificando o método de cálculo das propriedades termodinâmicas	70
2.1.2 Recursos de auxílio à seleção do método	71
2.1.3 Personalizando um método	73

2.2 ASPEN PROPERTIES E O CÁLCULO DE PROPRIEDADES FÍSICAS	73
2.2.1 Introdução	73
2.2.2 Especificando um conjunto de propriedades físicas (Property Set)	74
2.2.3 Configurando um conjunto de propriedades	75
2.2.4 Algumas propriedades que podem ser avaliadas no Aspen	77
2.3 ANÁLISE GRÁFICA DE PROPRIEDADES FÍSICAS	82
2.3.1 Configurando a análise de propriedades físicas	82
2.3.2 Criando o gráfico dos resultados da análise	84
2.3.3 Formatando o gráfico	86
2.3 DIAGRAMAS DE FASE	87
2.3.4 Equilíbrio de fase	87
2.3.5 Diagramas T-xy e P-xy	90
2.3.6 Diagrama P x T em versões antigas	95
2.3.7 Diagramas ternários em versões antigas	98
2.4 OPERAÇÕES DE SEPARAÇÃO	99
Tanque Flash	99
2.5 EXERCÍCIOS CAPÍTULO 2	102
2.6 GABARITO CAPÍTULO 2	104
CAPÍTULO 3	110
3 TROCADORES DE CALOR	110
3.1 OBJETIVOS	110
3.2 APLICAÇÕES E TIPOS	110
3.3 SELEÇÃO	113
3.4 CUIDADOS E MANUTENÇÃO	113
3.5 TROCADORES DE CALOR E O ASPEN	114
3.5.1 Fundamentação teórica	114
3.5.2 Blocos	115
3.5.3 Heater	119
3.5.4 HeatX	121
3.5.5 HeatX versus Heater	129
3.6 EXERCÍCIOS CAPÍTULO 3	131
Exercício 3.1. Aquecimento de uma mistura equimolar	131
Exercício 3.2. Mistura de correntes e pontos de bolha e orvalho	131
Exercício 3.3. Trocador de calor cocorrente	131
Exercício 3.4. Trocador de calor contracorrente	131
Exercício 3.5. Reaproveitamento de calor na produção de acetaldeído	132
3.7 GABARITO CAPÍTULO 3	133
Exercício 3.1	133
Exercício 3.1. Mistura de correntes - Pontos de bolha e orvalho	138
Exercício 3.2. Trocador de calor cocorrente	143
Exercício 3.3. Trocador de calor contracorrente	148
Exercício 3.4. Reaproveitamento de calor na produção de acetaldeído	150

CAPÍTULO 4	157
4 SEPARAÇÃO LÍQUIDO-LÍQUIDO E VAPOR-LÍQUIDO, ANÁLISE DE SENSIBILIDADE E OTIMIZAÇÃO	157
4.1 OBJETIVOS	157
4.2 EQUILÍBRIO LÍQUIDO-LÍQUIDO	157
4.2.1 Decantadores	157
4.2.2 Extração em múltiplas fases	159
4.3 EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR	160
4.3.1 Destilação	160
4.3.2 Absorção e dessorção	163
4.4 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE	165
4.4.1 Escolha das variáveis cujo efeito será calculado	165
4.4.2 Definição das variáveis presentes na função estudada	166
4.4.3 Definição da função analisada	167
4.5 OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS	168
4.5.1 Definição das variáveis presentes na função objetivo	168
4.5.2 Função objetivo e restrições	168
4.5.3 Definição do intervalo numérico para variáveis manipuladas	169
4.6 EXERCÍCIOS	169
Exercício 4.1. Destilação	169
Exercício 4.2. Componente-chave leve e componente-chave pesado na destilação	170
Exercício 4.3. Estudo de sensibilidade de uma coluna de absorção	170
Exercício 4.4. Otimização de uma coluna de destilação	170
CAPÍTULO 5	172
5 REATORES E ESPECIFICAÇÕES DE PROJETO	172
5.1 OBJETIVOS	172
5.2 CONCEITOS FUNDAMENTAIS DE REATORES QUÍMICOS	172
5.2.1 Balanço de massa em sistemas reativos	172
5.2.2 Equilíbrio químico	173
5.2.3 Cinética química	174
5.2.4 Reatores ideais	175
5.3 MODELOS DE REATORES NO ASPEN PLUS	177
5.4 ESPECIFICAÇÕES DE PROJETO (DESIGN SPECS)	178
5.4.1 Definição das variáveis da especificação	179
5.4.2 Definição da especificação de projeto	179
5.4.3 Configurações da variável manipulada	179
5.5 EXERCÍCIOS	180
Exercício 5.1. Aromatização de n-heptano	180
Exercício 5.2. Produção de acetato de etila	180
Exercício 5.3. Produção de propilenoglicol pela hidratação de óxido de propileno	180
Exercício 5.4. Produção de fenilbenzeno pela desidrogenação de benzeno	181
GABARITO	186
CAPÍTULO 2	186

Exercício 2.1. Tanque Flash	186
CAPÍTULO 3	190
Exercício 3.1. Resfriamento de metanol e água utilizando Heaters	190
Exercício 3.2. Mistura de correntes - Pontos de bolha e orvalho	197
Exercício 3.3. Trocador de calor cocorrente	203
Exercício 3.4. Trocador de calor contracorrente	207
Exercício 3.5. Reaproveitamento de calor na produção de acetaldeído	209
CAPÍTULO 4	215
Exercício 4.1. Destilação	215
Exercício 4.2. Componente-chave leve e componente-chave pesado na destilação	217
Exercício 4.3. Estudo de sensibilidade de uma coluna de absorção	220
Exercício 4.4. Otimização de uma coluna de destilação	222
CAPÍTULO 5	225
Exercício 5.1. Aromatização de n-heptano	225
Exercício 5.2. Produção de acetato de etila	229
Exercício 5.3. Produção de propilenoglicol pela hidratação de óxido de propileno	231
Exercício 5.4. Produção de fenilbenzeno pela desidrogenação de benzeno	234
APÊNDICE A: MODELOS TERMODINÂMICOS	263
APÊNDICE B: FLUXOGRAMA DO ASSISTENTE DE SELEÇÃO DE MODELO TERMODINÂMICO	265
APÊNDICE C: INTRODUÇÃO AO FORTRAN NO ASPEN PLUS	266
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	268

APRESENTAÇÃO

O Aspen é um *software* de enorme valor para as/os Engenheiras/os Químicas/os. Com uma interface relativamente simples ele prevê o desempenho de determinado processo. Ele permite à/ao usuária/o montar o fluxograma desse processo, especificar os equipamentos utilizados, assim como os componentes presentes e suas características, fornecendo no fim os resultados da simulação. Diante do alto custo de equipamentos para construção de unidades em escala piloto, a simulação de processos tem ganhado bastante espaço ao longo das últimas décadas. Com o passar dos anos, a informática tem evoluído rapidamente, possibilitando o surgimento de *softwares* capazes de realizar os mais complexos cálculos. Além disso, existe a influência do design sobre as mudanças na interface gráfica dos programas que conhecemos. Desta forma, ao entrar em contato com um *software* novo, uma das primeiras etapas é conhecer suas ferramentas, o que torna necessária uma exploração prévia de sua interface.

Através de modelos matemáticos, o Aspen prediz como determinado processo se comportará. Mas ele não concebe esse processo; a/o engenheira/o deve fornecer as características, os parâmetros de entrada e escolher o modelo termodinâmico adequado, além de outros dados que serão eventualmente necessários para que o programa funcione corretamente. Por isso, é importante que a/o usuária/o do *software* tenha um profundo conhecimento dos princípios básicos da Engenharia Química e do processo que ela/e queira simular.

Nesse curso, também serão abordados equipamentos fundamentais de uma indústria química. Na primeira aula, serão vistos ciclones e precipitadores eletrostáticos, usados na separação sólido-gás. O segundo capítulo aborda a aplicação da termodinâmica em operações de separação em que é preciso ter conhecimento de equilíbrio de fases: tanques Flash, decantadores líquido-líquido, colunas de destilação e colunas de extração.

Na terceira aula, serão vistos trocadores de calor, equipamentos que permitem a troca de calor entre fluidos que se encontram em diferentes temperaturas. Esses equipamentos são amplamente utilizados como aquecedores, resfriadores, evaporadores e condensadores. Devido à sua vasta aplicação, trocadores de calor de diversos tipos e configurações diferentes foram desenvolvidos. Na aula, você aprenderá a simular esses equipamentos no *software* Aspen Plus®, observando as variáveis envolvidas no seu funcionamento e trabalhando com dois distintos modelos de trocadores de calor disponibilizados por esse *software*.

A quarta aula tem como objetivo apresentar os equipamentos de separação que envolvem o equilíbrio entre duas ou mais fases, como líquido-líquido, líquido-vapor e comentar sobre o cálculo líquido-líquido-vapor. Também, estudar-se-á a otimização de processos e a análise de sensibilidade das variáveis envolvidas através de ferramentas que poderão ser aplicadas não só para estes equipamentos, mas para as operações estudadas nas demais aulas.

A simulação com especificações de projeto será iniciada na quinta aula, com isso, será possível compreender e explorar bastante as ferramentas necessárias para a simulação de processos em que estejam presentes reações químicas. Assim, essa aula terá enfoque no uso de reatores químicos, o coração da indústria química, desenvolvendo conhecimentos para a escolha da ferramenta correta para os respectivos cálculos.

Na indústria é necessário deslocar um fluido de uma operação unitária para outra, para tal são utilizadas as tubulações. Entretanto, deve-se fornecer energia ao fluido a fim de que este deslocamento ocorra e assim surgem as bombas e compressores, que serão o assunto da sexta aula do minicurso. Eles são máquinas que fornecem energia mecânica ao fluido com a finalidade de deslocá-lo nas condições desejadas.

Vale lembrar que o Aspen é apenas um simulador; logo, é necessário que a/o Engenheira/o Química/o tenha uma boa base teórica que lhe permita fornecer corretamente os dados e parâmetros necessários para que o programa cumpra com o seu objetivo.

Esse minicurso foi preparado com muita dedicação e nós esperamos que você faça proveito do conhecimento que adquirirá e não hesite em tirar dúvidas. Procuramos confeccionar uma apostila completa, buscando apresentar os fundamentos teóricos de forma objetiva e sucinta, além de uma abordagem detalhada e explicativa nos exercícios. No fim da apostila, você encontrará as resoluções para todos os exercícios propostos. Com isso, desejamos um ótimo minicurso!

CAPÍTULO 1

1. NOÇÕES BÁSICAS DE SEPARAÇÃO SÓLIDO-GÁS

1.1 OBJETIVO

O foco desta aula é introduzir às/aos participantes do minicurso as ferramentas e demais recursos da interface gráfica do Aspen. Com isso, será capaz de construir fluxogramas de processos, dos quais o software utiliza informações para realizar as simulações. Serão realizados exercícios de forma a explorar esse aprendizado, inicialmente com o mero intuito de entender como configurar e executar uma simulação após a construção de um fluxograma e, posteriormente, resolver problemas aplicados. Nesta aula, esses problemas se tratarão de operações de separação sólido-gás, a fim de também auxiliar a/o aluna/o a diferenciar as principais classes de corrente utilizadas nos processos simulados pelo Aspen. Das ferramentas do pacote AspenTech, somente o Aspen Plus® será usado neste capítulo.

1.2 PRIMEIROS PASSOS

1.2.1 Iniciando o Aspen Plus

Como os exercícios desta aula serão resolvidos no Aspen Plus®, este será o primeiro passo. Para iniciar o programa, vá ao menu do Windows *Iniciar* → *Todos os programas* → *AspenTech* → *Process Modeling V10* → *Aspen Plus®* e então abra o programa Aspen Plus® V10 (ou a versão que esteja usando). Ao abrir, aparecerá uma caixa de diálogo como mostrada na Figura 1.

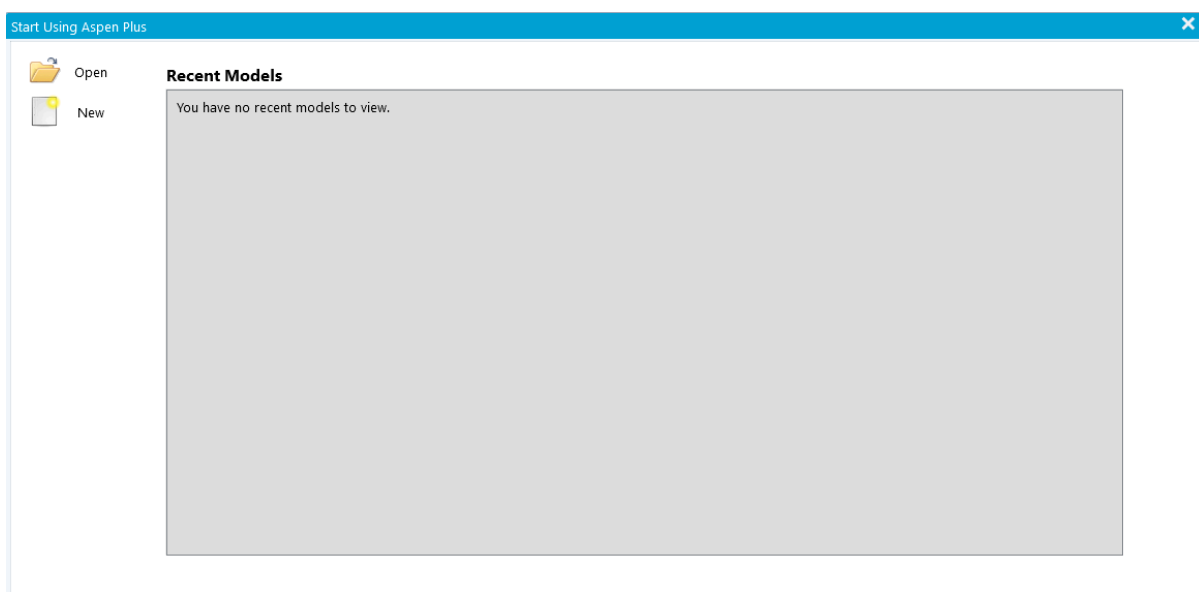


Figura 1- Caixa de diálogo de início do Aspen Plus® V10.

Nessa janela, pode-se abrir um projeto já existente assim como inicializar outra simulação. Os projetos recentes aparecem na tela também. Ao clicar em *New* somos redirecionados para outra caixa de diálogo.

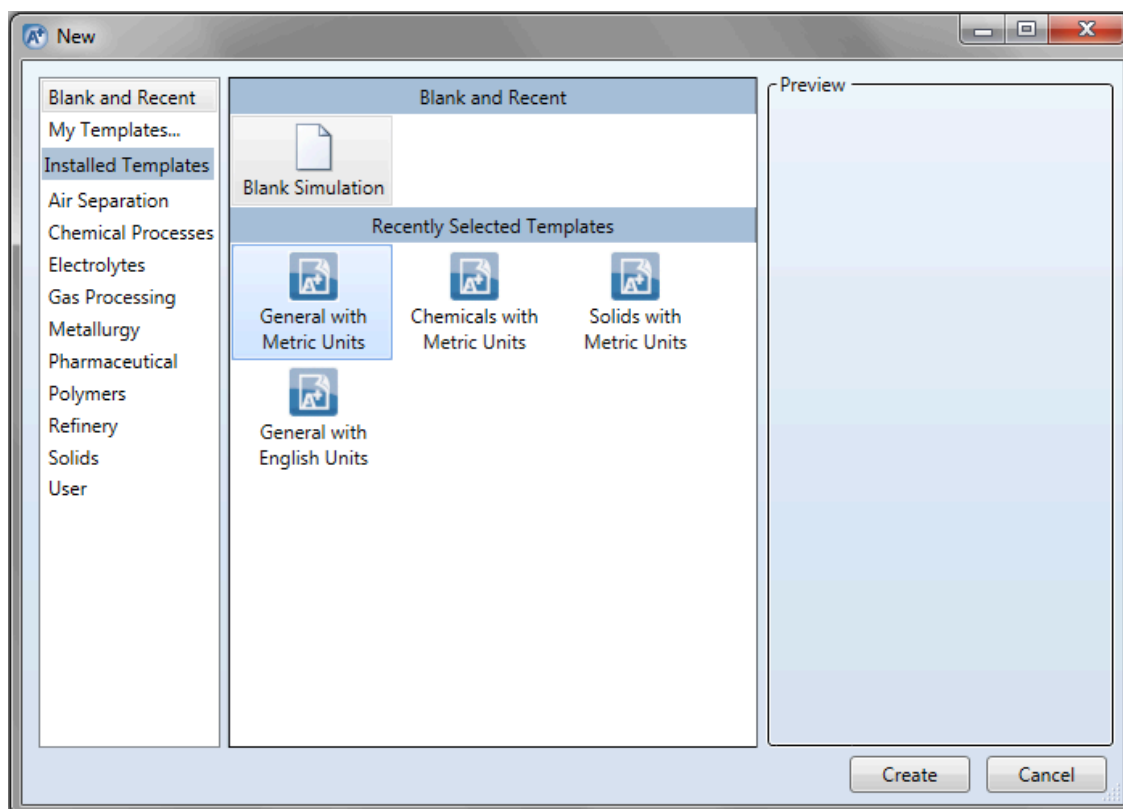


Figura 2 - Caixa de diálogo de início do Aspen Plus® V10.

Nessa janela existem diversas formas de inicialização para a simulação, dependendo do tipo de processo e das unidades desejadas pelo usuário.

1. *Blank Simulation* – gera uma simulação em branco, sem quaisquer configurações definidas;
2. *Templates ou modelos de simulação* – cria uma simulação com base em um modelo, ou seja, com configurações de simulação pré-definidas para diferentes tipos de processos (ex.: refino de petróleo, farmacêutico, sólidos, carvão, etc.);

Ao selecionar a Blank Simulation (1) e clicar em OK, o programa levará um tempo até preparar o ambiente de trabalho e levará a/o usuária/o direto para a escolha de componentes. Selecionando algum outro Template (opção 2), o mesmo ocorre, porém, já com as configurações pré-definidas pelo modelo. Nessa mesma janela encontram-se também:

1. *Lista de modelos* – apresenta todos os modelos da categoria selecionada em uma das abas da janela. Para cada um dos modelos, é possível já selecionar o sistema de unidades que será usado naquela simulação: *English Units* para o sistema inglês de engenharia e *Metric Units* para o sistema métrico de engenharia;
2. *Preview* – lista as mais importantes configurações pré-definidas no modelo, bem como sua descrição;
3. *Run Type* – caixa para selecionar de qual entidade o programa retirará as informações necessárias para executar a simulação. Por padrão, a opção *Flowsheet* está selecionada, definindo que a simulação será feita a partir de um fluxograma. Durante todo o minicurso somente essa opção será utilizada.

Após selecionar o modelo de simulação, o Aspen Plus® preparará a área de trabalho e o ambiente de simulação. Isso pode levar alguns minutos, então basta aguardar um pouco.

1.2.2 Conhecendo o ambiente de simulações do Aspen Plus

Atualmente, o laboratório de informática da sala EQ18 dispõe de versões do Aspen Plus® 10, 8.4 e 7.3, em que a AspenTech passou a adotar interface gráfica semelhante aos programas do pacote Microsoft Office. Na versão 7.3 existem frisos que agrupam ferramentas com funções semelhantes. Na versão 8.4 é um pouco diferente, o Aspen Plus® apresenta uma barra de menus e uma barra de ferramentas, como mostrado na Figura 3, e na versão 10 a interface se manteve igual a versão 8.4. Caso apareça a tela de escolha de componentes, clique no botão *Simulation*, no canto inferior esquerdo. A tela de simulação é o ambiente inicial de trabalho:

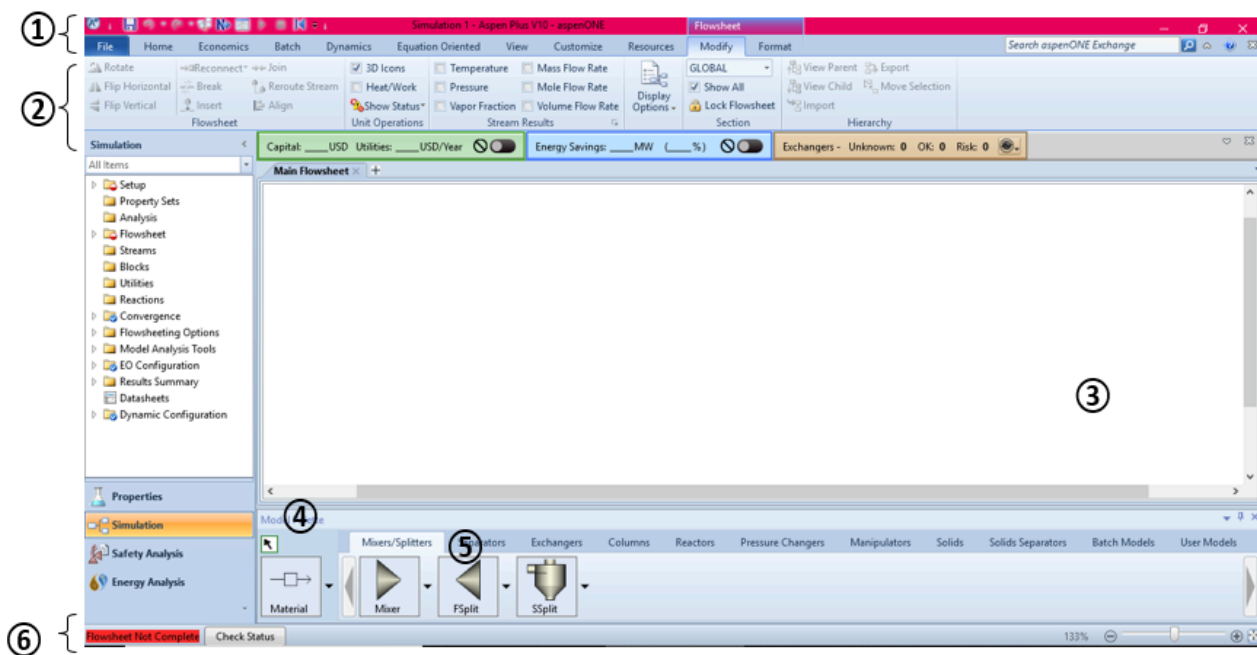


Figura 3 - Tela inicial de simulação do Aspen Plus® V10.

Aqui, encontram-se:

1. Barra de menus – reúne recursos agrupados em diferentes categorias, quanto à visualização do programa, ao fluxograma e opções para execução da simulação, por exemplo;
2. Barra de ferramentas – reúne os principais atalhos do programa;
3. Área de trabalho – nela será construído o fluxograma do processo que será simulado, assim como exibe de forma concisa os resultados de uma simulação;
4. Linhas ou correntes – linhas que conectam os equipamentos em um fluxograma, representando correntes materiais, de trabalho ou de calor;
5. Biblioteca de modelos – reúne os equipamentos que podem ser adicionados ao fluxograma, representados por blocos ou desenhos esquemáticos;
6. Barra de status – reúne algumas informações sobre a simulação. À esquerda, é possível encontrar uma descrição para a entidade sobre a qual o cursor está posicionado. À direita, o endereço em que está salvo o documento aberto ou o caminho padrão definido pelo programa e uma verificação da simulação. Na Figura 3, essa verificação mostra o texto em vermelho Flowsheet Not Complete, o que significa que o fluxograma não está completo.

1.2.3 Barra de menus e barra de ferramentas

Voltando para a janela de *Properties* (canto inferior esquerdo), encontramos uma lista de ferramentas úteis para a simulação. É possível alterar as unidades de utilização do programa nesta janela.

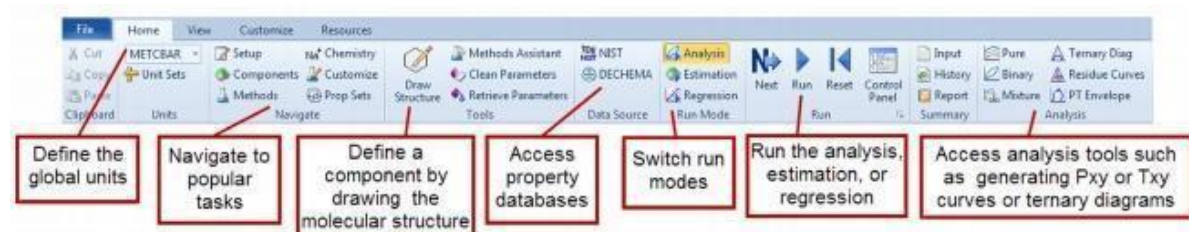


Figura 4 - Barra de menus da janela *Properties*.

Na janela *Simulation* as abas e ferramentas são diferentes, e são resumidas na figura e na tabela abaixo:

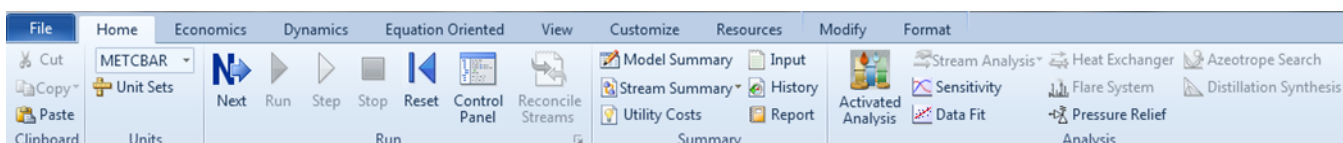


Figura 5 - Barra de menus da janela *Simulation*.

Menu	Descrição e algumas ferramentas
File	Reúne ferramentas que gerenciam arquivos. Abrir, salvar, importar e exportar arquivos. Configurar página e visualizar impressão. Encerrar o programa. Inclui notícias e funcionalidades atualizadas pelo Aspen Plus®.
Home	Reúne ferramentas para edição da simulação em trabalho. Pode ser alterado o sistema de unidades.
View	Gerencia elementos gerais de visualização do documento.
Modify e Format	Ferramentas de edição para o fluxograma. Inserir temperatura, pressão. Alterar formato dos equipamentos. Alterar forma de texto e tabela na área de trabalho.
Dynamics	Entrada de dados para uma simulação dinâmica.
Resources	Aba com exemplos. Possui o botão de ajuda, acessível também pelo atalho F1.

Tabela 1 - Barra de menus da janela *Simulation*.

1.3 ARQUIVO DE AJUDA

Como se pode ver na aba *Resources* do Aspen Plus®, há um botão denominado *Help*. Esse botão, que também pode ser acessado pelo atalho do teclado (**F1**), entra no arquivo de ajuda do programa. Esse é um recurso bastante importante para melhor compreensão do programa. Nele, é possível encontrar, por exemplo:

- Documentação teórica sobre as operações unitárias que podem ser simuladas, como princípios de funcionamento dos equipamentos, equações utilizadas nos cálculos dos mais diversos parâmetros e propriedades de operação, bem como referências bibliográficas de onde essas informações foram retiradas;
- Descrição e dicas de solução (Troubleshooting) para problemas comuns de simulação, por exemplo, de convergência e de erros nos cálculos de propriedades;
- Informações sobre como devem ser preenchidos os formulários de configuração da simulação;

- Informações sobre quais linhas podem ser ligadas aos blocos dos equipamentos que compõem o fluxograma;
- Listagem e informações sobre as propriedades físicas que podem ser calculadas e os modelos termodinâmicos que podem ser empregados.

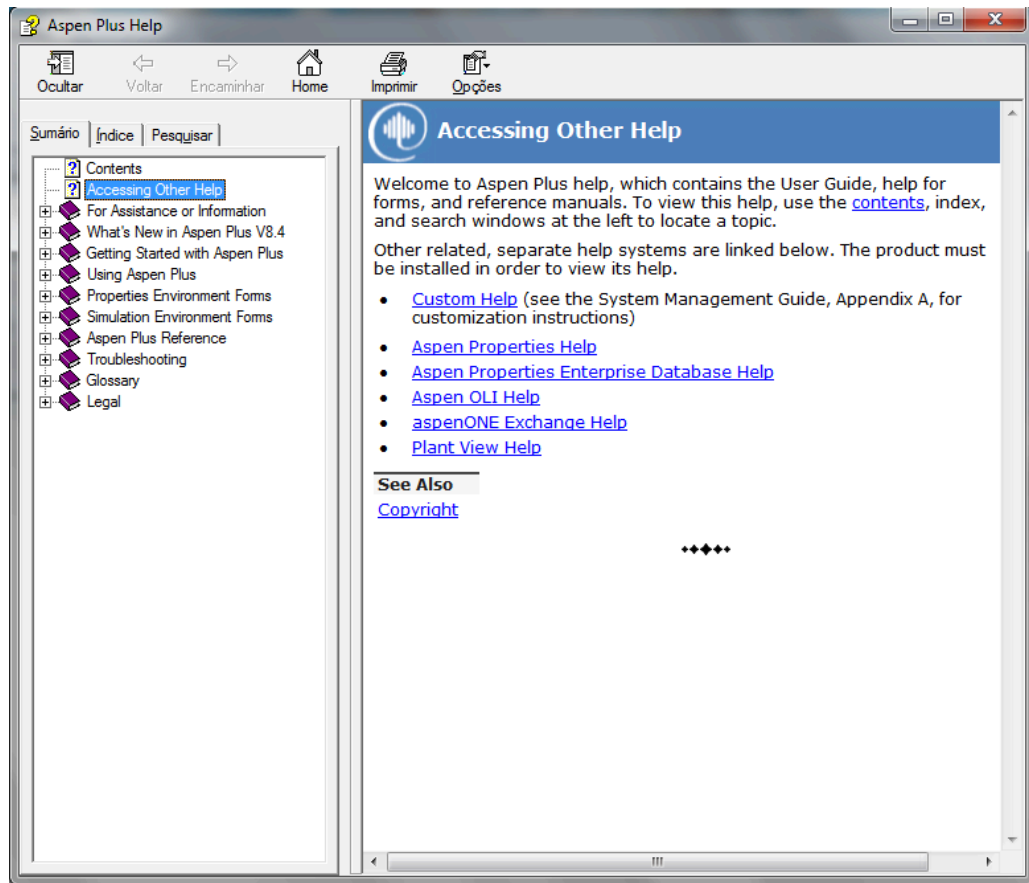


Figura 6 - Visão geral do arquivo de ajuda do programa.

1.4 CONSTRUÇÃO DE FLUXOGRAMAS

Como no minicurso serão feitas simulações para a opção *Flowsheet* escolhida como *Run Type*, é imprescindível entender a construção do fluxograma, uma vez que isso é obrigatório para executar uma simulação desse tipo.

1.4.1 Selecionando resultados exibidos na janela do fluxograma

A área de trabalho em que se encontra o fluxograma (janela *Simulation*) pode conter as mais diversas informações sobre o processo após a conclusão da simulação. Para isso, na *barra de menus*, clique em *Modify* (*Flowsheet*) e então as ferramentas e caixa de botões será como a seguinte:

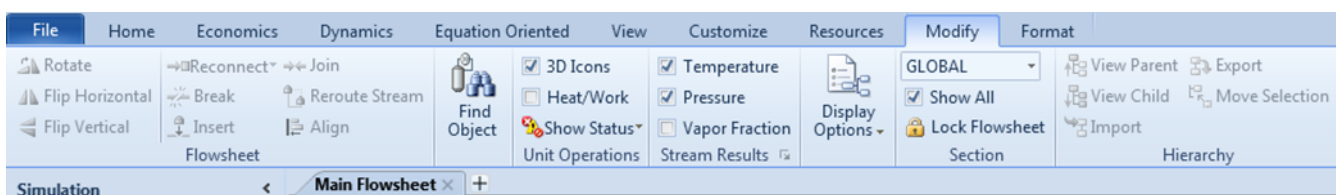


Figura 7 - Opções de exibição de resultados no fluxograma na aba Modify

Nessa aba, encontram-se:

1. *3D Icons* – altera a forma de visualização dos ícones na área de trabalho;
2. *Heat/Work* – exibir resultados dos cálculos para as linhas de calor (*Heat*) e de trabalho (*Work*);
3. *Show Status* – exibir ícones de notificação sobre erros e avisos associados aos cálculos para cada componente do processo;
4. *Stream results (Temperature/Pressure/Vapor Fraction)* – exibir resultados e informações sobre as linhas materiais (*Material*), como temperatura, pressão, fração de vapor, vazão mássica, volumétrica ou molar.

Lembre-se que você também pode mudar as unidades de todas as medidas, e que o botão está na página *Home*.

Para mudar as configurações, clique no botão *File*, abaixo da barra de título, à esquerda. Clique nele e então no botão *Options* no canto direito do menu que aparecerá. Vá à categoria *Flowsheet* e você poderá editar não só as opções que já comentamos, mas outras quanto ao estilo e aparência do seu fluxograma, como mostra a Figura 8.

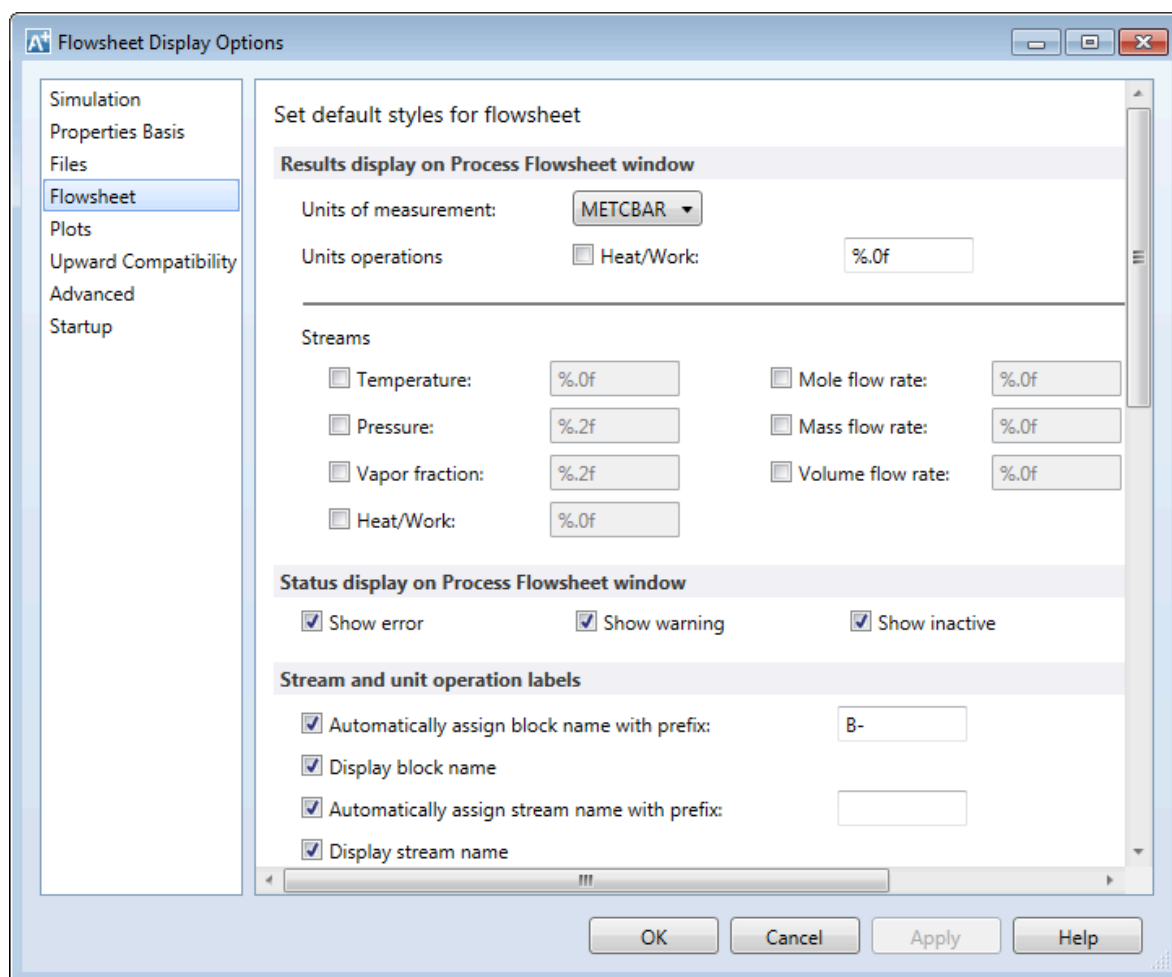


Figura 8 - Opções de exibição de resultados no fluxograma (versões recentes do Aspen Plus).

1.4.2 Linhas ou correntes de processo

O Aspen Plus® trabalha com três tipos diferentes de linhas, que têm como função conectar equipamentos, transferindo informações e resultados de acordo com o tipo de linha. A tabela a seguir traz informações sobre cada um desses tipos.

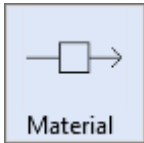
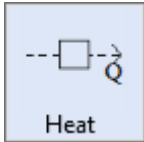
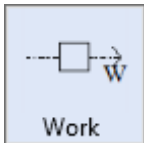
Linha	Ícone	Descrição
Linha de material		Carrega os componentes dentro do processo. Esse tipo de linha é obrigatório para completar o fluxograma. Para as correntes de materiais de alimentação, deve-se especificar sua vazão, composição e duas condições termodinâmicas, como temperatura, pressão e fração de vapor. No caso de correntes de reciclo, por exemplo, o usuário pode fornecer estimativas iniciais para os cálculos.
Linha de calor		Realiza conexões entre equipamentos que envolvem cálculo de carga térmica em seu balanço de energia. Equipamentos cujos modelos calculam carga térmica podem ter linhas de calor na sua saída. Equipamentos cujos modelos aceitam carga térmica como informação podem ter linhas de calor alimentadas a eles. O Aspen adota a convenção de sinais como positivo quando calor é fornecido ao equipamento e negativo quando calor é removido.
Linha de trabalho		Realiza conexões entre equipamentos que envolvem cálculo de potência em seu balanço de energia. Equipamentos cujos modelos requerem especificações de potência podem receber linhas de trabalho. Equipamentos cujos modelos calculam potência podem ter linhas de trabalho na sua saída. A convenção de sinais é contrária à das linhas de calor: o trabalho é positivo quando removido do equipamento e negativo quando fornecido ao equipamento.

Tabela 2 - Linhas ou correntes do processo.

1.4.3 Biblioteca de modelos

Como vimos, o Aspen possui diferentes tipos de correntes para conectar os equipamentos no fluxograma do processo que será simulado. O programa possui diversas opções de operações unitárias, cujos equipamentos são representados por modelos ou blocos, apresentados na Figura 9.

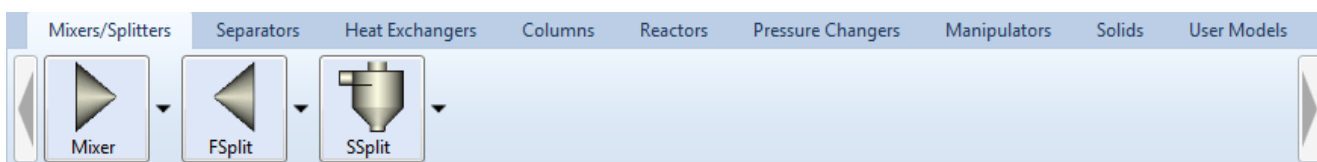


Figura 9- Biblioteca de modelos do Aspen Plus.

Observe que os equipamentos estão divididos em categorias, como mostram as abas acima da lista de ícones. Cada categoria agrupa operações com finalidades semelhantes:

- *Mixers/Splitters*: blocos que efetuarão a mistura ou fracionamento de correntes.
- *Separators*: alguns equipamentos de separação, como tanque Flash e decantador líquido-líquido.
- *Heat Exchangers*: trocadores de calor.
- *Columns*: diversos tipos de colunas de separação, como as de destilação e de extração.

- *Reactors*: reatores de diferentes classificações e parâmetros para simulação.
- *Pressure Changers*: equipamentos para transporte de fluidos e outros associados às tubulações da planta. Reúne bombas e compressores, além de tubos e válvulas.
- *Manipulators*: blocos para manipulação do processo, como mudança na classe da corrente, alteração arbitrária das propriedades de uma corrente, entre outras.
- *Solids*: equipamentos de separações unitárias com sólidos, como ciclone, filtro, precipitador eletrostático, peneira, entre outros.

1.4.4 Organizando o fluxograma

Ter um fluxograma organizado não é pura questão de estética ou de preferência. Um processo grande e complexo pode ser de difícil visualização e entendimento se o fluxograma for feito de qualquer forma. Na Figura 10 (a), podemos ver um tanque de mistura ao qual estão conectadas correntes adicionadas de qualquer forma. Além disso, nem as correntes nem o bloco do tanque receberam um nome.

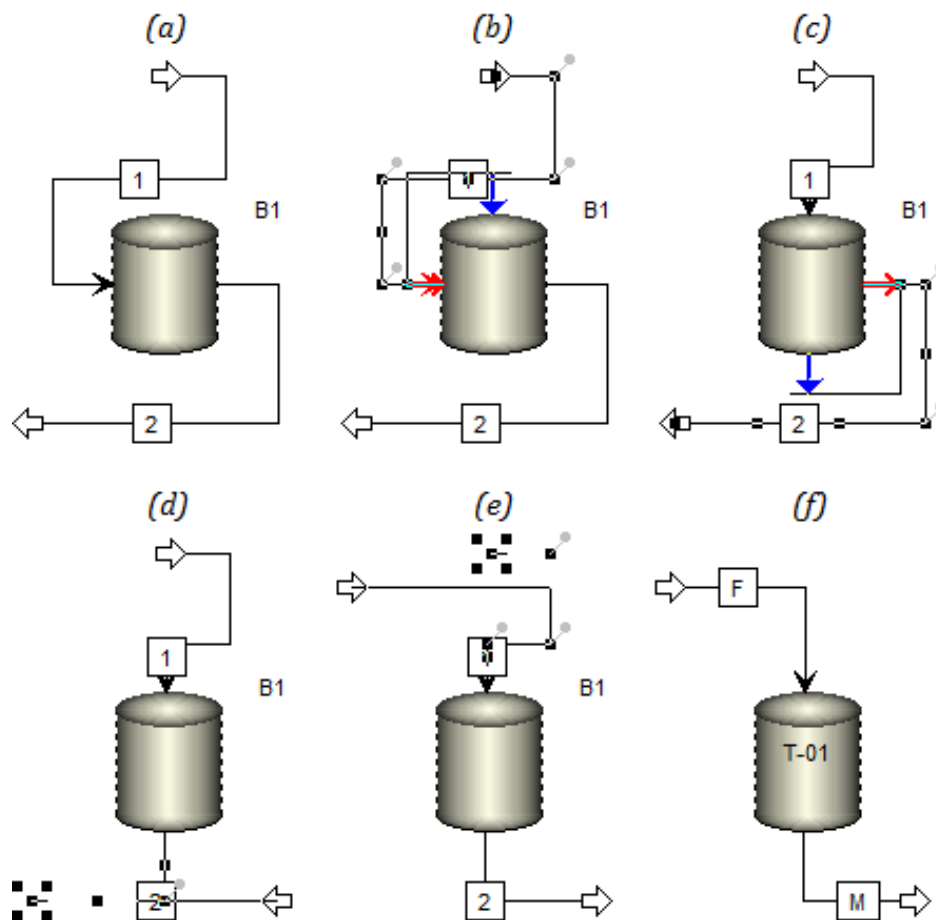


Figura 10 - Fluxograma de tanque de mistura com corrente de alimentação e de saída.

Ao clicar em uma corrente, pequenos quadrados pretos aparecerão nos cantos e nas medianas dos segmentos mais compridos. Você pode alterar a forma das correntes clicando e arrastando esses quadrados. Na Figura 10 (b) começamos a posicionar melhor a corrente de alimentação, arrastando a seta vermelha (à esquerda do tanque) até o seu topo, mudando o ponto onde a corrente se conecta ao bloco. Na Figura 10 (c), fazemos o mesmo para a corrente de saída, fazendo com que ela saia do fundo do tanque. Pensando em um fluxograma que segue da esquerda para a direita, clicamos e arrastamos as extremidades (as setas brancas sem preenchimento) das duas correntes para posições mais adequadas, conforme as Figura 10 (d) e 10 (e). Como o ponto de destino da corrente de saída continua apontando para a esquerda, devemos clicar com o botão direito na corrente e em *Rotate Icon → Flip Horizontally*. Por fim, renomeamos as correntes e o bloco. Isso pode ser feito com o atalho Ctrl+M após clicar no objeto que deseja renomear ou então clicando nele com o botão direito e em *Rename Block*. Assim, chegamos ao resultado da Figura 10 (f).

Arrumar um fluxograma dessa forma nem sempre é tão simples, especialmente quando as correntes e os blocos insistem em continuarem desalinhados. Na Figura 11 (a) encontramos esse tipo de situação, mas, felizmente, o Aspen Plus® possui uma ferramenta que agiliza a tarefa. Clicando em um local vazio do fluxograma e arrastando até um ponto em que a caixa de seleção compreenda todas as correntes e os blocos que você deseje alinhar, selecionamos os três tanques e todas as correntes conectadas a eles, como mostra a Figura 11 (b).

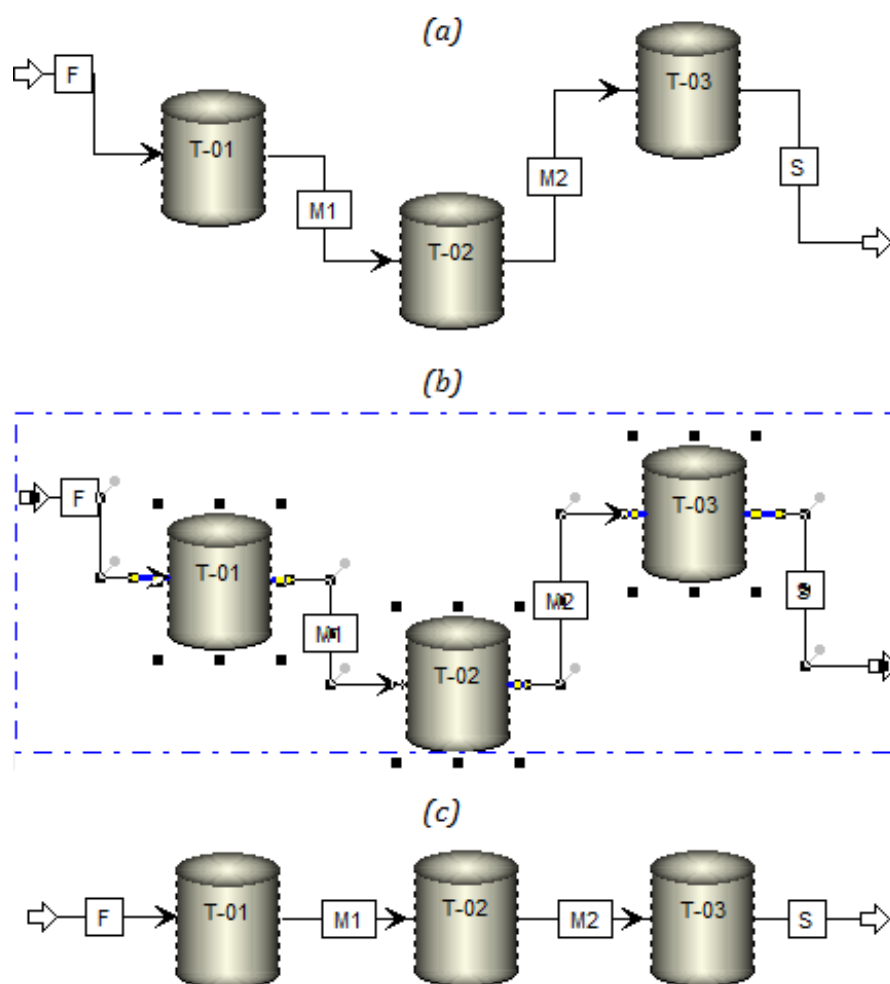


Figura 11 - Fluxograma de um conjunto de tanques de mistura.

Em seguida, basta usar o atalho **CTRL + B** ou, após clicar com o botão direito em qualquer um dos objetos selecionados, clicar em *Align Blocks*.

1.5 CONFIGURAÇÕES GLOBAIS DA SIMULAÇÃO

O Aspen Plus® pode trabalhar com diferentes tipos de substâncias, desde as mais comuns até as mais complexas para se definir um modelo que descreva sua natureza química e propriedades termodinâmicas. Dependendo não só do tipo de substância, mas também se é um fluido ou um sólido, além de como esse sólido é considerado, deve-se definir a classe das correntes do processo.

Assim, torna-se necessário apresentar primeiramente o formulário de configurações globais do Aspen Plus®. Ao abrir o Setup, você deverá encontrar o formulário apresentado na Figura 12.

Figura 12 - Formulário *Setup*.

1.5.1 Sistemas de unidades

Aqui, você poderá dar um título para o seu trabalho, bem como definir globalmente o sistema de unidades de medida dentre os seguintes:

- ENG – sistema inglês de engenharia.
- MET – sistema métrico de engenharia.
- METCBAR – sistema padrão do Aspen, semelhante ao MET. Trabalhará com a temperatura em graus Celsius e pressão em bar, por exemplo.
- SI – Sistema Internacional.

Podemos também criar nosso próprio sistema de unidades. Enquanto você estiver na janela de um formulário, você encontra à esquerda todos os formulários organizados em pastas de trabalho. Expanda a pasta *Setup* e clique em *Units-Sets*. Na área de trabalho, você verá a janela mostrada na Figura 13.

	Name	Status
▶	ENG	Input Complete
▶	MET	Input Complete
▶	METCBAR	Input Complete
▶	SI	Input Complete

New...

Edit

Delete

Copy

Rename

Hide

Reveal

Paste

Figura 13 - Lista de sistemas de unidades do Aspen.

Aqui são encontrados todos os sistemas de unidades implementados no programa e os criados pela/o usuária/o. Para criar um novo sistema, basta clicar em *New* e dar um nome a ele.

Figura 14 - Janela para configuração de um novo sistema de unidades.

Observe na Figura 14 que é possível usar um sistema já existente como base para seu novo sistema de unidades. Isso facilita bastante, já que são bastante numerosas as unidades que você deve configurar. Por exemplo, a imagem mostra a aba *Standard*, onde estão presentes as unidades mais comuns, como as relacionadas à vazão (*Flow related*), à temperatura (*Temperature related*) e à pressão (*Pressure related*). Nas outras abas você encontra as unidades de medidas:

- De calor (*Heat*);
- De propriedades de transporte (*Transport*);
- De concentração (*Concentration*);
- De dimensão (*Size*);
- Para análises financeiras (*Currency*);
- Que não se encaixam as outras categorias (*Miscellaneous*).

E informações sobre o sistema que você está configurando, na aba *Information*.

1.5.2 Parâmetros globais

Na Figura 15, encontramos no lado direito da janela o conjunto Global Settings. Ele reúne todos os parâmetros globais para a sua simulação:

Figura 15 - Formulário Setup.

- *Input mode*: define se os dados de entrada para a sua simulação são para regime permanente ou estacionário (*Steady-State*) ou em regime transiente* (*Dynamics*).
- *Stream class*: define globalmente a classificação das correntes do processo simulado, como será visto posteriormente.
- *Flow basis*: define em que base as vazões no processo estarão, podendo ser em base molar (*Mole*), base mássica (*Mass*) ou em base normal volumétrica** (*StdVol*).
- *Ambient pressure*: define a pressão ambiente. Informação importante para cálculos que considerem a pressão relativa. Por padrão, o Aspen usa a pressão atmosférica no nível do mar.
- *Ambient temp.*: define a temperatura ambiente. Informação necessária apenas quando o modo de entrada é definido para regime transiente.
- *Valid phases*: determina quais fases serão consideradas nos cálculos. Se deixado em branco, essa opção será definida localmente em cada bloco.
- *Free water*: opção especial para cálculos de simulação de processos em que estejam presentes sistemas água-hidrocarbonetos ou água-orgânicos. Ao selecionar a opção “Sim”, você definirá que o Aspen tratará a água presente nesses sistemas como uma segunda corrente líquida pura, sempre que for possível a sua decantação. A opção “*Dirty Water*” usará um modo de cálculo para tratar a água decantada desses sistemas como uma segunda corrente líquida, mas com traços de componentes hidrocarbonetos ou outros compostos orgânicos.
- *Operational year*: determina por quanto tempo a planta simulada estará em operação durante um ano.

*Regime transiente: processos em regime transiente podem ter seus dados e seu fluxograma construídos no Aspen Plus®, mas a sua simulação é preparada em outro programa da AspenTech, o Aspen Dynamics®.

**Normal volume: essa base é definida como o volume ocupado por uma substância a 60°F e 1 atm. Por padrão, o Aspen utiliza para essa opção o normal volume líquido. Esse valor é convertido pelo programa através de diferentes correlações, como a Equação de Rackett. Caso você queira usar não o normal volume líquido, mas o normal volume gasoso, deve-se usar a base molar com unidade que tenha um “s” (de *Standard*), como MMscfd ou MMscmh. Através dessa opção, definindo o normal volume gasoso com unidade normal pé cúbico (*scf*), o gás é avaliado como um gás ideal a 60°F e 14,696 psia e, com unidade normal metro cúbico (*scm*), como gás ideal a 0°C e 1 atm.

1.5.3 Classificação das correntes do processo

Agora que entendemos melhor as configurações globais, resta conhecer uma das mais importantes, que é a classificação das correntes (*Stream class*). Expandindo a lista de opções para esse campo, você encontrará as classes apresentadas na Figura 16.

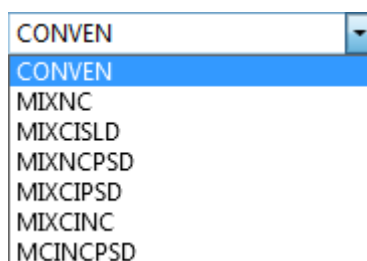


Figura 16 - Classificação global das correntes do processo.

Por padrão, o Aspen seleciona a classe convencional (**CONVEN**). Esta opção é válida para simulações de processos que não envolvam sólidos. Pode-se já concluir que sólidos são mais complexos de serem avaliados e essa avaliação é feita separando uma corrente em duas ou mais, dependendo do tipo de sólido. A parte convencional da corrente é chamada **MIXED**, cujo prefixo é **MIX** ou **M**. Nela encontram-se todos os componentes fluidos ou convencionais. Por convencional, entende-se aquele componente cujas propriedades físicas e químicas podem ser expressas usando o banco de dados e os modelos e equações existentes no Aspen.

Sólidos convencionais são tratados pelo termo **CI** e os não convencionais, pelo termo **NC**. Para a simulação de vários equipamentos, é necessário fornecer a distribuição granulométrica dos sólidos presentes. Neste caso, a classe recebe o sufixo **PSD**, enquanto que o sufixo **SLD** significa que não é necessário fornecer a distribuição granulométrica. Assim, temos as seguintes opções:

- CONVEN: corrente tipo MIXED, formada apenas por fluidos convencionais.
- MIXNC: corrente dividida em MIXED e em outra de sólidos não convencionais sem distribuição granulométrica.
- MIXCISLD: corrente dividida em MIXED e em outra de sólidos convencionais sem distribuição granulométrica.
- MIXNCPSD: corrente dividida em MIXED e em outra de sólidos não convencionais com distribuição granulométrica.
- MIXCIPSD: corrente dividida em MIXED e em outra de sólidos convencionais com distribuição granulométrica.
- MIXCINC: corrente dividida em MIXED e em outras duas, uma com sólidos não convencionais e outra com sólidos convencionais, ambas sem distribuição granulométrica.
- MCINCPSD: corrente dividida em MIXED e em outras duas, uma com sólidos não convencionais e outra com sólidos convencionais, ambas com distribuição granulométrica.

1.5.4 Personalizando os intervalos de distribuição granulométrica

Muitas operações com sólidos dependem de medidas que são diferentes de acordo com o tamanho da partícula. É muito difícil que, em uma quantidade de sólidos particulados, todas essas partículas sejam de mesmo tamanho e formato. Como seria inviável analisar cada partícula individualmente, torna-se necessária a presença da Estatística. Quando não há problema, podemos avaliar a operação com base em um diâmetro médio de partícula, mas, mesmo uma quantidade maior de medidas estatísticas não substitui uma distribuição.

No estudo de sólidos particulados, é importante o conhecimento de sua distribuição granulométrica (*particle size distribution* ou *PSD*).

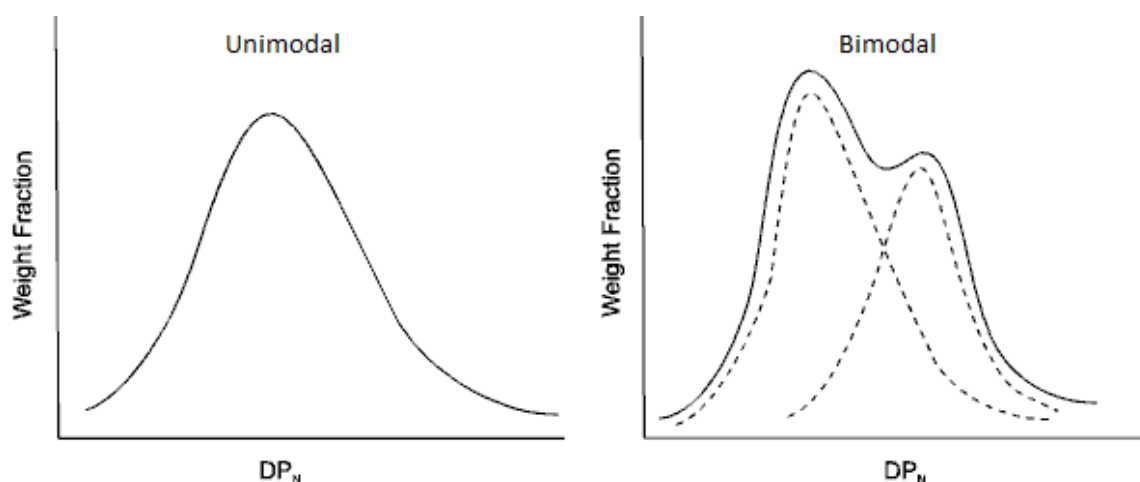


Figura 17 - Exemplos de distribuições. A distribuição unimodal exibe um comportamento semelhante à distribuição normal. Distribuições com dois picos são chamadas de distribuições bimodais e, com mais picos, multimodais.

Na análise granulométrica, diferentes faixas de diâmetro de partícula são avaliadas quanto à fração mássica que representam com relação ao conjunto. Quanto menores forem essas faixas, mais contínua é a curva que pode ser construída a partir da distribuição, que pode apresentar um ou mais picos. O mais interessante da observação gráfica dessa análise é ter conclusões a respeito da homogeneidade das partículas. Se o gráfico desenhado for mais achatado, significa que o diâmetro das partículas é consideravelmente heterogêneo e, havendo um pico e este for bastante acentuado, teremos uma distribuição mais homogênea.

Entretanto, nem sempre está disponível a curva de distribuição granulométrica. Assim, a análise granulométrica é feita com faixas de granulometria, cujas frações mássicas são avaliadas. O Aspen Plus® traz como padrão a tabela de distribuição granulométrica com dez faixas de granulometria de 0 a 200 micra, cada intervalo com 20 micra. Caso deseje editar essa tabela, abra o Setup e expanda essa pasta de trabalho. Dentro dela, encontrará outra pasta chamada Solids e, dentro dela, o formulário PSD, como mostra a Figura 18.

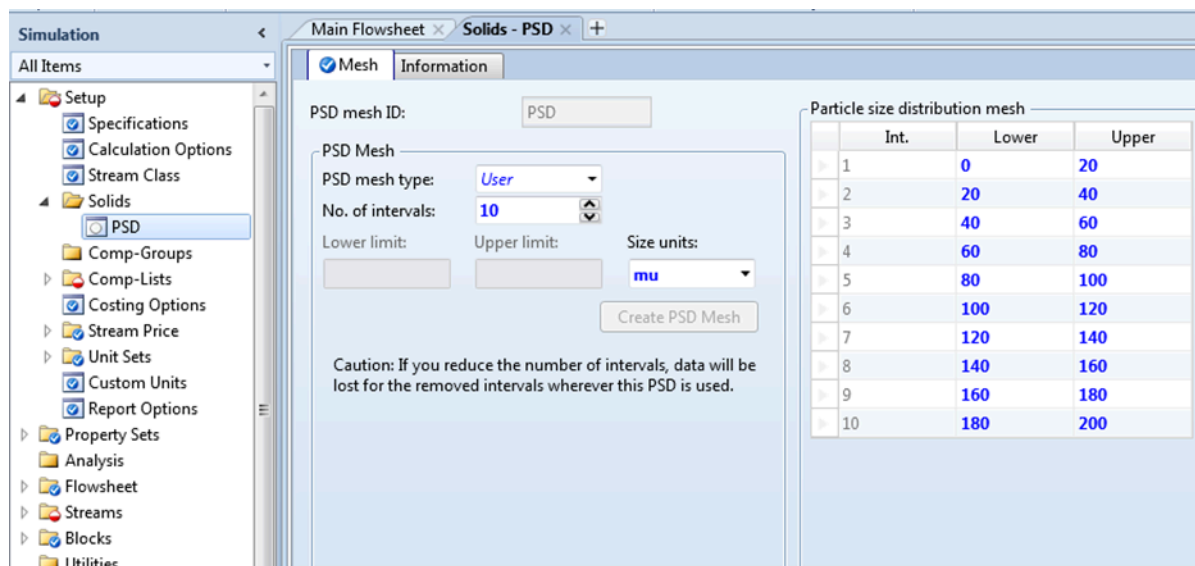


Figura 18 - Janela para configuração das faixas granulométricas.

1.6 EXECUTANDO UMA SIMULAÇÃO

Agora que sabemos configurar os parâmetros de uma simulação e construir fluxogramas, vamos colocar tudo o que foi visto até aqui em prática, para então sabermos o que é necessário para executar uma simulação. Para isso, vamos resolver um exemplo.

1. Após abrir o Aspen Plus®, crie uma simulação a partir do modelo General with Metric Units.
2. Construa o fluxograma como mostrado na Figura 19.

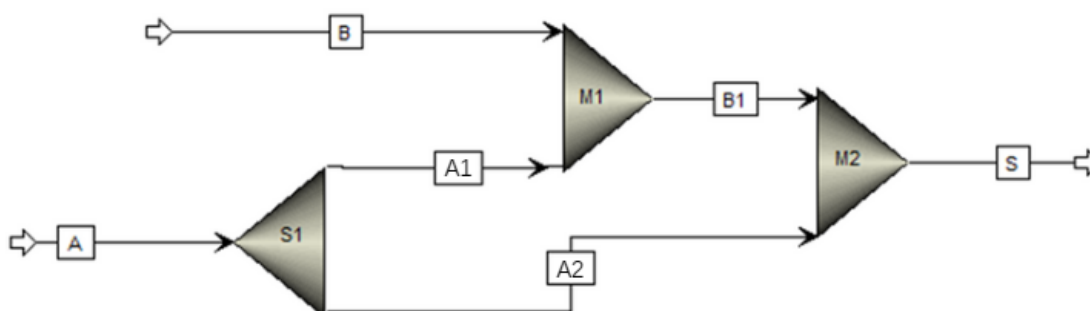


Figura 19 - Fluxograma do exemplo da Aula 1.

O bloco S1 é um bloco FSplit e os blocos M1 e M2 são blocos Mixer. As correntes mostradas no fluxograma são todas do tipo *Material*. Também é importante observar as extremidades das linhas de corrente no fluxograma. Nas correntes A e B, sua origem é representada por uma flecha grande e vazia. Isso significa que ela possui dados de entrada e não parte de algum bloco. Na corrente S, pode-se observar que o destino da corrente é representado também por uma flecha grande e branca, o que significa que seus resultados de saída não estão sendo levados a outro bloco. Quando a origem de uma corrente está ligada à saída de algum bloco,

não há uma flecha e, quando o destino de uma corrente está ligado à entrada de algum equipamento, a flecha passa a ser preenchida e menor.

Isso é importante para perceber erros na montagem do fluxograma. Caso alguma corrente que deveria estar conectando dois blocos não tenha sido colocada corretamente, você poderá notar isso pela representação da sua origem e/ou do seu destino.

3. Concluído o fluxograma, você encontrará no canto direito da janela do programa, na Barra de Status, a mensagem Flowsheet Complete. Caso apareça Required Input Incomplete significa que faltam dados das correntes (como escolha dos componentes, que será vista a seguir), mas não significa que o fluxograma está errado. Clique no botão Next ou **F4** para ser direcionado a próxima etapa.
4. Abra a janela do Setup e verifique se as configurações globais estão corretas. Precisaremos usar o sistema de unidades METCBAR e classificação global das correntes CONVEN. O restante pode ser mantido como o padrão.

1.6.1 Especificações dos componentes em uma simulação

Esses quatro primeiros passos consistiram do que havíamos visto até aqui. Temos as configurações globais e o fluxograma preparados. Agora, precisamos escolher as equações usadas, os componentes do processo e, também, inserir os dados do projeto. Primeiro, vamos especificar os componentes.

5. Clicando em Next (ou usando o atalho **F4**), você será enviado para a janela de especificação dos componentes.

Component ID	Type	Component name	Alias
WATER	Conventional	WATER	H2O
ETHANOL	Conventional	ETHANOL	C2H6O-2

Figura 20 - Tabela para especificação dos componentes para a simulação.

A Figura 20 mostra a tabela de componentes já especificados para este exemplo. Na aba *Selection*, temos que listar todos os componentes existentes no processo inteiro, seja matérias-primas, produtos ou intermediários do processo. Observe que listamos dois componentes: água e etanol. Ao escolher os componentes, devemos lembrar que a interface do programa está em inglês, portanto, ao buscar componentes no banco de dados do Aspen, deve escrever o seu nome em inglês.

A primeira coluna é *Component ID*. Se você souber algum termo que identifique seu componente no banco de dados, pode digitá-lo nesse campo, como o nome ou a fórmula química. Na coluna *Alias*, encontramos a fórmula química daquele componente. Entretanto, não se esqueça da existência de isômeros, então existem muitas substâncias que possuem mesma fórmula química. Para diferenciá-las, o banco de dados guarda a fórmula com algum sufixo. Por exemplo, as formas alotrópicas do carvão são o grafite e o diamante. No banco de dados, o carvão grafite é identificado como C e o diamante, como C-D. Quanto a isômeros, já encontramos um exemplo no que estamos resolvendo. O etanol e o éter dimetilico são isômeros, então o álcool é identificado por C2H6O-2 e esse éter, por C2H6O-1.

Em todo caso, um recurso muito útil pode ser usado, que é o mecanismo de busca do programa. Na janela de especificação dos componentes, podemos encontrar abaixo da tabela o botão *Find*. Ao clicar nele, a janela mostrada na Figura 21 será exibida.

Compounds Databanks

Search criteria

☐ Begins with

Name or Alias: ☒ Contains ☐ Equals

Compound class:

Molecular weight: From To

Boiling point: From To

Compounds found matching the specified criteria

Compound name	Alias	Databank	Alternate name	MW	BP <C>	CAS number	Compound class
DIETHYLENE-GLYC	C7H16O3-D1	APV732.PU	2-(2-Propoxyethyl)	148,2	214,84	6881-94-3	OTHER-POLYFUNCTIONAL
METHYL-ETHANO	C3H9NO	APV732.PU	(2-Hydroxyethyl)	75,11	158	109-83-1	POLYFUNCTIONAL
P-TOLUALCOHOL	C8H10O-D2	APV732.PU	(4-Methylphenol)	122,1	217	589-18-4	AROMATIC-ALCOHOL
EG-MONOBUTYL-	C8H16O3	APV732.PU	1-Acetoxy-2-butanol	160,2	192	112-07-2	POLYFUNCTIONAL

Matches found : 94

Figura 21 - Janela de busca de componentes do banco de dados do Aspen.

No box *Search criteria*, definimos as preferências para a busca, como preferências sobre a busca por nome, classe do componente, peso molecular e temperatura normal de ebulição. Ao clicar em *Find Now*, serão exibidos todos os componentes que se encaixam nos critérios selecionados. Note que, na Figura 21, procuramos por um componente cujo nome contém o termo “ethanol”. Assim, 94 resultados foram encontrados, dos quais são exibidos seu nome, sua fórmula química (com algum sufixo, caso exista outro componente com a mesma fórmula), peso molecular (MW), temperatura normal de ebulição (BP), registro CAS (do banco de dados do *Chemical Abstracts Service*, divisão da Sociedade Americana de Química) e sua respectiva classe.

Use a forma que mais achar conveniente para escolher a água e o etanol e vamos voltar à Figura 20. Observe a coluna *Type*. Assim como escolhemos anteriormente a classe das correntes na simulação, também temos que selecionar o tipo de cada componente que estamos trabalhando. Cada tipo terá sua aplicação de acordo com o tipo de processo que se deseja simular. Neste minicurso, nos restringiremos ao uso de apenas dois desses tipos: *Conventional* e *Solid*.

1.6.2 Especificando o modelo termodinâmico

Este é um dos principais assuntos da segunda aula deste minicurso, então você verá com maiores detalhes o procedimento para a escolha do modelo termodinâmico mais adequado no capítulo da Aula 2. Nesta aula, vamos apenas inserir as informações necessárias para prosseguir com o exemplo que estamos resolvendo.

6. Clicando em *Next* novamente, você será encaminhado à janela de escolha do modelo termodinâmico. Neste exemplo, usaremos o modelo IDEAL.

Feito isso, a janela do *Physical properties* deverá ficar como mostrado na Figura 22.

Figura 22 - Especificação do modelo termodinâmico para o exemplo da Aula 1.

1.6.3 Especificação das correntes do processo

Com exceção do fluxograma e as configurações globais, todos os outros passos realizados até aqui são feitos no ambiente *Properties* nas versões do Aspen Plus® a partir da 7.3.2. No caso, passaríamos para o ambiente *Simulation*. Se estivéssemos trabalhando com versões anteriores (7.1 ou 7.3), faríamos todas as configurações no mesmo ambiente. Clique na janela *Simulation* para a próxima etapa.

7. Ao clicar em Next quando na janela Simulation, você chegará ao formulário para especificação da primeira corrente com dados incompletos. Você também pode fazer isso clicando duas vezes em alguma corrente do fluxograma.

Para especificar uma corrente, precisamos preencher um formulário para cada uma das correntes. Observe a Figura 23.

Component	Value
ETHAN-01	
WATER	

Total: 0

Figura 23 - Formulário de especificação de uma corrente.

Logo acima, vemos as três primeiras abas: *Mixed*, *CI Solid* e *NC Solid*. Essas abas se referem às subcorrentes que mencionamos anteriormente. Selecionando uma classe diferente da *CONVEN* para a corrente que você está especificando, outra aba além da *Mixed* estará aberta para configuração. De qualquer forma, todas elas têm uma aparência semelhante. No entanto, todas as subcorrentes devem possuir a mesma pressão.

Voltando à aba *Mixed*, precisamos selecionar duas das seguintes propriedades para especificar as variáveis fixas para a corrente: temperatura, pressão e fração de vapor (total). Feito isso, digitamos nos campos correspondentes tais propriedades e escolhemos sua respectiva unidade de medida.

Para a composição, podemos fazer de diversas formas. Observe a caixa à direita. Temos duas opções, uma para escolher o que o valor na tabela representa, seja vazão, concentração ou fração e a unidade de medida. Dependendo da opção escolhida, devemos proceder de forma adequada:

- *Mole-Flow*, *Mass-flow* e *StdVol-Flow*: não precisamos preencher na caixa da esquerda as informações totais da corrente, pois essas opções representam valores de vazão.
- *Mole-Frac*, *Mass-Frac* e *StdVol-Frac*: devemos preencher na caixa da esquerda as informações totais da corrente e tomar cuidado com a soma das frações. Caso não seja 1, o Aspen alertará sobre isso e normalizará as frações para que somem a unidade.
- *Mass-Conc* e *Mole-Conc*: além das informações totais da corrente, devemos especificar qual dos componentes é o solvente da mistura.

Outro fato importante a se saber para usar opções de concentração é que a corrente deve ser obrigatoriamente monofásica. Dependendo das condições da corrente, o Aspen é capaz de fazer cálculos de problemas tipo Flash para determinar a composição da fase vapor e da fase líquida. Ao desejar trabalhar somente com uma fase, devemos ir à aba *Flash Options*, como mostra a Figura 24.

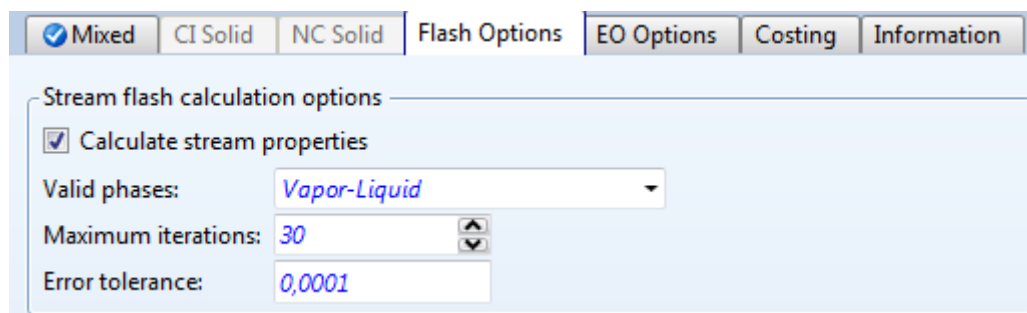


Figura 24 - Opções de cálculo tipo Flash para uma corrente.

Na caixa *Valid Phases* definimos quais são as fases que o programa considerará nos cálculos. Assim, ao usarmos uma opção de concentração, para que a corrente trabalhada esteja em uma única fase, devemos escolher *Vapor-Only*, *Liquid-Only* ou *Solid-Only*. Outra forma é especificar a fração total de vapor como sendo 1 (vapor no ponto de orvalho) ou 0 (líquido no ponto de bolha). Ao alterar as configurações nos cálculos tipo Flash, tome cuidado com as condições de temperatura e pressão, para que uma corrente especificada como em fase líquida não esteja em condições nas quais estaria em estado vapor, na verdade.

Na aba *Mixed*, em *Reference Temperature*, especificamos a temperatura de referência para o volume, caso escolhamos a vazão volumétrica no campo *Total flow basis*. Dependendo do tipo de componente presente, serão necessários atributos que devem ser inseridos em *Component Attributes*. Como trabalharemos apenas com sólidos e fluidos convencionais, não precisaremos nos preocupar com isso.

Temos também a caixa *Particle Size Distribution*, que trata de especificar a distribuição granulométrica da corrente, mas ela só está disponível nas subcorrentes *CI Solid* e *NC Solid* e isso se a classe da corrente receber o sufixo *PSD*. Não se esqueça de, ao trabalhar com essas subcorrentes, especificar na janela de componentes os tipos dos componentes sólidos no processo (por exemplo, *Solid* ou *Nonconventional*).

Sabendo disso, especifique as correntes A e B com os seguintes dados:

- **Corrente A:** vazão molar de 100 kmol/h de água a 25°C e pressão de 1 bar.

- **Corrente B:** vazão molar de 50 kmol/h de etanol a 25°C e pressão de 1 bar.

1.6.4 Especificando os modelos de operações unitárias ou blocos

Agora que especificamos as correntes, restam apenas os equipamentos que, como já sabemos, possuem uma grande quantidade de modelos matemáticos que os representam. No Aspen Plus® eles aparecem como blocos no fluxograma e devemos escolher, para cada operação, seu modelo matemático, condições de operação e metas de cálculo.

8. Clicando em Next, você irá para o formulário para especificação do primeiro bloco que esteja com informações insuficientes para simulação. Você também pode fazer isso clicando duas vezes em algum bloco no fluxograma.

Neste minicurso não chegaremos a trabalhar com mais da metade dos blocos do Aspen Plus®, mas a ideia é bastante semelhante para todos eles. É importante que você conheça a operação unitária que os modelos representem, assim saberá quais informações deverão ser fornecidas aos mais diversos métodos de cálculo. Em caso de dúvidas, recorra sempre ao arquivo de ajuda do Aspen. Ao passarmos pelo sumário do arquivo de ajuda, podemos encontrar dois itens muito importantes para essas situações, como mostra a Figura 25. Há tópicos de ajuda para as informações que devem ser dadas nos formulários dos blocos, encontrando o item *Simulation Environment Forms* ▢ *Blocks*, que terá uma lista com todos os blocos existentes no programa e, para cada um, tópicos de ajuda que tratam de descrever os campos de todos os formulários para seus respectivos blocos. E, em *Aspen Plus Reference* ▢ *Unit Operation Models Reference Manual*, encontramos base teórica sobre as operações capazes de serem simuladas com o Aspen Plus®, além de que informações devem ser fornecidas e também, equações e modelos utilizados. Muitos tópicos de ajuda do programa trazem referências bibliográficas de onde as informações foram retiradas.

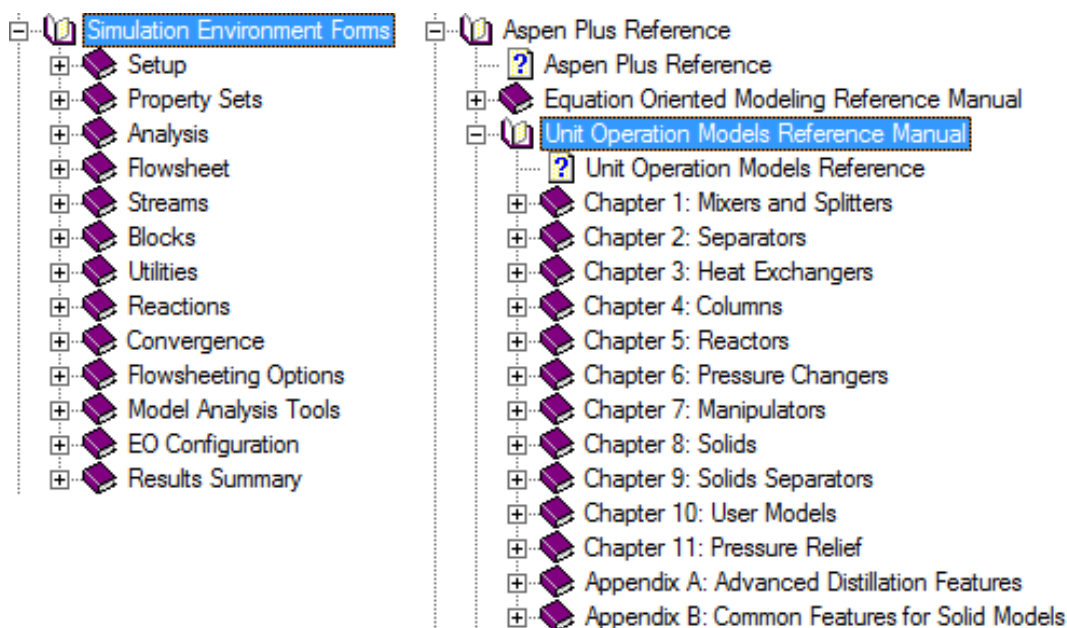


Figura 25 - Arquivos de ajuda do Aspen Plus® interessantes para a especificação de blocos.

Neste exemplo, o primeiro bloco a ser especificado é o *Mixer M1*. Na Figura 26 você pode ver o formulário para esse bloco.

Figura 26 - Formulário para especificação de um bloco Mixer.

Começamos informando sobre a pressão do misturador. Lembre-se que as unidades de pressão podem se referir à pressão absoluta ou à pressão relativa (*gauge*). No caso de unidades de pressão absoluta, especificar pressões positivas informará a pressão de saída da mistura e aquelas menores ou iguais a zero informarão a perda de carga no misturador. No caso de unidades de pressão relativa, o Aspen entenderá como a pressão de saída do equipamento.

No campo *Valid phases*, informamos as fases consideradas nos cálculos de equilíbrio e, no caso em que possa ocorrer mudança de fase, uma estimativa para a temperatura de saída pode ser informada no campo *Temperature estimate*, apesar de ser opcional. Na caixa *Convergence parameters*, opções de cálculos podem ser definidas.

Assumamos que não haja perda de carga no misturador. Mantenha as informações como na figura e escolha *Next* e faça o mesmo para o segundo misturador. Você chegará ao formulário do bloco *FSplit* S1. Nele temos que informar como as correntes alimentadas ao separador serão fracionadas e podemos fazer isso de forma simples, como estabelecer diretamente a fração da corrente original para cada corrente fracionada ou valores exatos ou limites para a vazão de cada corrente fracionada. Neste exemplo, 40% da corrente A será a corrente A1. Ao colocar 0,4 para o campo *Value* de *Split fraction*, resta preencher a coluna *Stream order*, que serve apenas para informar a ordem em que o programa fará os cálculos. Chegaremos ao que está na Figura 27.

Specifications Flash Options Key Components Information						
Flow split specification for outlet streams						
Stream	Specification	Basis	Value	Units	Key Comp No	Stream order
A1	Split fraction		0,4			1
A2						2

Figura 27 - Formulário do bloco *FSplit* preenchido para o exemplo da Aula 1.

1.6.5 Execução e análise dos resultados da simulação

Chegamos ao último passo.

9. Ao clicar em *Next*, uma janela aparecerá para confirmar se você deseja executar a simulação, como mostra a Figura 28.

Figura 28 - Janela para confirmação antes da execução da simulação do projeto.

Essa mensagem de confirmação aparece quando pelo menos os dados de entrada obrigatórios estão inseridos. Como você pode ver nela, mais dados podem ser informados. Enfim, de qualquer forma, já podemos dar início aos cálculos. Clique em *OK*. O painel de controle será aberto, dando início à simulação. Ao fim dela, veremos a janela como na Figura 29.

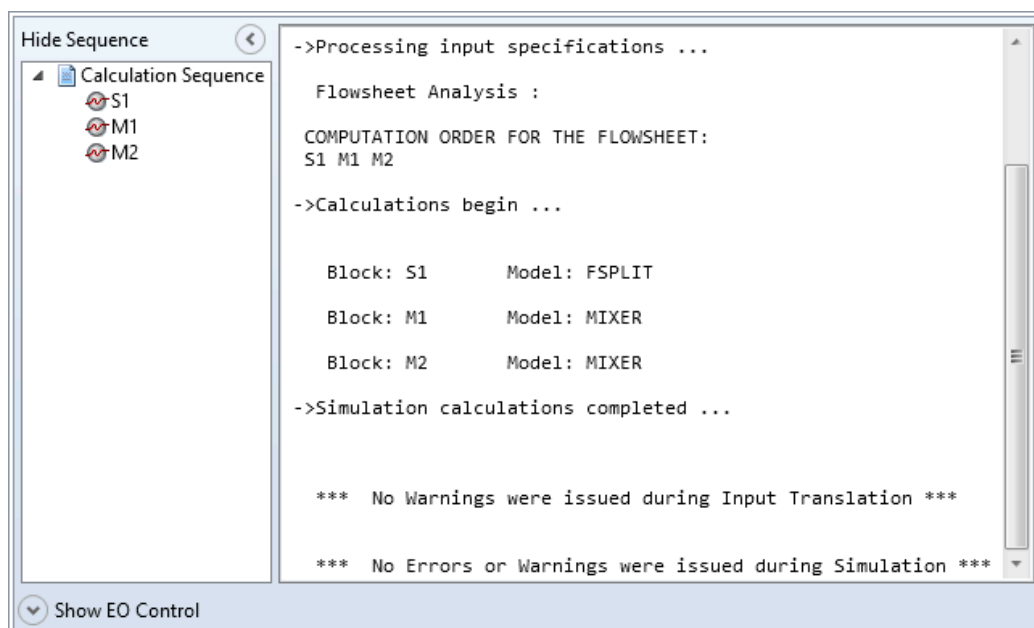


Figura 29 - Desenvolvimento da simulação no painel de controle.

Essa janela traz todas as informações sobre o desenvolvimento dos cálculos. À esquerda, temos listada a ordem em que os blocos do fluxograma serão calculados. À direita, temos o registro de todo o procedimento. Note que, após a linha de “->Calculations begin ...”, aparecem algumas linhas com o nome que damos aos blocos e o tipo do bloco ao lado. Como informamos corretamente os dados para esta simulação, nenhum texto aparece entre essas linhas, mas, por exemplo, erros e alertas nos cálculos de cada bloco apareceriam após a linha que enuncia o início de seus cálculos.

Após a linha “->Simulation calculations completed”, veremos o resumo do relatório de simulação. Se alertas ou erros ocorreram, o número e o tipo de erro ou alerta serão resumidos nessa parte.

Agora podemos analisar os resultados. Todas as correntes e todos os blocos têm em sua pasta na árvore de trabalho uma planilha chamada *Results*. Para ver todos os resultados mais importantes reunidos em um só lugar, procuramos na árvore a pasta *Results Summary* e, dentro dela, a planilha *Streams*. Nela, veremos resultados de balanço de massa e de energia, assim como algumas propriedades físicas para cada corrente, como mostra a Figura 30.

Material	Heat	Load	Work	Vol.% Curves	Wt.% Curves	Petro. Curves	Poly. Curves	Solids
Display: All streams	Format: FULL	Stream Table	Copy All					
	A	A1	A2	B	B1	S		
Substream: MIXED								
Mole Flow kmol/hr								
WATER	100	40	60	0	40	100		
ETHANOL	0	0	0	50	50	50		
Total Flow kmol/hr	100	40	60	50	90	150		
Total Flow kg/hr	1801,53	720,611	1080,92	2303,45	3024,06	4104,98		
Total Flow l/min	30,208	12,0832	18,1248	48,0782	59,9797	78,0248		
Temperature C	25	25	25	25	25	25		
Pressure bar	1	1	1	1	1	1		
Vapor Frac	0	0	0	0	0	0		
Liquid Frac	1	1	1	1	1	1		
Solid Frac	0	0	0	0	0	0		
Enthalpy cal/mol	-68232,2	-68232,2	-68232,2	-66277,7	-67146,4	-67580,7		
Enthalpy cal/gm	-3787,46	-3787,46	-3787,46	-1438,66	-1998,36	-2469,47		
Enthalpy cal/sec	-1,8953e+06	-758140	-1,1372e+06	-920520	-1,6787e+06	-2,8159e+06		

Figura 30 - Planilha dos resultados resumidos para todas as correntes materiais do processo.

Nessa tabela começamos vendo a composição de cada corrente na forma de vazão em base molar. Em seguida, propriedades totais, como a vazão em base molar, mássica e volumétrica, a temperatura, a pressão e a fração de cada fase na corrente. Depois temos do balanço energético a entalpia de cada corrente e, do balanço entrópico, a entropia, todos esses resultados nas três bases mencionadas. Ainda temos a massa específica, o volume molar e a massa molecular média das correntes. Note que os resultados estão apresentados nas unidades selecionadas nas configurações globais da simulação. Para vê-los em outras unidades, você deve ir à planilha *Streams (Custom)* e mudar as unidades conforme desejar.

Ainda em *Streams*, caso tenhamos outros tipos de correntes ou componentes no processo, outras abas nessa janela estarão disponíveis. Vale lembrar também que, como vimos anteriormente, ao trabalharmos com sólidos, eles são tratados em subcorrentes. Na Figura 30, você pode ver que os resultados mostrados são para a subcorrente *MIXED*. Se tivéssemos mais de uma subcorrente, os resultados seriam apresentados separadamente para cada subcorrente.

1.6.6 Tabela dos resultados

Por padrão, a tabela com os resultados dos cálculos para as correntes usa o formato *FULL*, que é o que mais possui informações. Não entraremos em detalhes durante o curso, mas é possível criar seu próprio formato, escrevendo um TFF (*Table Format File*) e o salvando na pasta *Program Files\AspenTech\Aspen Plus <versão>\GUI\xeq*. A dificuldade nisso é que você deve compreender a linguagem de programação utilizada na leitura desses arquivos.

Podemos importá-la para a janela do fluxograma. Na planilha de resultados, como mostra a Figura 31, você pode ver que existe um botão ao lado da opção de formato da tabela, *Stream Table*. Ao clicar nele, a tabela será colocada junto ao fluxograma, interessante caso você queira imprimir os resultados de balanço de massa e de energia junto com o fluxograma do processo. Também é possível importar os resultados para outros programas, como o Microsoft Office Excel®. Para isso, basta selecionar as linhas e as colunas que deseje copiar e, clicando com o botão direito na seleção e então em *Copy* ou usando o atalho Ctrl+C, você pode colar a tabela no outro programa usando o atalho Ctrl+V. Você pode fazer o mesmo indo à tabela colocada junto ao fluxograma. Na Figura 31, fizemos isso com a tabela no formato GEN_M.

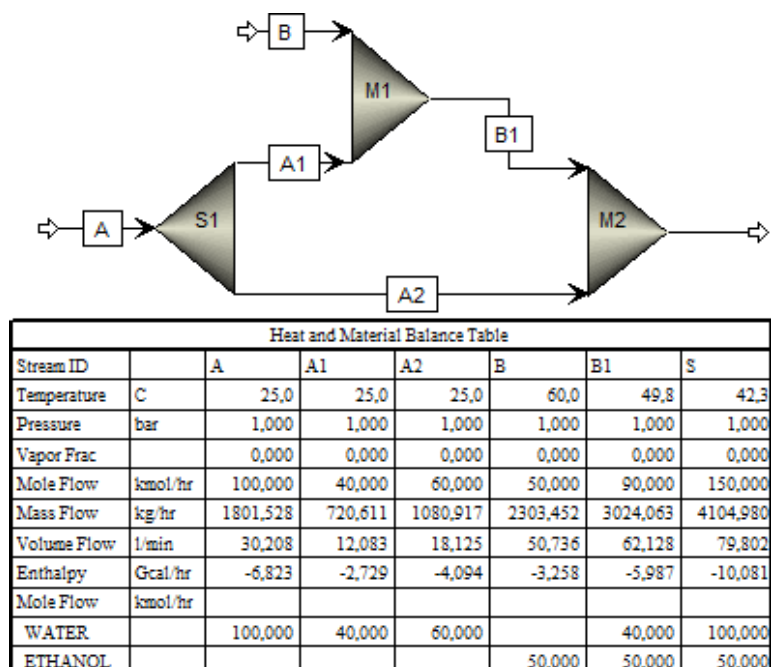


Figura 31 - Resultados do balanço de massa e de energia adicionados ao fluxograma do exemplo da Aula 1.

Agora, repita a simulação, aumentando a temperatura da corrente de alimentação de etanol (Corrente B) para 60°C e observe a diferença nos resultados.

1.6.7 Considerações finais

Antes de partirmos para os exercícios do capítulo, vamos recapitular. Apesar de cada processo ser diferente, os passos desde o projeto em branco à execução da simulação são basicamente os mesmos:

1. **Configurações globais:** definir o sistema de unidades, selecionar a classificação das correntes e demais configurações desejadas.
2. **Fluxograma:** verificar se todas as correntes estão ligadas aos blocos e renomear todos os itens para melhor organização durante a especificação dos mesmos.
3. **Componentes da planta:** selecionar nos bancos de dados do Aspen todos os componentes existentes na planta e classificá-los caso não sejam convencionais.
4. **Modelo termodinâmico:** seleção do modelo termodinâmico que melhor descreva o processo simulado.
5. **Correntes:** especificar as quantidades presentes e as condições em que as correntes de entrada do processo se encontram.
6. **Blocos:** especificar as operações unitárias do processo, informando dados sobre suas condições de operação e outros necessários para os modelos que descrevam tais operações.
7. **Execução e análise dos resultados da simulação:** balanço de massa e de energia, perfis de propriedades, resultados de eficiência, entre outros, como será visto durante o curso.

1.7 SEPARAÇÃO SÓLIDO-GÁS

Os exercícios desta aula tratam de algumas operações de separação sólido-gás, então vamos revisar sobre o assunto e conhecer como o Aspen Plus® trabalha com os dois equipamentos usados nos exercícios, ciclones e precipitadores eletrostáticos.

É muito comum, não só no meio industrial, que correntes gasosas carreguem partículas sólidas em suspensão e que se deseja separá-las, seja com o objetivo de recuperar um sólido de interesse (como um catalisador), de purificar o ar em um determinado ambiente, por medidas de segurança ou de fazer com que a fábrica esteja em conformidade com as regulamentações ambientais. Por isso, existem diferentes tipos de equipamentos coletores de partículas em suspensões gasosas, cada um com um princípio físico adequado às propriedades físicas e químicas do gás e do sólido.

Coletores gravitacionais: desaceleração do gás e emprego da deposição gravitacional;

Coletores inerciais: uso de obstáculos e mudanças bruscas de fluxo para coleta;

Coletores centrífugos: uso da força centrífuga para retirar as partículas do fluxo gasoso, empurrando-as contra as paredes internas do equipamento;

Coletores úmidos: encontro da suspensão com a aspersão de um líquido; baseados nos mecanismos de impactação, interceptação, difusão e condensação;

Filtros: passagem da suspensão por um meio poroso, no qual os sólidos são retidos;

Precipitadores eletrostáticos: uso da força elétrica para retirar as partículas do fluxo.

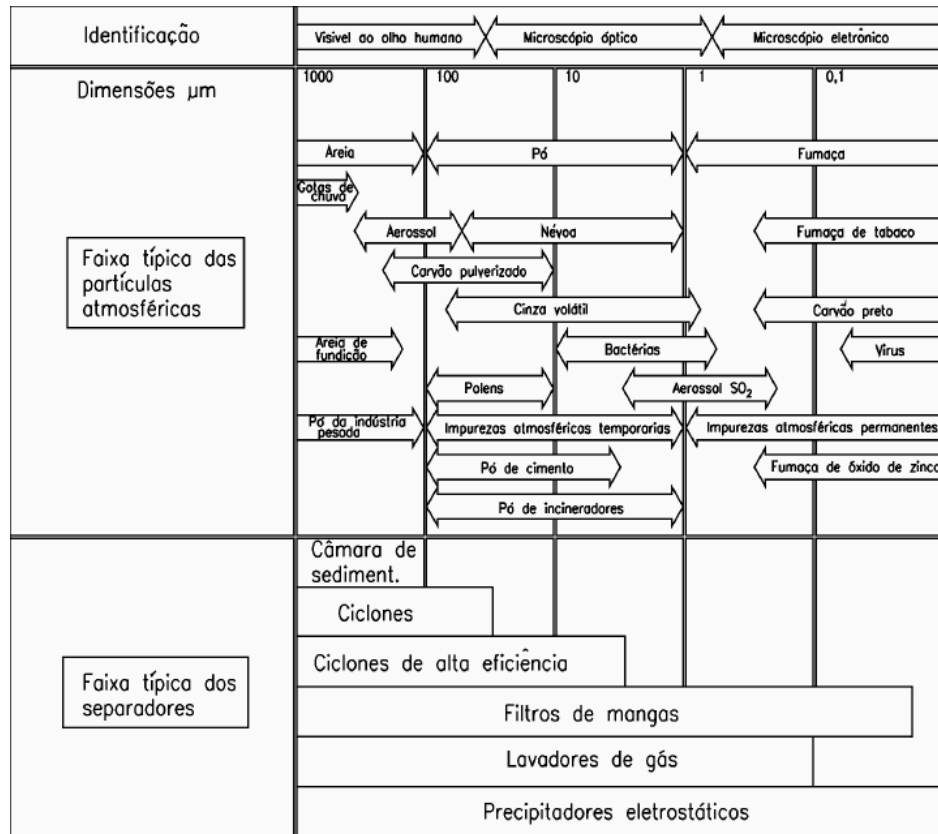


Figura 32 - Faixas comuns de diâmetro de partículas e de separadores sugeridos. (LORA, 2000)

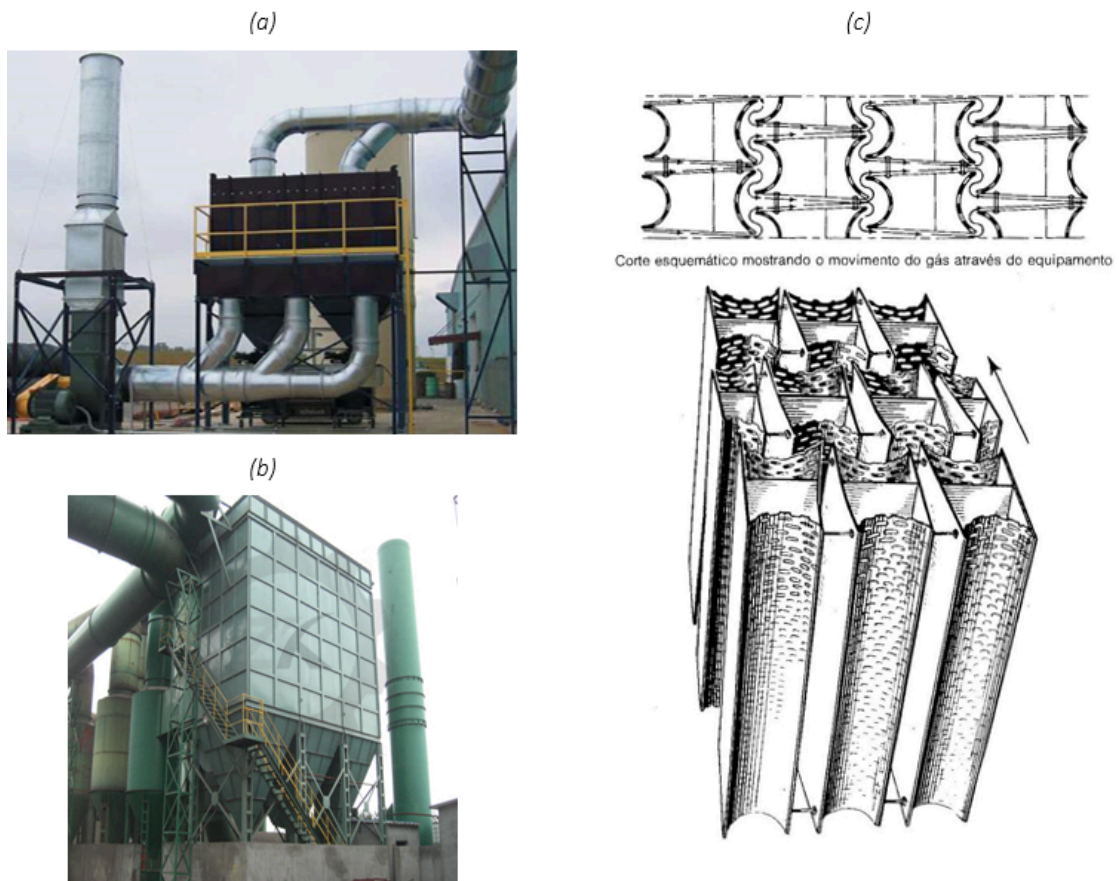


Figura 33 - Alguns exemplos de separadores sólido-gás: (a) separador gravitacional (in.all.biz), (b) separador usado em uma indústria de siderúrgica (inczk.com) e (c) corte esquemático de um separador inercial (PERRY, 1986).

1.7.1 Ciclones

São equipamentos industriais sem partes móveis usados em operações de separação mecânica de partículas sólidas ou neblina de líquidos de uma corrente gasosa. O princípio no qual se baseiam é o da força centrífuga, muito maior que a gravitacional. A vazão é alimentada tangencialmente e forçada a percorrer o interior do ciclone em um vórtice descendente (espiral principal). A parte inferior do ciclone é cônica e, conforme o diâmetro do movimento é reduzido, aumenta a eficiência de coleta de partículas menores. Chegando ao final da seção cônica, as partículas não conseguem seguir a corrente gasosa, que inverte o movimento e sobe em direção à saída na chamada espiral interna, em torno do eixo central, enquanto os sólidos são coletados na sua saída inferior. (CAMPOS)

Utilizados para a coleta de material particulado ou fibroso, os ciclones são, em geral, equipamentos de baixo custo que consomem pouca potência e são adequados para separação partículas de diâmetro superior a 5 micra e não-adequados para sólidos de alta dureza em alta velocidade ou partículas pegajosas ou higroscópicas em alta concentração. (MACINTYRE, 1990)

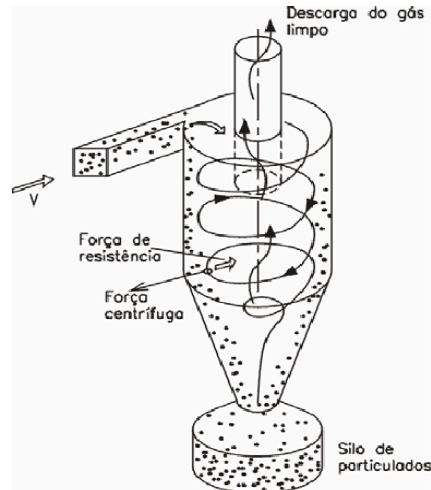


Figura 34 - Desenho esquemático da separação em um ciclone com alimentação tangencial e saída axial (LORA, 2000).

Geralmente a suspensão é alimentada tangencialmente à periferia da parte superior do ciclone, criando um fluxo helicoidal descendente que, ao atingir a parte inferior da parte cônica do equipamento, retorne como um fluxo helicoidal ascendente central até a boca de descarga na parte superior do ciclone. As forças centrífugas decorrentes deste movimento lançam as partículas sólidas de encontro às paredes, perdendo energia e se separando da massa gasosa, caindo até o cone inferior e então sendo coletadas no dispositivo de coleta. (MACINTYRE, 1990)

O dimensionamento de um ciclone pode ser bastante trabalhoso quando feito à mão. Existem diferentes métodos que definem passo-a-passo formas de realizar essa tarefa. Uma delas é o Método SIX (CARDOSO, 2012), que pode ser resumido em:

Definir as dimensões do ciclone a partir de uma velocidade de entrada de gás arbitrada. Sabendo que a vazão volumétrica é o produto entre a área e a velocidade de escoamento, se você fosse montar um ciclone com as proporções de Stairmand, chegaria à Equação 1.1.

$$A = a \times b = 0,5D_c \times 0,2D_c = 0,1D_c^2$$

$$\frac{Q}{v} = A = 0,1D_c^2$$

$$D_c = 3,1623\sqrt{\quad} \quad (1.1)$$

Conhecendo o diâmetro do ciclone, basta aplicar as proporções de medidas para calcular as outras dimensões do equipamento.

Calcular o diâmetro de corte das partículas (d_c). É o tamanho daquelas que são coletadas com 50% de eficiência. A Equação 1.2 pode ser usada para esse cálculo.

$$d_c = 0,27\sqrt{\quad} \quad (1.2)$$

Calcular a eficiência de coleta (η). Deve-se conhecer a distribuição granulométrica das partículas para calcular a eficiência de coleta para cada faixa. Com a Equação 1.3, podemos calculá-la.

$$\eta = \frac{1}{1 + \left(\frac{d_p}{d_c}\right)^{-2}} \quad (1.3)$$

Como a fração mássica nos sólidos de cada faixa granulométrica é conhecida, a partir da eficiência calculada para cada uma, pode-se determinar a quantidade de sólidos presentes na coleta e na saída de gases limpos.

Calcular a perda de carga. O Método SIX utiliza a Equação 1.4.

$$\Delta P = 8 \frac{\rho_a \times v_{entrada}^2 \times A}{D_e^2} \quad (1.4)$$

Onde ρ_a é a densidade da suspensão alimentada e D_e é o diâmetro do duto de saída do gás (*overflow*).

Corrigir a eficiência em função da concentração de sólidos e em função da penetração do duto de saída do gás.

Tudo isso é bastante trabalhoso. Usando um programa como o Aspen, esse trabalho pode ser muito mais fácil. O programa permite que você realize todos os cálculos de eficiência e perda de carga apenas fornecendo os dados da alimentação e o diâmetro do ciclone, por exemplo.

Figura 35 - Especificação de um bloco Cyclone.

Na Figura 35 está a janela do formulário para especificação de um ciclone no Aspen Plus®. Existem dois módulos de cálculo para ciclones: *Simulation* e *Design*. Se o modo de simulação estiver selecionado, precisamos inserir os parâmetros mostrados na Figura 36.

Figura 36 - Parâmetros do modo *Simulation* para um bloco Cyclone.

No campo *Diameter* informamos o diâmetro externo do ciclone. Lembre-se que, tendo as relações geométricas para as outras medidas, basta informar esse diâmetro para ter todo o dimensionamento do ciclone. Em *Number of cyclones*, colocamos o número desejado de ciclones associados em paralelo. Assim, a alimentação será distribuída para essa rede, cujos ciclones possuem as mesmas medidas especificadas.

Figura 37 - Parâmetros do modo *Design* para um bloco Cyclone.

Ao selecionar o modo *Design*, serão necessários os parâmetros mostrados na Figura 37. Este modo escolhe e dimensiona a melhor rede de ciclones em paralelo que atendam critérios quanto à eficiência, máxima

perda de carga e número máximo de ciclones desejados, além de, na caixa *Design convergence options*, você definir opções de convergência para os cálculos.

Voltando à Figura 35, é preciso tomar cuidado ao escolher a correlação do cálculo para a eficiência. Basicamente, trata de como o programa calculará o diâmetro de corte das partículas, tendo em vista as propriedades físicas da mistura gasosa e das partículas, a geometria do ciclone e as condições de operação. Em *Type*, selecionamos o tipo do ciclone. Existem tipos já com as relações geométricas definidas. No caso em que você deseje simular um ciclone com suas próprias medidas, selecione a opção *User-specified* ou *User-specified ratios*. Com a primeira, você precisará informar na aba *Dimensions* todas as medidas do ciclone e, com a segunda opção, informar na aba *Ratios* as proporções geométricas com relação ao diâmetro do ciclone. Também podemos criar uma correlação do cálculo para a eficiência do ciclone, selecionando a opção *User-specified* no campo *Efficiency correlation*. Para isso, é mais interessante dispor de dados experimentais para aquela geometria específica, pois, na aba *Efficiency*, você deverá informar, para cada diâmetro de partícula, qual é a eficiência de coleta alcançada.

Na aba *Solids Loading*, podemos definir a influência da concentração de sólidos sobre a eficiência e a perda de carga no aparelho, como mostra a Figura 38.

Figura 38 - Configurações do efeito da concentração de sólidos sobre a operação do ciclone.

Essa correção é proposta por SMOLIK (1975) e usa as Equações 1.5 e 1.6 para corrigir a eficiência e a perda de carga, respectivamente.

$$\frac{1-E_T}{1-E_r} = \left(\frac{C}{C} \right)^\alpha \quad (1.5)$$

$$\frac{\Delta P}{\Delta P} = 1 - \beta C^\gamma \quad (1.6)$$

Onde E_T é a eficiência total, C a concentração de sólidos, ΔP a perda de carga e α , β e γ são parâmetros da correlação. A eficiência corrigida aparece no numerador da Equação 1.5 e, no termo à direita, a concentração crítica de sólidos aparece no numerador da razão entre concentrações. Geralmente, seu valor é adotado como 1 g/m³. Quanto à Equação 1.6, a perda de carga corrigida aparece no numerador. O denominador se refere à perda de carga calculada para o gás sem a presença de sólidos. Para os parâmetros, o autor adota $\alpha = 0,182$, $\beta = 0,02$ e $\gamma = 0,6$.

1.7.2 Precipitadores eletrostáticos

São dispositivos usados para remover partículas sólidas ou líquidas suspensas em um meio gasoso usando forças eletrostáticas. Além das indústrias, os precipitadores também são usados para limpar o ar em hospitais, áreas residenciais e comerciais e áreas de trabalho. Apresentam qualidades superiores a outros tipos de filtros. No meio industrial, estão presentes principalmente nas centrais termelétricas de usinas siderúrgicas. (OZAWA, 2003)

A precipitação eletrostática é um processo físico segundo o qual uma partícula contida num fluxo gasoso é carregada eletricamente e, sob a influência de um corpo elétrico, é separada da corrente gasosa. O fenômeno é dividido de diferentes formas, dependendo da/o autora/tor. Riehle (1997) divide a precipitação eletrostática em quatro etapas, como mostra a Figura 39. (CERDA, 2004)

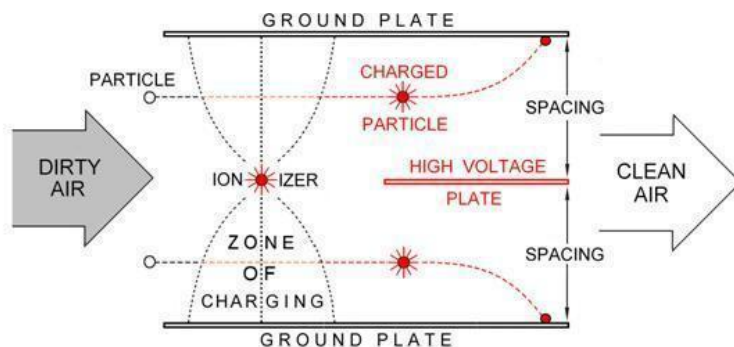


Figura 39 - Fenômeno da precipitação eletrostática. (aircleancompany.com)

Ionização do gás: geração de íons no fluxo gasoso através da quebra da resistência dielétrica do gás devido à aplicação de uma elevada tensão elétrica, gerando o efeito corona. (CERDA, 2004) Essa tensão não deve superar 50 kV, o que pode gerar um arco voltaico ou corona inversa, o que conseqüentemente diminui a carga das partículas; (OZAWA, 2003)

Carregamento elétrico das partículas: ocorre por campo e por difusão. Para partículas maiores que 1 micra, o campo é mais influente e, para menores que esse diâmetro, o carregamento por difusão é predominante; (CERDA, 2004)

Coleta das partículas: as partículas carregadas eletricamente são coletadas pela ação de forças elétricas e inerciais, fazendo com que migrem com certa velocidade em direção aos eletrodos coletores; (CERDA, 2004)

Remoção das partículas: pode ser feita de duas formas: via seca ou via úmida. Por via seca, a remoção é feita pela agitação ou vibração, que pode ser causada por batidas ou pelo uso de aparelhos sonoros. Pela via úmida, água é utilizada para remover o material aglomerante, que é mais difícil de ser removido das placas coletoras.

Como você pode perceber, esse fenômeno é bastante complexo, assim como a sua modelagem. Uma grande dificuldade de trabalhar com precipitadores eletrostáticos nas versões antigas do Aspen Plus® é que o programa utiliza o modelo de Crawford, que requer a constante dielétrica da suspensão gasosa alimentada ao equipamento. Na versão 8.0 do Aspen, você poderá selecionar entre três modelos. Além do modelo de Crawford (1976), há disponíveis o modelo de Svarovsky (1981) e o modelo de Deutsch (1922). Nesses dois modelos não é necessário saber a constante dielétrica da alimentação. Para o de Svarovsky, basta a informação sobre o regime de escoamento por um parâmetro α , que pode variar de 0 (regime laminar) a 1 (regime turbulento). No caso do modelo de Deutsch, um parâmetro K é usado para estender seu modelo para situações práticas, cujo valor comumente usado está na faixa de 0,4 e 0,6 para melhores resultados.

Outra desvantagem das versões anteriores do Aspen Plus® é que, ao usar somente o modelo de Crawford para precipitador eletrostático, somente o precipitador tipo placa-fio pode ser simulado ou projetado. Também existem os precipitadores tipo tubo-fio (que podem ser simulados pelos modelos de Svarovsky e de Deutsch) e tipo placa-plana.

Assim como os ciclones, podemos resolver problemas de operação ou de projeto para precipitadores eletrostáticos. No primeiro caso, usamos o modo de cálculo *Simulation* e, para o segundo, o modo *Design*. O modo de simulação é bastante simples, como mostra a Figura 40.

Figura 40 - Parâmetros do modo *Simulation* de um bloco ESP.

Precisaremos fornecer o dimensionamento do precipitador: altura e comprimento das placas, assim como o número de placas usadas (de 2 a 100 placas).

Figura 41 - Parâmetros do modo *Design* de um bloco ESP.

Como mostra a Figura 41, no caso de problemas de projeto, devemos especificar as condições desejadas (eficiência de separação e velocidade do gás dentro do equipamento) e restrições de tamanho. Lembre-se que precipitadores eletrostáticos são equipamentos de altíssima eficiência, então não tenha medo de usar, por exemplo, 99,5% de eficiência desejada. A faixa de validade do modelo usado para a eficiência e perda de carga é para velocidades de 0,5 a 3 m/s (situações em que o transporte devido à difusão pela turbulência se torna mais significativa que aquele devido às forças eletrostáticas). É importante lembrar, também, que os resultados podem ser superestimados caso a concentração de sólidos (kg/m^3) seja muito baixa. O modelo trabalha bem para concentrações relativamente altas (superiores a $0,1 \text{ kg/m}^3$).

Em todo caso, ao trabalhar com versões anteriores à 8.0, como o modelo utilizado para o precipitador é o modelo de Crawford, ressaltamos que a especificação da constante dielétrica dos sólidos é obrigatória. Vá até a aba *Dielectric Constant* (Figura 42).

Figura 42 - Especificação da constante dielétrica das subcorrentes em uma suspensão gasosa alimentada a um bloco ESP.

Define-se como constante dielétrica a razão entre a permissividade elétrica do meio nas condições em que ele se encontra e a permissividade elétrica no vácuo ($\epsilon_0 = 8,85 \times 10^{-12} \text{ CV}^{-1} \text{ m}^{-1}$), como mostra a Equação 1.7.

$$k = \frac{\epsilon}{\epsilon_0} \quad (1.7)$$

Esse valor deve ser informado para cada subcorrente existente na alimentação (sólidos convencionais ou não convencionais com ou sem distribuição granulométrica).

1.8 BOMBAS E COMPRESSORES

OBJETIVOS

O objetivo dessa aula é aprender a simular bombas e compressores no *Software Aspen Plus®*. Com isso relembremos conceitos vistos na disciplina de Operações Unitárias I e Integração III. Além de aprenderemos a

colocar tubulações com diferentes acessórios, elevações, temperatura externa em um projeto. Para este módulo serão utilizados as ferramentas Aspen Plus® do pacote Aspentech.

0. BOMBAS

O escoamento de fluidos em condutos e máquinas, como bombas e turbinas, configura-se como uma situação corriqueira. Então, surge a importância em determinarmos e utilizarmos a equação geral do balanço de energia, sendo sua aplicação em tais casos consideravelmente simplificada.

A forma mais conhecida do balanço de energia para escoamento de um fluido pode ser expressa pela Equação 6.1:

$$\frac{\Delta v^2}{2g_c} + \Delta z + \frac{\Delta P}{\rho g_c} + l_w + H = 0 \quad (6.1)$$

Sendo o primeiro termo referente à energia cinética do fluido, o segundo com a energia potencial, o terceiro com a energia de pressão, o quarto com as perdas de energia que o fluido terá ao escoar e o último à quantidade de energia recebida pelo fluido, ou seja, quantidade de energia cedida pela bomba (Head da bomba). Considerando a linha esquematizada apresentada na Figura 138 - Balanço de Energia em Tubulações. Figura 138.

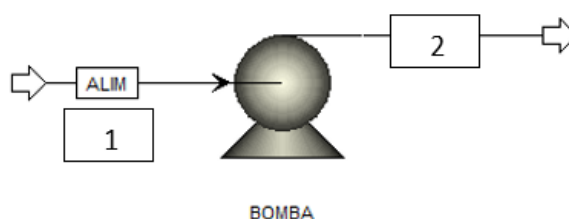


Figura 138 - Balanço de Energia em Tubulações.

Podemos aplicar o balanço de energia no volume de controle do ponto 1 ao 2, obtendo:

$$\frac{v_2^2 - v_1^2}{2g_c} + z_2 - z_1 + \frac{P_2 - P_1}{\rho g_c} + l_w + H = 0 \quad (4.2)$$

Como a alteração do diâmetro da tubulação é pequena, a variação de energia cinética é proporcionalmente diminuta, não há variação da energia potencial e a perda de carga no trecho pode ser desprezada, o balanço de energia mostra que a pressão aumenta em decorrência da energia cedida pela bomba ao fluido. Isso quer dizer: o fluido absorve a energia fornecida pela bomba convertendo-a em carga de pressão.

1. Funcionamento

A peça fundamental de uma bomba centrífuga é o rotor da bomba. Dentro há um eixo, que, ligado o rotor ao motor da bomba, faz com que o rotor gire, obrigando o fluido a entrar em movimento junto com as palhetas do rotor. O fluido é posto em rotação, após ser admitido à bomba pelo centro do rotor e ter entrado em contato com as palhetas. A aceleração centrífuga força-o a se deslocar rapidamente para a borda do rotor enquanto gira. Na medida em que o fluido se desloca em direção a periferia do rotor, a energia cinética do fluido aumenta, ou seja, o rotor cede energia para o fluido. Ao atingir a borda do rotor, o fluido escapa por um espaço denominado de voluta. Como na voluta não mais é solicitado a girar, a energia cinética recebida em carga de pressão é convertida; e assim o fluido deixa a bomba pelo bocal de descarga com alta pressão. Para um melhor entendimento de uma bomba centrífuga, pode-se observar a Figura 139.

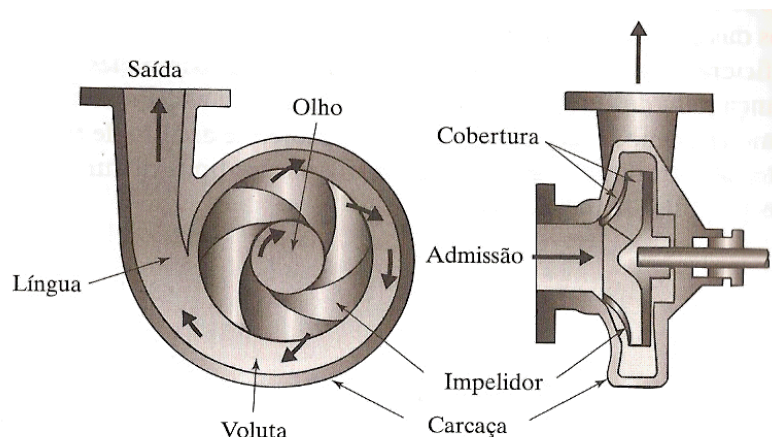


FIGURA 12.1 Bomba de sucção única.

Figura 139 - Esquema Simplificada de uma bomba centrífuga (escoladavida.eng.br).

Como o fluido sofre uma brusca aceleração centrífuga, há uma tendência de “esvaziar” o centro do rotor. Essa rápida fuga provoca uma súbita queda de pressão no bocal de admissão da bomba. Se a pressão baixar até o nível da pressão de vapor do fluido na temperatura em que se encontra, o fluido satura e entra em ebulição. O fluxo bifásico líquido-vapor assim gerado desloca-se pelo rotor em direção a voluta, encontrando progressivamente pressões mais elevadas, proporcionando ao fluido a volta à condição de subresfriado. Isso força imediata condensação da fase vapor, o que provoca a cavitação da bomba, provocando uma severa erosão no rotor. Para que não ocorra a cavitação o fluido deve chegar a uma pressão tal que suporte a queda adicional da pressão, provocada pela aceleração centrífuga do fluido na boca do rotor. A cavitação causa redução na eficiência da bomba causando ruído, vibrações, fratura do rotor, da carcaça, etc.

0. Escolha de uma bomba

Primeiramente deve-se estipular qual será o tipo de bomba: (i) deslocamento positivo ou (ii) centrífuga, essa escolha deve ser baseada em relação à viscosidade do fluido. São comumente utilizadas, para fluidos com viscosidade abaixo de 20 cP, bombas centrífugas, ao passo que se utilizam bombas de deslocamento positivo para altas viscosidades. Porém, para vazões muito baixas, é difícil encontrar uma bomba que ofereça um bom rendimento, portanto indica-se o uso de bombas alternativas.

Os dados essenciais de projeto de uma bomba são: a vazão de fluido, a pressão de operação, temperatura e propriedades do fluido, assim podem se determinar outros dados. Para as bombas centrífugas, calcula-se a potência do motor e o NPSH_r, obtendo-se através da carta da bomba, o diâmetro do rotor, a rotação, o número de ordem da bomba, a potência do motor e o NPSH_r.

0. COMPRESSORES

Compressores são considerados máquinas de fluxo. Assim, há o aumento do nível energético do fluido a partir do fornecimento de energia mecânica. São máquinas operatrizes que transformam trabalho mecânico em energia comunicada a um gás, preponderantemente na forma de energia de pressão. Devido à energia de pressão que adquire, isto é, à pressurização, o gás pode:

1. Deslocar-se a longas distâncias em tubulações;
2. Ser armazenado em reservatórios para ser usado quando necessário, isto é, acumular energia;
3. Realizar trabalho mecânico, atuando sobre dispositivos, equipamentos e máquinas motrizes (motores a ar comprimido, por exemplo).

1. Utilização

A energia fornecida a um gás é utilizada, não só para o seu transporte ou armazenamento sob pressão, mas também para possibilitar determinadas reações químicas que só acontecem a elevadas pressões. Os compressores são máquinas sempre presentes nas instalações frigoríficas e nas instalações de liquefação de gases.

Façamos uma referência às aplicações de ar comprimido, conforme as características dos equipamentos que o utilizam:

1. Equipamentos à pressão de ar ou de ação fechada: trabalhos submarinos, inflagem de câmaras de ar de veículos, transporte pneumático;
2. Equipamentos a jato de ar ou de ação livre: resfriadores ou aquecedores a ar, jateamento de areia, pintura a pistola, metalização, projeção de revestimentos plásticos;
3. Equipamentos e máquinas de percussão: martelotes a ar comprimido, perfuratrizes de rocha, bate-estacas;
4. Motores a ar comprimido de pistões, de palhetas, de engrenagens;
5. Bombas de injeção de concreto;
6. Máquinas ferramentas fixas e portáteis de todos os tipos: furadeiras, serras, parafusadeiras, etc;
7. Abertura e fechamento de portas.

0. Tipos de compressores

Os compressores podem ser divididos em compressores de fluxo e compressores volumétricos, ou de deslocamento positivo. Os compressores de deslocamento positivo são máquinas destinadas a fornecer energia a um fluido compressível (gás), elevando sua pressão desde 0,1MPa, ou menos, até valores superiores a 300MPa.

Enquanto os turbo compressores (compressores de fluxo) dominam a gama das grandes vazões (acima de 100000 m³/h) e das grandes potências (acima de 1000 kW), devido ao seu elevado rendimento e dimensões reduzidas, os compressores de deslocamento positivo, principalmente os de êmbolo, matem um domínio completo para a faixa das médias e pequenas vazões (abaixo de 1000 m³/h), com pressões acima de 1MPa.

Os compressores podem ser classificados de acordo com o esquema proposto na Figura 140.

Figura 140 - Esquema dos Compressores.

COMO FUNCIONAM OS COMPRESSORES

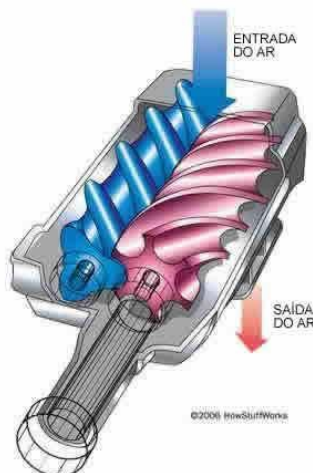


Figura 141 - Esquema de um Compressor Parafuso (How Stuff Works. 2006).

COMO FUNCIONAM OS SUPERCHARGERS



Figura 142 - Esquema de um Compressor Centrífugo (How Stuff Works. 2006).

0. MÁQUINAS DE FLUXO E A AJUDA DO ASPEN PLUS

O Aspen Plus® oferece seis tipos de equipamentos ou acessórios que alteram a pressão de um fluido. Eles são a bomba, o compressor, o compressor de múltiplos estágios, e ainda as válvulas, o *pipe* (único segmento com acessórios) ou o *pipeline* (múltiplo segmento com acessórios). Esses três últimos conferem uma resistência ao movimento do fluido, portanto diminuem a pressão. Essa queda de pressão é chamada de perda de carga.

O menu *Help* (F1) do programa em estudo é muito útil. As equações que são utilizadas nos cálculos da maior parte das propriedades, bem como instruções para a utilização dos blocos (cada equipamento), podem ser vistas em tal menu. Como a visualização de como deve ser conectadas as linhas de alimentação e saída em uma bomba.

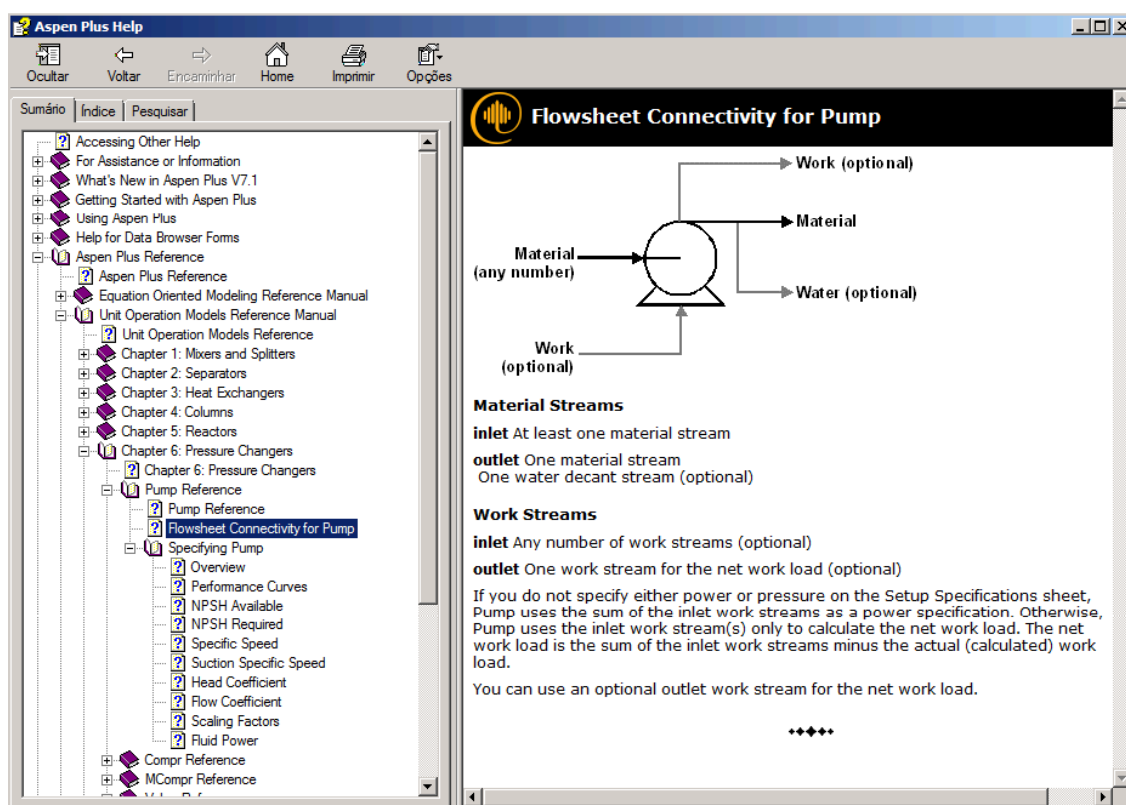


Figura 143 - Menu Help do Aspen Tech.

Você pode encontrar essas e outras informações sobre bombas e compressores no arquivo *Aspen Plus Reference* □ Unit Operation Models Reference Manual □ Chapter 6: Pressure Changers.

1. Opções de uma bomba

Ao colocar uma bomba em seu fluxograma, em uma das abas do bloco abrirá uma página similar à da Figura 144.

Figura 144 - Opções de uma Bomba no Aspen Tech.

As opções necessárias são as seguintes:

1. Devemos especificar o funcionamento da bomba. Há dois tipos: bomba ou turbina;
2. Em seguida, devemos dar alguma informação sobre a saída da bomba como: pressão de descarga, aumento na pressão (saída subtraída da entrada), razão na pressão (geralmente para máquina de fluxo essa razão não passa de 4), potência requerida ou por fim, utilizar curvas de performance. Para esta última opção, será necessário colocar dados a respeito da curva da bomba que será utilizada em seu processo, como por exemplo, pontos da curva;
3. Podemos especificar a eficiência da bomba. Esta opção não é imprescindível para que o simulador rode, entretanto é interessante preenchê-la.

Há outras abas além das abas de especificações como as opções de cálculo, opções do *flash*, utilidade e informações gerais. Porém, estas abas são dispensáveis para a simulação e seu uso é importante quando se possui dados adicionais para a bomba.

0. Opções de um compressor

The screenshot shows the Aspen Tech software interface for compressor specifications. The 'Specifications' tab is active. Under 'Model and type', 'Compressor' is selected and 'Isentropic' is chosen from the 'Type' dropdown (labeled 1). Under 'Outlet specification', 'Discharge pressure' is selected with a value of 3 and unit of bar (labeled 2). Under 'Efficiencies', 'Isentropic', 'Polytropic', and 'Mechanical' efficiency fields are visible (labeled 3).

Figura 145 - Opções de um compressor no Aspen Tech.

Similar à bomba, aparecerá uma janela igual à Figura 145. As opções necessárias serão:

1. Devemos especificar o modelo e o tipo no compressor, os quais podem ser:
 - a. Isentrópico;
 - a. Isentrópico utilizando o método ASME, para melhor visualização das equações utilizadas nesse e em outro método no Aspen® pode-se utilizar a ajuda do Aspen através da tecla "F1";
 - a. Isentrópico utilizando o método GPSA;
 - a. Politrópico utilizando o método ASME (método mais rigoroso que GPSA);
 - a. Politrópico utilizando o método GPSA (utilizado para quando temos condições de sucção);
 - a. Politrópico utilizando integração por partes;
 - a. Deslocamento positivo;
 - a. Deslocamento positivo utilizando integração por partes.

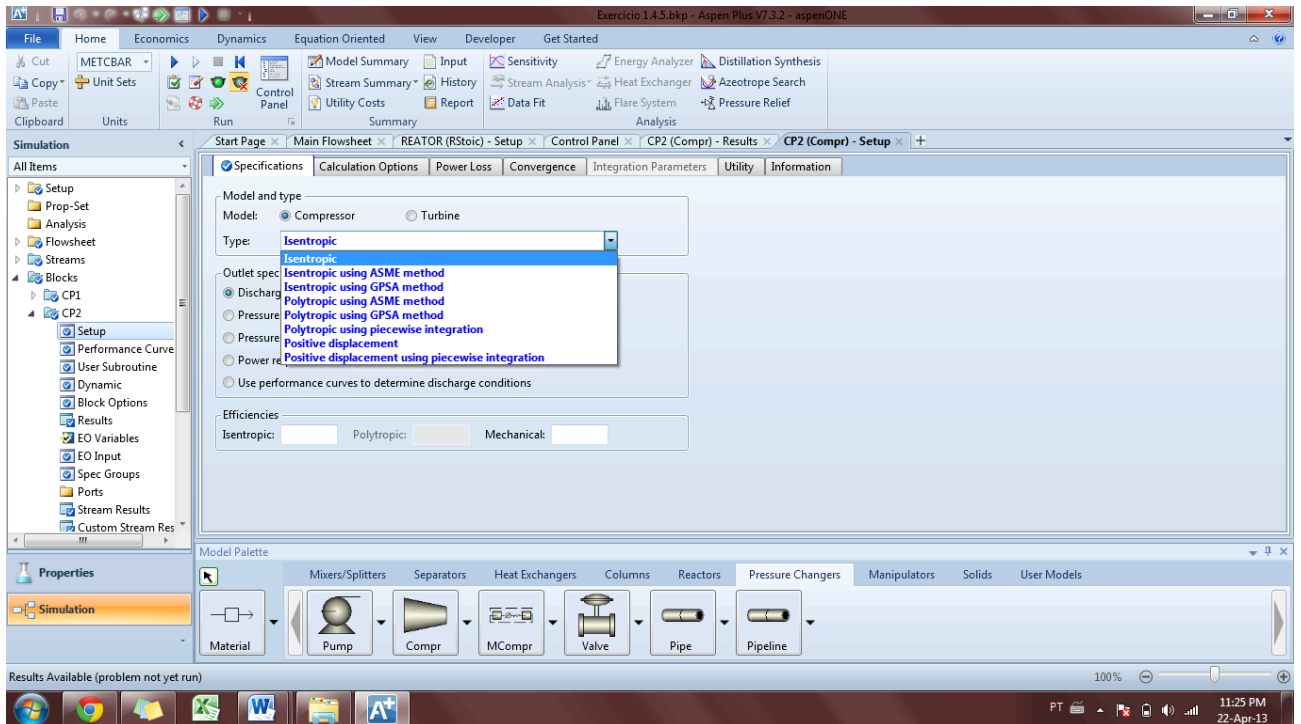


Figura 146 - Tipos de Compressores no Aspen Tech.

0. Em seguida, determinamos alguma das propriedades de saída do equipamento, conforme foi feita para a bomba no item anterior;
0. A terceira opção é apenas selecionada caso possuamos o valor da eficiência do compressor.
0. **Opções de tubulação**

Além das bombas e compressores, que são utilizados para aumentar a pressão, existem outros equipamentos ou acessórios que influenciam na carga, ou seja, na pressão de uma corrente. A tubulação possui grande importância se considerar uma tubulação extensa, com alguns quilômetros. Além dessa, ainda temos os acessórios, como por exemplo: medidores de vazão, pressão, válvulas, entre outros. O simulador Aspen Tech oferece a opção de usarmos tubulações e válvulas a fim de que tenhamos uma simulação mais realista.

Para as tubulações, temos dois tipos: (i) *Pipe* e (ii) *Pipeline*. A primeira corresponde à um único segmento com mesmas características, já a segunda corresponde a uma tubulação com diversas conexões, tantas quantas forem do seu interesse.

A seguir, temos melhor explicado as opções para as tubulações.

Para o *Pipeline*, teremos a especificação de acordo com a Figura 147.

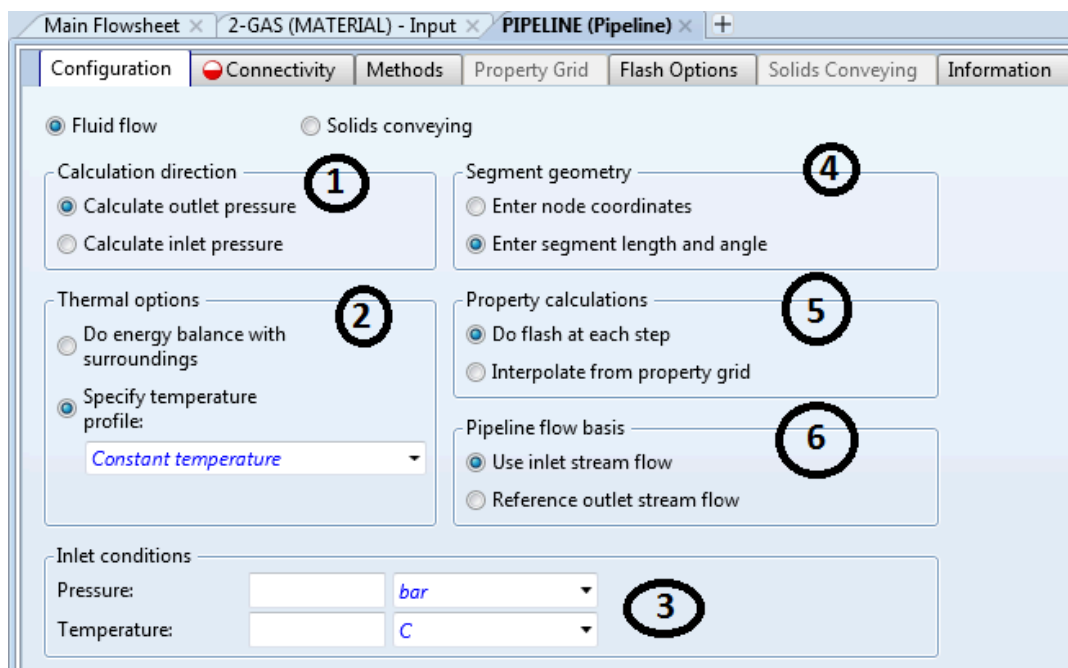


Figura 147 - Configurações para o Pipeline.

É possível definir alguns tipos de configurações:

1. A respeito do cálculo da pressão: entrada ou saída;
2. Em relação ao balanço de energia: é possível especificar o perfil de temperatura ou ainda realizar o balanço de energia através da temperatura ambiente;
3. Pode-se colocar as condições de entrada da tubulação;
4. Em relação ao segmento: pode-se entrar com as especificações dele em relação às coordenadas x e y, ou fornecer o comprimento e ângulo;
5. O tipo de cálculo das propriedades;
6. E por fim, como é feito o cálculo da vazão.

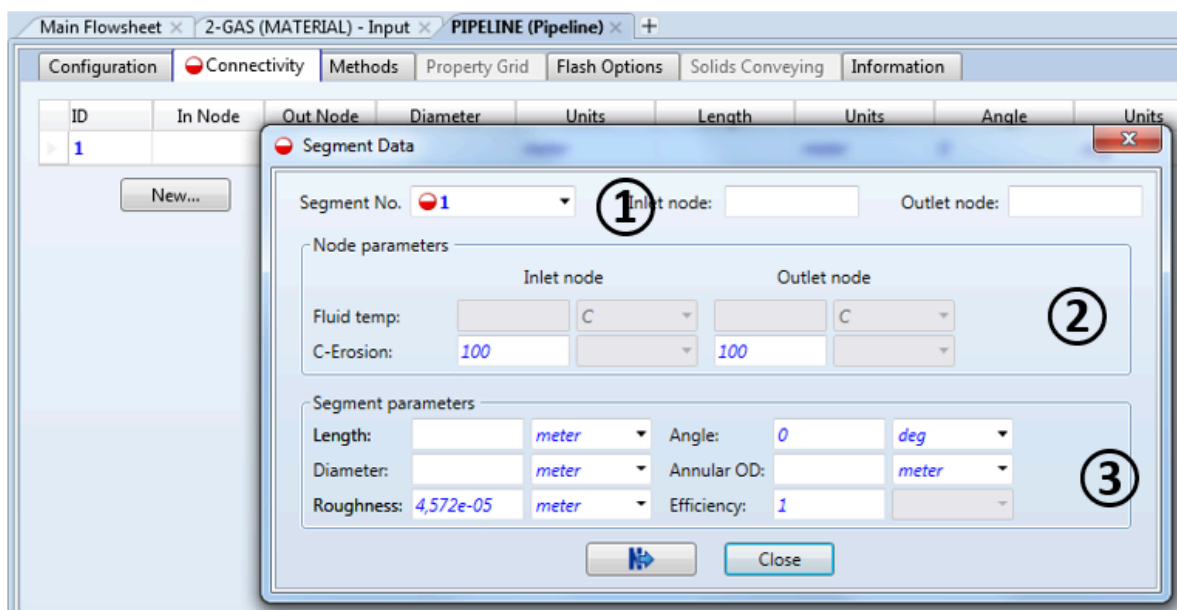


Figura 148 - Especificações dos Segmentos do Pipeline.

Na Figura 148 podemos observar um esquema geral da disposição dos segmentos:

1. Primeiramente devemos nomear a entrada e saída do segmento;
2. Em seguida, dependendo das configurações escolhidas anteriormente será necessário colocar as coordenadas, elevação e temperatura ambiente;
3. Por fim, devemos fornecer o diâmetro e caso escolhido fazer o balanço de energia com o ambiente, colocamos coeficiente global de troca térmica.

O *Pipe* possui uma configuração mais fácil, é necessário informar apenas o comprimento e diâmetro, como indicado na Figura 149.

Figura 149 - Especificações do Pipe.

1. Comprimento da tubulação;
2. Diâmetro interno da tubulação: nessa opção é possível utilizar o *schedule* ao invés de fornecer o diâmetro. Para tanto, colocamos o material e o *schedule* e o Aspen® irá nos fornecer o diâmetro automaticamente.
3. Caso seja pertinente, podemos colocar a elevação e angulação da tubulação.

Uma das vantagens do *Pipe* é a possibilidade de informar os diversos acessórios que estão presentes na tubulação. E ainda pode-se configurar as condições externas à tubulação a fim de fazer um cálculo mais preciso. Essas duas opções estão indicadas na Figura 150 e Figura 151.

Thermal specification type

☒ Constant temperature

☐ Linear temperature profile Outlet temperature: C

☐ Adiabatic (zero duty)

☐ Perform energy balance ☒ Include energy balance parameters

☒ Include heat flux

Energy balance parameters

Inlet ambient temperature: C

Outlet ambient temperature: C

Heat transfer coefficient: cal/sec-sqcm-K

Heat flux: cal/sec-m

Figura 150 - Especificação do Pipe em relação ao Balanço de Energia.

Nesse item é apenas necessário colocar como será realizado o balanço de energia. Nesse caso foi realizado com temperatura constante. Podemos escolher com um perfil de temperatura linear, adiabático ou realizar o balanço de energia. Caso seja escolhida a última opção, as opções que estão em cinza poderão ser alteradas, como as temperaturas de entrada e saída e o coeficiente global de transferência de calor.

Connection type

☒ Flanged welded ☐ Screwed

Number of fittings

Gate valves: 0

Butterfly valves: 0

Large 90 deg. elbows: 0

Straight tees: 0

Branched tees: 0

Miscellaneous L/D

Value: 0 Label:

Miscellaneous K factor

Value: 0 Label:

Figura 151 - Acessórios disponíveis no Pipe.

1. Nessa etapa é necessário fornecer o tipo de conexão das tubulações: flangeado ou parafusado;
2. Em seguida, podemos especificar os acessórios presentes em nossa tubulação, tais como, válvulas gaveta e borboleta, cotovelos, T's;
3. Caso os nossos acessórios não estejam em nenhuma dessas opções, é necessário apenas colocar a perda de carga nessa parte.

1.9 BOMBAS E COMPRESSORES

1.10 OBJETIVOS

O objetivo dessa aula é aprender a simular bombas e compressores no *Software Aspen Plus®*. Com isso relembremos conceitos vistos na disciplina de Operações Unitárias I e Integração III. Além de aprendermos a colocar tubulações com diferentes acessórios, elevações, temperatura externa em um projeto. Para este módulo serão utilizados as ferramentas Aspen Plus® do pacote Aspentech.

1.11 BOMBAS

O escoamento de fluidos em condutos e máquinas, como bombas e turbinas, configura-se como uma situação corriqueira. Então, surge a importância em especializarmos a equação geral do balanço de energia, sendo sua aplicação em tais casos consideravelmente simplificados.

A forma mais conhecida do balanço de energia para escoamento de um fluido pode ser expressa pela Equação 6.1:

$$\frac{\Delta v^2}{2g_c} + \Delta z + \frac{\Delta P}{\rho g_c} + l_w + H = 0 \quad (6.1)$$

Sendo o primeiro termo referente à energia cinética do fluido, o segundo com a energia potencial, o terceiro com a energia de pressão, o quarto com as perdas de energia que o fluido terá ao escoar e o último à quantidade de energia recebida pelo fluido, ou seja, quantidade de energia cedida pela bomba (Head da bomba). Considerando a linha esquematizada apresentada na Figura 138 - Balanço de Energia em Tubulações. Figura 138.

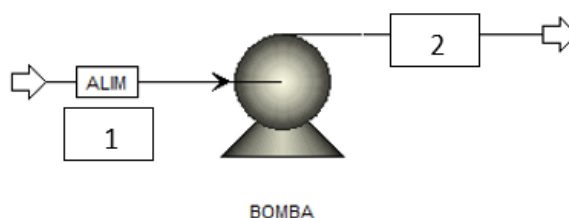


Figura 138 - Balanço de Energia em Tubulações.

Podemos aplicar o balanço de energia no volume de controle do ponto 1 ao 2, obtendo:

$$\frac{v_2^2 - v_1^2}{2g_c} + z_2 - z_1 + \frac{P_2 - P_1}{\rho g_c} + l_w + H = 0 \quad (4.2)$$

Como a alteração do diâmetro da tubulação é pequena, a variação de energia cinética é proporcionalmente diminuta, não há variação da energia potencial e a perda de carga no trecho pode ser desprezada, o balanço de energia mostra que a pressão aumenta em decorrência da energia cedida pela bomba ao fluido. Isso quer dizer: o fluido absorve a energia fornecida pela bomba convertendo-a em carga de pressão.

1.11.1 Funcionamento

A peça fundamental de uma bomba centrífuga é o rotor da bomba. Dentro há um eixo, que, ligado o rotor ao motor da bomba, faz com que o rotor gire, obrigando o fluido a entrar em movimento junto com as palhetas do rotor. O fluido é posto em rotação, após ser admitido à bomba pelo centro do rotor e ter entrado em contato com as palhetas. A aceleração centrífuga força-o a se deslocar rapidamente para a borda do rotor enquanto gira. Na medida em que o fluido se desloca em direção à periferia do rotor, a energia cinética do fluido

aumenta, ou seja, o rotor cede energia para o fluido. Ao atingir a borda do rotor, o fluido escapa por um espaço denominado de voluta. Como na voluta não mais é solicitado a girar, a energia cinética recebida em carga de pressão é convertida; e assim o fluido deixa a bomba pelo bocal de descarga com alta pressão. Para um melhor entendimento de uma bomba centrífuga, pode-se observar a Figura 139.

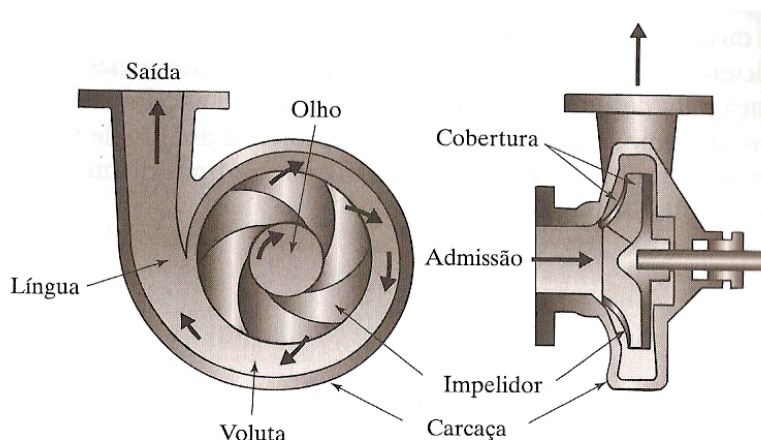


Figura 139 - Esquema Simplificada de uma bomba centrífuga (escoladavida.eng.br).

Como o fluido sofre uma brusca aceleração centrífuga, há uma tendência de “esvaziar” o centro do rotor. Essa rápida fuga provoca uma súbita queda de pressão no bocal de admissão da bomba. Se a pressão baixar até o nível da pressão de vapor do fluido na temperatura em que se encontra, o fluido satura e entra em ebulição. O fluxo bifásico líquido-vapor assim gerado desloca-se pelo rotor em direção a voluta, encontrando progressivamente pressões mais elevadas, proporcionando ao fluido a volta à condição de subresfriado. Isso força imediata condensação da fase vapor, o que provoca a cavitação da bomba, provocando uma severa erosão no rotor. Para que não ocorra a cavitação o fluido deve chegar a uma pressão tal que suporte a queda adicional da pressão, provocada pela aceleração centrífuga do fluido na boca do rotor. A cavitação causa redução na eficiência da bomba causando ruído, vibrações, fratura do rotor, da carcaça, etc.

1.11.2 Escolha de uma bomba

Primeiramente deve-se estipular qual será o tipo de bomba: (i) deslocamento positivo ou (ii) centrífuga, essa escolha deve ser baseada em relação à viscosidade do fluido. São comumente utilizadas, para fluidos com viscosidade abaixo de 20 cP, bombas centrífugas, ao passo que se utilizam bombas de deslocamento positivo para altas viscosidades. Porém, para vazões muito baixas, é difícil encontrar uma bomba que ofereça um bom rendimento, portanto indica-se o uso de bombas alternativas.

Os dados essenciais de projeto de uma bomba são: a vazão de fluido, a pressão de operação, temperatura e propriedades do fluido, assim podem se determinar outros dados. Para as bombas centrífugas, calcula-se a potência do motor e o $NPSH_d$, obtendo-se através da carta da bomba, o diâmetro do rotor, a rotação, o número de ordem da bomba, a potência do motor e o $NPSH_r$.

1.12 COMPRESSORES

Compressores são considerados máquinas de fluxo. Assim, há o aumento do nível energético do fluido a partir do fornecimento de energia mecânica. São máquinas operatrizes que transformam trabalho mecânico em energia comunicada a um gás, preponderantemente na forma de energia de pressão. Devido à energia de pressão que adquire, isto é, à pressurização, o gás pode:

1. Deslocar-se a longas distâncias em tubulações;
2. Ser armazenado em reservatórios para ser usado quando necessário, isto é, acumular energia;
3. Realizar trabalho mecânico, atuando sobre dispositivos, equipamentos e máquinas motrizes (motores a ar comprimido, por exemplo).

1.12.1 Utilização

A energia fornecida a um gás é utilizada, não só para o seu transporte ou armazenamento sob pressão, mas também para possibilitar determinadas reações químicas que só acontecem a elevadas pressões. Os compressores são máquinas sempre presentes nas instalações frigoríficas e nas instalações de liquefação de gases.

Façamos uma referência às aplicações de ar comprimido, conforme as características dos equipamentos que o utilizam:

1. Equipamentos à pressão de ar ou de ação fechada: trabalhos submarinos, inflagem de câmaras de ar de veículos, transporte pneumático;
2. Equipamentos a jato de ar ou de ação livre: resfriadores ou aquecedores a ar, jateamento de areia, pintura a pistola, metalização, projeção de revestimentos plásticos;
3. Equipamentos e máquinas de percussão: martelotes a ar comprimido, perfuratrizes de rocha, bate-estacas;
4. Motores a ar comprimido de pistões, de palhetas, de engrenagens;
5. Bombas de injeção de concreto;
6. Máquinas ferramentas fixas e portáteis de todos os tipos: furadeiras, serras, parafusadeiras, etc;
7. Abertura e fechamento de portas.

1.12.2 Tipos de compressores

Os compressores podem ser divididos em compressores de fluxo e compressores volumétricos, ou de deslocamento positivo. Os compressores de deslocamento positivo são máquinas destinadas a fornecer energia a um fluido compressível (gás), elevando sua pressão desde 0,1MPa, ou menos, até valores superiores a 300MPa.

Enquanto os turbo compressores (compressores de fluxo) dominam a gama das grandes vazões (acima de 100000 m³/h) e das grandes potências (acima de 1000 kW), devido ao seu elevado rendimento e dimensões reduzidas, os compressores de deslocamento positivo, principalmente os de êmbolo, matem um domínio completo para a faixa das médias e pequenas vazões (abaixo de 1000 m³/h), com pressões acima de 1MPa.

Os compressores podem ser classificados de acordo com o esquema proposto na Figura 140.

Figura 140 - Esquema dos Compressores.

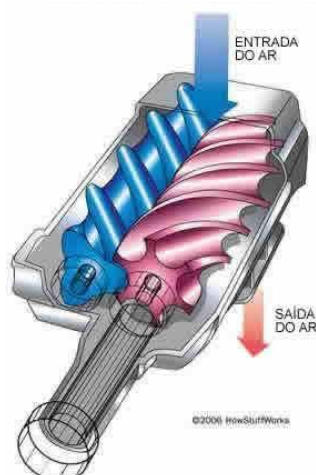


Figura 141 - Esquema de um Compressor Parafuso (How Stuff Works. 2006).



Figura 142 - Esquema de um Compressor Centrífugo (How Stuff Works. 2006).

1.13 MÁQUINAS DE FLUXO E A AJUDA DO ASPEN PLUS

O Aspen Plus® oferece seis tipos de equipamentos ou acessórios que alteram a pressão de um fluido. Eles são a bomba, o compressor, o compressor de múltiplos estágios, e ainda as válvulas, o *pipe* (único segmento com acessórios) ou o *pipeline* (múltiplo segmento com acessórios). Esses três últimos conferem uma resistência ao movimento do fluido, portanto diminuem a pressão. Essa queda de pressão é chamada de perda de carga.

O menu *Help* (F1) do programa em estudo é muito útil. As equações que são utilizadas nos cálculos da maior parte das propriedades, bem como instruções para a utilização dos blocos (cada equipamento), podem ser vistas em tal menu. Como a visualização de como deve ser conectadas as linhas de alimentação e saída em uma bomba.

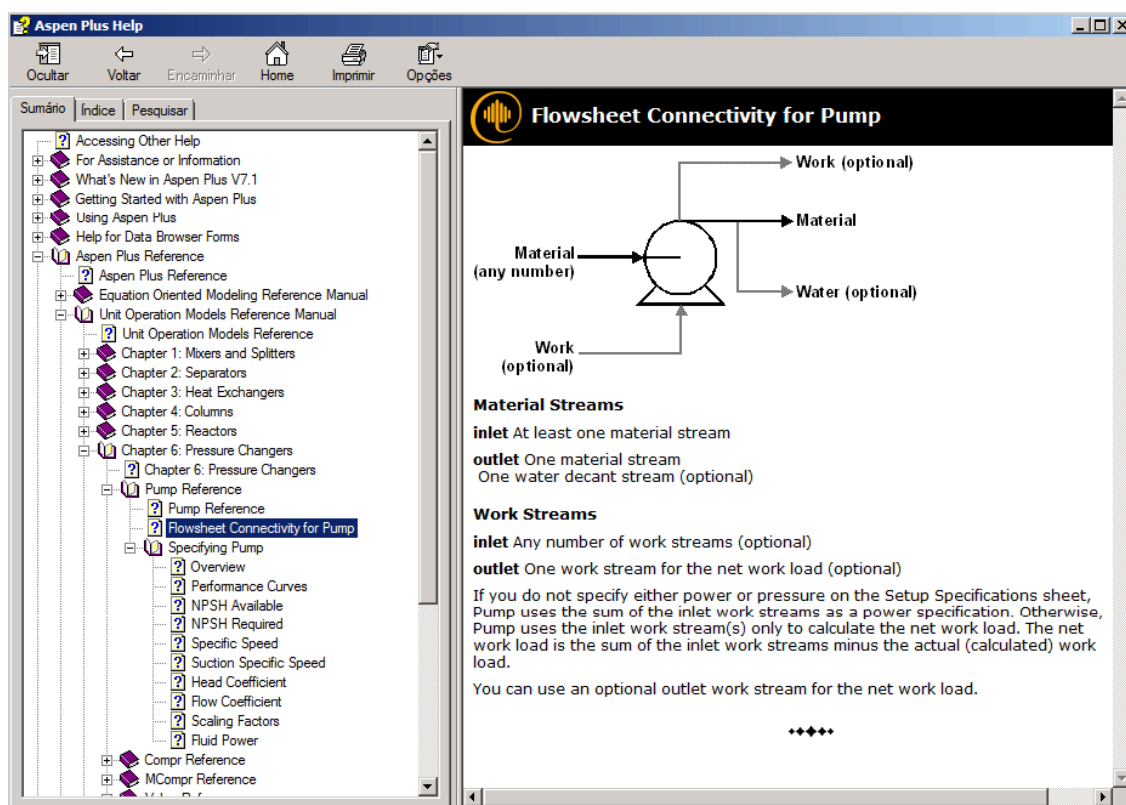


Figura 143 - Menu Help do Aspen Tech.

Você pode encontrar essas e outras informações sobre bombas e compressores no arquivo *Aspen Plus Reference* □ *Unit Operation Models Reference Manual* □ *Chapter 6: Pressure Changers*.

1.13.1 Opções de uma bomba

Ao colocar uma bomba em seu fluxograma, em uma das abas do bloco abrirá uma página similar à da Figura 144.

Specifications | Calculation Options | Flash Options | Utility | Information

Model
☒ Pump ① ☐ Turbine

Pump outlet specification
☐ Discharge pressure: [] bar
☐ Pressure increase: [] bar
☐ Pressure ratio: ② []
☐ Power required: [] kW
☒ Use performance curve to determine discharge conditions

Efficiencies
 Pump: ③ [] Driver: []

Figura 144 - Opções de uma Bomba no Aspen Tech.

As opções necessárias são as seguintes:

1. Devemos especificar o funcionamento da bomba. Há dois tipos: bomba ou turbina;

2. Em seguida, devemos dar alguma informação sobre a saída da bomba como: pressão de descarga, aumento na pressão (saída subtraída da entrada), razão na pressão (geralmente para máquina de fluxo essa razão não passa de 4), potência requerida ou por fim, utilizar curvas de performance. Para esta última opção, será necessário colocar dados a respeito da curva da bomba que será utilizada em seu processo, como por exemplo, pontos da curva;
3. Podemos especificar a eficiência da bomba. Esta opção não é imprescindível para que o simulador rode, entretanto é interessante preenchê-la.

Há outras abas além das abas de especificações como as opções de cálculo, opções do *flash*, utilidade e informações gerais. Porém, estas abas são dispensáveis para a simulação e seu uso é importante quando se possui dados adicionais para a bomba.

1.13.2 Opções de um compressor

The screenshot shows the 'Specifications' tab in Aspen Tech. The 'Model and type' section has 'Compressor' selected and 'Isentropic' chosen from the 'Type' dropdown menu (labeled 1). The 'Outlet specification' section has 'Discharge pressure' selected with a value of 3 bar (labeled 2). The 'Efficiencies' section has 'Isentropic' selected (labeled 3).

Figura 145 - Opções de um compressor no Aspen Tech.

Similar à bomba, aparecerá uma janela igual à Figura 145. As opções necessárias serão:

1. Devemos especificar o modelo e o tipo no compressor, os quais podem ser:
 - a) Isentrópico;
 - b) Isentrópico utilizando o método ASME, para melhor visualização das equações utilizadas nesse e em outro método no Aspen® pode-se utilizar a ajuda do Aspen através da tecla "F1";
 - c) Isentrópico utilizando o método GPSA;
 - d) Politrópico utilizando o método ASME (método mais rigoroso que GPSA);
 - e) Politrópico utilizando o método GPSA (utilizado para quando temos condições de sucção);
 - f) Politrópico utilizando integração por partes;
 - g) Deslocamento positivo;
 - h) Deslocamento positivo utilizando integração por partes.

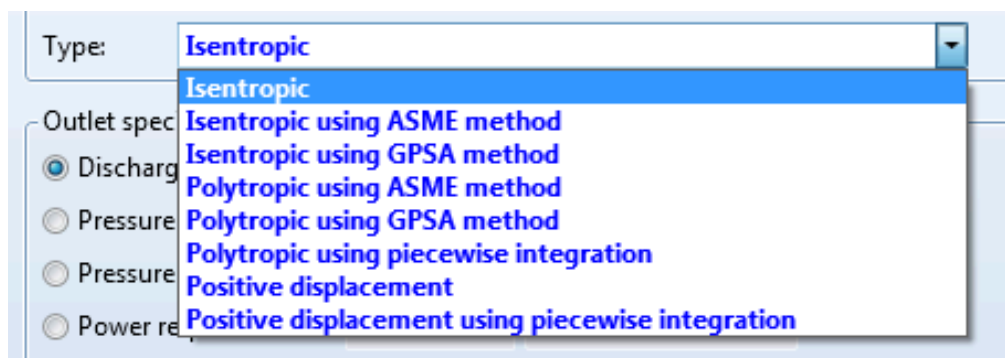


Figura 146 - Tipos de Compressores no Aspen Tech.

2. Em seguida, determinamos alguma das propriedades de saída do equipamento, conforme foi feita para a bomba no item anterior;
3. A terceira opção é apenas selecionada caso possuamos o valor da eficiência do compressor.

1.13.3 Opções de tubulação

Além das bombas e compressores, que são utilizados para aumentar a pressão, existem outros equipamentos ou acessórios que influenciam na carga, ou seja, na pressão de uma corrente. A tubulação possui grande importância se considerar uma tubulação extensa, com alguns quilômetros. Além dessa, ainda temos os acessórios, como por exemplo: medidores de vazão, pressão, válvulas, entre outros. O simulador Aspen Tech oferece a opção de usarmos tubulações e válvulas a fim de que tenhamos uma simulação mais realista.

Para as tubulações, temos dois tipos: (i) *Pipe* e (ii) *Pipeline*. A primeira corresponde à um único segmento com mesmas características, já a segunda corresponde a uma tubulação com diversas conexões, tantas quantas forem do seu interesse.

A seguir, temos melhor explicado as opções para as tubulações.

Para o *Pipeline*, teremos a especificação de acordo com a Figura 147.

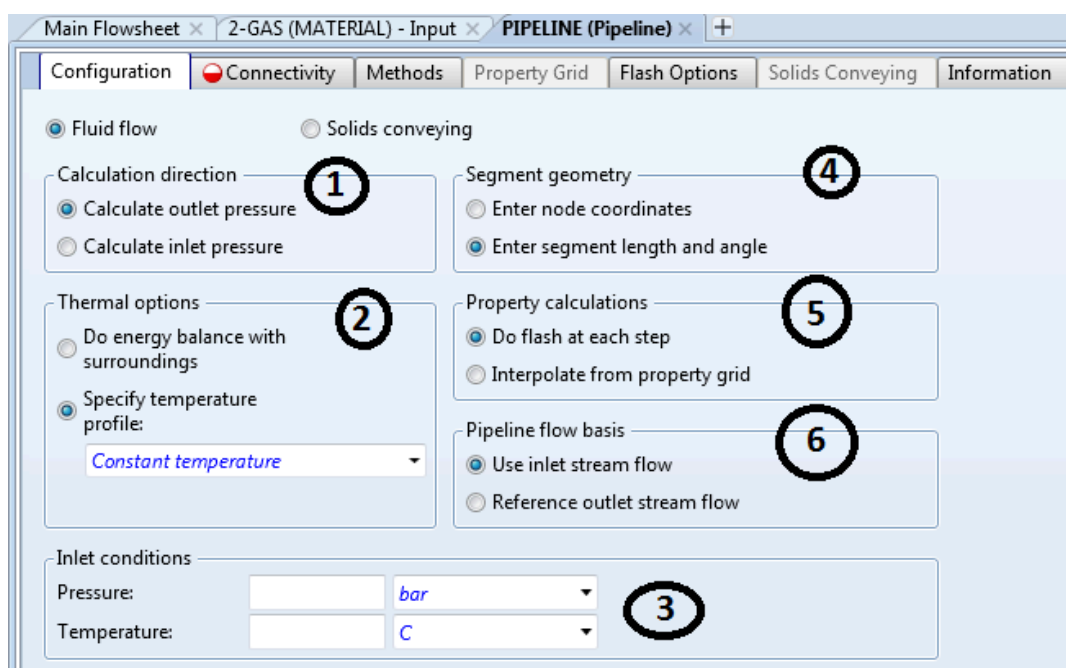


Figura 147 - Configurações para o Pipeline.

É possível definir alguns tipos de configurações:

1. A respeito do cálculo da pressão: entrada ou saída;
2. Em relação ao balanço de energia: é possível especificar o perfil de temperatura ou ainda realizar o balanço de energia através da temperatura ambiente;
3. Pode-se colocar as condições de entrada da tubulação;
4. Em relação ao segmento: pode-se entrar com as especificações dele em relação às coordenadas x e y, ou fornecer o comprimento e ângulo;
5. O tipo de cálculo das propriedades;
6. E por fim, como é feito o cálculo da vazão.

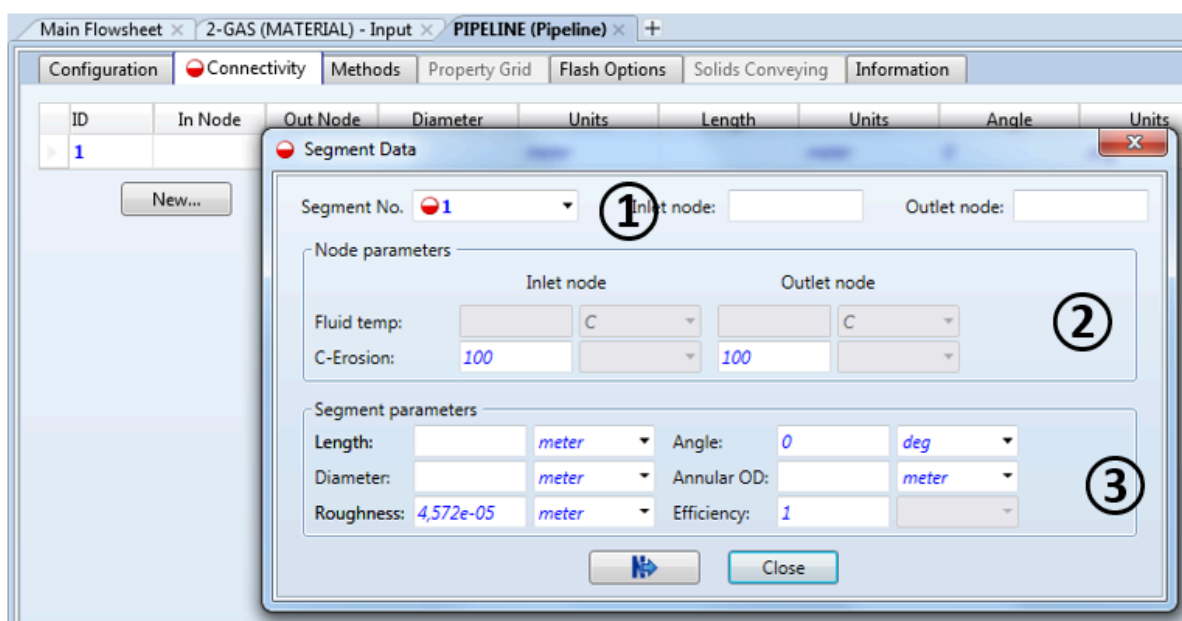


Figura 148 - Especificações dos Segmentos do Pipeline.

Na Figura 148 podemos observar um esquema geral da disposição dos segmentos:

1. Primeiramente devemos nomear a entrada e saída do segmento;
2. Em seguida, dependendo das configurações escolhidas anteriormente será necessário colocar as coordenadas, elevação e temperatura ambiente;
3. Por fim, devemos fornecer o diâmetro e caso escolhido fazer o balanço de energia com o ambiente, colocamos coeficiente global de troca térmica.

O *Pipe* possui uma configuração mais fácil, é necessário informar apenas o comprimento e diâmetro, como indicado na Figura 149.

Figura 149 - Especificações do Pipe.

1. Comprimento da tubulação;
2. Diâmetro interno da tubulação: nessa opção é possível utilizar o *schedule* ao invés de fornecer o diâmetro. Para tanto, colocamos o material e o *schedule* e o Aspen® irá nos fornecer o diâmetro automaticamente.
3. Caso seja pertinente, podemos colocar a elevação e angulação da tubulação.

Uma das vantagens do *Pipe* é a possibilidade de informar os diversos acessórios que estão presentes na tubulação. E ainda pode-se configurar as condições externas à tubulação a fim de fazer um cálculo mais preciso. Essas duas opções estão indicadas na Figura 150 e Figura 151.

Figura 150 - Especificação do Pipe em relação ao Balanço de Energia.

Nesse item é apenas necessário colocar como será realizado o balanço de energia. Nesse caso foi realizado com temperatura constante. Podemos escolher com um perfil de temperatura linear, adiabático ou realizar o balanço de energia. Caso seja escolhida a última opção, as opções que estão em cinza poderão ser alteradas, como as temperaturas de entrada e saída e o coeficiente global de transferência de calor.

Figura 151 - Acessórios disponíveis no Pipe.

1. Nessa etapa é necessário fornecer o tipo de conexão das tubulações: flangeado ou parafusado;
2. Em seguida, podemos especificar os acessórios presentes em nossa tubulação, tais como, válvulas gaveta e borboleta, cotovelos, T's;
3. Caso os nossos acessórios não estejam em nenhuma dessas opções, é necessário apenas colocar a perda de carga nessa parte.

1.14 EXERCÍCIOS

Ciclone

Calcular a eficiência de coleta de um ciclone de média eficiência ao qual sejam alimentados 3500 m³/h de ar e 20000 kg/h de sílica a 100 °C e 1,5 bar. Definir o diâmetro do ciclone para que a velocidade de entrada seja 18 m/s. Utilizar a correlação de Leith-Licht para o cálculo da eficiência de coleta. Usar o modelo *SOLIDS* para a simulação. A alimentação possui sílica com a distribuição granulométrica apresentada na Tabela 3.

Faixa	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Granulometria (µm)	0-20	20-40	40-60	60-80	80-100	100-120	120-140	140-160	160-180	180-200
Fração mássica	0,07	0,14	0,25	0,25	0,14	0,07	0,03	0,02	0,02	0,01

Tabela 3 - Distribuição granulométrica (PSD) da sílica presente na alimentação do ciclone do exercício 1.1.

Repita a simulação alterando a vazão de ar. Compare os resultados para 100, 250, 500, 1000 e 3000 m³/h. Que conclusões você pode tirar a respeito dessa comparação? De que forma a vazão de ar pode influenciar na eficiência de coleta do ciclone, ou seja, quais variáveis são afetadas por seu valor?

Ciclone + Precipitador eletrostático

Em uma indústria, carvão betuminoso é queimado em uma fornalha e é necessário tratar os gases de combustão que carregam uma larga quantidade de cinzas. Para isso, um ciclone de média eficiência com diâmetro de 3 ft realiza a coleta das partículas de maior diâmetro e a corrente gasosa carregando as menores partículas deve ser enviada a um precipitador eletrostático para uma eficiência de coleta de 99,5%. A partir de uma alimentação de 100000 ft³/h a 930 °F e pressão relativa zero com 3000 lb/h de sólidos nas mesmas condições, determine a eficiência do ciclone (usando a correlação de Leith-Licht para o cálculo da eficiência) e o projeto do precipitador, para que seja alcançada a eficiência desejada, considerando que a constante dielétrica seja 5. Os dados para a alimentação ao ciclone constam na Tabela 4, Tabela 5 e na Tabela 6.

Componente	Fração molar
O ₂	0,03
N ₂	0,70
H ₂ O	0,12
CO ₂	0,15

Tabela 4 - Composição gasosa da alimentação (Substream MIXED) do processo do exercício 1.2.

Componente	Fração mássica
SiO ₂	0,60
Al ₂ O ₃	0,15
Fe ₂ O ₃	0,25

Tabela 5 - Composição das cinzas na alimentação (Substream CIPSD) do processo do exercício 1.2.

Faixa (μm)	0-20	20-40	40-60	60-80	80-100	100-120	120-140
Fração mássica	0,7	0,2	0,06	0,02	0,01	0,007	0,003

Tabela 6 - Distribuição granulométrica (PSD) das partículas na alimentação do processo do exercício 1.2.

:

1.15 GABARITO CAPÍTULO 1

Exercício 1.1. Ciclone

O diâmetro do ciclone para a velocidade pedida é de 0,7349 m. Com a vazão de ar proposta, a eficiência de coleta será de 91,0%. Repetindo a simulação para 100, 250, 500, 1000 e 3000 m³/h de ar, os resultados serão 59,4%, 69,1%, 76,0%, 82,2% e 90,1%. A conclusão é que com maiores vazões de gás, a eficiência de coleta também é aumentada. Isso ocorre, pois, para um ciclone de mesmo tamanho, ao aumentar a vazão da suspensão, maior será sua velocidade de entrada no equipamento, o que influencia diretamente a eficiência de coleta.

No Aspen 8.4, a primeira janela após a escolha das unidades será a de especificação dos componentes. Selecionando-os de acordo com a Figura 152. Não esqueça de trocar o Type do SiO₂ para Solid.

Select components:

	Component ID	Type	Component name	Alias
▶	SIO2	Solid	SILICON-DIOXIDE	SIO2
▶	AIR	Conventional	AIR	AIR
▶				

Find Elec Wizard User Defined Reorder Review

Figura 43- Componentes selecionados para a resolução do exercício 1.1

Ao clicar no Next (F4), abrirá a janela de configurações termodinâmicas. Vamos alterar o Base method para Solids.

Property methods & options

Method filter: COMMON

Base method: SOLIDS

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method: STEAM-TA

Water solubility: 3

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Figura 44 - Modelo termodinâmico usado na resolução do exercício 1.1

Podemos mudar para a janela *Simulation* e montar o fluxograma. Lembre de que o Ciclone está na janela de Solid Separators e não Splitters.

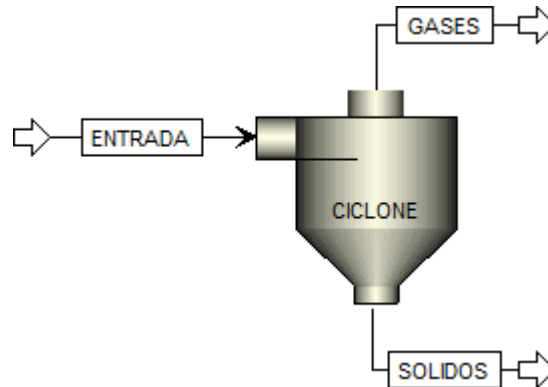


Figura 45 - Fluxograma proposto para o exercício 1.1.

Na janela *Simulation*, ao clicar na pasta Setup (menu esquerdo), é possível editar as configurações globais das correntes. Trocar Stream class para MIXCIPSD e flow basis para Mass.

Global settings

Input mode: *Steady-State*

Stream class: **MIXCIPSD**

Flow basis: **Mass**

Ambient pressure: *1,01325* *bar*

Ambient temp.: *10* *C*

Valid phases:

Free water: *No*

Operational year: *8766* *hr*

Figura 46 - Configurações globais do exercício 1.1.

Especificar a subcorrente *MIXED* da alimentação do processo de acordo com a Figura 156.

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: *100* *C*

Pressure: *1,5* *bar*

Vapor fraction:

Total flow basis: **Volume**

Total flow rate: *3500* *cum/hr*

Solvent:

Composition

Mole-Frac

	Component	Value
▶	SiO2	
▶	AIR	1

Total: *1*

Figura 47 - Especificação da subcorrente MIXED da corrente de alimentação do exercício 1.1.

E a subcorrente CIPSD da alimentação do processo, como mostra a Figura 157.

State variables		Composition	
Substream name:	<input type="text" value="CIPSD"/>	Mass-Flow	<input type="text" value="kg/hr"/>
Temperature:	<input type="text" value="100"/> <input type="text" value="C"/>		
Pressure:	<input type="text" value="1,5"/> <input type="text" value="bar"/>		
Total flow basis:	<input type="text" value="Mass"/>		
Total flow rate:	<input type="text" value=""/>		
		Component	Value
		SiO2	20000
		Total:	20000

Figura 48 - Especificação da subcorrente CIPSD da corrente de alimentação do exercício 1.1.

Isso incluindo a distribuição granulométrica informada no enunciado do exercício, seguindo a Figura 158.

	Interval	Lower limit	Upper limit	Weight fraction	Cumulative weight fraction
▶	1	0	20	0,07	0,07
▶	2	20	40	0,14	0,21
▶	3	40	60	0,25	0,46
▶	4	60	80	0,25	0,71
▶	5	80	100	0,14	0,85
▶	6	100	120	0,07	0,92
▶	7	120	140	0,03	0,95
▶	8	140	160	0,02	0,97
▶	9	160	180	0,02	0,99
▶	10	180	200	0,01	1

Figura 49 - Distribuição granulométrica da alimentação do exercício 1.1.

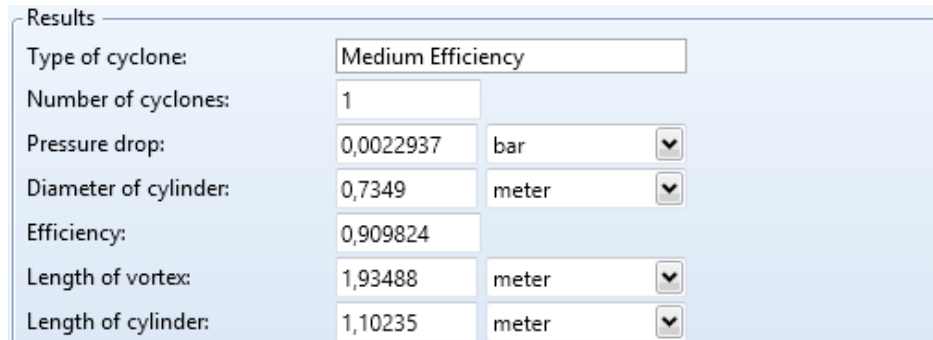
Especificar o ciclone conforme a Figura. Como a resolução foi feita no Aspen Plus® V8.4, há uma pequena diferença na interface e no nome do tipo de ciclone. O tipo escolhido se refere ao ciclone de média eficiência, o qual deve ser usado nesse exercício.

Para encontrar o diâmetro do ciclone, deve-se utilizar a equação 1.1. É necessário converter a vazão dada no enunciado para o Sistema Internacional de Unidades, portanto, de m^3/h para m^3/s . Dessa forma, realizando os cálculos, encontramos o valor de 0,7349 m para o diâmetro.

Calculation options	
Mode:	<input type="text" value="Simulation"/>
Efficiency correlation:	<input type="text" value="Leith-Licht"/>
Type:	<input type="text" value="Stairmand-HT"/>
Efficiency correlation parameters	
Vane constant:	<input type="text" value="16"/>
Wall friction coefficient:	<input type="text" value="0,0075"/>
Constant D:	<input type="text" value="3"/>
Constant Kg:	<input type="text" value="0,025"/>
<input type="checkbox"/> Consider secondary flow	
Simulation parameters	
Diameter:	<input type="text" value="0,7349"/> <input type="text" value="meter"/>
Number of cyclones:	<input type="text" value="1"/>

Figura 50 - Especificações do ciclone do exercício 1.1.

Encontrar a eficiência de coleta na pasta *Results* dentro da pasta do bloco do Ciclone, como mostra a Figura 160.

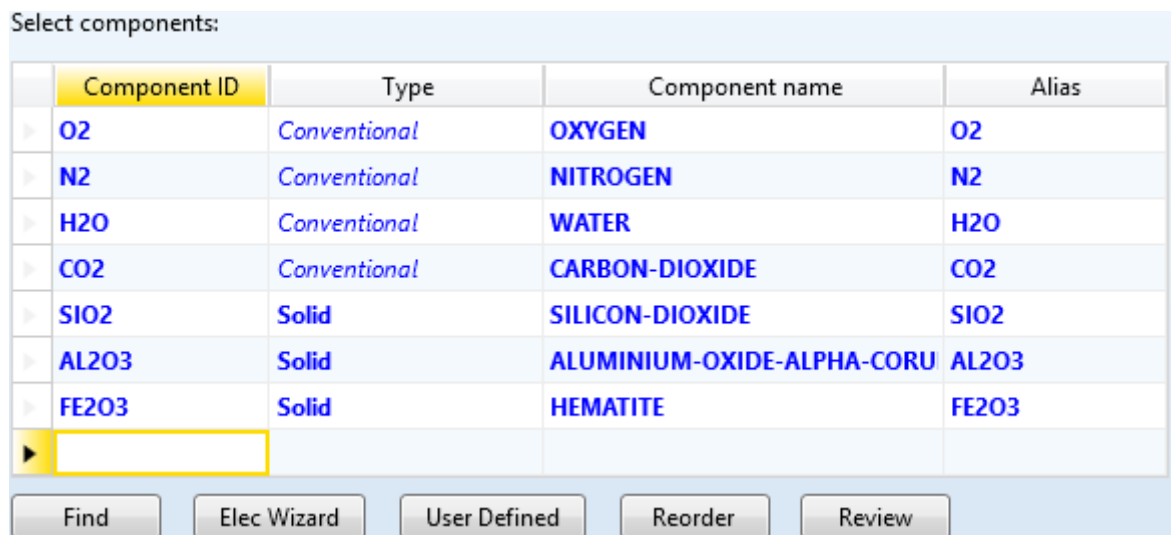


Results	
Type of cyclone:	Medium Efficiency
Number of cyclones:	1
Pressure drop:	0,0022937 bar
Diameter of cylinder:	0,7349 meter
Efficiency:	0,909824
Length of vortex:	1,93488 meter
Length of cylinder:	1,10235 meter

Figura 51 - Resultados para o ciclone do exercício 1.1.

Exercício 1.2. **Ciclone + Precipitador eletrostático**

Iniciar uma simulação com unidades métricas, alterar para o sistema inglês de unidades. Adicionar os componentes lembrando de alterar para *Solids* os componentes sólidos.



Component ID	Type	Component name	Alias
O2	Conventional	OXYGEN	O2
N2	Conventional	NITROGEN	N2
H2O	Conventional	WATER	H2O
CO2	Conventional	CARBON-DIOXIDE	CO2
SiO2	Solid	SILICON-DIOXIDE	SiO2
Al2O3	Solid	ALUMINIUM-OXIDE-ALPHA-CORU	Al2O3
Fe2O3	Solid	HEMATITE	Fe2O3

Find Elec Wizard User Defined Reorder Review

Figura 52 - Componentes selecionados para o exercício 1.2.

Ao clicar no **Next (F4)**, abrirá a janela de configurações termodinâmicas. Alterar *Base method* para *Solids*.

Property methods & options

Method filter: **COMMON**

Base method: **SOLIDS**

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method: **STEAM-TA**

Water solubility: **3**

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Figura 53 - Modelo termodinâmico usado na resolução do exercício 1.2.

Na janela *Simulation*, montar o fluxograma.

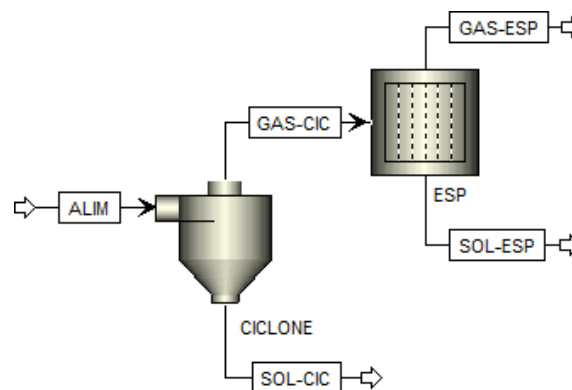


Figura 54 - Fluxograma sugerido para o exercício 1.2.

Na janela *Simulation*, ao clicar na pasta Setup (menu esquerdo), é possível editar as configurações globais das correntes. Trocar Stream class para MIXCIPSD e flow basis para Mass.

Global settings

Input mode: **Steady-State**

Stream class: **MIXCIPSD**

Flow basis: **Mass**

Ambient pressure: **1,01325** **bar**

Ambient temp.: **10** **C**

Valid phases:

Free water: **No**

Operational year: **8766** **hr**

Figura 55 - Global settings para o 1.2.

Ao clicar Next, especificar a subcorrente *MIXED* da alimentação do processo, como mostra a Figura 165.

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: **930** **F**

Pressure: **0** **psig**

Vapor fraction:

Total flow basis: **Volume**

Total flow rate: **100000** **cuft/hr**

Solvent:

Composition

Mole-Frac

Component	Value
O2	0,03
N2	0,7
H2O	0,12
CO2	0,15
SiO2	
Al2O3	
Fe2O3	

Total: **1**

Figura 56 - Especificações da subcorrente MIXED da alimentação do exercício 1.2.

Especificar a subcorrente *CIPSD* da alimentação do processo, de acordo com a Figura 166.

State variables

Substream name: **CIPSD**

Temperature: **930** **F**

Pressure: **0** **psig**

Total flow basis: **Mass**

Total flow rate: **3000** **lb/hr**

Composition

Mass-Frac

Component	Value
SiO2	0,6
Al2O3	0,15

Total: **1**

Figura 57 - Especificação da subcorrente *CIPSD* da alimentação do exercício 1.2.

E, também, a sua distribuição granulométrica, conforme a Figura 167.

	Interval	Lower limit	Upper limit	Weight fraction	Cumulative weight fraction
▶	1	0	20	0,7	0,7
▶	2	20	40	0,2	0,9
▶	3	40	60	0,06	0,96
▶	4	60	80	0,02	0,98
▶	5	80	100	0,01	0,99
▶	6	100	120	0,007	0,997
▶	7	120	140	0,003	1
▶	8	140	160	0	1
▶	9	160	180	0	1
▶	10	180	200	0	1

Figura 58 - Distribuição granulométrica da alimentação do exercício 1.2.

Especificar o ciclone, conforme a Figura 168. Observar que a resolução foi feita no Aspen Plus® V8.0, em que o ciclone de média eficiência é achado de *Stairmand HT*.

Calculation options	
Mode:	Simulation
Efficiency correlation:	Leith-Licht
Type:	Stairmand-HT

Efficiency correlation parameters	
Vane constant:	16
Wall friction coefficient:	0,0075
Constant D:	3
Constant Kg:	0,025
<input type="checkbox"/> Consider secondary flow	

Simulation parameters	
Diameter:	3 ft
Number of cyclones:	1

Figura 59 - Especificação do ciclone do exercício 1.2.

E as variáveis de projeto do precipitador eletrostático, conforme a Figura 169. Como mencionado, o Aspen Plus® V8.4 dá três opções de modelos de precipitadores. Nas versões antigas não há essa opção, pois o bloco *ESP* só trabalha com o modelo de Crawford para precipitadores tipo placa-fio.

Calculation options	
Precipitator type:	Plate
Model:	Crawford
Mode:	Design
Exponent K:	1
Exponent alpha:	0,53

Design parameters	
Separation efficiency:	0,995
Gas velocity:	6,56168 ft/sec
Maximum height:	27,5591 ft
Maximum width:	27,5591 ft
Minimum length:	0,328084 ft
Maximum length:	20,6693 ft

Figura 60 - Variáveis de projeto do precipitador eletrostático do exercício 1.2.

Definir a constante dielétrica da suspensão de acordo com o enunciado, como é mostrado na Figura 170.

Dielectric constant for each substream	
Substream ID	Dielectric constant
CIPSD	5

Figura 61 - Constante dielétrica da suspensão da alimentação do exercício 1.2.

A eficiência do ciclone é 53,0%. O projeto do precipitador obtido em simulação no Aspen Plus® V8.4 é mostrada na Figura 171.

ESP results		
Gas velocity:	1,64041995	ft/sec
Number of plates:	6	
Plate height:	4,52836	ft
Plate length:	4,88649	ft
Overall collection efficiency:	0,99518	
Corona voltage:	9813,08	
Power requirement:	0,256292	hp
Total width of precipitator:	3,74016	ft
Pressure drop:	0,000763741	psia
Solid load of gas inlet:	0,0140862	lb/cuft
Solid load of gas outlet:	0,0140855	lb/cuft

Figura 62 - Resultados do projeto do precipitador eletrostático do exercício 1.2.

CAPÍTULO 2

2 TERMODINÂMICA APLICADA EM OPERAÇÕES DE SEPARAÇÃO

2.1 OBJETIVOS

O foco desta aula será a escolha do modelo termodinâmico. Com isso, o aluno trabalhará o que foi aprendido em exercícios com operações unitárias que envolvam processos de separação líquido-vapor e líquido-líquido, a fim de resgatar, principalmente, os conhecimentos da disciplina de Termodinâmica II para aplicação na disciplina de Operações Unitárias III. A partir das últimas atualizações o Aspen Properties foi colocado dentro do Aspen Plus®, então utilizaremos apenas o Aspen Plus®.

2.2 ESCOLHA DO MODELO TERMODINÂMICO

A escolha do modelo termodinâmico envolve um conhecimento prévio do sistema em que se quer trabalhar e deve levar em conta o número de componentes de cada corrente, suas características, a forma como interagem entre si, ou seja, todo o conhecimento termodinâmico adquirido durante o curso.

A termodinâmica, através de suas equações de estado, tem como principal objetivo determinar as propriedades desconhecidas de um dado sistema, a fim de que este seja modelado. Muitas correlações foram obtidas com esse objetivo, cada qual se ajustando melhor conforme o sistema em questão.

Muitos dos modelos termodinâmicos utilizados para a modelagem de sistema em equilíbrio utilizam-se do coeficiente de atividade de um determinado componente para representar seu desvio do componente ideal. Esse parâmetro termodinâmico se relaciona com a energia livre de Gibbs em excesso e depende, basicamente, da composição da mistura, temperatura e da pressão. O termo em excesso descreve o comportamento real do componente, desse modo, os coeficientes de atividade possuem um significado decisivo na modelagem do equilíbrio de fases.

A modelagem termodinâmica de sistemas em equilíbrio é desenvolvida pela análise dos sistemas. Quando se tem um sistema cuja não idealidade verifica-se na fase vapor o equilíbrio do dado sistema pode ser previsto utilizando-se as equações de estado tais como: PENG ROBINSON, REDLICH KWONG entre outras. No caso da não idealidade se verificar na fase líquida o equilíbrio do sistema deve ser previsto através dos modelos termodinâmicos tais como: WILSON, UNIQUAC, UNIFAC entre outros. Caso a não idealidade do sistema seja verificada nas duas fases utilizam-se da combinação das equações e dos modelos.

2.1.1 Especificando o método de cálculo das propriedades termodinâmicas

Como vimos na aula anterior, após a entrada dos componentes de cada corrente, o Aspen Plus® e o Properties exigirão a escolha do modelo termodinâmico (na pasta *Methods*) que será utilizado na simulação, que deverá ser preenchido no campo *Base method*. Ele fornece uma lista com várias opções, como se pode observar na Figura 43.

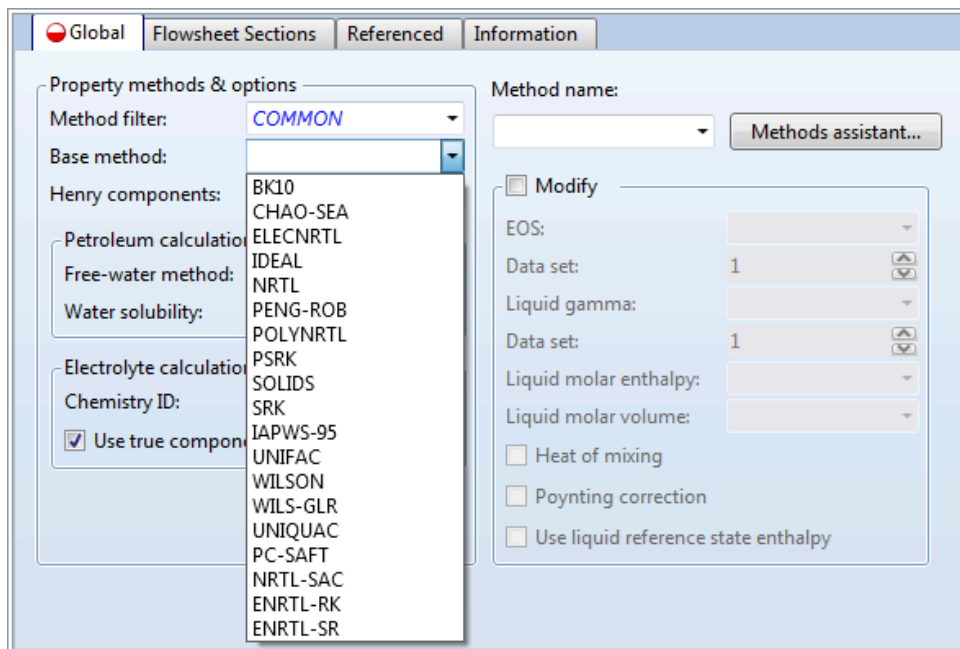


Figura 43 - Escolha do modelo termodinâmico.

Os métodos listados em *Base method* são filtrados pela opção selecionada no campo *Method filter*. Por padrão, o programa tem selecionado o filtro *COMMON*, listando apenas os métodos mais comuns. Se você deixar o cursor em cima do nome de algum dos métodos, aparecerá em um balão de ajuda (versões mais recentes) ou no rodapé da janela uma breve descrição do método, informando sobre a equação de estado (*EOS* – *Equation of State*) utilizada para descrever a fase vapor e o modelo para o coeficiente de atividade (*Liquid gamma*).

2.1.2 Recursos de auxílio à seleção do método

Há situações em que podem surgir dúvidas na hora de escolher o método cujos modelos termodinâmicos melhor simularão a operação de uma planta ou uma simples operação unitária. Neste curso, trazemos duas formas de ajudá-lo com esse problema. Você pode encontrar, no Apêndice A, informações sobre alguns dos modelos termodinâmicos e, também, um fluxograma que mostra a metodologia adotada pela ferramenta que explicaremos agora.

Felizmente, o Aspen possui uma ferramenta bastante útil: o Assistente de seleção do método para o cálculo de propriedades termodinâmicas. Na Figura 43, ao lado do campo *Method name*, você encontra um botão que abrirá o Assistente. Nas versões mais atuais do Aspen Plus®, o Assistente é operado dentro da própria ajuda (*Help*), conforme a Figura 44. Serão ofertadas duas opções para prosseguir com a escolha do método: *Specify component type* e *Specify process type*. Na primeira opção são feitas perguntas relativas às características das espécies químicas presentes no sistema. Já a segunda alternativa é utilizada para especificar o tipo de processo simulado (Farmacêutico, polimérico, eletrolítico, etc.), e assim o Assistente fornece informações adicionais sobre os principais métodos utilizados em cada caso.

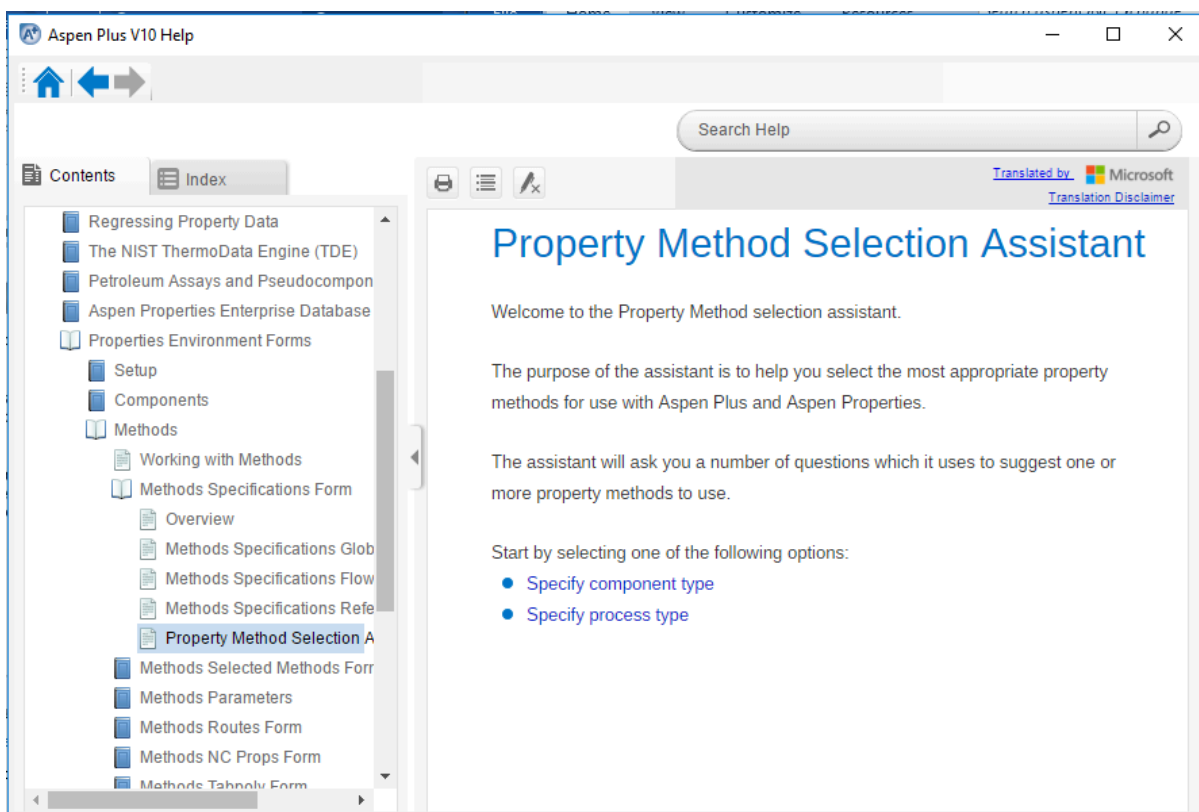


Figura 44 - Assistente de seleção de métodos e modelos termodinâmicos.

No arquivo de ajuda do Aspen há também várias informações sobre todos os métodos, equações e modelos termodinâmicos, como mostra a Figura 45.

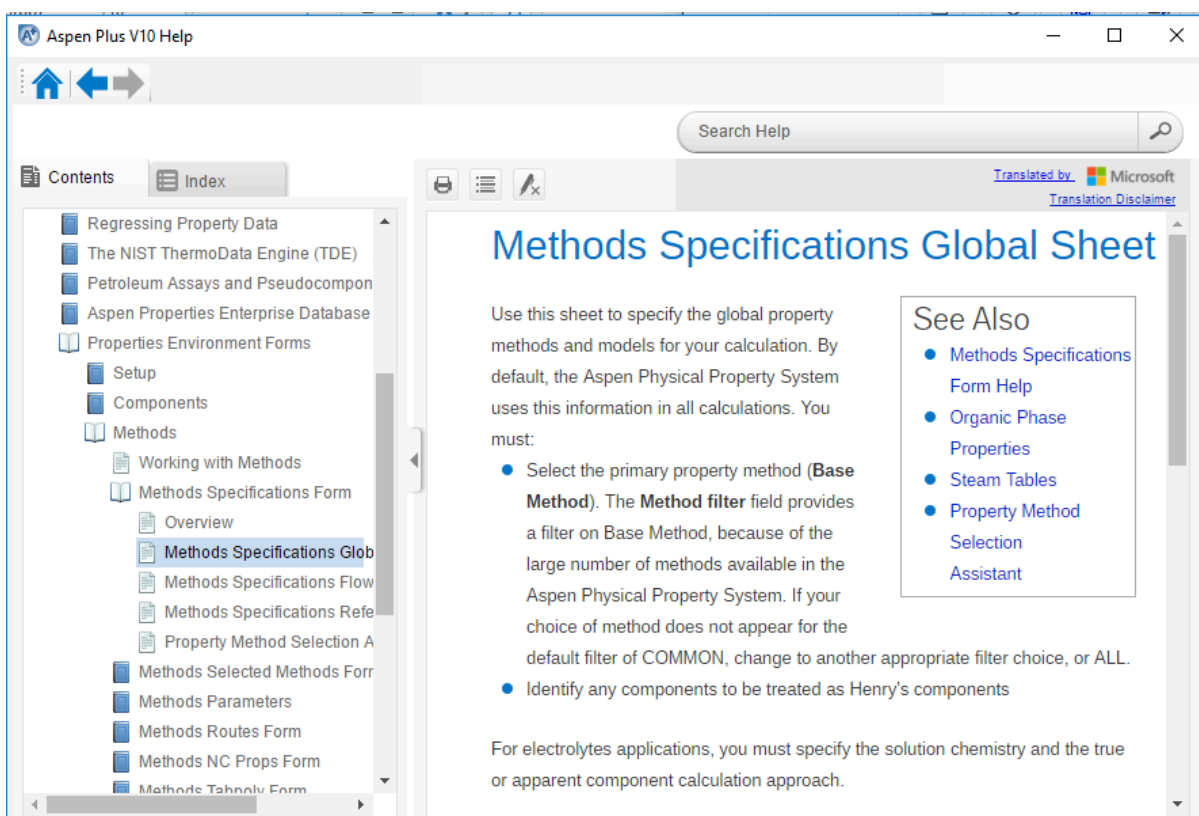


Figura 45 - Tópicos de ajuda do Aspen sobre métodos de propriedades termodinâmicas.

2.1.3 Personalizando um método

É possível a necessidade de alterar um método, devido às especificidades do sistema trabalhado. Na janela para especificação do método de cálculo, você encontra, na caixa *Modify* opções para editá-lo. Antes, é preciso escolher um método base no campo *Base method*. Na Figura 46, modificamos o método *UNIFAC*, substituindo a equação de estado de Redlich-Kwong (*ESRK*) para a de Peng-Robinson (*ESPRSTD*).

Method name: UNIFAC-2 [Methods assistant...]

☒ Modify

Vapor EOS: ESPRSTD

Data set: 1

Liquid gamma: GMUFAC

Data set: 1

Liquid molar enthalpy: HLMX103

Liquid molar volume: VLMX01

☒ Heat of mixing

☒ Poynting correction

☐ Use liquid reference state enthalpy

Figura 46 - Modelo criado a partir do padrão *UNIFAC*.

2.2 ASPEN PROPERTIES E O CÁLCULO DE PROPRIEDADES FÍSICAS

2.2.1 Introdução

Não é um grande mistério pensar que conhecer as propriedades físicas seja um fator crucial para projetar ou operar uma planta industrial. Para isso, temos uma ferramenta específica para esse objetivo: o Aspen Properties. Em versões mais recentes, como a 7.3.2 e a 8.0, isso não será uma grande preocupação para você, pois o Aspen Plus® passou a integrar todas as funcionalidades do Properties. No entanto, como estamos focando versões mais antigas, como a 7.1 e a 7.3, muitas das tarefas que explicaremos a seguir deverão ser feitas separadamente.

No Aspen Properties, é possível calcular diversas propriedades como:

- Propriedades termodinâmicas da mistura;
- Propriedades termodinâmicas de componentes em misturas;
- Propriedades termodinâmicas de componentes puros;
- Propriedades de eletrólitos;
- Propriedades de transporte;
- Propriedades válidas para todas as correntes.

Para abrir o programa, vá ao menu do Windows *Iniciar* □ *Todos os programas* □ *AspenTech* □ *Aspen Engineering Suite* □ *Aspen Plus® 7.3* (ou a versão que esteja usando) e então abra o programa *Aspen Properties User Interface*. Você deverá notar que a interface dele é muito semelhante à do Aspen Plus® e não só isso, assim como fizemos anteriormente, devemos passar pelas mesmas etapas de especificação de componentes e escolha do método de cálculo de propriedades termodinâmicas, tal como fazemos no simulador de processos

da AspenTech. Em versões mais recentes do software, como a V10, basta definir as propriedades termodinâmicas dentro do próprio *Properties*.

2.2.2 Especificando um conjunto de propriedades físicas (Property Set)

Em suma, a função do Aspen Properties se resume a uma só: calcular propriedades. Então, precisamos a princípio especificar ao programa quais propriedades desejamos calcular. Isso é feito na pasta *Prop-Set* (*Property Set*), ou seja, essa pasta de trabalho reunirá diferentes listas de propriedades a serem calculadas, como mostra a Figura 47.



Figura 47 - Janela para criação e edição de listas de propriedades (*Property Set*).

Essas listas de propriedades podem ser bastante úteis. Por exemplo, usamos para:

- Relatórios de curvas de aquecimento e resfriamento;
- Relatórios de propriedades de cada estágio de coluna de destilação e as especificações de desempenho;
- Relatórios de perfil de reatores;
- Especificações de projeto e restrições;
- Blocos de FORTRAN;
- Blocos de sensibilidade;
- Otimização;
- Relatórios de fluxo e dimensionamento;
- Tabelas de propriedades físicas.

As propriedades para estas aplicações são definidas de forma indireta. Para o conjunto de propriedades você pode também definir:

- A temperatura na qual a propriedade será calculada;
- A pressão na qual a propriedade será calculada;
- Incluir ou excluir a água do cálculo (ver item 1.5.2 sobre parâmetros globais);
- Unidades para a propriedade;

- Componentes para os quais as propriedades serão calculadas (componentes puros e/ou componentes de uma mistura).

2.2.3 Configurando um conjunto de propriedades

Lembrando que devemos começar especificando os componentes e o modelo termodinâmico, passamos para a definição das propriedades que desejamos calcular. Você pode seguir passo-a-passo o procedimento que será explicado agora.

1. Criar o conjunto de propriedades.

Estando na pasta *Prop-Set*, clique no botão *New*. Uma caixa de diálogo aparecerá, pedindo um nome para esse conjunto. Por padrão, o programa sempre usará o prefixo “PS” antes do número do conjunto na ordem em que foi criado. Esse nome pode ser alterado a qualquer momento, bastando selecionar o conjunto na lista e clicar em *Rename*.

2. Definir as propriedades pertencentes ao conjunto.

Você pode selecionar as propriedades de duas formas: (1) pela lista expandida com todas as propriedades existentes no Aspen Properties, como mostra a Figura 48 ou (2) usando a busca, clicando no botão *Search*.

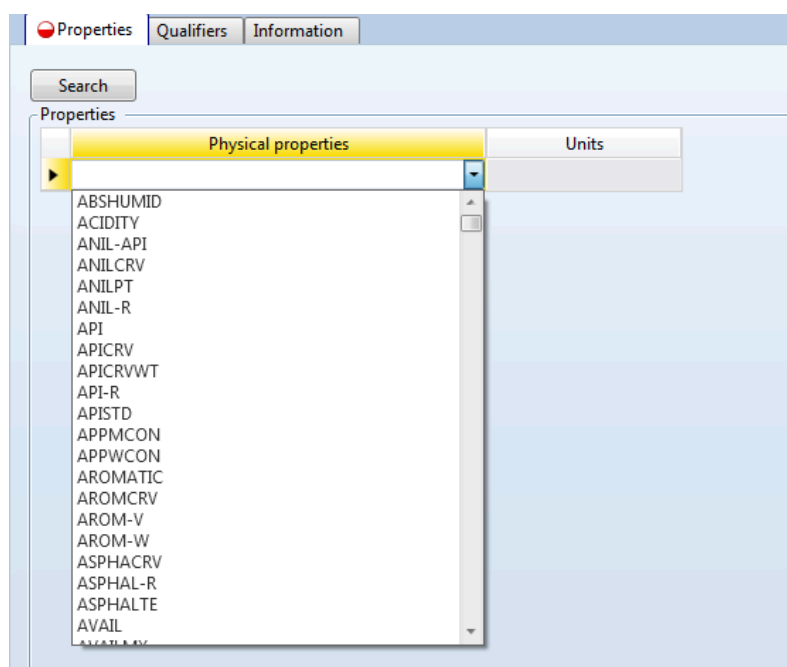


Figura 48 - Definição das propriedades de um *Property Set* pela lista expandida.

A menos que você saiba de cor o que cada nome na lista significa, usar a busca pode ser uma alternativa muito melhor. Ao clicar em *Search*, a janela de busca será exibida, como mostra a Figura 49.

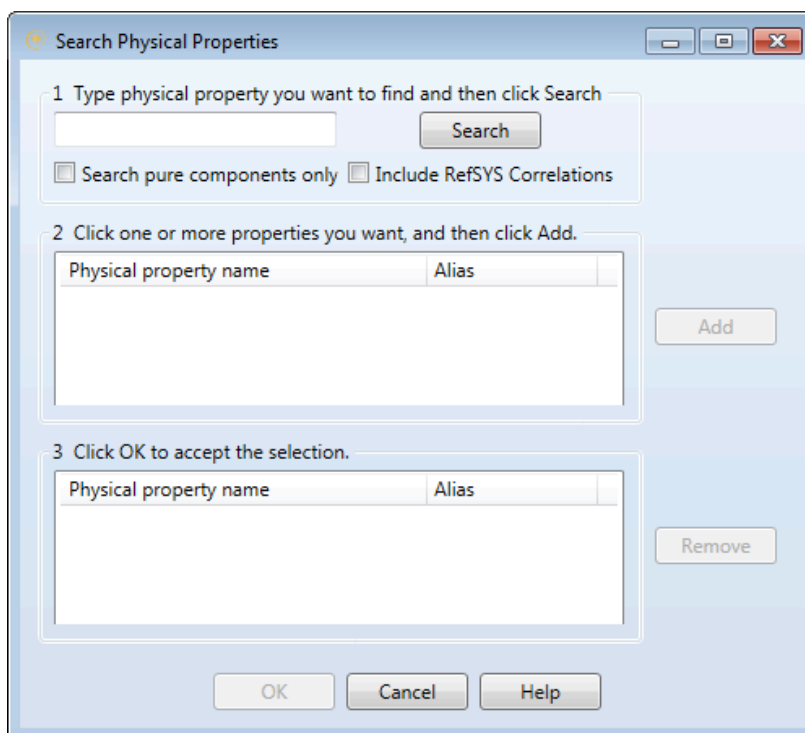


Figura 49 - Janela de busca de propriedades físicas.

A busca trabalha com três passos. Primeiro você deve digitar (em inglês) o nome ou parte do nome da propriedade física que deseja. Abaixo do campo adequado para isso, há duas opções que você pode selecionar:

- *Search pure components only*: lembre-se que existem propriedades de mistura e propriedades de componentes na sua forma pura. Ao marcar essa opção, as propriedades de mistura não serão exibidas;
- *Include RefSYS Correlations*: ao trabalhar com plantas de refinaria, existem modelos mais adequados para trabalhar com os vários componentes do petróleo. Ao marcar essa opção, a temperatura final de ebulição nos cálculos de curvas de destilação será determinada pelas correlações do método *RefSYS*. Nas versões mais recentes, esse campo foi substituído por *Exclude Petroleum correlations*, que funciona de forma oposta ao *Include RefSYS Correlations*.

Assim, ao clicar em *Search* após definir as opções de busca, serão listadas no segundo campo todas as propriedades relacionadas ao termo inserido para a busca. Dessa lista, você pode selecionar quais propriedades realmente interessam e então clicar em *Add*, para mover para o terceiro campo. Você pode fazer várias buscas até listar nessa caixa todas as propriedades para esse *Property Set*. Ao concluir, clique em *OK*.

3. Definir as unidades de medida das propriedades selecionadas

Você verá mais à frente que os resultados serão exibidos em uma tabela com as propriedades selecionadas medidas nas unidades de medida selecionadas. Podemos selecionar quantas unidades desejarmos para avaliar cada propriedade.

	Physical properties	Units	Units	Units
►	RHO	kg/cum	gm/ml	mol/cc
►				

Figura 50 - Unidades de medida escolhidas para avaliar a densidade de um componente puro no Aspen Properties.

Na Figura 50, escolhemos uma propriedade física, a densidade do componente enquanto puro (*RHO*) com três unidades de medida diferentes: kg/m^3 (*kg/cum*), g/mL (*gm/ml*) e mol/cm^3 (*mol/cc*). Note então que a densidade pode ser trabalhada como massa específica ou densidade molar.

4. Definir os parâmetros qualificadores

Conhecer a temperatura e a pressão já é suficiente para determinar a densidade de um componente puro. Entretanto, existem muitas propriedades, especialmente as de mistura, que precisam de informações adicionais sobre o sistema. Essas são os chamados parâmetros qualificadores. Na janela do *Property Set* em edição, observe que, nesses casos, a aba *Qualifiers* deverá ser preenchida.

Uma dessas propriedades que requer parâmetros qualificadores é a viscosidade (*MU*). Observe, na Figura 51, que adicionamos à lista de propriedades a viscosidade em duas unidades: centipoise (*cP*) e Pascal-segundo (*Pa-sec*).

	Physical properties	Units	Units	Units
▶	RHO	kg/cum	gm/ml	mol/cc
▶	MU	cP	Pa-sec	

Figura 51 - Densidade e viscosidade com as respectivas unidades de medida selecionadas.

Agora, trabalharemos com os *Qualifiers*. Essa etapa pode ser um tanto complicada, pois existem parâmetros inadequados para certas propriedades. Se a aba *Qualifiers* continuar aparecendo como incompleta, clique em *Next* (ou use F4) para que o programa informe quais alterações devem ser feitas para você prosseguir com o trabalho. Na Figura 52, temos selecionado os parâmetros adequados para avaliar a viscosidade. No caso, selecionamos como único componente o ar atmosférico (*AIR*) e método Peng-Robinson (*PENG-ROB*).

Qualifiers of selected properties

▶	Phase	Vapor	
▶	Component	AIR	
▶	2nd liquid key component		
▶	Temperature <input checked="" type="checkbox"/> System	C	
▶	Pressure <input checked="" type="checkbox"/> System	bar	
▶	% Distilled		
▶	Water basis		
▶	Base component		

Boiling point range: to C

Base boiling point range: to C

Figura 52 - Parâmetros qualificadores para a avaliação das propriedades selecionadas do ar atmosférico.

2.2.4 Algumas propriedades que podem ser avaliadas no Aspen

Para você poder se orientar melhor sem se preocupar com onde encontrar informações sobre as propriedades físicas existentes no banco de dados do Aspen Properties, reunimos um bom número de propriedades, fases válidas e unidades de medida que podem ser usadas.

Quanto às fases, as identificaremos de forma simplificada para melhor representação, como mostra a Tabela 7.

Fase	Descrição
------	-----------

V	Vapor
L1	Fase líquida 1
L2	Fase líquida 2 (não inclui fases <i>Water-free</i> ou <i>Dirty-water</i>)
L	Líquida
S	Sólida
T	Total (considera todas as fases do sistema)

Tabela 7 - Notação usada para representar as fases válidas para as diversas propriedades físicas no Aspen Properties.

A Tabela 8 descreve algumas das propriedades disponíveis no Aspen Physical Property System. Esta tabela mostra os qualificadores de fase e indicam se qualificadores como a temperatura, pressão são aplicáveis. Um ponto (•) na tabela indica que você pode usar o qualificador para essa propriedade.

NOME	Descrição	FASE	T	P	Unidade
CP	Capacidade calorífica a pressão constante	V L L1 L2 S T	•	•	MOLE-HEAT-CAPACITY or MASS-HEAT-CAPACITY
CPCV	Razão de capacidade calorífica (CP/CV)	V L L1 L2 S T	•	•	—
CPIG	Capacidade calorífica (gás ideal)	V	•		MOLE-HEAT-CAPACITY or MASS-HEAT-CAPACITY
CV	Capacidade calorífica a volume constante	V L L1 L2 S T	•	•	MOLE-HEAT-CAPACITY or MASS-HEAT-CAPACITY
DHVL	Entalpia de vaporização	L	•		MOLE-ENTHALPY, MASS-ENTHALPY or ENTHALPY-FLOW
G	Energia livre	V L L1 L2 S T	•	•	MOLE-ENTHALPY, MASS-ENTHALPY or ENTHALPY-FLOW
GIG	Energia livre (gás ideal)	V	•		MOLE-ENTHALPY, MASS-ENTHALPY or ENTHALPY-FLOW
H	Entalpia	V L L1 L2 S T	•	•	MOLE-ENTHALPY, MASS-ENTHALPY or ENTHALPY-FLOW
HIG	Entalpia (gás ideal)	V	•		MOLE-ENTHALPY, MASS-ENTHALPY or ENTHALPY-FLOW
MW	Peso molecular	V L L1 L2 S T			—
PHI	Coeficiente de fugacidade	V L L1 L2 S	•	•	—

PL	Pressão de vapor	L	·		PRESSURE
RHO	Massa específica	V L L1 L2 S T	·	·	MOLE-DENSITY or MASS-DENSITY
S	Entropia	V L L1 L2 S T	·	·	MOLE-ENTROPY or MASS-ENTROPY
SIG	Entropia (gás ideal)	V	·		MOLE-ENTROPY or MASS-ENTROPY
TB	Temperatura de ebulição	V L L1 L2 S T			TEMPERATURE
U	Energia interna	V L L1 L2 S T	·	·	MOLE-ENTHALPY, MASS-ENTHALPY or ENTHALPY-FLOW
V	Volume	V L L1 L2 S T	·	·	MOLE-VOLUME or VOLUME-FLOW

Tabela 8 - Propriedades físicas para componentes puros.

As propriedades avaliadas para misturas são identificadas pelo sufixo *MX*, como mostra a Tabela 9

PROPNAME	Descrição	FASE	T	P	Unidades
CPCVMX	Razão de capacidade calorífica (CPMX/CVMX)	V L L1 L2 S T	·	·	—
CPIGMX	Capacidade calorífica (gás ideal)	V	·		MOLE-HEAT-CAPACITY or MASS-HEAT-CAPACITY
CPMX	Capacidade calorífica a pressão constante	V L L1 L2 S T	·	·	MOLE-HEAT-CAPACITY or MASS-HEAT-CAPACITY
CPMX-M	Capacidade calorífica a pressão constante (base mássica)	V L L1 L2 S T	·	·	MASS-HEAT-CAPACITY
CSATMX	Calor específico na saturação	V L L1 L2	·	·	MOLE-HEAT-CAPACITY or MASS-HEAT-CAPACITY
CVMX	Capacidade calorífica a volume constante	V L L1 L2 S T	·	·	MOLE-HEAT-CAPACITY or MASS-HEAT-CAPACITY
DGMIX	Energia livre de mistura	L L1 L2 T	·	·	MOLE-ENTHALPY, MASS-ENTHALPY or ENTHALPY-FLOW
GIGMX	Energia livre (gás ideal)	V	·		MOLE-ENTHALPY, MASS-ENTHALPY or ENTHALPY-FLOW
GMX	Energia livre	V L L1 L2 S T	·	·	MOLE-ENTHALPY, MASS-ENTHALPY or

					ENTHALPY-FLOW
GXS	Energia de excesso	L L1 L2 S	·	·	MOLE-ENTHALPY, MASS-ENTHALPY or ENTHALPY-FLOW
HIGMX	Entalpia (gás ideal)	V	·		MOLE-ENTHALPY, MASS-ENTHALPY or ENTHALPY-FLOW
HMX	Entalpia molar	V L L1 L2 S T	·	·	MOLE-ENTHALPY or ENTHALPY-FLOW
HXS	Entalpia de excesso	L L1 L2 S	·	·	MOLE-ENTHALPY, MASS-ENTHALPY or ENTHALPY-FLOW
MASSHMX	Entalpia mássica	V L L1 L2 S T	·	·	MASS-ENTHALPY
MASSSMX	Entropia mássica	V L L1 L2 S T	·	·	MASS-ENTROPY
RHOMX	Densidade molar	V L L1 L2 S T	·	·	MOLE-DENSITY
SIGMX	Entropia (gás ideal)	V	·		MOLE-ENTROPY or MASS-ENTROPY
SMX	Entropia molar	V L L1 L2 S T	·	·	MOLE-ENTROPY
UMX	Energia interna	V L L1 L2 S T	·	·	MOLE-ENTHALPY, MASS-ENTHALPY or ENTHALPY-FLOW
VMX	Volume	V L L1 L2 S T	·	·	MOLE-VOLUME or VOLUME-FLOW

Tabela 9- Propriedades físicas de misturas.

PROPNAME	Descrição	FASE	T	P	Unidades
BOD	Demanda biológica de oxigênio	V L L1 L2 S T			MASS
COD	Demanda química de oxigênio	V L L1 L2 S T			MASS
GAMMA	Coeficiente de atividade	L L1 L2 S	·	·	—
HNRYMX	Constante de Henry para um component de Henry na mistura		·	·	—

<u>KVL</u>	Coeficiente de partição em ELV		·	·	—
MASSCONC	Concentração mássica	V L L1 L2 S T			MASS-CON C
MASSFLOW	Vazão mássica	V L L1 L2 S T			MASS-FLO W
MASSFRAC	Fração mássica	V L L1 L2 S T			—
MOLECONC	Concentração molar	V L L1 L2 S T			MOLE-CON C
MOLEFLOW	Vazão molar	V L L1 L2 S T			MOLE-FLO W
MOLEFRAC	Fração molar	V L L1 L2 S T			—
<u>PHIMX [2]</u>	Coeficiente de fugacidade na mistura	V L L1 L2 S	·	·	—

Tabela 10 - Propriedades de componentes em uma mistura.

Mistura					
PROPNAME	Descrição	FASE	T	P	Unidades
KINVIS	Viscosidade cinemática	V L L1 L2	·	·	DIFFUSIVITY
KMX	Condutividade térmica	V L L1 L2 S	·	·	THERMAL-CONDUCTIVITY
MUMX	Viscosidade	V L L1 L2	·	·	VISCOSITY
PR	Número de Prandtl	V L L1 L2	·	·	—
RE	Número de Reynolds dimensional	V L L1 L2	·	·	LENGTH
SIGMAMX	Tensão superficial	L L1 L2	·	·	SURFACE-TENSION
THRMDIFF	Difusividade térmica	V L L1 L2 S	·	·	DIFFUSIVITY
Componente na Mistura					
PROPNAME	Descrição	FASE	T	P	Unidades
DMX	Coeficiente de difusão	V L L1 L2	·	·	DIFFUSIVITY
Componentes Puros					
PROPNAME	Descrição	FASE	T	P	Unidades
K	Condutividade térmica	V L L1 L2 S	·	·	THERMAL-CONDUCTIVITY
MU	Viscosidade	V L L1 L2	·	·	VISCOSITY
SIGMA	Tensão superficial	L L1 L2	·	·	SURFACE-TENSION

Tabela 11 - Propriedades de transporte.

2.3 ANÁLISE GRÁFICA DE PROPRIEDADES FÍSICAS

Até agora, vimos como selecionar as propriedades físicas que serão avaliadas e como serão avaliadas. No entanto, precisamos criar no Aspen Properties a tarefa de avaliar essas propriedades físicas. Isso é feito na pasta de trabalho *Analysis*. Nela, você deve criar e configurar as análises de propriedades físicas que deseja fazer, similar ao que fizemos ao criar um *Property Set*. O que irá mudar é o campo *Select Type*, como mostra a Figura 53.

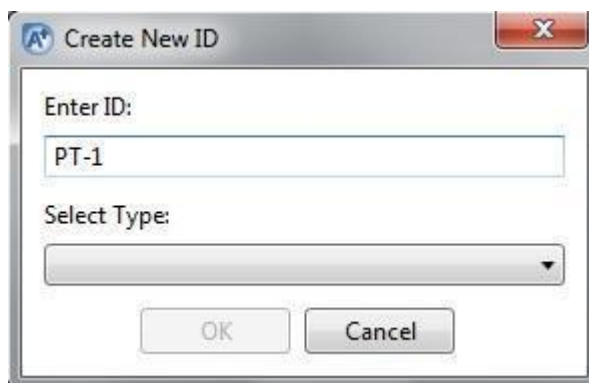


Figura 53 - Janela de diálogo para a criação de uma tarefa de análise no Aspen Properties.

O programa traz nessa janela quatro tipos de análise:

- **GENERIC:** simples representação gráfica que relaciona em dois eixos uma variável independente com uma variável dependente.
- **PTENVELOPE:** diagrama pressão versus temperatura.
- **RESIDUE:** curvas residuais em um sistema ternário.
- **TERDIAGRAM:** diagrama ternário de fases.

2.3.1 Configurando a análise de propriedades físicas

Seguindo o sistema que tínhamos escolhido (ar) com variáveis densidade e viscosidade para serem avaliadas, poderíamos construir gráficos para representar o comportamento dessas duas propriedades com a temperatura da mistura gasosa, ou seja, densidade x temperatura e viscosidade x temperatura. Assim, trabalharemos com uma análise tipo *GENERIC*.

Ao especificar o tipo na janela mostrada na Figura 53, você deverá escolher as configurações da análise, cujo primeiro passo é mostrado na Figura 54.

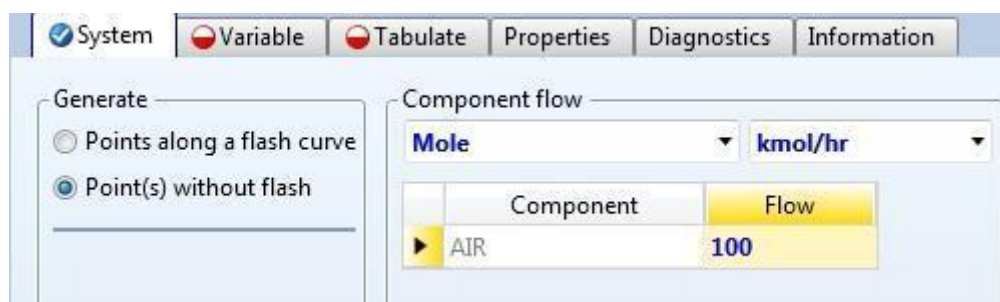


Figura 54 - Especificação do sistema a ser analisado no Aspen Properties.

Aqui escolhemos quais pontos serão gerados e a composição do sistema. Aqui, o Aspen trabalha apenas com unidades de vazão, mas, dependendo da propriedade avaliada, não há incômodo em trabalhar como se estivéssemos falando de massa, volume ou quantidade de matéria, esquecendo o escoamento. Na figura,

usamos um valor qualquer, apenas para dizer que o sistema é composto somente por ar. Como estamos distantes de uma situação de equilíbrio de fases, selecionamos a opção de gerar os dados sem cálculos de flash.

Na aba *Variables*, definimos variáveis fixas e os intervalos ou valores que as variáveis independentes assumirão para a análise das propriedades. Como opções de variáveis fixas, temos a temperatura, a fração total de vapor e a pressão, como mostra a Figura 55.



Figura 55 - Definição das variáveis em uma análise no Aspen Properties.

Desejando-se avaliar a densidade e a viscosidade do ar como função da temperatura, devemos fixar a pressão, por exemplo, a 1 atm, e, na caixa *Adjusted variables*, usar a temperatura como variável independente. Note que, na caixa *Fixed state variables*, o primeiro campo estará indisponível para ser editado. Agora, devemos escolher quais valores de temperatura serão usados. Ao selecionar a célula da temperatura na tabela, clique em *Range/List*. Você verá uma nova janela de diálogo, como mostra a Figura 56.

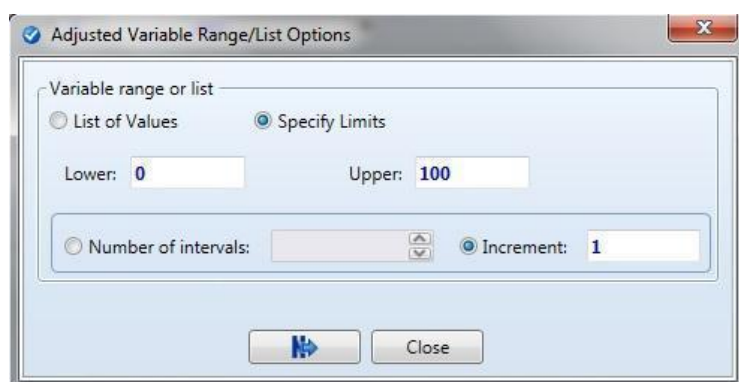


Figura 56 - Janela de diálogo para definir os valores usados para uma variável independente.

Podemos definir uma variável independente para uma lista de valores ou um intervalo. A lista (*List*) é interessante quando você estiver buscando conhecer uma determinada propriedade física em uma dada condição. Por exemplo, se precisássemos da capacidade calorífica de uma mistura em três temperaturas específicas, fixaríamos a pressão do sistema e escreveríamos uma lista com essas temperaturas. No caso de avaliar o comportamento de uma propriedade física, o intervalo (*Range*) é muito mais adequado.

Para definir um intervalo, especificamos nos campos *Lower* e *Upper* os limites inferior e superior do intervalo, respectivamente. Abaixo, escolhemos quantos pontos serão usados dentro desse intervalo ou como o programa trabalhará ao longo do intervalo, especificando o passo (*Increments*). Vamos definir o intervalo de temperatura de 0 a 100°C com 100 pontos. Feito isso, resta ainda a aba *Tabulate*. Nela, você seleciona o conjunto de propriedades físicas que deseja avaliar na análise. Selecione o conjunto que criamos anteriormente e clique no botão >. O conjunto *PS-1* será movido para a caixa *Selected Prop Sets*. Se tiver vários conjuntos, você pode movê-los de uma vez só clicando no botão >>. Assim, o resultado será como mostrado na Figura 57.

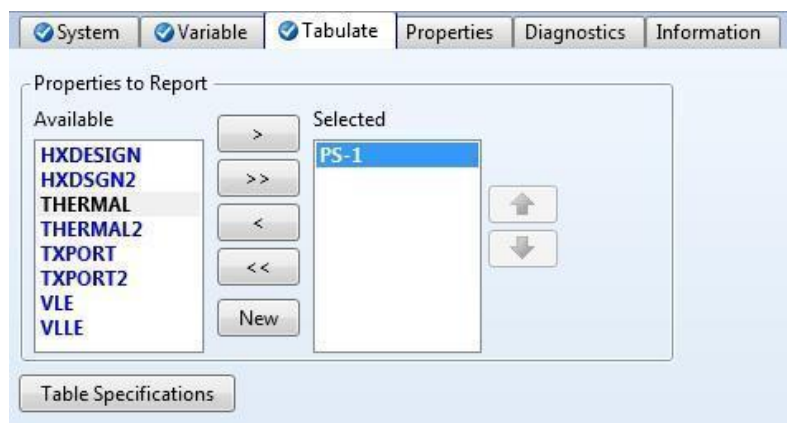


Figura 57 - Conjunto de propriedades físicas selecionadas na aba *Tabulate* na configuração de uma análise.

A análise está pronta para ser executada. Clique em *Next* e confirme ao ser perguntado se deseja executar a simulação. Ao convergirem os cálculos, vá à árvore de trabalho na janela à esquerda e abra a pasta *Properties*.

Abra a tabela *Results* em *Properties* ▢ *Analysis* ▢ *PT-1* ▢ *Results*. Nela, você verá os resultados mostrados na Figura 58.

TEMP	VAPOR	VAPOR	VAPOR
	RHO	RHO	MU
	AIR	AIR	AIR
C	kg/cum	mol/cc	cP
0	1,29296	4,46606e-05	0,0172377
1	1,28823	4,4497e-05	0,0172874
2	1,28353	4,43346e-05	0,017337
3	1,27886	4,41733e-05	0,0173865
4	1,27422	4,40133e-05	0,0174359
5	1,26962	4,38544e-05	0,0174852
6	1,26506	4,36967e-05	0,0175345
7	1,26052	4,354e-05	0,0175837
8	1,25602	4,33846e-05	0,0176327
9	1,25155	4,32302e-05	0,0176818
10	1,24712	4,30769e-05	0,0177307

Figura 58 - Tabela de resultados da análise de propriedades físicas no Aspen Properties.

2.3.2 Criando o gráfico dos resultados da análise

Você pode, por exemplo, copiar os resultados da tabela para um dos programas do pacote *Microsoft Office*®. Para isso, basta selecionar pelos cabeçalhos as colunas que deseja copiar. Se quiser selecionar toda a tabela, clique na primeira célula, no canto superior esquerdo dela.

No entanto, nosso objetivo aqui é analisar graficamente o comportamento de uma propriedade física. Ao trabalhar com uma versão mais recente do Aspen, você notará que o procedimento é bem diferente das versões até a 7.3. Mostraremos aqui como fazer gráficos das duas formas.

- Versões antigas do Aspen (até a 7.3)

Na tabela gerada, segure *Ctrl* e clique uma vez nas colunas de densidade em kg/m^3 e viscosidade em cP. Feito isso, vá à barra de ferramentas, clique em *Plot* e então em *Y-Axis Variable*. Você também pode usar o atalho *Ctrl+Alt+Y*. Agora, sem pressionar *Ctrl*, clique na coluna de temperaturas. Repita o procedimento anterior, clicando desta vez em *X-Axis Variable*. O atalho para isso é *Ctrl+Alt+X*.

Agora vamos plotar o gráfico com as variáveis selecionadas. Clique em *Plot* e em *Display Plot*. Também há um atalho do teclado para isso: *Ctrl+Alt+P*. O gráfico será exibido, como mostra a Figura 59.

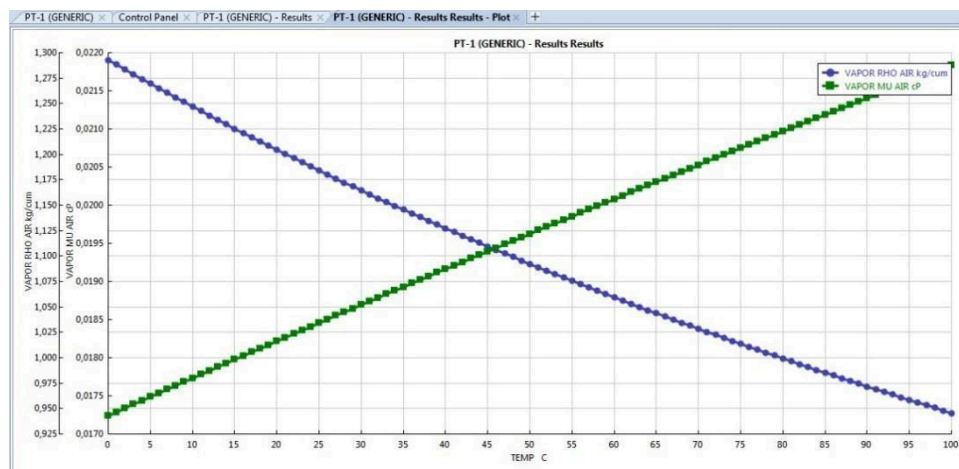


Figura 59 - Gráfico do comportamento da densidade e da viscosidade do ar com a temperatura.

- Versões recentes do Aspen (a partir da 7.3.2)

Nas versões mais recentes o trabalho é muito mais simples. No friso *Home*, na categoria *Plot*, encontre o ícone *Custom*, como mostra a Figura 60.

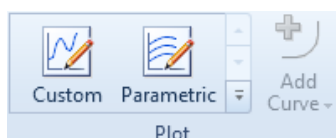


Figura 60 - Tipos de gráficos que podem ser construídos em versões mais recentes do Aspen.

Clicando nesse ícone, uma janela será exibida. Nela, você deverá escolher a variável independente e quais são as variáveis dependentes. Assim como fizemos antes, selecionaremos a densidade em kg/m^3 e a viscosidade em cP para serem plotadas em função da temperatura em $^{\circ}\text{C}$, como mostra a Figura 61.

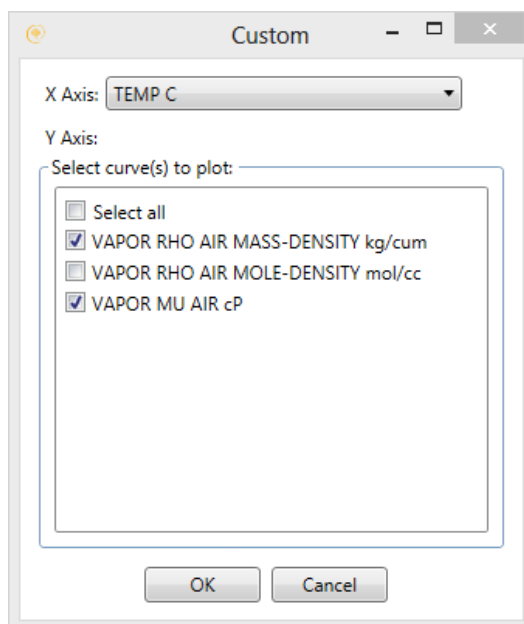


Figura 61 - Selecionando as curvas a serem plotadas nas versões recentes do Aspen.

Clique em *OK* e o gráfico será mostrado, como visto na Figura 59.

2.3.3 Formatando o gráfico

Como foi possível ver, os gráficos criados apresentam uma escala diferente para cada variável plotada no gráfico, ajustada de forma que os pontos estejam bem distribuídos na área do gráfico. Nem sempre isso é desejável ou será importante adequar a escala ao objetivo pretendido. Em versões recentes do Aspen, ao clicar nos valores da escala, as opções de configuração aparecerão no friso superior à janela de trabalho. Aqui, comentaremos como isso é feito nas versões antigas. Clique duas vezes na numeração da escala e uma janela será exibida, como mostra a Figura 62.

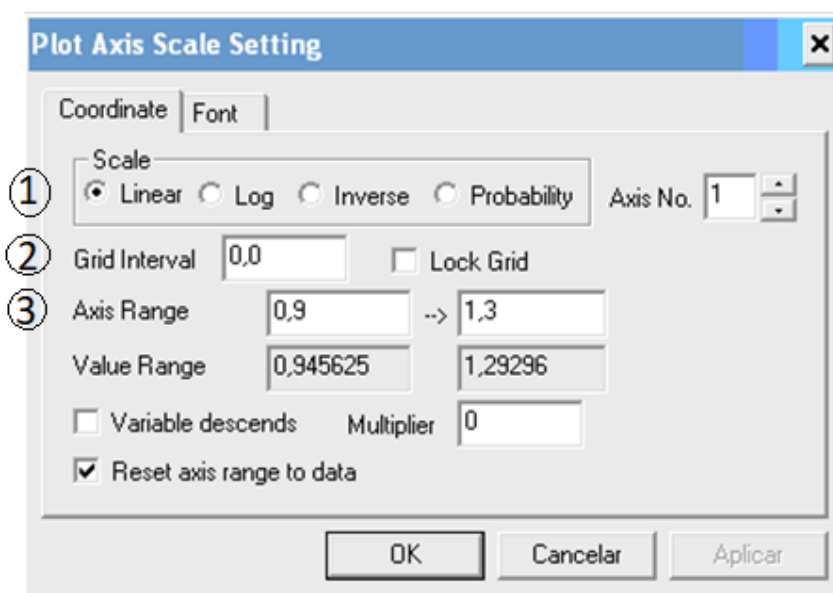


Figura 62 - Configurações da escala de um gráfico.

Na aba *Coordinate*, configuramos como as coordenadas no eixo selecionado serão exibidas.

1. Escala (*Scale*): há quatro opções de escala: linear (*Linear*), logarítmica (*Log*), inversa (*Inverse*) e de probabilidade (*Probability*). Na caixa à direita dessas opções, o número do eixo que você está editando.
2. Passo de escala (*Grid Interval*): o intervalo entre os valores na escala do gráfico. Ao criar um gráfico, o padrão é 0, o que significa que a escala foi automaticamente redimensionada.
3. Intervalo (*Axis Range*): o intervalo em que os pontos estão, definido em um limite inferior e em um limite superior. Nas caixas abaixo desses campos, será mostrado o menor e o maior valor dentro desse intervalo.

2.3 DIAGRAMAS DE FASE

2.3.4 Equilíbrio de fase

Nos processos da indústria química, misturas de fluidos são geralmente separadas em seus componentes por operações de difusão como a destilação, a absorção e a extração. O projeto de tais operações de separação requer estimativas quantitativas de propriedades parciais de equilíbrio de misturas de fluidos. Quanto possível, essas estimativas devem ser baseadas em dados experimentais confiáveis para aquela mistura em particular em condições de temperatura, pressão e composição correspondentes àquelas de interesse. Infelizmente, esses dados não costumam estar disponíveis. Em casos típicos, apenas parte dos dados estão ao nosso alcance e é necessário correlacioná-los para fazer as melhores interpolações e extrapolações. (POLING et. al., 2004)

A abordagem na literatura científica sobre o assunto existe há mais de 150 anos e alcançou proporções monumentais, incluindo milhares de artigos e centenas de livros e monografias. (POLING et. al., 2004)

Há uma importante diferença entre calcular a composição do equilíbrio de fases e calcular propriedades típicas, como as volumétricas, energéticas ou de transporte de uma conhecida composição. Neste caso,

estamos interessados na propriedade da mistura como um todo, enquanto naquele caso estamos interessados nas propriedades parciais dos componentes que individualmente compõem a mistura. Aqui, o mais importante é saber o quanto as propriedades da mistura (em particular a energia livre de Gibbs) dependem da sua composição e, por isso, para encontrar essas propriedades parciais, tipicamente diferenciamos seus dados com respeito à composição. Quando esse processo é feito com dados experimentais, há perda de precisão e, geralmente, a perda é grande. Como são propriedades parciais em vez de totais e as propriedades são necessárias no equilíbrio de fases, não é de se surpreender que os cálculos para o equilíbrio de fases são muitas vezes mais difíceis e menos precisos que aqueles para outras propriedades encontradas no projeto de indústrias químicas. (POLING et. al., 2004)

Para a análise da destilação e outros processos de separação líquido-vapor deve-se estimar as composições do vapor e do líquido em equilíbrio. (SANDLER, 2006) Estamos preocupados com uma mistura líquida que, à temperatura T e pressão P , está em equilíbrio com uma mistura vapor na mesma temperatura e pressão. As quantidades de interesse são a temperatura, a pressão e as composições de ambas as fases. Dadas algumas dessas quantidades, nossa tarefa é calcular as outras. (POLING et. al., 2004) Quando se fala em algumas dessas quantidades, referimo-nos ao número de graus de liberdade, que expressa o número de propriedades termodinâmicas independentes de um sistema que devem ser conhecidas para determinar as outras. Esse número, F , é determinado pela Regra de Fases, apresentada por J. W. Gibbs em 1876:

$$F = 2 - \pi + N$$

Onde, F = número de graus de liberdade

π = número de fases

N = número de componentes do sistema

Aplicando a regra ao ELV, havendo duas fases envolvidas e, por exemplo, que seja um sistema binário, temos dois graus de liberdade. Desta forma, para descrever o equilíbrio, deve-se conhecer, por exemplo, a composição de uma das fases e a temperatura ou a pressão do sistema ou a temperatura e a pressão do sistema, como é o caso para problemas tipo Flash.

Conforme POLING et. al. (2004), para cada componente i na mistura, a condição do equilíbrio termodinâmico é dada pela Equação 2.1.

$$f_i^V = f_i^L \quad (2.1)$$

O problema fundamental é relacionar essas fugacidades à composição da mistura. Negligenciaremos efeitos devido a forças de superfície, de campo gravitacional, elétrico ou magnético, membranas semipermeáveis ou qualquer outra condição especial. Assim, a fugacidade de um componente em uma mistura depende da temperatura, da pressão e da composição naquela mistura. A princípio, qualquer medida de composição pode ser usada. Para a fase vapor, a composição é quase sempre expressada pela fração molar y . Para relacionar f_i^V com a temperatura, a pressão e a fração molar, é importante introduzir o coeficiente de fugacidade, como é apresentado nas equações 2.2a e 2.2b. (POLING et. al., 2004)

$$\phi_i^V = \frac{f_i^V}{y_i^P} \quad (2.2a)$$

$$\phi_i^L = \frac{f_i^L}{x_i^P} \quad (2.2b)$$

Dessas equações, pode-se tirar a fugacidade do componente i na fase vapor e na fase líquida. Assim, substituindo essas expressões na Equação 2.1, obtemos a Equação 2.3.

$$y_i P \varphi_i^V = x_i P \varphi_i^L \quad (2.3)$$

Este é conhecido como o modelo ϕ - ϕ , porém, também pode ser usado um modelo de coeficiente de atividade para descrever as não idealidades da fase líquida. Dessa forma, apresentaremos outro modelo para descrever o ELV: o modelo γ - ϕ . A atividade de um componente i é dada pela razão entre a sua fugacidade na mistura e a sua fugacidade enquanto puro. Ela também pode ser expressa pelo produto da composição da mistura por uma função das propriedades do sistema, o coeficiente de atividade do componente i , obtida matematicamente pela Equação 2.4.

$$a_i = \gamma_i x_i = \frac{f_i^L}{f_i^L} \quad (2.4)$$

Então a fugacidade do componente i em fase líquida pode ser dada pela Equação 2.5.

$$f_i^L = x_i f_i^L \gamma_i \quad (2.5)$$

Sendo que f_i^L é a fugacidade do componente i como substância pura. Tendo que:

$$\frac{f_i^L}{f_i^{L, sat}} = \exp \left(\int_{P_i^{sat}}^P \frac{V_i^L}{RT} dP \right)$$

E, pela Equação 2.2, nas condições de saturação:

$$f_i^L = P_i^{sat} \varphi_i^{sat} \exp \left(\int_{P_i^{sat}}^P \frac{V_i^L}{RT} dP \right)$$

Admitindo-se que o volume molar para uma substância no estado líquido não dependa da pressão, ou seja, que o líquido seja incompressível, apresentamos o Fator de Poynting, conforme a Equação 2.6.

$$POY_i = \exp \left[\frac{V_i^L}{RT} (P - P_i^{sat}) \right] \quad (2.6)$$

Com isso, a fugacidade de uma substância líquida e pura passa a ser expressa pela Equação 2.7.

$$f_i^L = P_i^{sat} \varphi_i^{sat} POY_i \quad (2.7)$$

Substituindo esse resultado na Equação 2.5, chegamos à expressão para a fugacidade de um componente i em uma mistura líquida mostrada na Equação 2.8.

$$f_i^L = x_i P_i^{sat} \varphi_i^{sat} POY_i \gamma_i \quad (2.8)$$

Dessa forma, podemos reescrever a equação para o ELV, adaptando a Equação 2.3 para o método γ - ϕ , obtendo-se a Equação 2.9.

$$y_i P \varphi_i^V = x_i P_i^{sat} \varphi_i^{sat} P O Y_i \gamma_i \quad (2.9)$$

Existem casos em que simplificações dessa equação podem ser feitas. Se assumirmos que a fase vapor é ideal, sabemos que o coeficiente de fugacidade será igual a um. Se considerarmos que a fase líquida é incompressível, assim desprezando o efeito da pressão avaliado pelo fator de Poynting, seu valor será igual a um. E, se tomarmos como verdadeira a hipótese de que a fase líquida seja ideal, o coeficiente de fugacidade será igual a um. É com base nessas hipóteses que se chega à Lei de Raoult, como mostra a Equação 2.10.

$$y_i P = x_i P_i^{sat} \quad (2.10)$$

Porém, esse capítulo não trata somente de operações que necessitam o conhecimento de parâmetros de ELV. Como o objetivo aqui é aplicar grande parte do que foi visto na disciplina de Termodinâmica II, vale lembrar também das operações de separação líquido-líquido. Lembrando-se sempre de que o critério usado por nós para avaliar o equilíbrio termodinâmico é o de isofugacidade, ao analisarmos duas fases líquidas em equilíbrio, encontraremos a Equação 2.11.

$$f_i^{L,I} = f_i^{L,II} \quad (2.11)$$

Sendo que a fugacidade do componente i em cada fase líquida é calculada individualmente pela Equação 2.8. Mas, como as duas fases estão em equilíbrio termodinâmico e, dentre os critérios, há o de equilíbrio mecânico e térmico, a temperatura e a pressão de ambas fases são iguais. Dessa forma, podemos simplificar os termos calculados para o componente i puro e chegarmos à Equação 2.12.

$$x_i^I P_i^{sat} \varphi_i^{sat} P O Y_i^I \gamma_i^I = x_i^{II} P_i^{sat} \varphi_i^{sat} P O Y_i^{II} \gamma_i^{II}$$

$$x_i^I \gamma_i^I = x_i^{II} \gamma_i^{II} \quad (2.12)$$

Para concluir, devemos lembrar que nem sempre é possível usar simplificações para tornar mais fácil os cálculos de equilíbrio de fases. Felizmente estamos trabalhando com um simulador dotado de um vasto banco de dados e com inúmeras equações de estado e modelos de coeficiente de atividade. Como dito anteriormente, devemos tomar certos cuidados ao escolher um método termodinâmico no Aspen, pensando em qual equação de estado e qual modelo de coeficiente de atividade se adequa melhor ao processo que se deseja simular, ou mesmo se é necessário ser tão rigoroso a ponto de não fazer simplificações como o uso da Lei de Raoult.

2.3.5 Diagramas T-xy e P-xy

Ao estudar o equilíbrio de fases em sistemas binários, é muito importante a construção e compreensão dos diagramas de fase. Na literatura encontramos esses diagramas construídos à pressão constante ou à temperatura constante, onde aparecem curvas que limitam a região de equilíbrio. A Figura 63 e a Figura 64 mostram diagramas de ELV do sistema binário etanol-metanol, o primeiro a pressão constante (1 atm) e o segundo a temperatura constante (298,15 K).

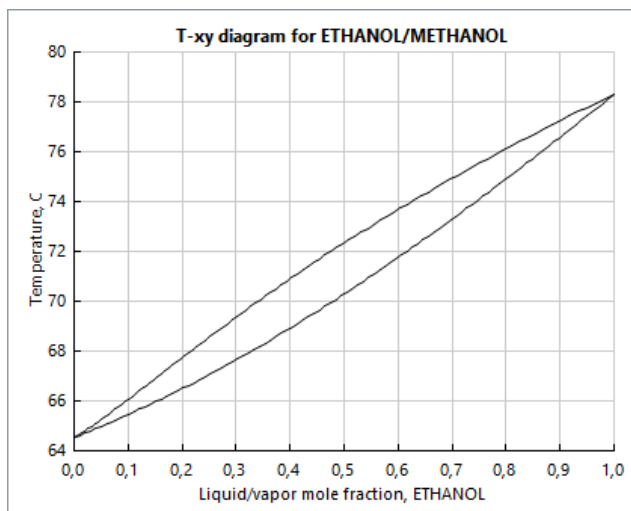


Figura 63 - Diagrama de ELV do sistema etanol/metanol a P=1atm construído no Aspen Properties 8.0.

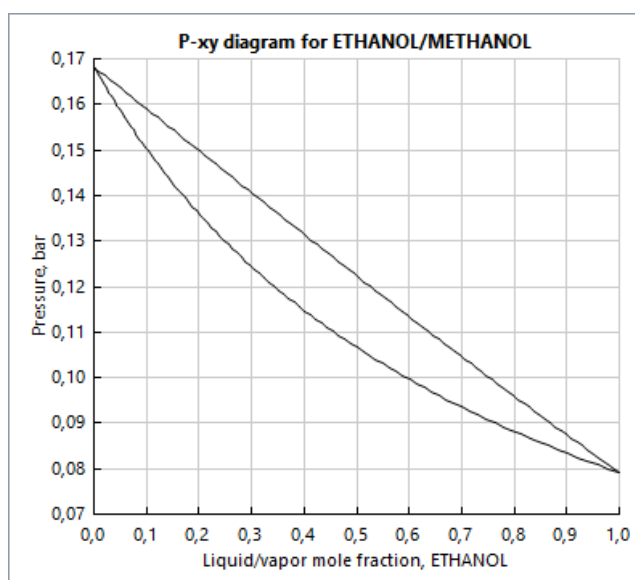


Figura 64 - Diagrama de ELV do sistema etanol/metanol a T=298,15K construído no Aspen Properties 8.0.

Devemos recordar da Termodinâmica que as curvas traçadas nesses gráficos representam a transição de fases. No caso do diagrama T-xy, ao passarmos de uma temperatura baixa até uma temperatura elevada, estaremos passando da região onde os componentes estão em uma solução líquida (fase líquida) para a região de equilíbrio líquido-vapor e da região de ELV para a região em que os componentes estão em uma solução gasosa (fase vapor). No diagrama P-xy, para pressões altas, temos a região de fase líquida e a pressões baixas, a região de fase vapor.

Outra questão importante trata justamente da transição de fases. Não esqueça que o momento em que o líquido começa a evaporar, ou seja, em que a primeira bolha de gás surge, é chamado de ponto de bolha. E o momento em que o vapor começa a condensar, ou seja, em que a primeira gota de líquido é formada, é chamado de ponto de orvalho. Assim, ao construir um diagrama de fases desse tipo, estamos plotando a curva de orvalho e a curva de bolha. No caso do diagrama T-xy, buscamos saber as temperaturas de bolha e as temperaturas de orvalho. Para o diagrama P-xy, o pensamento é o mesmo. E, no Aspen Properties, essas medidas podem ser calculadas e então plotadas em função da composição do sistema:

- Temperatura: de bolha (TBUB) e de orvalho (TDEW)
- Pressão: de bolha (PBUB) e de orvalho (PDEW)

Neste capítulo, um dos exercícios trata do estudo do ELV do sistema fenol/acetona. Vamos praticar construindo os diagramas T-xy e P-xy para esse sistema. Usando o conhecimento adquirido até aqui, abra o Aspen Properties como um blank case. Especifique os componentes (ACETONE ou C₃H₆O-1 e PHENOL ou C₆H₆O). Como método do cálculo das propriedades físicas, escolha um modelo que se adeque ao estudo de ELV, por exemplo, o método de Wilson. Agora, na pasta de trabalho Properties, encontre a pasta Prop-sets. Crie dois conjuntos, um para as temperaturas e outro para as pressões de orvalho e de bolha, respectivamente. Chame-os como preferir. Aqui, usaremos os nomes T-XY e P-XY. Na Figura 65 e na Figura 66 você pode ver como esses property sets podem ser definidos.

	Physical properties	Units
▶	TBUB	C
▶	TDEW	C

Figura 65 - Property Set T-XY.

	Physical properties	Units
▶	PBUB	bar
▶	PDEW	bar

Figura 66 - Property Set P-XY.

Lembre-mos do passo seguinte, que é criar a análise. Vamos seguir o mesmo procedimento. Na pasta de trabalho *Analysis*, crie dois estudos, um chamado *T-XY* e o outro, *P-XY*, ambos do tipo *GENERIC*. É importante saber que muitas configurações na análise não farão diferença para o que desejamos fazer. Na aba *System*, você pode colocar qualquer valor para a vazão dos componentes do sistema. Em diante, explicaremos separadamente a construção dos diagramas.

- Diagrama T-xy

Na aba *Variable*, em *Fixed state variables*, devemos especificar tanto a temperatura como a pressão. Como o objetivo é calcular as temperaturas de bolha e de orvalho, não fará diferença a escolha da temperatura pela forma como o programa realiza seus cálculos. Você deve apenas se preocupar com a pressão em que o sistema se encontra. Por exemplo, com pressão de 1 atm, vá para a caixa *Adjusted variables*. Escolha *Mole fraction* na coluna *Variable* e o componente desejado na segunda coluna. Como estamos estudando o sistema acetona/fenol, podemos escolher o fenol como componente.

Agora, definir os valores usados para a fração molar do fenol. Selecione a primeira linha e clique em *Range/List*. Lembre que a fração molar varia de 0 a 1. Coloque esses valores como limites inferior e superior, respectivamente, e o número de pontos desejado, por exemplo, 100. Antes de continuar, observe a Figura 67.

The screenshot shows the Aspen Properties software interface. Under the 'Fixed state variables' section, 'Temperature' is set to 1 and 'Pressure' is set to 1. In the 'Adjusted variables' section, a table is shown with 'Mole fraction' in the 'Variable' column and 'PHENOL' in the 'Component' column. A 'Range/List' button is located at the bottom of the 'Adjusted variables' section.

Figura 67 - Escolha das variáveis para a construção do diagrama T-xy do sistema acetona/fenol.

Por fim, na aba *Tabulate*, selecione apenas o *Prop-set* que criamos, *T-XY*.

- Diagrama P-xy

No caso deste diagrama, não importará a pressão especificada em *Fixed state variables* na aba *Variable*, somente a temperatura. No exemplo, fizemos com 25°C. Em *Adjusted variables* o pensamento também é o mesmo. Escolher *Mole fraction* e o componente correspondente, não se esquecendo de colocar o intervalo para os valores, por exemplo, 100 pontos de 0 a 1. Por fim, em *Tabulate*, escolher o *Prop-set P-XY*.

Tudo está pronto. Execute a simulação e os resultados dos cálculos dos diagramas *T-XY* e *P-XY* estarão disponíveis na pasta de trabalho *Properties* ▢ *Analysis*, como mostra a Figura 68.

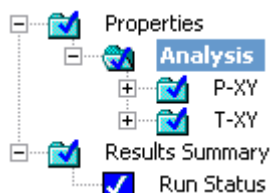


Figura 68 - Pastas de trabalho onde se encontram os resultados das análises no Aspen Properties.

Para plotar os gráficos, basta lembrar o que foi explicado antes. Selecionar as colunas dos pontos de bolha e de orvalho e defini-las como eixo y e a coluna de fração molar do fenol como eixo x. Feito isso, usar o atalho ou clicar em *Display Plot* no item da barra de ferramentas *Plot*. Os resultados podem ser vistos na Figura 69 e na Figura 70.

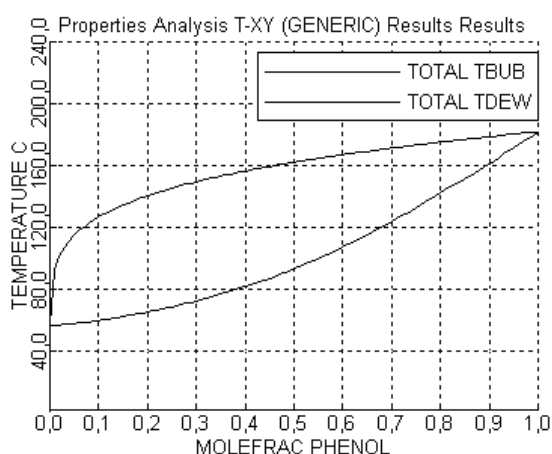


Figura 69 - Diagrama de fases T-xy do sistema fenol/acetona.

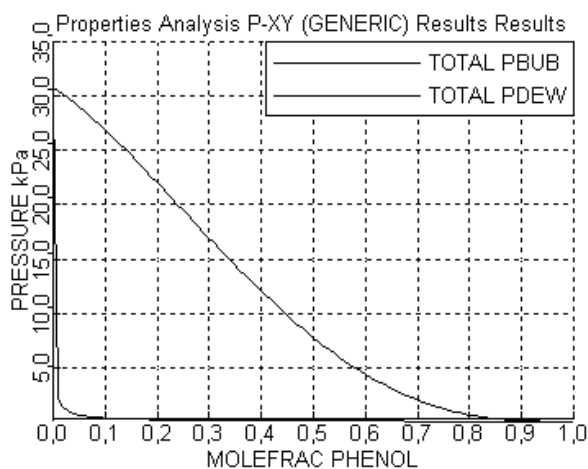


Figura 70 - Diagrama de fases P-xy do sistema fenol/acetona.

- Diagrama T-xy e P-xy no Aspen versão 8.4

Nas versões recentes do Aspen Plus® ficou muito mais fácil fazer os diagramas binários Txy e Pxy. Após inserir os componentes e definir o modelo termodinâmico a ser utilizado basta selecionar a opção *Binary* na guia *Home* subgrupo *Analysis*, conforme exemplificado na Figura 71.

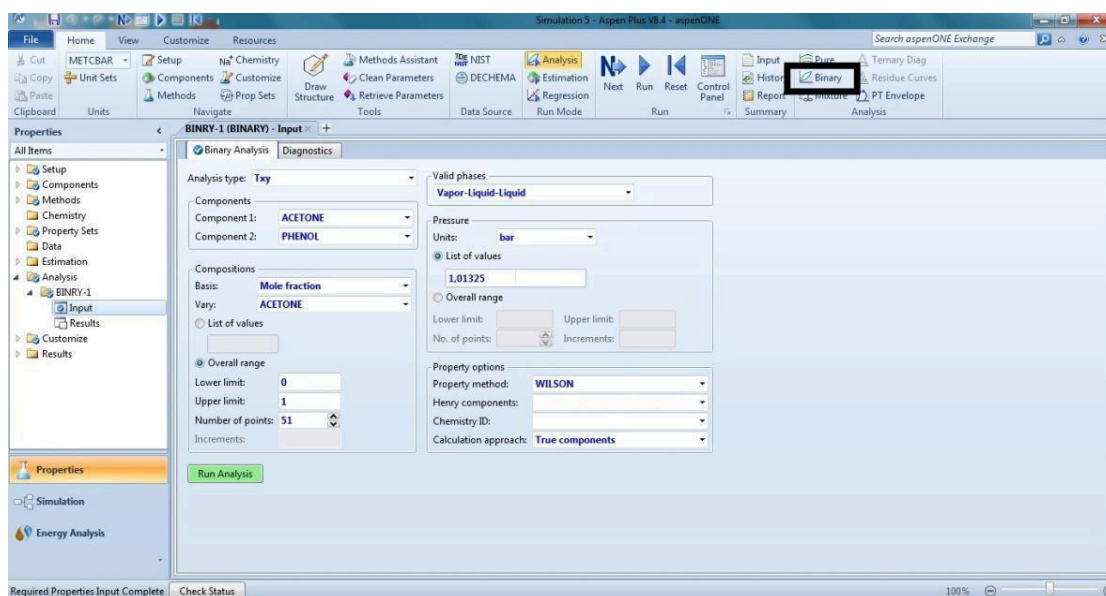


Figura 71 - Diagramas Binários nas versões mais recentes.

Você poderá definir o tipo da análise, por exemplo Txy, quais componentes deseja analisar, fases válidas na análise, intervalo a ser calculado e número de pontos. Após a definição das opções da análise, clique em Run Analysis e o Aspen irá plotar um gráfico com a análise feita (ver Figura 72 e Figura 73).

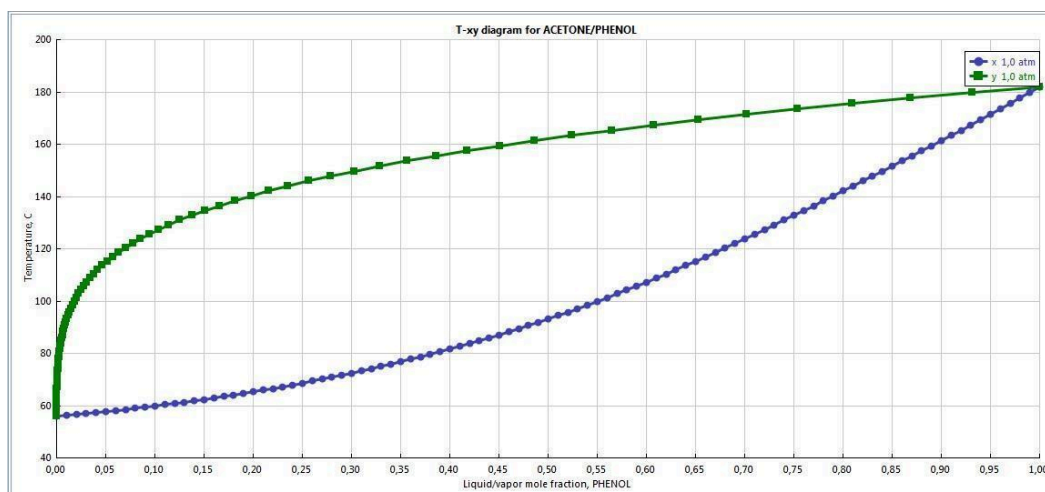


Figura 72 - Exemplo de Análise Txy.

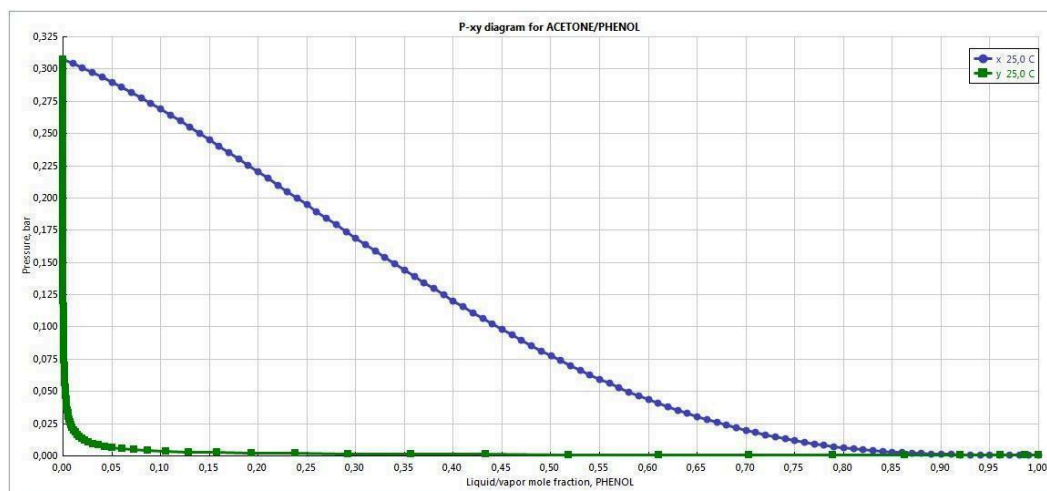


Figura 73 - Exemplo de Análise Pxy.

2.3.6 Diagrama P x T em versões antigas

Um diagrama bastante interessante que pode nos auxiliar a decidir condições de operação é o diagrama de pressão *versus* temperatura. Para isso, deve ser conhecida a composição do sistema e, assim, construiremos a região de ELV em função dessas duas variáveis. Outro ponto interessante nisso é que os diagramas P x T não se restringem a sistemas binários.

Para esse tipo de diagrama, devemos ir até a pasta de trabalho *Analysis* e criar um estudo do tipo *PTENVELOPE*. Observe na Figura 74 como é simples construir esse diagrama.

Component	Flow
ACETONE	50
PHENOL	50

Figura 74 - Configurações do sistema para uma análise tipo *PTENVELOPE*.

A primeira coisa que se pode observar são as hipóteses adotadas nessa análise. O Aspen Properties considerará que não há água existente no sistema e somente o equilíbrio líquido-vapor. Quanto à composição do sistema, esta deve ser informada na forma de vazão dos seus componentes. Até aqui inserimos somente as informações obrigatórias.

A opção *Dew/Bubble point curves* deve estar marcada, pois o objetivo é construir o diagrama ELV em um gráfico P x T. Entretanto, o Aspen pode não gerar os resultados desejados. Assim, esta opção não é selecionada para forçar com que tenhamos tanto a curva de bolha como a curva de orvalho. Abaixo, você pode definir o número máximo de pontos plotados, sendo o padrão 50. À direita, podemos limitar o gráfico, quanto a pressão e temperatura iniciais e o ponto final pela temperatura reduzida da mistura (a razão entre a temperatura do sistema e a temperatura crítica). Muitas vezes podem acontecer problemas caso não seja estabelecido um ponto final para os gráficos, então é interessante evitar que o programa trabalhe em regiões críticas, já que não é possível a existência do ELV. Assim, é interessante definir como ponto final a temperatura reduzida 1. Dessa forma, essa aba deverá estar preenchida como mostra Figura 75.

☒ System ☒ **Envelope** | Tabulate | Properties | Diagnostic

Vapor fraction branches
☐ Dew/Bubble point curves

Additional vapor fractions:

	Vapor fraction	Complementary
	0	1
	1	0
*		

Optional initial point
 Pressure: bar
 Temperature: C

Optional termination point
 Mixture reduced temperature: 1

Maximum points: 100

Figura 75 - Configurações adicionais da análise tipo *PTENVELOPE*.

Agora, os resultados podem ser gerados clicando em *Next* e confirmando o início da simulação. Ao convergir, ir até os resultados como sempre fazemos. A diferença agora é como o gráfico é gerado. Em *Plot*, clique em *Plot Wizard* ou use o atalho *Ctrl+Alt+W*. Após clicar em *Next*, escolha o gráfico *Phase Envelope*. Você pode clicar em *Finish* para gerar o gráfico com as opções padrões ou mudar algo mais clicando em *Next*. Na etapa seguinte, você pode escolher as unidades em que estarão os eixos pressão e temperatura. Clicando novamente em *Next*, irá para o quarto e último passo do assistente de construção de gráficos, como mostra a Figura 76. Colocando as opções que achar melhor, clique em *Finish*.

Plot Wizard Step 4

Plot title: Phase Envelope

Axis titles
 X-Axis: Temperature %Unit%
 Y-Axis: Pressure %Unit%

Select display options
☒ Show legend ☐ Add time stamp ☐ Show diagonal line

Would you like to update the plot when new results are available?
☐ Yes ☒ No

Select grid type: Mesh
 Select line type: Line only

Help Cancel <Back Next> Finish

Figura 76 - Opções de formatação no assistente de construção de gráficos do tipo *PTENVELOPE*.

A Figura 77 mostra o diagrama de fases PXT construído para o sistema acetona/fenol com 20% molar em acetona e 80% em fenol.

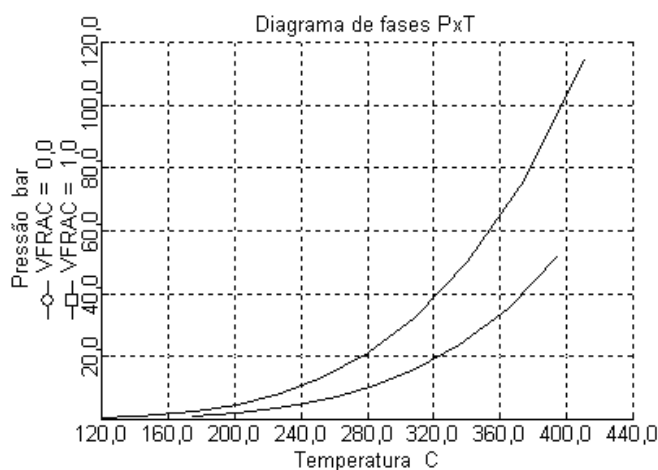


Figura 77 - Diagrama de fases P x T do sistema acetona (20% molar) e fenol (80%).

- Diagrama P x T no Aspen versão 8.4 em diante

Assim como a análise binária o diagrama de Pressão versus Temperatura também ficou muito mais fácil, seguindo os mesmos passos do diagrama binário quando chegar na seleção da opção Binary você selecionará PTEnvelope ao invés de Binary.

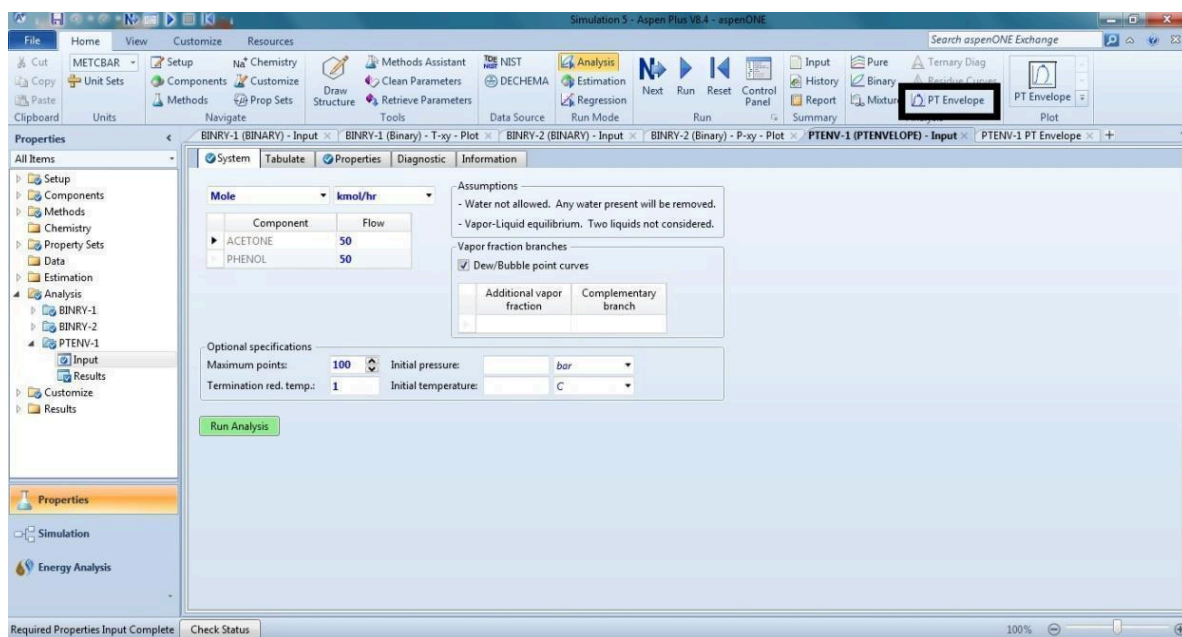


Figura 78 - Diagrama PTEnvelope.

O diagrama P x T Envelope tem uma configuração bem parecida com as versões anteriores do Aspen, definido as condições da sua análise rode a simulação e ele plotará um gráfico com os resultados.

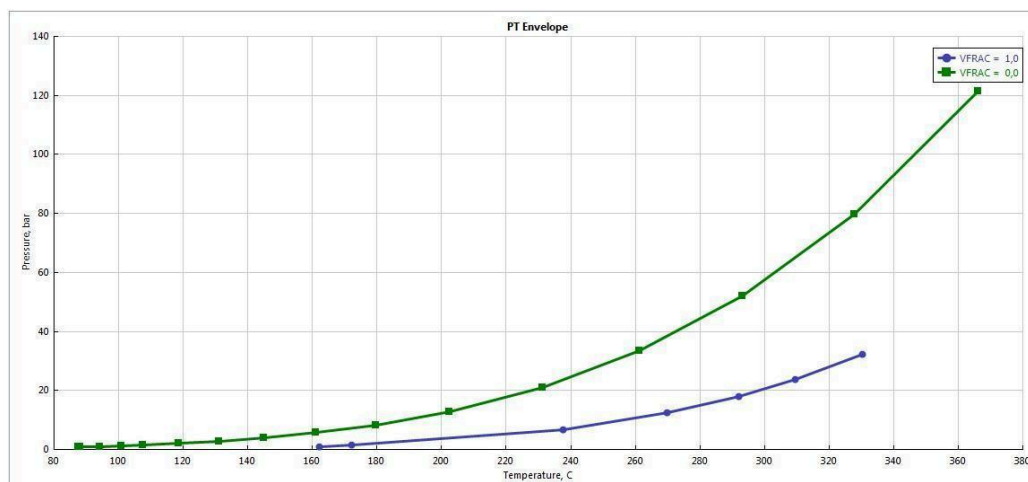


Figura 79 - Gráfico plotado do diagrama PTEnvelope.

2.3.7 Diagramas ternários em versões antigas

Principalmente no estudo da extração líquido-líquido é de grande interesse a compreensão dos diagramas ternários. Como o nome sugere, o diagrama mostra o comportamento das fases em um sistema de três componentes, separando a região homogênea e a região heterogênea.

No Aspen Properties, esse tipo de diagrama também é construído na pasta de trabalho *Analysis*. Ao ser perguntado o tipo de estudo, escolha *TERDIAGRAM*. Ao criá-lo, verá a janela mostrada na Figura 80.

Figura 80 - Configurações da análise tipo *TERDIAGRAM*.

Primeiro, especificar o sistema ternário. Quando estiver trabalhando com problemas de extração, é interessante colocar o seu componente de interesse como componente 2, dessa forma será mais fácil a leitura de sua fração molar no diagrama. Para evitar trabalhar com mais fases em equilíbrio, pode ser mais interessante escolher *Liquid-Liquid* na opção *Valid phases*. Em *Number of tie lines*, você pode definir o número de linhas de amarração que serão traçadas, às quais podem ser aplicadas a regra da gravata e a regra da alavanca, tal como pode ser feito em diagramas de fases de sistemas binários. Também é necessário definir a temperatura e a pressão do sistema. Clique em *Next* após escolher todas as variáveis desejadas e dê início à simulação.

A construção do diagrama é feita como a do diagrama $P \times T$. Após ir à tabela com os resultados gerados, abrir o assistente de construção de gráficos e escolher *Terdiagram* e clicar em *Finish*. A Figura 81 mostra o diagrama ternário do sistema água/etanol/acetato de etila a 25°C e 1atm feito por esse procedimento, usando 10 linhas de amarração.

Diagrama ternário do sistema água/etanol/acetato de etila a 25°C e 1atm

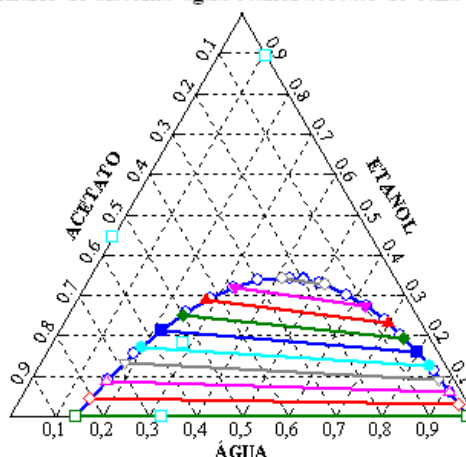


Figura 81 - Diagrama ternário construído no Aspen Properties.

- Diagramas ternários no Aspen versão 8.4

As análises em geral ficaram mais fáceis de serem feitas, como você pode perceber diagramas binários, PxT, Residuais, Ternários, entre outros podem ser feito rapidamente pela opção no subgrupo Analysis. Lá encontramos nossa opção de diagrama ternário.

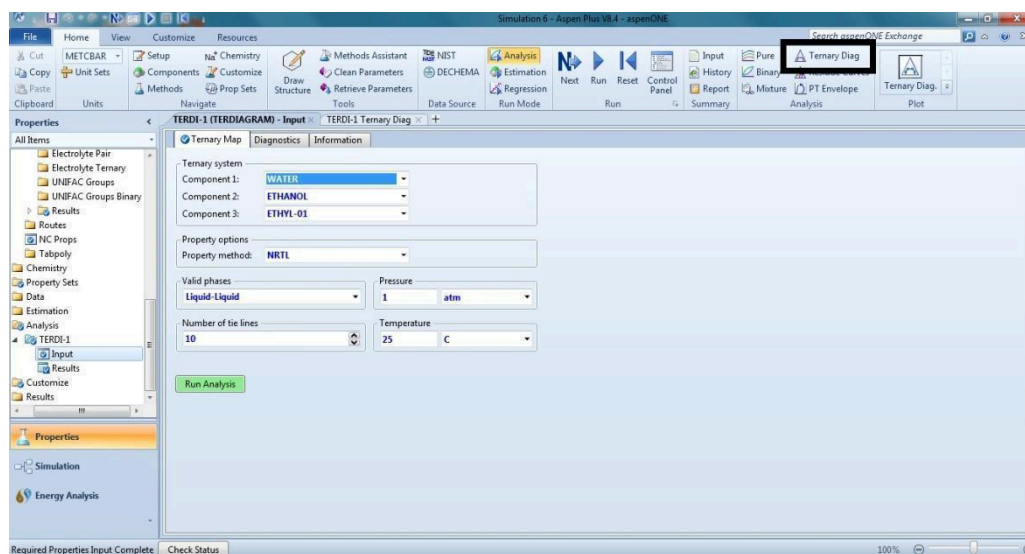


Figura 82 - Diagrama Ternário.

Inclua as condições da análise e rode a simulação. Você obterá o mesmo gráfico da Figura 81.

2.4 OPERAÇÕES DE SEPARAÇÃO

Tanque Flash

Um típico problema de equilíbrio líquido-vapor, importante para o projeto de um equipamento de separação, é determinar o estado do equilíbrio entre duas fases quando o líquido de uma composição conhecida é parcialmente vaporizado ou um vapor é parcialmente condensado como resultado da mudança de temperatura ou de pressão. Tal problema é geralmente referido como tipo flash. O termo “flash” surge do fato de que, se pressão é subitamente reduzida (ou a temperatura é subitamente aumentada) em uma mistura que esteja na temperatura de ebulição, ela sofrerá uma súbita vaporização. No caso de problemas tipo bolha e tipo orvalho, temos a vantagem de conhecer a composição de uma das fases. No caso dos problemas tipo flash, são desconhecidas as composições de ambas as fases. No caso em que a operação ocorre à temperatura constante,

deve-se aplicar o critério de equilíbrio satisfazendo ao balanço de massa. No caso em que a temperatura não é mantida constante, deve-se também incluir o balanço de energia, o que torna o problema mais complexo. (SANDLER, 2006)

O Aspen traz dois blocos para a simulação de tanque flash. O primeiro, o bloco *Flash2*, realiza os cálculos considerando que, na saída, possa haver uma corrente de vapor e uma corrente de líquido, levando em conta cálculos de ELV ou também ELLV. A Figura 83 mostra como diferentes correntes podem se conectar a esse bloco.

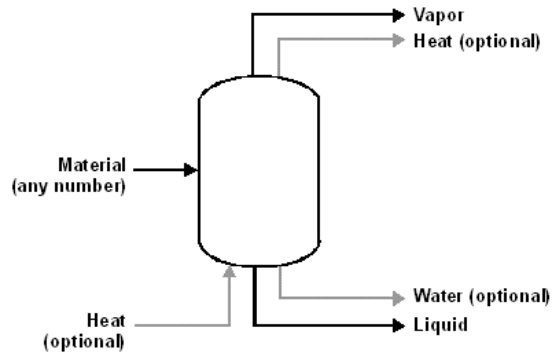


Figura 83 - Conectividade do bloco *Flash2*.

Como visto na disciplina de Termodinâmica II, a resolução desse tipo de problema envolve satisfazer, simultaneamente, o balanço de massa e o equilíbrio de fases. Seja o balanço de massa global para essa unidade:

$$A = V + L$$

Onde A é a vazão de alimentação e V e L as vazões de vapor e líquido, respectivamente. E o balanço de massa parcial, ou seja, para cada componente alimentado:

$$z_i A = y_i V + x_i L$$

Usando como base de cálculo $A = 1$:

$$z_i = y_i V + x_i L$$

Define-se coeficiente de partição como mostra a Equação 2.13.

$$K_i \equiv \frac{y_i}{x_i} \quad (2.1)$$

Combinando essa definição com a equação do balanço de massa, chegamos às Equações 2.14a e 2.14b.

$$y_i = \frac{z_i K_i}{1 + V(K_i - 1)} \quad (2.14a)$$

$$x_i = \frac{z_i}{1 + V(K_i - 1)} \quad (2.14b)$$

Definindo as funções F_x e F_y como sendo, respectivamente, $\sum_i x_i$ e $\sum_i y_i$:

$$F_y = \sum_i (y_i) - 1 = \sum_i \left[\frac{z_i K_i}{1 + V(K_i - 1)} \right] - 1 = 0$$

$$F_x = \sum_i (x_i) - 1 = \sum_i \left[\frac{z_i}{1+V(K_i-1)} \right] - 1 = 0$$

Neste caso, definindo uma terceira função como a diferença entre as duas, chegamos à Equação 2.15a e, derivando esta em relação à vazão da corrente de vapor, obtemos a Equação 2.15b.

$$F = \sum_i \left[\frac{z_i(K_i-1)}{1+V(K_i-1)} \right] = 0 \quad (2.15a)$$

$$\frac{dF}{dV} = \sum_i \left\{ \frac{z_i(K_i-1)^2}{[1+V(K_i-1)]^2} \right\} \quad (2.15b)$$

Tendo-se a composição da vazão de alimentação e o coeficiente de partição calculado, resta encontrar a solução para $F(V)$, ou seja, a vazão da corrente de vapor para satisfazer o balanço de massa. Para isso, utilizaremos o Método de Newton-Raphson que, em sua forma iterativa aplicada a este problema é:

$$V^{i+1} = V^i - \frac{F(V^i)}{\frac{dF}{dV^i}}$$

Até aqui, falou-se somente sobre satisfazer o balanço de massa. Como dito anteriormente, o critério de equilíbrio de fase também deve ser satisfeito. Fazendo uso da Equação 2.9, chegamos a uma expressão para o coeficiente de partição, como mostra a Equação 2.16.

$$K_i \equiv \frac{y_i}{x_i} = \frac{P_i^{sat} \phi_i^{sat} POY_i y_i}{P \phi_i^V} \quad (2.16)$$

E, assim, um processo iterativo deve ser realizado, a fim de que a Equação 2.16 seja resolvida e, respeitando o balanço mássico, o somatório das composições em ambas as fases seja igual a 1. Esse tipo de resolução se aplica a tanques Flash isotérmicos. No caso dos adiabáticos, além do balanço de massa e do equilíbrio de fases, também entraria nos cálculos o balanço energético.

Ao trabalhar no Aspen Plus®, o problema fica muito mais simples. Após escolher o método termodinâmico e especificar a corrente de alimentação do tanque Flash, você precisará apenas inserir algumas informações na janela de especificação do bloco *Flash2*, como ilustra a Figura 84.

Figura 84 - Especificação de um bloco tipo *Flash2* no Aspen Plus

Como você pode ver, sua preocupação será em definir as condições de operação do equipamento. No Aspen Plus®, há também outra opção de bloco, o *Flash3*. Ele realiza cálculos mais rigorosos, levando em conta, também, a possibilidade de a corrente líquida se separar, ou seja, é útil ao trabalhar com casos de ELLV. A Figura 85 mostra como correntes podem ser ligadas a esse tipo de bloco.

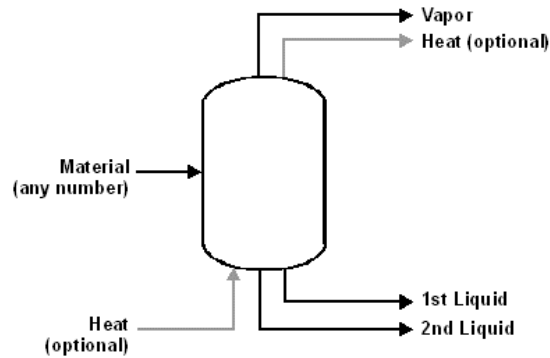


Figura 85 - Conectividade do bloco *Flash3*.

Como esse bloco pode trabalhar com a separação da fase líquida, deve-se informar qual é o componente chave em uma das fases, como mostra a Figura 86.

Figura 86 - Seleção do componente chave da segunda fase líquida gerada no bloco *Flash3*.

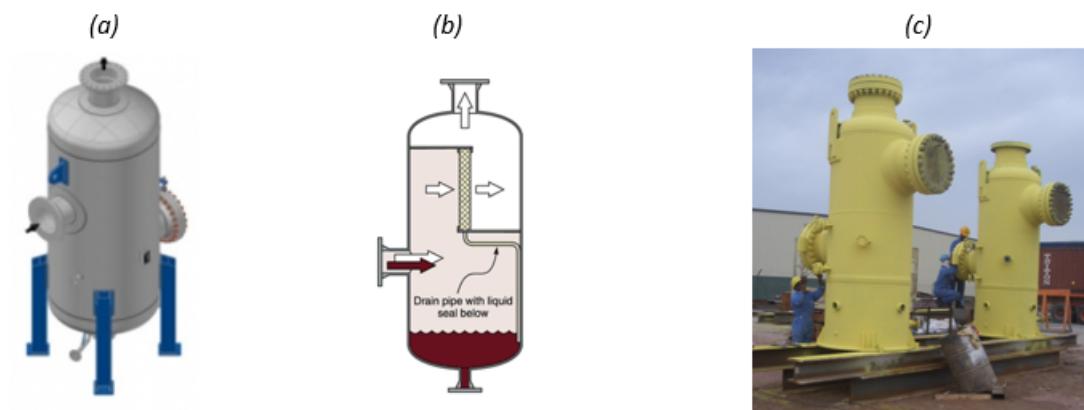


Figura 87 - Tanques Flash. (a) Desenho em computação 3D. (b) Fluxograma esquemático, mostrando redutor de névoa. (c) Construção de um tanque Flash.

2.5 EXERCÍCIOS CAPÍTULO 2

2.1 Tanque Flash

Deseja-se determinar as condições de operação de um tanque flash isotérmico que possui como função separar fenol e acetona, que são transportados em uma linha livre de perda de carga a 8 bar e 100 °C com vazão molar de 120 kmol/h e equimolar com relação aos dois componentes.

- a) No Aspen Plus®, construa o fluxograma para essa operação. Selecione o modelo termodinâmico mais adequado, tendo em mente que esta é uma operação de separação líquido-vapor. Se necessário, faça uso do assistente ou do arquivo de ajuda. Especifique os dois componentes do processo, fenol (*PHENOL/C6H6O*) e acetona (*ACETONE/C3H6O-1*). Realize quatro simulações, alterando as condições de operação do tanque flash (*Flash2*) de acordo com a Tabela 12.

Simulação	1	2	3	4
-----------	---	---	---	---

Temperatura (°C)	160	160	230	230
Pressão (bar)	8	5	8	5

Tabela 12 - Condições de operação para o exercício 2.1.

- b) Com base nos resultados, analise se foi possível ou não separar os componentes em cada caso. Justifique: por que não foi possível obter a separação da acetona e do fenol em duas fases em todas as simulações?
- c) No Aspen Properties, construa o diagrama de fases PxT (*PT-Envelope*) para um sistema equimolar de fenol e acetona (utilize a base de cálculo que desejar). Com base nos dados utilizados no item (a) e comparando ao diagrama gerado, os resultados obtidos estão coerentes?
- d) No Aspen Properties, construa o diagrama de ELV para pressão constante (T-xy Plot) e igual a 3 bar. Determine a temperatura para que se obtenha separação de fases com 25% de fenol na fase vapor. Estime a vazão molar da corrente de vapor e da corrente líquida que deixam o equipamento. Em seguida, no Aspen Plus®, ajuste as configurações da simulação utilizada nos itens anteriores para as condições que você definiu com o auxílio do diagrama de fases. Compare os resultados obtidos com a simulação com aqueles estimados junto ao diagrama Txy.
- e) No Aspen Plus®, corra uma simulação para a mesma corrente de alimentação ao tanque flash, agora com temperatura de 160 °C e pressão de 8 bar. O Flash, no entanto, deve ser adiabático, trabalhando com a pressão ambiente. Ao concluir a simulação, determine a temperatura de saída do equipamento. Justifique.

2.6 GABARITO CAPÍTULO 2

Exercício 2.1. Tanque Flash

Fluxograma sugerido:

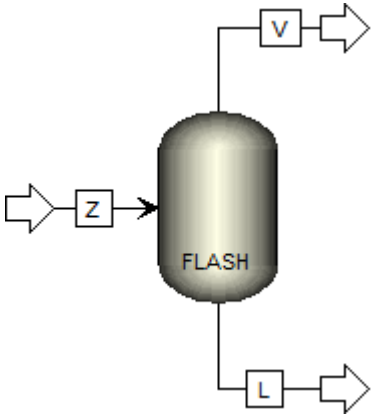


Figura 63 - Fluxograma sugerido para o exercício 2.1.

Item a)

Os dois passos a seguir são os mesmos passos iniciais, tanto para o Aspen Plus® como para o Aspen Properties. Comece especificando os componentes do processo, conforme a Figura 64.

Select components:

	Component ID	Type	Component name	Alias
▶	PHENOL	Conventional	PHENOL	C6H6O
▶	ACETONE	Conventional	ACETONE	C3H6O-1
▶				

Find Elec Wizard User Defined Reorder Review

Figura 64 - Componentes selecionados para o exercício 2.1

Especificar um modelo termodinâmico adequado. Para a resolução do exercício, utilizamos o modelo Wilson, como mostra a Figura 65.

Property methods & options

Method filter: **COMMON**

Base method: **WILSON**

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method: **STEAM-TA**

Water solubility: **3**

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Figura 65 - Modelo termodinâmico selecionado para o exercício 2.1.

No Aspen Plus®, especificar a corrente de alimentação, conforme a Figura 66.

Specifications

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: **100** **C**

Pressure: **8** **bar**

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mole**

Total flow rate: **120** **kmol/hr**

Solvent:

Composition

Mole-Flow: **kmol/hr**

Component	Value
PHENOL	0,5
ACETONE	0,5

Figura 66 - Especificação da corrente de alimentação do exercício 2.1.

E o tanque Flash, seguindo a Figura 67.

Flash specifications

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

Temperature: **160** **C**

Pressure: **8** **bar**

Duty: **cal/sec**

Vapor fraction:

Valid phases

Vapor-Liquid

Figura 67 - Especificação do tanque Flash na primeira simulação do exercício 2.1.

Em cada simulação do item (a), basta mudar as condições de operação nas especificações do tanque Flash e mandar o programa executar os cálculos novamente. Nos resultados mostrados em *Stream Results*, verificar as vazões de saída (V e L) do equipamento, apresentadas na Figura 68.

	Units	L	Z	V
— Mole Flows	kmol/hr	120	120	0
PHENOL	kmol/hr	60	60	0
ACETONE	kmol/hr	60	60	0
— Mole Fractions				
PHENOL		0,5	0,5	
ACETONE		0,5	0,5	
— Mass Flows	kg/hr	9131,58	9131,58	

Figura 68 - Resultados da primeira simulação do exercício 2.1.

	Units	L	Z	V
— Mole Flows	kmol/hr	111,734	120	8,26618
PHENOL	kmol/hr	59,6471	60	0,352927
ACETONE	kmol/hr	52,0867	60	7,91326
— Mole Fractions				
PHENOL		0,533832	0,5	0,0426953
ACETONE		0,466168	0,5	0,957305
— Mass Flows	kg/hr	8638,77	9131,58	492,817

Figura 69 - Resultados da segunda simulação do exercício 2.1.

	Units	L	Z	V
— Mole Flows	kmol/hr	42,4533	120	77,5467
PHENOL	kmol/hr	34,823	60	25,177
ACETONE	kmol/hr	7,63032	60	52,3697
— Mole Fractions				
PHENOL		0,820266	0,5	0,324669
ACETONE		0,179734	0,5	0,675331
— Mass Flows	kg/hr	3720,47	9131,58	5411,12

Figura 70 - Resultados da terceira simulação do exercício 2.1.

	Units	L	Z	V
– Mole Flows	kmol/hr	0	120	120
PHENOL	kmol/hr	0	60	60
ACETONE	kmol/hr	0	60	60
– Mole Fractions				
PHENOL			0,5	0,5
ACETONE			0,5	0,5
– Mass Flows	kg/hr		9131,58	9131,58

Figura 71 - Resultados da quarta simulação do exercício 2.1.

Para as simulações 1 e 4 não foi possível obter a separação dos componentes, em que o resultado obtido foi de 100% líquido e 100% vapor, respectivamente. Isso significa que essas condições de processo não estavam nas condições para a separação de fases, ou seja, estavam fora da região de ELV, ao contrário das condições das simulações 2 e 3.

Na primeira simulação, as vazões na corrente de vapor são todas zero. Isso significa que não houve separação de fases com as condições usadas. O resultado para as outras simulações já foram comentadas. Na quarta simulação, o problema ocorrerá com as vazões da corrente líquida, o que significa que toda a alimentação foi evaporada.

Item b)

No Aspen Properties, criar um estudo em *Analysis* do tipo PTENVELOPE. Coloque temperatura reduzida final igual a 1 e temperatura inicial 120 °C. Execute a simulação e plote o gráfico dos resultados com o auxílio do assistente de criação de gráficos tipo PTENVELOPE (Plot Wizard).

O diagrama PxT gerado utilizando como modelo termodinâmico o modelo Wilson é mostrado na Figura 72. Observa-se que os resultados obtidos no item (a) são coerentes. As condições de operação das simulações 1 e 4 estão fora da região de ELV, ao contrário das condições das simulações 2 e 3.

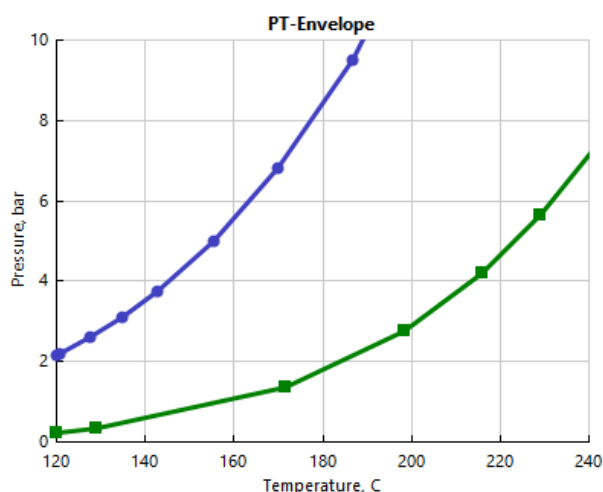


Figura 72 - Diagrama de fases PxT do exercício 2.1.

Item c)

No Aspen Properties, criar um property set com as propriedades TBUB e TDEW, como mostrado no exemplo da apostila. Em seguida, construir uma análise tipo GENERIC com intervalo de fração molar do fenol de 0 a 1 com o número de pontos desejado. Com os resultados, criar o gráfico selecionando as temperaturas como eixo y e as frações como eixo x.

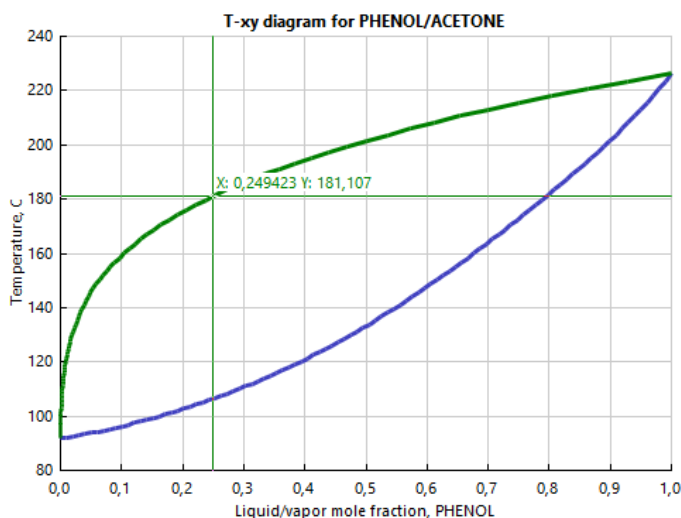


Figura 73 - Identificação da temperatura no diagrama T-xy do exercício 2.1.

O diagrama construído no Aspen Properties com o modelo Wilson foi mostrado na Figura 73. A temperatura desejada é de aproximadamente 181,1°C. A determinação foi feita com o auxílio do *Tracker*, clicando com o botão direito na curva de orvalho e marcando a opção *Show Tracker*. Isso foi feito no Aspen Properties V8.0. Com a escala usada, a partir de uma alimentação equimolar, há três quadrados à direita do ponto marcado na linha de amarração e dois e meio à esquerda, em um total de cinco quadrados e meio.

Assim, podemos determinar a proporção entre a fase líquida e a fase vapor geradas. O resultado estimado é de 45,5% fase líquida e 55,5% fase vapor, o que corresponde a 54,5 kmol/h de líquido e 65,5 kmol/h, respectivamente. Executando a simulação com essas condições, as vazões serão 55,0 kmol/h de líquido e 65,0 kmol/h de vapor contendo 16,24 kmol/h de fenol, o que corresponde a 25,0% dessa corrente, como desejado.

Item d)

No Aspen Plus®, ir ao formulário de especificação da corrente de alimentação e mudar a temperatura para 160°C, como mostra a Figura 74.

Flash Type:		Temperature	Pressure
State variables			
Temperature:	160	C	
Pressure:	8	bar	
Vapor fraction:			
Total flow basis:	Mole		
Total flow rate:	120	kmol/hr	
Solvent:			

Composition	
Mole-Frac	
Component	Value
ETHANOL	
WATER	
BENZENE	
PHENOL	0,5
ACETONE	0,5
Total: 1	

Figura 74- Novas especificações da corrente de alimentação do exercício 2.1.

E, no formulário de especificação do Tanque Flash, mudar as condições de operação. Sendo a pressão de operação a ambiente, mudar para 1 atm e, sendo um Flash adiabático, colocar 0 no campo da carga térmica (Heat Duty). As especificações são mostradas na Figura 75.

The image shows a software interface for specifying flash tank parameters. It is divided into two main sections: 'Flash specifications' and 'Valid phases'.
In the 'Flash specifications' section, there are several input fields and dropdown menus:
- 'Flash Type:' has a dropdown menu set to 'Duty'.
- Next to it is a dropdown menu set to 'Pressure'.
- 'Temperature:' has a text input field with the value '160' and a dropdown menu set to 'C'.
- 'Pressure:' has a text input field with the value '1' and a dropdown menu set to 'atm'.
- 'Duty:' has a text input field with the value '0' and a dropdown menu set to 'cal/sec'.
- 'Vapor fraction:' has an empty text input field.
In the 'Valid phases' section, there is a dropdown menu set to 'Vapor-Liquid'.

Figura 75 - Especificações do Flash adiabático do exercício 2.1.

Em seguida, executar a simulação. Na pasta *Stream Results*, encontrar a temperatura das correntes de saída junto ao balanço energético do processo.

A temperatura de saída é 117,6 °C. Como o equipamento é adiabático, a energia necessária para haver mudança de fase e expansão devido à queda de pressão é retirada da energia interna da mistura, resultando no abaixamento da sua temperatura.

CAPÍTULO 3

3 TROCADORES DE CALOR

3.1 OBJETIVOS

O objetivo dessa aula é aprender a simular trocadores de calor no *Software Aspen Plus*, observando as variáveis envolvidas no funcionamento desses equipamentos e analisando diferentes situações ao modificar alguma dessas variáveis. Dessa forma, a/o aluna/o irá rever conceitos das disciplinas de Fenômenos de Transporte II e Operações Unitárias II. Será dado enfoque em dois modelos de trocadores de calor oferecidos pelo *Software*: o *Heater* e o *HeatX*. Com os conhecimentos adquiridos, a/o aluna/o deverá ter um bom entendimento para poder realizar simulações com esses dois modelos.

3.2 APLICAÇÕES E TIPOS

Trocadores de calor são largamente usados na indústria tanto para resfriamento quanto para aquecimento em larga escala de processos industriais. O tipo e o tamanho dos trocadores de calor podem ser adaptados a um processo dependendo do fluido, sua fase, temperatura, densidade, viscosidade, pressão, composição química e várias outras propriedades termodinâmicas.

Existem os trocadores de calor por contato direto e trocadores de calor de superfície. Os últimos são os mais utilizados na indústria, principalmente pelo fato de que os fluidos a trocarem calor não precisam ser misturados. No entanto, nesse tipo de trocador de calor há uma resistência de condução devido à superfície presente entre os fluidos que deve ser levada em conta.

Como engenheiras/os, sempre buscamos a otimização e, sempre que possível, aumentar a eficiência das operações. Num trocador de calor, para aumentar o coeficiente global de troca térmica, e portanto, a eficiência do equipamento, pode-se reduzir a resistência de condução proporcionada pela parede. Uma das formas de reduzi-la é utilizar um material com elevado coeficiente de condutibilidade térmica na construção do trocador de calor. Sendo assim, são amplamente utilizados o cobre e o alumínio e suas ligas na fabricação desses equipamentos.

A eficiência de um trocador de calor depende, principalmente:

- Do material utilizado para construção;
- Da característica geométrica;
- Do fluxo, temperatura e coeficiente de condutibilidade térmica dos fluidos em evidência.

Em muitos processos industriais existe desperdício de energia ou uma corrente de calor que está sendo exaurida. Trocadores de calor podem ser usados para recuperar este calor e colocá-lo em uso pelo aquecimento de uma outra corrente no processo. Esta prática poupa uma quantidade de dinheiro na indústria, evitando que o calor utilizado tenha que vir de uma fonte externa, a qual é mais custosa e mais nociva ao meio ambiente.

Trocadores de calor são usados em muitas indústrias, algumas das quais incluem:

- Tratamento de águas residuais;
- Sistemas de refrigeração;
- Indústria de vinhos e cervejarias;
- Indústria do petróleo;
- Indústria química pesada.

Na indústria de tratamento de águas residuais, por exemplo, os trocadores de calor desempenham um papel vital na manutenção de temperaturas ótimas internamente a digestores anaeróbicos, a fim de promover o crescimento de micro-organismos que removem os poluentes das águas residuais.

Os trocadores de calor são tipicamente classificados de acordo com a configuração do escoamento e do tipo de construção.

- Escoamento:
 - Co ou contracorrente;
 - Paralelo ou cruzado (um fluido escoa perpendicularmente ao outro).

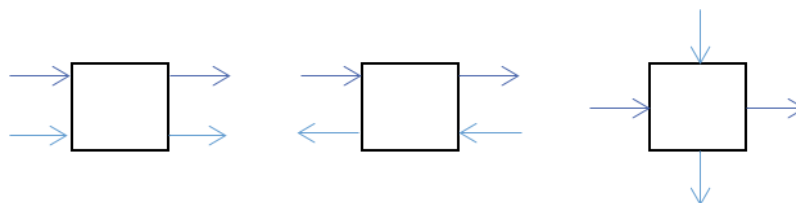


Figura 76 - Tipos de escoamento.

- Construção:
 - Duplo tubo: Um dos trocadores mais simples. Possui dois tubos concêntricos.

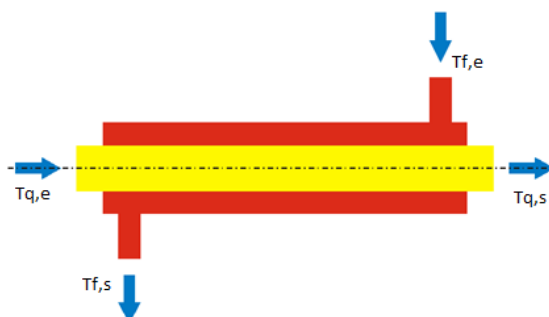


Figura 77- Trocador de calor do tipo duplo tubo (users.rdc.puc-rio.br).

- Casco tubo: É o trocador de calor mais utilizado na área industrial. Constituído de um feixe tubular e um casco. É mais eficiente que o duplo tubo. As chicanas são instaladas para aumentar o coeficiente convectivo do fluido que passa pelo casco, induzindo turbulência e um componente de velocidade na direção do escoamento cruzado.

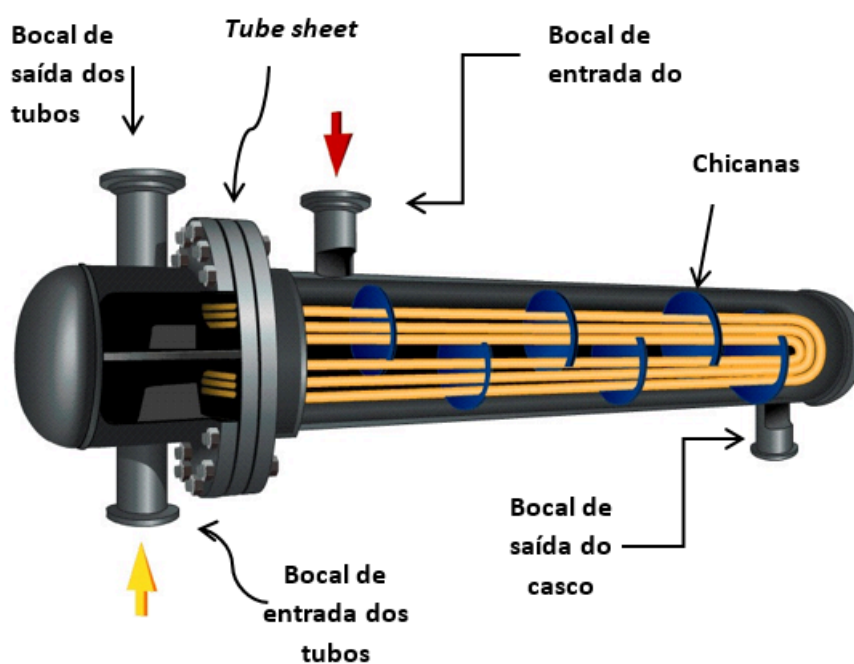


Figura 78 - Trocador de calor do tipo casco-tubo com dois passes pelo casco (rexheatexchanger.com).

- Placas paralelas: constituído de uma série de placas paralelas com passagens para o escoamento que intercalam o fluido frio e o quente.

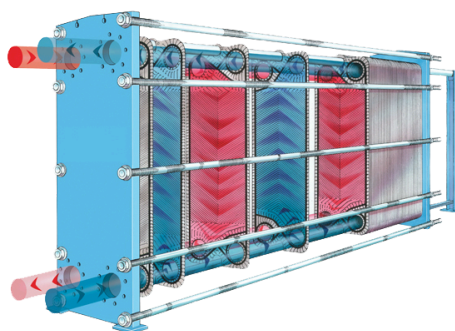


Figura 79 - Trocador de calor do tipo placas paralelas (tranter.com).

- Trocadores de calor compactos: utilizados para atingir superfícies de transferência de calor muito grandes em relação ao volume ocupado. Possuem densas matrizes de tubos aletados ou placas, e são tipicamente usados quando um dos fluidos é um gás.



Figura 80 - Trocador de calor do tipo tubos aletados (geadobrasil.com.br).

Quanto às fases existem dois tipos de trocadores de calor:

- Monofásico: não há mudança de fase do fluido a ser refrigerado ou aquecido. Por exemplo, radiadores de água e intercooler (ou radiadores a ar).
- Multifase: há mudança de estado físico do fluido. Por exemplo, condensadores e evaporadores.

3.3 SELEÇÃO

Devido às muitas variáveis envolvidas, a seleção ótima de um trocador de calor é desafiante. Cálculos manuais são possíveis, mas muitas iterações são tipicamente necessárias. Assim, trocadores de calor são mais frequentemente selecionados através de *softwares* computacionais.

De maneira a selecionar um trocador de calor apropriado, as/os projetistas de sistemas (ou fornecedoras/es dos equipamentos), em primeiro lugar, consideram as limitações de projeto para cada tipo de trocador de calor. Embora o custo seja muitas vezes o primeiro critério avaliado, há vários outros importantes critérios de seleção que incluem:

- Limite de alta e baixa pressão;
- Performance térmica;
- Faixas de temperatura;
- Fases que suporta (líquido/líquido, líquidos com particulados, ou alto teor de sólidos);
- Queda de pressão ao longo do trocador;
- Capacidade de fluxo de fluido;
- Características de limpeza, manutenção e reparo;
- Materiais requeridos para construção;
- Capacidade e facilidade de futura expansão.

A escolha do trocador de calor correto requer algum conhecimento de diferentes tipos de trocadores de calor, assim como o ambiente no qual a unidade irá operar. Tipicamente, na indústria de manufatura, diversos tipos diferentes de trocadores de calor são usados para apenas um processo ou sistema para obter-se o produto final. Por exemplo, um trocador de calor kettle para pré-aquecimento, um trocador de tubo duplo para o fluido transportador, e um trocador placa e quadro (placas paralelas) para resfriamento. Com suficiente conhecimento de tipos de trocadores de calor e requerimentos de operação, uma seleção apropriada pode ser feita para otimizar o processo.

3.4 CUIDADOS E MANUTENÇÃO

A inspeção de integridade de trocadores de calor tubular e de placas pode ser testada por métodos de condutividade ou por gás hélio. Estes métodos confirmam a integridade das placas ou dos tubos para prevenir qualquer contaminação cruzada e garantir as condições das juntas.

A monitoração das condições dos tubos de trocadores de calor pode ser conduzida através de ensaios não destrutivos, como os ensaios não destrutivos de tubos, e ensaios baseados em correntes parasitas. Os mecanismos de fluxo de água e depósitos são frequentemente simulados por fluidodinâmica computacional. A incrustação é um problema sério em alguns trocadores de calor, podendo afetar seriamente sua eficiência. Águas doces pouco tratadas são frequentemente usadas como água de resfriamento, o que resulta em detritos biológicos entrando no trocador de calor e produzindo camadas, diminuindo o coeficiente de transferência térmica. Outro problema comum é o "tártaro", ou incrustação calcária, que é composto de camadas depositadas de compostos químicos, como carbonato de cálcio ou carbonato de magnésio, relacionados com a dureza da água.

Trocadores de calor de placas precisam ser desmontados e limpos periodicamente. Trocadores de calor tubulares podem ser limpos por métodos tais como a limpeza ácida, jateamento, jato de água de alta pressão, limpeza por bala, ou por hastes.

3.5 TROCADORES DE CALOR E O ASPEN

3.5.1 Fundamentação teórica

Antes de nos aprofundarmos no *software* Aspen, convém uma revisão da fundamentação teórica para os cálculos envolvendo trocadores de calor.

Para simular um trocador de calor, este deve resolver as seguintes equações fundamentais: (INCROPERA)

$$Q - m_{quente} \cdot c_p^{quente} \cdot (T_1^{quente} - T_2^{quente}) = 0 \quad (3.1)$$

$$Q - m_{fria} \cdot c_p^{fria} \cdot (T_2^{fria} - T_1^{fria}) = 0 \quad (3.2)$$

$$Q - U \cdot A \cdot F \cdot \Delta T_{LM} = 0 \quad (3.3)$$

Onde:

$$\Delta T_{LM} = \frac{\Delta T_1 - \Delta T_2}{\ln\left(\frac{\Delta T_1}{\Delta T_2}\right)} \quad (3.4)$$

Sendo Q a carga térmica do trocador de calor; m a vazão mássica; c_p o calor específico (considerado constante); T a temperatura média do fluido na localização indicada; U o coeficiente global de troca de calor (definido em função da resistência térmica total à transferência de calor entre dois fluidos e, logo, dependente da temperatura, propriedades de transporte e geometria do trocador); F o fator de correção para múltiplos passes tanto no casco como nos tubos. Os sub-índices 1 e 2 correspondem ao início e ao final do trocador de calor, respectivamente.

As Equações 3.1 e 3.2 são obtidas a partir da aplicação de balanços globais de energia nos fluidos quente e frio, e independem da configuração do escoamento e do tipo do trocador de calor. A Equação 3.3 é uma extensão da lei do resfriamento de Newton $q = h \cdot A \cdot (T_q - T_f)$ (onde q é a taxa de calor), em que o coeficiente de transferência de calor (h) é substituído pelo coeficiente global de transferência de calor (U), assim como a diferença de temperatura ΔT é substituída pela ΔT_{LM} .

Dependendo da complexidade do modelo de trocador de calor escolhido, as informações que a/o usuária/o deve fornecer para a Equação 3.3, podem variar desde uma simples estimativa até cálculos baseados na geometria do trocador de calor.

O fator F foi definido por Nagle (1933) e Underwood (1934) e pode ser calculado pela Equação 3.5, conforme o autor do livro de trocadores de calor, Sadik Kakaç.

$$F = \frac{\sqrt{R}}{1 + \sqrt{R}} \quad (3.5)$$

Onde R é a razão da capacidade térmica e S é efetividade térmica. Seus cálculos são feitos por:

$$R = \frac{T_1^{quente} - T_2^{quente}}{T_2^{fria} - T_1^{fria}} \quad (3.6)$$

$$S = \frac{T_2^{fria} - T_1^{fria}}{T_1^{quente} - T_2^{fria}} \quad (3.7)$$

A área de troca térmica, A, pode ser estipulada ou calculada através de correlações como as de Hewitt (1992), correlação feita por Gnielinski, que envolve o Nusselt (Nu), Reynolds (Re) e Prandtl (Pr) e o fator de fricção de Darcy, dados por:

$$Nu = \frac{h_i D_i}{k} = \quad (3.8)$$

$$f_D = (1,82 \cdot \log \log \Re - 1,64)^{-2} \quad (3.9)$$

Onde h_i é o coeficiente convectivo no interior do tubo; D_i é o diâmetro interno do tubo; k é a condutividade térmica; f_D é o fator de Darcy.

O coeficiente global de troca térmica (U) representa a facilidade com a qual o calor é transferido de um meio a outro. Temos como exemplo, calor sendo transferido de um fluido quente, dentro do tubo, para um fluido frio, fora do tubo, como mostra a Figura 81, abaixo.

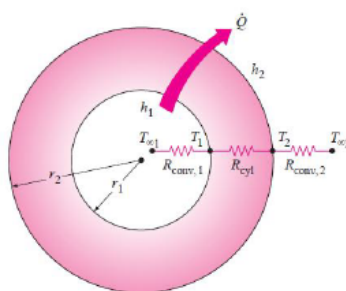


Figura 81- Transferência de calor através de uma tubulação (just.edu.jo).

Para esse caso, o coeficiente global de troca térmica é:

$$U = \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_3} \right) \quad (3.1)$$

Onde R_1 e R_3 são resistências convectivas no interior e no exterior do tubo, respectivamente, dadas por:

$$R_i = \frac{1}{2\pi r_i L h_i} \quad (3.1)$$

E R_2 é uma resistência de condução devido à parede do tubo, dada por:

$$R_2 = \ln \quad (3.1)$$

3.5.2 Blocos

O Aspen possui vários tipos de modelos de trocadores de calor, cada um desempenha cálculos característicos e é recomendado para certas situações. Na Tabela 14, abaixo, você encontra um resumo das aplicações e dos principais cálculos desempenhados por cada modelo de trocador de calor que o Aspen oferece.

Modelo	Descrição	Cálculos	Uso
<i>Heater</i>	Aquecedor ou resfriador	Determina condições termodinâmicas e de fase	Aquecedores, resfriadores, condensadores, entre outros
<i>HeatX</i>	Trocador de calor de duas correntes do tipo casco-tubo	Troca calor entre duas correntes	Análise completa do trocador de calor com estimativas ou cálculos rigorosos do U e da perda de carga (dependendo da simulação). Além de cálculos de dimensionamento e simulações
<i>MHeatX</i>	Trocador de calor multicorrente	Troca calor entre qualquer número de correntes	Trocador de calor de n números de correntes frias e quentes. Análises rigorosas e detalhadas do interior do trocador de calor. Incluindo cálculos de coeficiente global de troca térmica e determinação de pontos “pinch”
<i>Hetran*</i>	Trocador de calor casco-tubo	Dimensionamento e simulação de trocadores de calor casco-tubo	Trocadores de calor casco-tubo com uma vasta variedade de configurações
<i>Aerotran*</i>	Trocador de calor que utiliza o ar como fluido refrigerante	Dimensionamento e simulação de resfriadores a ar	Trocadores de calor com o ar como fluido refrigerante com uma vasta variedade de configurações
<i>HxFlux</i>	Modelo de cálculo da transferência de calor	Calcula coeficientes de convecção entre uma fonte de calor e um receptor	Determina a diferença de temperatura média logarítmica usando ou o método rigoroso ou o aproximado para o cálculo do coeficiente convectivo
<i>HTRL-Xist*</i>	Interface para o programa IST de trocador de calor pelo HTRL	Dimensiona e simula trocadores de calor casco-tubo	Trocadores de calor casco-tubo com uma vasta variedade de configurações, incluindo o refulvedor Kettle

Tabela 13 - Modelos de trocadores de calor do Aspen.

*A versão 7.1 do Aspen foi a última a dar suporte aos blocos de trocadores de calor *Hetran*, *Aerotran* e *HTRL-Xist*. Em versões mais recentes, você poderá fazer cálculos para esses blocos usando algum bloco *HeatX* e as simulações *Shell&Tube* e *AirCooled*. Para usar essas e outras formas de simulação com cálculos rigorosos, você deverá ter um arquivo em formato EDR, com informações sobre a geometria do trocador de calor.

Dentre esses modelos que constam na Tabela 14, foram selecionados o *Heater* e o *HeatX* para uma abordagem aprofundada, encontrada nos próximos itens.

A seguir, seguem algumas figuras contendo os fluxogramas dos modelos de trocadores de calor que são oferecidos pelo Aspen.

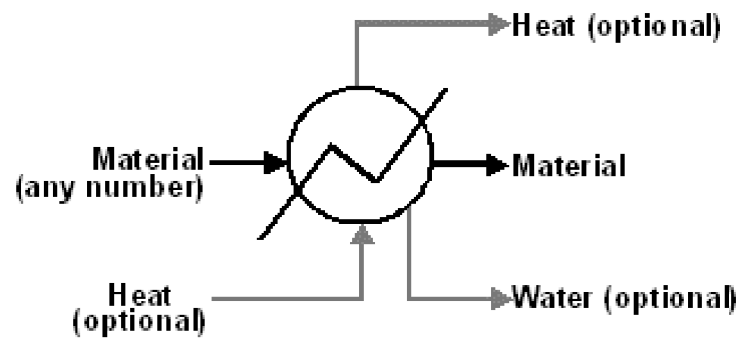


Figura 82 - Heater.

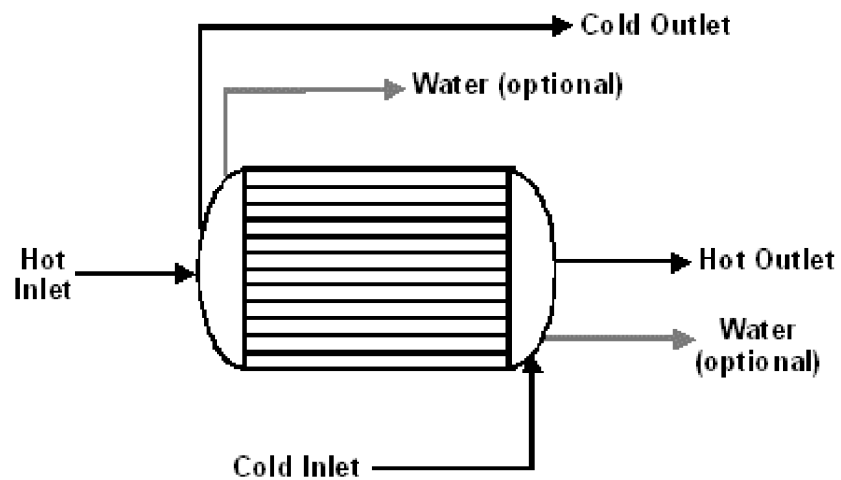


Figura 83 - HeatX.

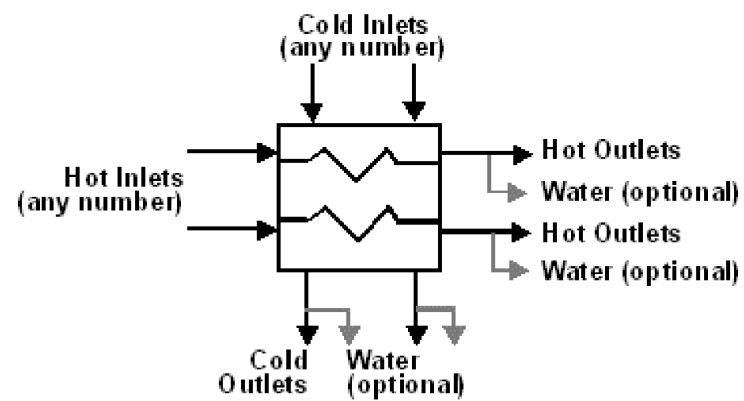


Figura 84 - MheatX.

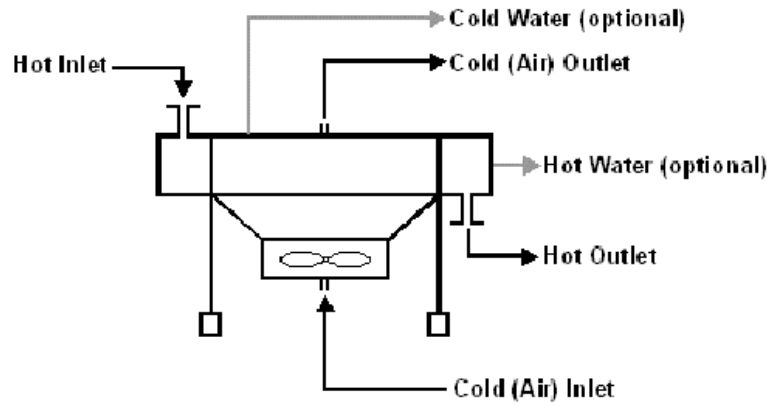


Figura 85 - Aerotran.

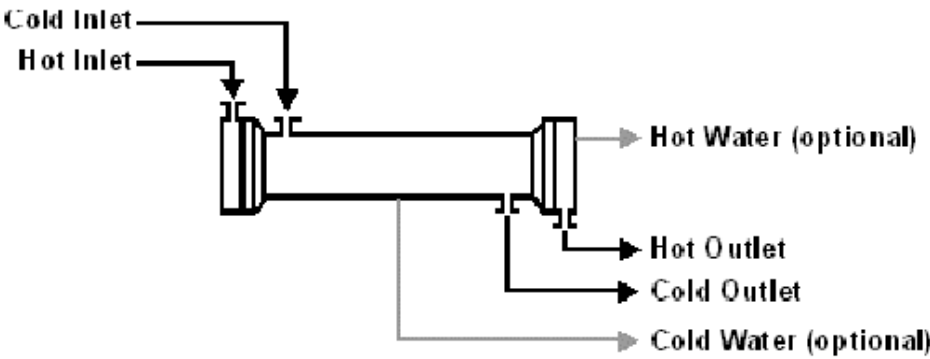


Figura 86 - Hetran.

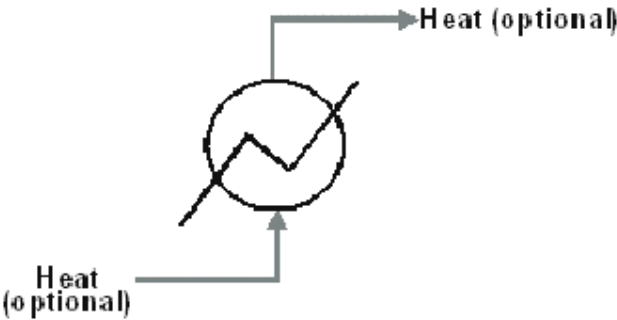


Figura 87 - HxFlux.

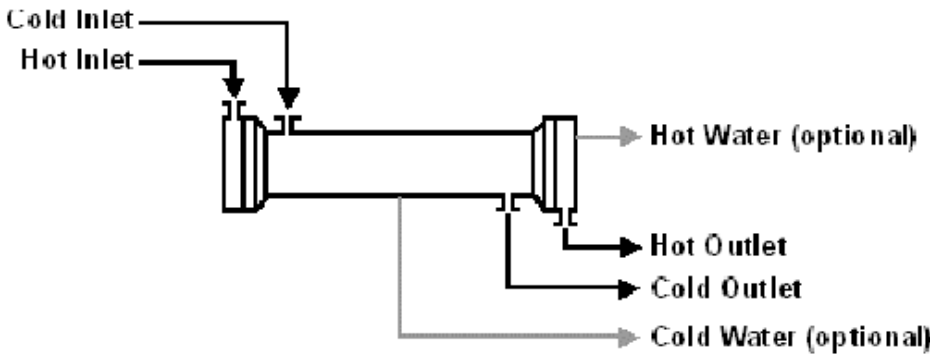


Figura 88 - HTRI-Xist.

3.5.3 Heater

O modelo *Heater* pode ter uma ou múltiplas correntes de entrada e produz uma única corrente de saída em um determinado estado termodinâmico. A Figura 88, acima, mostra o seu fluxograma.

O *Heater* pode ser utilizado para representar:

- Aquecedores ou resfriadores (um lado do trocador de calor);
- Bombas e compressores quando não se quer saber resultados do trabalho envolvido;
- Válvulas quando se conhece a perda de carga.

Tipos de cálculos desempenhados pelo *Heater*:

- Cálculo dos pontos bolha e orvalho;
- Adiciona ou remove uma quantidade de carga térmica estipulada pelo usuário;
- Determina a carga térmica necessária, de aquecimento ou resfriamento, para atingir certa fração de vapor.

É principalmente utilizado para estabelecer ou modificar as condições termodinâmicas de uma corrente.

O *Heater* oferece uma variedade de maneiras de estabelecer o estado da corrente de saída, sendo que todas resultam do cálculo da energia requerida para aquecer (ou resfriar) a corrente. Alternativamente, a energia adicionada (ou removida) do *Heater* pode ser estipulada pelo usuário, de forma que o *Heater* determinará o estado da corrente de saída.

Uma importante aplicação do *Heater* é quando utilizado aos pares para modelar um trocador de calor, como mostrado na Figura 89, abaixo. Note que uma *Heatstream* (fluxo de calor) é utilizada para conectar os dois *Heaters*. O Aspen utiliza a seguinte nomenclatura para o calor: calor recebido é positivo. Nesse caso, o fluxo de calor vai do *Heater* H2 para o H1.

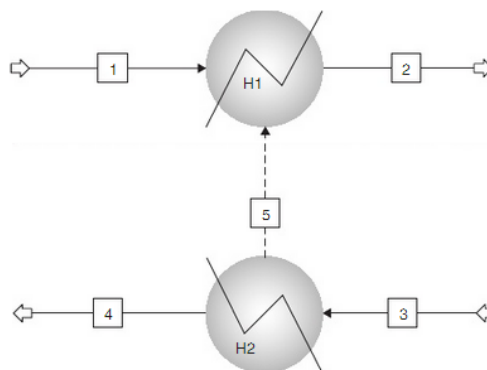


Figura 89 - Dois Heaters representando um trocador de calor.

As especificações do modelo *Heater* são feitas conforme a explicação da Figura 90 . Elas podem ser acessadas a partir do *Input* do *Heater*, localizado na árvore (lista com todos os itens do fluxograma, no lado esquerdo da tela).

Figura 102 - Caixa de diálogo para especificar o modelo *Heater*

Nessa janela, encontram-se:

1. *Aba: Specifications* – fornecer valores de duas das seguintes condições: temperatura, pressão ou perda de carga, carga térmica (*Duty*), variação de temperatura, graus de superaquecimento e de subresfriamento, parâmetro para correlação de perda de carga. Ainda, estipular as fases válidas para o sistema, no item Valid phases.
2. *Aba: Flash Options* – quando trabalhar com situações de Flash, deve-se fornecer um valor de temperatura ou um de pressão como estimativa inicial. Ainda é possível definir os parâmetros de convergência, número máximo de iterações e o erro.

Figura 90 - Caixa de diálogo para o input do modelo *Heater*, aba *Flash Options*.

3. *Aba: Utility* – é possível criar uma corrente de utilidade para substituir uma das correntes que trocará calor, a corrente fria ou a quente. Geralmente, isso é feito quando os dados dessa corrente não são tão importantes. Ao criar uma corrente de utilidade, uma nova aba irá aparecer no menu do lado esquerdo, chamada *Utilities*. Nela, serão feitas todas as especificações da corrente de utilidade, como o tipo de fluido, preço, opção de cálculo, dentre outras.

Figura 91 - Caixa de diálogo para o input do modelo *Heater*, aba *Utility*.

4. *Aba: Comments* – espaço para informar descrição e comentários referentes ao trocador de calor.

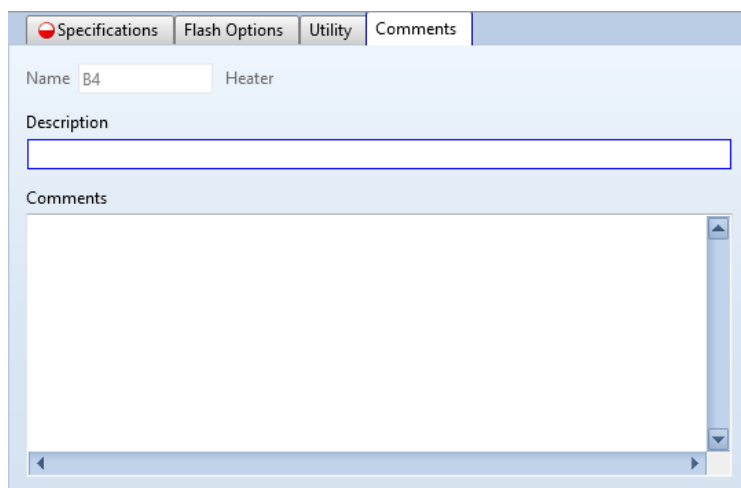


Figura 92 - Caixa de diálogo para o input do modelo Heater, aba Comments.

Fluxos de calor (*heatstreams*) no Heater:

- O número de fluxos de calor afluentes (que chegam) num Heater é ilimitado;
- Um fluxo efluente (que sai) de calor pode ser usado para determinar a carga térmica líquida de um Heater;
- A carga térmica líquida é a soma dos fluxos de calor afluentes menos o trabalho de calor envolvido;
- Se for dada apenas uma especificação (temperatura ou pressão), o Heater utiliza o somatório dos fluxos de calor afluentes para determinar a carga térmica;

3.5.4 HeatX

O modelo *HeatX* troca calor entre duas correntes, sendo uma corrente passando pelo feixe tubular e a outra passando pelo casco, de acordo com a Figura 95. As correntes de água decantada são opcionais. O *HeatX* possui uma grande faixa de aplicações. Suas especificações são feitas de acordo com a Figura 93, e podem ser acessadas a partir do *Input* do HeatX, localizado na árvore.

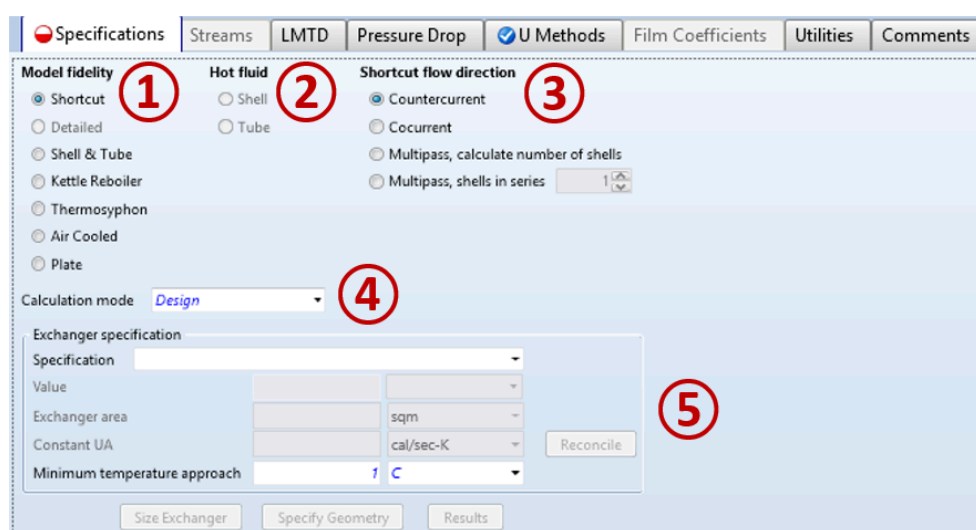


Figura 93 - Caixa de diálogo para o input do modelo HeatX, aba Specifications.

Nessa janela, encontram-se:

1. Model fidelity – *permite escolher o método utilizado nos cálculos, podendo ser Shortcut ou Rigorous (Shell&Tube, Kettle Reboiler, Thermosyphon, AirCooled, Plate).*

- *Shortcut*: a mais simples, que não requer dados da geometria do trocador. O usuário deve apenas definir a direção dos fluxos e alguma especificação térmica do bloco, como temperatura de alguma corrente na saída, diferença entre as temperaturas na saída, carga térmica, entre outros.
- *Detailed*: requer dados da geometria do trocador de calor. Permite calcular as condições das correntes na saída do bloco, bem como se o seu dimensionamento foi superestimado ou subestimado, de acordo com o tipo de simulação. Esta opção só está disponível quando você carrega arquivos de versões mais antigas que o usaram. Para novos cálculos, você deve usar o método *Rigorous* apropriado.
- *Rigorous*: substituem os blocos para alguns tipos especiais de trocador de calor mencionados no item 3.5.2., *Aerotran* e *Hetran*, além de *permitir* simular trocador de placas. Para esses três trocadores, o Aspen disponibiliza os seguintes programas de cálculo: *AirCooled*, *Shell&Tube* e *Plate*. Para usar qualquer uma dessas opções, o usuário deve dispor de um arquivo em formato EDR contendo informações quanto à geometria do equipamento.

A principal diferença entre os três métodos de *Calculation* é o procedimento para o cálculo do coeficiente global de transferência de calor. O método *Shortcut* utiliza um valor especificado pelo usuário para o coeficiente global de troca térmica e esse será constante durante todo o processo. O método *Detailed* utiliza rigorosas correlações de transferência de calor para o coeficiente de filme e combina as resistências de filme nos trocadores casco-tubo com a resistência de parede para calcular o coeficiente global de transferência de calor. Já o método *Rigorous* utiliza modelos EDR para coeficientes de filme e combina as resistências de filme em cada lado da parede com a resistência da parede para calcular o coeficiente global de transferência de calor. É um método mais complexo que requer muitas especificações.

2. *Hot fluid*: especificar se o fluido quente passa pelo casco (*Shell*) ou pelo tubo. Só é válido para os tipos de cálculo *Shell&Tube*, *Kettle Reboiler*, *Thermosyphon* e *AirCooled*. Por padrão, ele está no shell, exceto com o Kettle reboiler quando a opção não está disponível porque o fluido quente só pode estar nos tubos.
3. *Shortcut flow direction*: especificar o tipo de escoamento: se é cocorrente, contracorrente ou de múltiplos passes pelo tubo. Essa última opção só é possível ser selecionada na opção de cálculo *Shortcut*, no qual a geometria do trocador de calor é definida pelo Aspen. No *shells in series*: definir o número de trocadores de calor com múltiplos passes em série, podendo ser um número de 1 a 999.
4. *Calculation mode* – o Aspen fornece quatro tipos de simulação para o modelo *HeatX*. Cada uma atende a um determinado objetivo quanto aos resultados desejados e requer a especificação de diferentes dados. As simulações são as seguintes:
 - *Design*: com esta opção o Aspen selecionará a geometria do trocador. Não pode ser usada quando a forma de cálculo selecionada é *Detailed*. Para essa forma de simulação, o usuário deve informar apenas alguma especificação térmica do equipamento, seja a temperatura da corrente quente, da corrente fria, a carga térmica do trocador.

The image shows a software dialog box titled 'Specifications' for the 'HeatX' model. At the top, 'Calculation mode' is set to 'Design'. Below this, the 'Exchanger specification' section is expanded, revealing several input fields: 'Specification' (a dropdown menu), 'Value' (a text input field), 'Exchanger area' (a text input field with a unit dropdown set to 'sqm'), 'Constant UA' (a text input field with a unit dropdown set to 'cal/sec-K'), and 'Minimum temperature approach' (a text input field set to '1' with a unit dropdown set to 'C').

Figura 94 - Caixa de diálogo para o input do modelo *HeatX*, aba *Specifications*, *Calculation mode Design*.

- **Rating:** o Aspen definirá se os dados fornecidos estão subestimados ou superestimados. Além de alguma especificação do trocador, o usuário deve informar o produto entre o coeficiente global de troca térmica (U) e a área de troca térmica do trocador.

The screenshot shows the 'HeatX Specifications' dialog box with 'Calculation mode' set to 'Rating'. Under 'Exchanger specification', the 'Specification' dropdown is empty. The 'Value' field is also empty. The 'Exchanger area' is set to 'sqm', 'Constant UA' is set to 'cal/sec-K', and 'Minimum temperature approach' is set to '1 C'.

Figura 95 - Caixa de diálogo para o input do modelo HeatX, aba Specifications, Calculation mode Rating.

- **Simulation:** com a informação do produto entre U e a área de troca térmica, o Aspen determinará todas as condições de saída das correntes.

The screenshot shows the 'HeatX Specifications' dialog box with 'Calculation mode' set to 'Simulation'. The 'Specification' dropdown is empty. The 'Value' field is also empty. The 'Exchanger area' is set to 'sqm', 'Constant UA' is set to 'cal/sec-K', and 'Minimum temperature approach' is set to '1 C'.

Figura 96 - Caixa de diálogo para o input do modelo HeatX, aba Specifications, Calculation mode Simulation.

- **Maximum fouling:** realiza cálculos para a simulação de máxima incrustação no trocador de calor. Esse método só é aplicável às formas rigorosas de cálculo, mais especificamente, só ao Shell&Tube. O usuário não precisa fornecer as especificações do trocador, mas pode escolher como ele é tratado: trocador de calor, refeedor do tipo kettle ou termosifão.

The screenshot shows the 'HeatX Specifications' dialog box with 'Calculation mode' set to 'Maximum fouling'. The 'Specification' dropdown is empty. The 'Value' field is also empty. The 'Exchanger area' is set to 'sqm', 'Constant UA' is set to 'cal/sec-K', and 'Minimum temperature approach' is set to '1 C'.

Figura 97 - Caixa de diálogo para o input do modelo HeatX, aba Specifications, Calculation mode Maximum fouling.

5. Exchanger specification

- **Specification:** fornecer algum dos valores disponíveis entre a temperatura de saída da corrente quente ou da fria, a fração de vapor na saída da corrente quente ou da fria, a diferença entre a temperatura quente de saída e a temperatura fria de entrada, graus de subresfriamento da corrente quente, entre outros. Na caixa *Value* abaixo, colocar o valor e sua unidade correspondente.
- **Exchanger area:** referente à área de troca térmica.
- **Constant UA:** produto entre o coeficiente global de transferência de calor e a área de troca térmica.

- *Minimum temperature approach*: geralmente já está preenchido com o valor de 1°C. Esta informação limita a menor diferença entre a temperatura da corrente quente na saída do trocador e a temperatura da corrente fria na entrada. Caso o usuário tente especificar que a temperatura da corrente quente na saída seja igual à temperatura da corrente fria na entrada, o Aspen acusará erro de cálculo. Portanto, esse campo não pode ser preenchido com o valor 0.

Em seguida, há a aba Streams, onde é possível especificar as fases das correntes de saída.

Figura 98- Caixa de diálogo para o input do HeatX, aba Streams.

A Figura 99 a seguir refere-se à segunda aba da caixa de diálogo do input do HeatX, a da diferença de temperatura média logarítmica.

Figura 99 - Caixa de diálogo para o input do modelo HeatX, aba LMTD.

Nessa janela, encontram-se:

1. *LMTD calculation option – LMTD correction factor method*: escolher uma das quatro opções para o método utilizado para determinar o fator de correção da diferença de temperatura média logarítmica. Podendo ser:
 - *Constant*: utiliza um valor constante para o fator de correção fornecido pelo usuário.
 - *Geometry*: calcula o fator de correção pela geometria do trocador de calor. Só é possível escolher essa opção com o tipo de cálculo *Detailed*, em que as informações de geometria são fornecidas pelo usuário.
 - *User-subr*: utiliza uma sub-rotina do usuário para o cálculo do fator de correção.
 - *Calculated*: calcula o fator de correção. Só é possível quando o método de cálculo for o *Shortcut* e o tipo de escoamento for de *multiple passes*. O usuário deverá fornecer um valor mínimo para o fator de correção, sendo esse um número entre 0,1 e 1.

2. *Shortcut LMTD* – a análise do intervalo da LMTD só é permitida para o método de cálculo *Shortcut*. Aqui o usuário deve fornecer um número mínimo de pontos de flash (entre 10 e 100), um número mínimo de intervalos entre pontos de flash (entre 10 e 1000) e um número máximo de trocadores de calor de passes múltiplos em série (entre 1 e 100).

A Figura 100 refere-se à terceira aba da caixa de diálogo do *input* do *HeatX*, a da perda de carga.

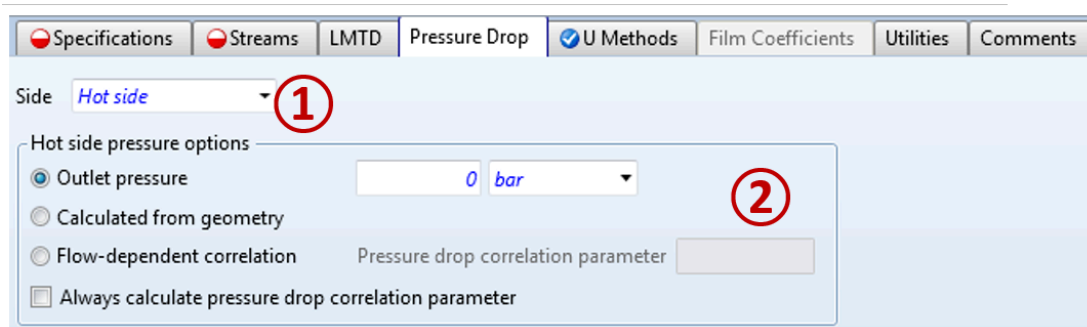


Figura 100- Caixa de diálogo para o *input* do modelo *HeatX*, aba *Pressure Drop*.

Nessa janela, encontram-se:

1. *Side* – escolher a corrente, quente ou fria, cujas informações sobre a perda de carga serão fornecidas.
2. *Hot/Cold side pressure options*:
 - *Outlet pressure*: pressão de saída ou perda de carga. Se o valor for maior que 0, refere-se à pressão de saída. Se o valor for menor ou igual a zero, refere-se à perda de carga.
 - *Calculated from geometry*: calcula a pressão de saída pela geometria. Essa opção só é possível quando o tipo de cálculo for o *Detailed*.
 - *Flow-dependent correlation*: utiliza uma correlação para a perda de carga dependente da vazão. Na caixa *Parameter*, ao lado, é necessário fornecer o parâmetro para a correlação da perda de carga.
3. Ao selecionar uma das duas últimas opções, uma nova caixa aparecerá chamada *Hot/Cold side options*. Nela, deve-se fornecer um valor de perda de carga máxima da corrente como uma fração em relação à pressão de entrada, referente à corrente escolhida no primeiro item, *Side*. Ainda, deve-se fornecer um fator de correção para o cálculo da perda de carga.

A Figura 101 refere-se à quarta aba da caixa de diálogo do *input* do *HeatX*, a dos métodos para o cálculo do coeficiente global de troca térmica.

Figura 101 - Caixa de diálogo para o input do modelo HeatX, aba U Methods.

Nessa janela, encontram-se:

1. *Selected calculation method* – selecionar um método para o cálculo do coeficiente global de transferência de calor (U), podendo ser:
 - *Constant U value*: o usuário define um valor para o U que será constante durante todo o trocador de calor.

Figura 102 - Caixa de diálogo para o input do modelo HeatX, aba U Methods, Selected calculation method Constant U value.

- *Phase specific values*: o usuário define valores separados de U para cada combinação de fases (líquido, vapor, condensação e ebulição) tanto para a corrente quente, quando para a fria. Uma nova caixa aparecerá ao lado para que o usuário preencha esses valores.

Selected calculation method

☐ Constant U value
0,0203019 cal/sec-sqcm-K

☒ Phase specific values

☐ Power law for flow rate

☐ Exchanger geometry

☐ Film coefficients

☐ User subroutine

Scaling factor

U correction factor: 1

Phase specific values

	Hot side	Cold side	U value
			cal/sec-sqcm-K
	Liquid	Liquid	0,0203019
	Liquid	Boiling	0,0203019
	Liquid	Vapor	0,0203019
	Condensing	Liquid	0,0203019
	Condensing	Boiling	0,0203019
	Condensing	Vapor	0,0203019
	Vapor	Liquid	0,0203019
	Vapor	Boiling	0,0203019
	Vapor	Vapor	0,0203019

Figura 103 - Caixa de diálogo para o input do modelo HeatX, aba U Methods, Selected calculation method Phase specific values.

- *Power law for flow rate*: essa é a opção que foi selecionada na Figura 103, acima. Nela, U será calculado pela relação empírica, chamada *Power law*. Ao clicar nessa opção, a caixa indicada pelo número 2 na Figura 103, aparece. Primeiramente, deve-se selecionar qual fluido será tomado como referência, podendo ser apenas a corrente quente, apenas a fria ou ambas. Após, escolher o tipo de vazão em *Flow basis* (mássica, molar ou volumétrica). Em *Reference flow* deve-se fornecer o valor da vazão do fluido de referência. Em seguida, no campo *U at reference*, fornecer o valor do coeficiente global de transferência de calor para o fluido de referência. E, por fim, definir o expoente da equação. A *Power law* corresponde à equação indicada pelo número 3, na Figura 103.
- *Exchanger geometry*: para escolher essa opção, o modo de cálculo *Detailed* deve ser selecionado. O HeatX calcula o U baseado na geometria do trocador de calor e nas propriedades das correntes para estimar os coeficientes de filme (coeficientes convectivos). Selecionando essa opção, é possível fornecer um valor para o fator de correção nos cálculos de U, na caixa *Scaling factor*, indicada pelo número 4, na Figura 103.
- *Film coefficients*: U é calculado utilizando os coeficientes de filme. Na aba *Film Coefficient*, o usuário pode escolher qualquer uma das opções para o cálculo dos coeficientes de filme, as quais serão melhor explicadas na Figura 104.
- *User subroutine*: o usuário fornece uma subrotina para o cálculo de U.

A Figura 108 refere-se à quinta aba da caixa de diálogo do input do HeatX, a dos métodos para o cálculo dos coeficientes convectivos. Essa janela só fica disponível quando for selecionado o método de cálculo *Detailed*.

Side: Hot stream

Hot stream film coefficient method

☒ Constant value: 0,0406038 cal/sec-sqcm-K

☐ Phase specific values

☐ Power law expression

☐ Calculate from geometry

Figura 104 - Caixa de diálogo para o input do modelo HeatX, aba Film Coefficients.

Nessa janela, encontram-se:

1. *Side* – escolher a corrente para o cálculo dos coeficientes de filme, quente ou fria.
2. *Hot/Cold stream film coefficient method* – escolher uma das quatro opções para o cálculo do coeficiente de filme, ou coeficiente convectivo (h).
 - *Constant value*: fornecer um valor para h, sendo esse constante para todo o trocador de calor.
 - *Phase specific values*: ao selecionar essa opção, a caixa *Hot/Cold stream phase specific values* aparece, onde deve-se fornecer diferentes valores de h para cada fase possível.
 - *Power law expression*: calcula h através de uma expressão empírica que toma como referência um valor de h conhecido para uma determinada vazão, e calcula um novo h para uma diferente vazão. Muito semelhante à equação *Power law* para o cálculo do coeficiente global de troca térmica (U).
 - *Calculate from geometry*: calcula o valor de h através da geometria. O usuário deve fornecer valores para o fator de incrustação e para o fator de correção para o cálculo de h.

A Figura 105 refere-se à sexta aba da caixa de diálogo do *input* do *HeatX*, a das utilidades.

Figura 105 - Caixa de diálogo para o *input* do modelo *HeatX*, aba *Utilities*.

Na aba *Utilities*, é possível criar correntes de utilidade para substituir a corrente fria ou a quente. Geralmente, isso é feito quando os dados dessa corrente não são tão importantes. Ao criar uma corrente de utilidade, uma nova aba irá aparecer no menu do lado esquerdo, chamada *Utilities*. Nela, serão feitas todas as especificações da corrente de utilidade, como o tipo de fluido, preço, opção de cálculo, dentre outras.

A última aba, *Comments*, é explicada conforme a Figura 106.

Figura 106 - Caixa de diálogo para o *input* do modelo *HeatX*, aba *Information*.

Aqui o usuário pode descrever ou fazer comentários referentes ao trocador de calor em questão.

Em caso de dúvidas o Aspen possui um imenso arquivo com detalhes e explicações de cada tipo de trocador de calor com, inclusive, as fórmulas e correlações utilizadas. Para acessar, basta teclar (F1). Quando o fizer, uma janela semelhante à da Figura 107 aparecerá.

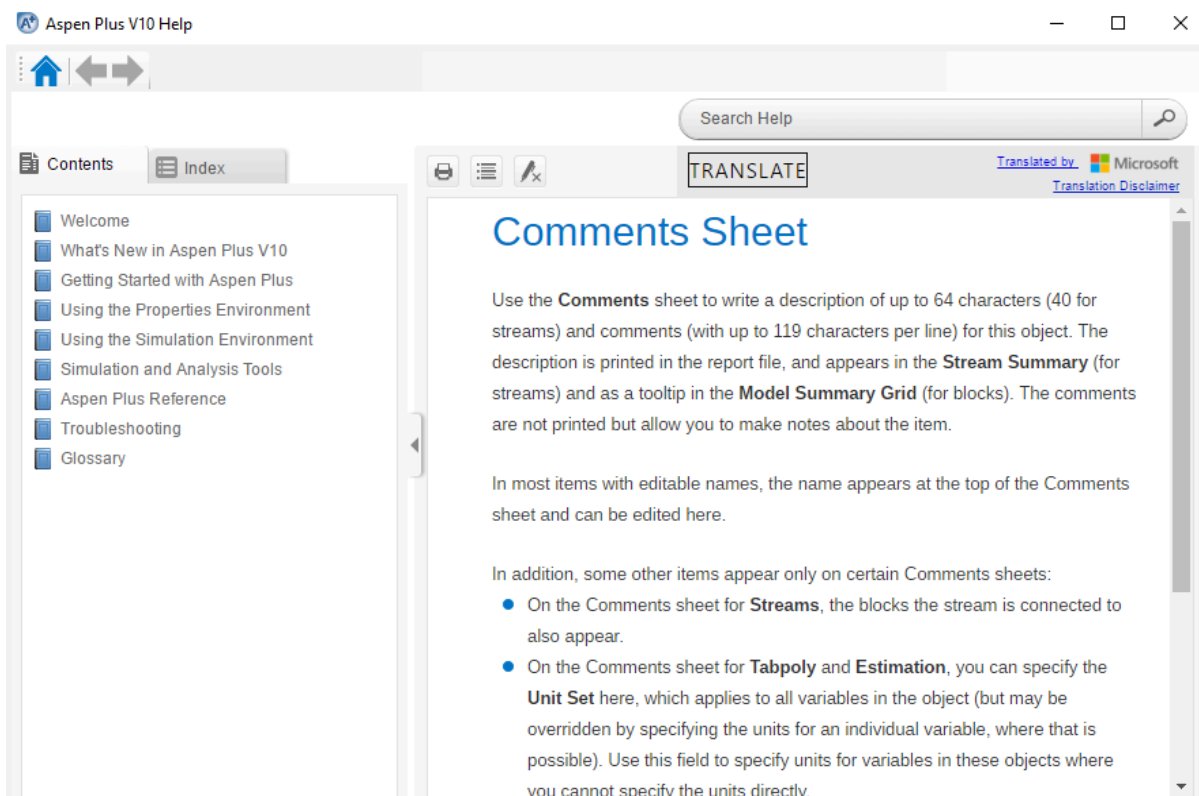


Figura 107 - Arquivo ajuda do Aspen.

3.5.5 HeatX versus Heater

Quando utilizar o modelo...	
<i>Heater</i>	<i>HeatX</i>
Modificar o estado termodinâmico de uma corrente (T, P)	Simular as condições de saída de duas correntes que trocam calor de acordo com as temperaturas de entrada, o U e alguma das temperaturas de saída, ou a área de troca térmica
Calcular o trabalho necessário para levar uma corrente à uma certa temperatura	Calcular a carga térmica do trocador de calor
Misturar duas ou mais correntes e determinar as condições de saída	Determinar a área de troca térmica do equipamento Avaliar o dimensionamento do trocador: porcentagem sub ou superestimada
Determinar pontos de bolha e de orvalho	Determinar a LMTD
Simula apenas um lado do trocador de calor	

Determinar a carga térmica necessária para atingir certa fração de vapor	Utilizar para uma abordagem mais aprofundada, quando souber informações detalhadas do trocador: número, comprimento e diâmetro dos tubos; quantidade de chicanas; informações sobre o casco e os bocais; etc
--	--

Tabela 14 - Aplicações de cada modelo de forma resumida.

Fluxograma de um processo utilizando quatro *Heaters* para compor dois trocadores de calor:

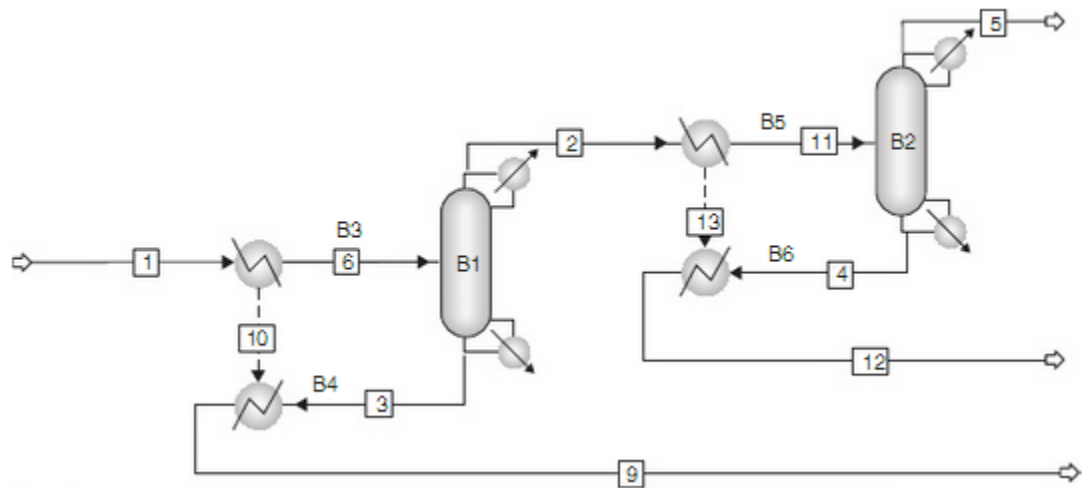


Figura 108 - Exemplo de fluxograma com *Heaters*.

Fluxograma do mesmo processo anterior, porém utilizando dois *HeatXs* como trocadores de calor:

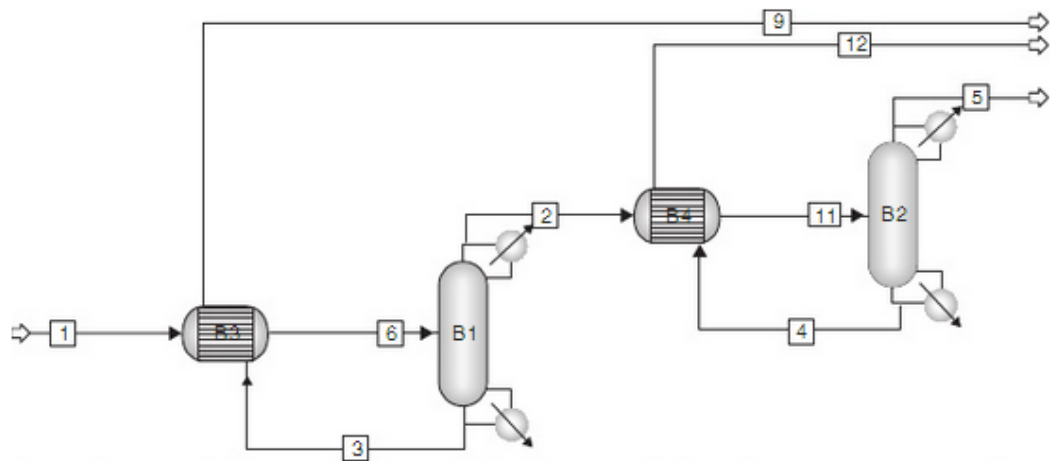


Figura 109 - Exemplo de fluxograma utilizando *HeatXs*.

3.6 EXERCÍCIOS CAPÍTULO 3

Exercício 3.1. Aquecimento de uma mistura equimolar

6000 kg/h de uma mistura binária de etanol e ácido acético é aquecida por uma reação de esterificação dos produtos a 101.3 kPa. A temperatura de formação dos produtos até 200°C e a pressão da corrente quente é de 115kPa. A temperatura inicial da mistura de etanol e ácido acético é de 20°C e a pressão dessa corrente é de 110kPa. A corrente quente contém 40% molar de acetato de etila, 40% molar de água, 10% molar de etanol e 10% molar de ácido acético.

a) Calcule a área de troca de calor necessária para aquecer a mistura binária a 80°C. Considere o coeficiente médio de transferência de calor $U=200\text{ W/m}^2\text{ K}$.

b) Calcular também a temperatura de saída da corrente quente.

Exercício 3.2. Mistura de correntes e pontos de bolha e orvalho

Uma corrente de n-butano a 90°C, uma corrente de n-pentano a 80°C e uma corrente de benzeno a 65°C são misturadas e trocam calor em um *Heater* produzindo uma corrente de produtos com as seguintes porcentagens molares: 40% de n-butano, 20% de n-pentano e 40% de benzeno. Tanto as pressões das correntes de entrada, quanto a pressão de operação do *Heater* são de 5bar. Utilize o *Methods Assistant* para determinar qual método melhor se aplica para esse caso.

- Qual é a temperatura da corrente de saída, considerando uma carga térmica de 500J/s?
- Qual é a temperatura de bolha para a composição da corrente de saída? E a temperatura de orvalho?
- Qual é a carga térmica do trocador de calor para que a corrente de saída atinja uma fração de vapor igual a 0,85?

Exercício 3.3. Trocador de calor cocorrente

Um trocador de calor com escoamento em configuração cocorrente e fluido quente escoando pelo casco possibilita a troca de calor entre acetona e éter. O fluido frio é acetona a 0°C e 10 bar, com vazão de 150 kmol/h. O fluido quente é éter etílico a 150 °C e 10 bar, com vazão de 50 kmol/h. Utilizando o modo *Simulation* para um bloco *HeatX*, sabendo que ele possui área total de troca (A) de 20 m² e que seu coeficiente global de troca térmica (U) é igual a 500 W/m²-K, determine:

- As temperaturas das correntes na saída do trocador de calor.
- Qual é a LMTD (diferença de temperatura média logarítmica)?

Exercício 3.4. Trocador de calor contracorrente

Agora, monte um trocador de calor com fluxo em contracorrente (fluido quente no casco) e use as mesmas vazões dos mesmos componentes nas mesmas condições do exercício anterior. Utilize $U = 500\text{ W/m}^2\text{ K}$ e o modo *Design*, com o objetivo de que a temperatura da corrente de acetona seja de 115°C na saída.

- Determine a carga térmica desse trocador de calor.
- Qual é a área total de troca térmica?
- Qual é a LMTD (diferença de temperatura média logarítmica)?
- Determine a temperatura da corrente de éter etílico na saída do trocador.

Exercício 3.5. Reaproveitamento de calor na produção de acetaldeído

Deseja-se avaliar a possibilidade de reaproveitamento do calor produzido em um reator de oxidação de etanol em um processo de produção de acetaldeído. Para isso, um engenheiro de projetos propôs que a unidade implantasse o uso de um trocador de calor para aquecer os reagentes do processo. O primeiro serve para evaporar etanol 70% (molar) e o segundo, para aquecer o ar, também alimentado ao reator. Neste reator, além da oxidação do etanol, ocorre uma reação secundária, a queima desse álcool. Determine a produção de acetaldeído, bem como o calor restante dos trocadores de calor, com base nas informações abaixo:

- Informações sobre o reator:
 - Oxidação: $C_2H_5OH + \frac{1}{2}O_2 \rightarrow CH_3CHO + H_2O$
 - Combustão: $C_2H_5OH + 3O_2 \rightarrow 2CO_2 + 3H_2O$
 - 80% do etanol alimentado serão consumidos, produzindo acetaldeído. Essa parcela representa 5 vezes aquela que é consumida na reação secundária.
 - Opera a 3,6 bar e os produtos, nessas condições, saem a 360°C.
 - Alimentações:
 - Etanol: 72 kmol/h (dos quais 70% são etanol e o restante, água), 25 °C e 1 atm.
 - Ar (79%v N₂, 21%v O₂): 300 kmol/h, 25 °C e 3,6 bar.
 - Trocadores de calor:
 - Pré-aquecedor de ar: sem mudança de pressão, elevação de temperatura para 240 °C.
 - Evaporador de etanol: elevação para 3,6 bar e de temperatura para 240 °C.
 - A carga térmica dos trocadores de calor deve ser fornecida através de correntes de calor (*Heatstreams*). Seguindo o proposto no enunciado, a primeira deve sair do reator e entrar no aquecedor de ar. Na saída deste trocador de calor, deve partir a segunda corrente de calor, para o evaporador de etanol. Deste, sai outra corrente de calor, da qual obteremos o resultado do calor restante.
- a) Qual é a carga térmica do reator nessas condições?
 - b) Qual é a quantidade de energia restante na corrente Q3?
 - c) Determine a vazão total da corrente de produtos. Qual é a quantidade de acetaldeído nessa corrente?
 - d) Qual é a emissão de CO₂ por hora dessa planta? E por ano?

3.7 GABARITO CAPÍTULO 3

Exercício 3.1

a) $T=126,6\text{ }^{\circ}\text{C}$

b) $A=10,4\text{m}^2$

Fluxograma proposto:

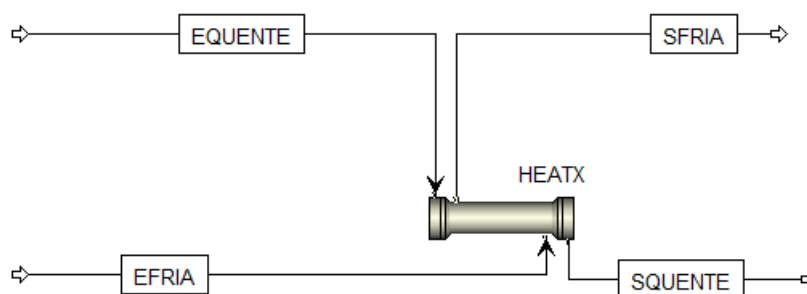


Figura 125 - Fluxograma proposto para o exercício 3.1.

Após montar o fluxograma, iremos em *Properties*, na página *Components* iremos definir os compostos do nosso processo, conforme a Figura xx.

Selection | Petroleum | Nonconventional | Enterprise Database | Comments

Select components

Component ID	Type	Component name	Alias
WATER	Conventional	WATER	H2O
ETHANOL	Conventional	ETHANOL	C2H6O-2
ETHYL	Conventional	ETHYL-ACETATE	C4H8O2-3
ACETIC	Conventional	ACETIC-ACID	C2H4O2-1

Find | Elec Wizard | SFE Assistant | User Defined | Reorder | Review

Figura 125 – Componentes do exercício 3.1.

Em seguida, clicando no botão *Next* iremos escolher o modelo termodinâmico mais adequado para o processo. Neste caso, iremos utilizar o modelo NRTL-HOC, no qual prevê dados de equilíbrio aplicando o modelo NRTL para cálculo dos coeficientes de atividade na fase líquida e a equação de estado de Hayden-O'Connell para a fase vapor.

The screenshot shows the 'Global' tab in Aspen Plus. The 'Method filter' is set to 'COMMON'. The 'Base method' is 'NRTL-HOC'. Under 'Petroleum calculation options', 'Free-water method' is 'STEAM-TA' and 'Water solubility' is '3'. Under 'Electrolyte calculation options', 'Chemistry ID' is empty and 'Use true components' is checked. On the right, the 'Method name' is 'NRTL-HOC'. The 'Modify' section includes: 'Vapor EOS' (ESHOC), 'Data set' (1), 'Liquid gamma' (GMRENON), 'Data set' (1), 'Liquid molar enthalpy' (HLMX80), 'Liquid molar volume' (VLMX01), 'Heat of mixing' (checked), 'Poynting correction' (checked), and 'Use liquid reference state enthalpy' (unchecked).

Figura 127 - Modelo termodinâmico para o exercício 3.1.

Ao clicarmos em *Next*, o Aspen nos mostrará os parâmetros referentes ao modelo NRTL-HOC para os componentes envolvidos. Clicando novamente em *Next*, escolhemos *Go to Simulation environment*. Com o *Next* novamente, vamos especificar as correntes do processo e as configurações do trocador de calor conforme as figuras a seguir:

The screenshot shows the 'Flash Options' tab. The 'Flash Type' is set to 'Temperature' and 'Pressure'. Under 'State variables', 'Temperature' is 20 C, 'Pressure' is 110 kPa, 'Vapor fraction' is empty, 'Total flow basis' is 'Mass', 'Total flow rate' is 6000 kg/hr, and 'Solvent' is empty. Under 'Reference Temperature', 'Volume flow reference temperature' is empty C and 'Component concentration reference temperature' is empty C. On the right, the 'Composition' is 'Mole-Frac'. A table lists components and their values:

Component	Value
WATER	
ETHANOL	0,5
ETHYL	
ACETIC	0,5

The 'Total' value is 1.

Figura 128 - Especificações da corrente fria para o exercício 3.1.

☒ Mixed
 ☐ CI Solid
 ☐ NC Solid
 ☐ Flash Options
 ☐ EO Options
 ☐ Costing
 ☐ Comments

Specifications

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables:

 Temperature: **C**

 Pressure: **kPa**

 Vapor fraction:

 Total flow basis: **Mass**

 Total flow rate: **kg/hr**

 Solvent:

Reference Temperature:

 Volume flow reference temperature: **C**

 Component concentration reference temperature: **C**

Composition: **Mole-Frac**

Component	Value
WATER	0,4
ETHANOL	0,1
ETHYL	0,4
ACETIC	0,1

Total:

Figura 128 - Especificações da corrente quente para o exercício 3.1

Em seguida, clicaremos em *Next* iremos para as especificações do trocador de calor. O modelo selecionado é o *Shortcut*, o arranjo do trocador de calor é contracorrente. No modo de cálculo selecionaremos *Rating*, especificando a corrente de saída do fluido mais frio.

☒ Specifications
 ☐ Streams
 ☐ LMTD
 ☒ Pressure Drop
 ☒ U Methods
 ☐ Film Coefficients
 ☐ Utilities
 ☐ Comments

Model fidelity

☒ Shortcut
 ☐ Detailed
 ☐ Shell & Tube
 ☐ Kettle Reboiler
 ☐ Thermosyphon
 ☐ Air Cooled
 ☐ Plate

Hot fluid

☐ Shell
 ☐ Tube

Shortcut flow direction

☒ Countercurrent
 ☐ Cocurrent
 ☐ Multipass, calculate number of shells
 ☐ Multipass, shells in series

Calculation mode: **Rating**

Exchanger specification:

 Specification: **Cold stream outlet temperature**

 Value: **C**

 Exchanger area: **sqm**

 Constant UA: **cal/sec-K**

 Minimum temperature approach: **C**

Reconcile

Size Exchanger
 Specify Geometry
 Results

Figura 128 - Especificações do trocador de calor para o exercício 3.1.

A pressão de saída do fluido quente também pode ser especificada na aba *Pressure Drop*.

Side: **Hot side**

Hot side pressure options

- ☒ Outlet pressure: **1,013 bar**
- ☐ Calculated from geometry
- ☐ Flow-dependent correlation: Pressure drop correlation parameter
- ☐ Always calculate pressure drop correlation parameter

Figura 128 - Especificações da corrente quente de saída para o exercício 3.1.

Por fim, é realizada a especificação do coeficiente global de transferência de calor em *U Methods*.

Selected calculation method

- ☒ Constant U value: **0,2 kW/sqm-K**
- ☐ Phase specific values
- ☐ Power law for flow rate
- ☐ Exchanger geometry
- ☐ Film coefficients
- ☐ User subroutine

Scaling factor

U correction factor:

Figura 128 - Especificações do coeficiente global de transferência de calor para o exercício 3.1.

Após isto, clicamos em *Next* e rodamos a simulação.

Para obter a temperatura de saída do fluido quente, vamos em *Thermal results – summary*, que encontra-se dentro do bloco do HEATX

Summary Balance Exchanger Details Pres Drop/Velocities Zones Utility Usage ☒ Status

Heatx results

Calculation Model

	Inlet		Outlet	
Hot stream:	EQUENTE		SQUENTE	
Temperature	200	C	126,563	C
Pressure	1,15	bar	1,013	bar
Vapor fraction	1		1	
1st liquid / Total liquid	1		1	
Cold stream	EFRIA		SFRIA	
Temperature	20	C	80	C
Pressure	1,1	bar	1,1	bar
Vapor fraction	0		0	
1st liquid / Total liquid	1		1	
Heat duty	55138,4		cal/sec	

Figura 128 – Resultados térmicos das correntes de alimentação e saída para o exercício 3.1.

Summary Balance Exchanger Details Pres Drop/Velocities Zones Utility Usage ☒ Status

Exchanger details

▶ Calculated heat duty	55138,4	cal/sec
▶ Required exchanger area	10,2014	sqm
▶ Actual exchanger area	10	sqm
▶ Percent over (under) design	-1,97388	
▶ Average U (Dirty)	0,00477692	cal/sec-sqcm-K
▶ Average U (Clean)		
▶ UA	487,311	cal/sec-K
▶ LMTD (Corrected)	113,148	C
▶ LMTD correction factor	1	
▶ Thermal effectiveness		
▶ Number of transfer units		
▶ Number of shells in series	1	
▶ Number of shells in parallel		

Figura 128 – Resultado da área necessária do trocador de calor para o exercício 3.1.

Exercício 3.1. Mistura de correntes - Pontos de bolha e orvalho

- a) $T = 84,5^{\circ}\text{C}$ ($U=500\text{J/s}$)
- b) $T_{\text{Bolha}} = 75,5^{\circ}\text{C}$ e $T_{\text{Orvalho}} = 111,3^{\circ}\text{C}$
- c) $Q = 457,324\text{kW}$

Fluxograma proposto:

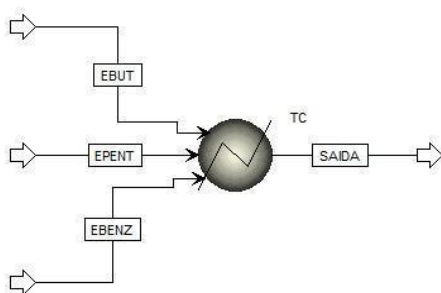


Figura 125 - Fluxograma proposto para o exercício 3.3.

Após montar o fluxograma, vamos clicar em *Next*, o que nos levará para a página *Components*, onde vamos definir os componentes utilizados no processo, conforme a Figura 198.

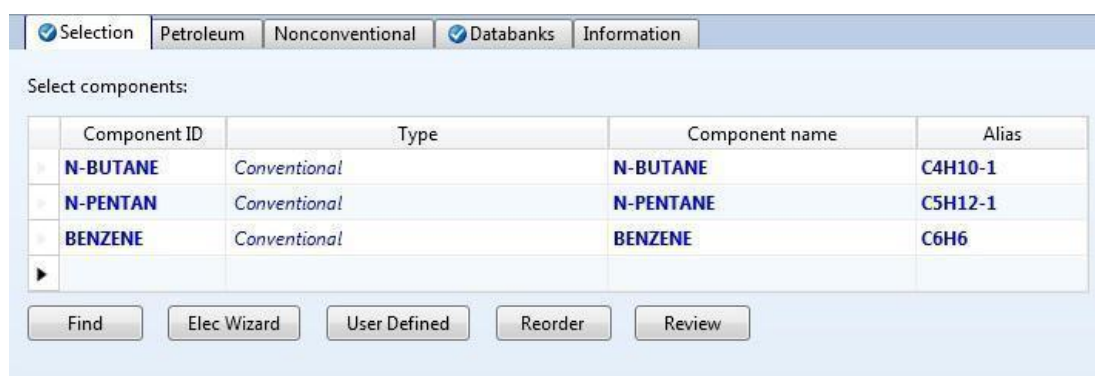


Figura 126- Definição dos componentes para o exercício 3.3.

Para localizar os componentes pode-se buscá-los pela sua fórmula molecular na coluna *Alias*, pelo seu nome na coluna *Component name*, ou ainda, caso não seja possível encontrá-lo por esses dois métodos, podemos clicar no botão *Find*, onde uma nova janela aparecerá com mais opções de busca.

Clicando novamente no botão *Next*, vamos escolher o modelo termodinâmico que será utilizado na simulação. Você pode escolher o modelo caso já saiba qual é o mais adequado aos seus componentes ou utilizar o *Methods assistant* para que o Aspen o ajude a encontrar o melhor modelo. Utilizando esse artifício, os métodos sugeridos foram NRTL, Wilson, UNIQUAC ou UNIFAC. Vamos utilizar o modelo NRTL, que é bom para predizer tanto equilíbrios entre líquido-líquido e líquido-vapor.

The screenshot shows the 'Global' tab in Aspen Plus. The 'Method filter' is set to 'COMMON', the 'Base method' is 'NRTL', and 'Henry components' is empty. Under 'Petroleum calculation options', 'Free-water method' is 'STEAM-TA' and 'Water solubility' is '3'. Under 'Electrolyte calculation options', 'Chemistry ID' is empty and 'Use true components' is checked. On the right, 'Method name' is 'NRTL'. The 'Modify' section shows 'Vapor EOS' as 'ESIG', 'Data set' as '1', 'Liquid gamma' as 'GMRENON', 'Data set' as '1', 'Liquid molar enthalpy' as 'HLMX86', and 'Liquid molar volume' as 'VLMX01'. Checkboxes for 'Heat of mixing' (checked), 'Poynting correction' (unchecked), and 'Use liquid reference state enthalpy' (unchecked) are also visible.

Figura 127 - Modelo termodinâmico para o exercício 3.3.

Ao clicarmos em *Next*, o Aspen nos mostrará os parâmetros referentes ao modelo NRTL para os componentes envolvidos. Clicando novamente em *Next*, escolhemos *Go to Simulation environment*. Com o *Next* novamente, vamos especificar as correntes do processo conforme a Figura 127, Figura 128 e a Figura 129.

The screenshot shows the 'Flash Options' tab for a 'Mixed' stream. 'Flash Type' is set to 'Temperature' and 'Pressure'. 'State variables' show 'Temperature' as 65 °C and 'Pressure' as 5 bar. 'Total flow basis' is 'Mole' and 'Total flow rate' is in kmol/hr. The 'Composition' section shows 'Mole-Flow' in kmol/hr. A table lists components: N-BUTANE, N-PENTAN, and BENZENE, with BENZENE having a value of 40. The total is 40.

Component	Value
N-BUTANE	
N-PENTAN	
BENZENE	40
Total:	40

Figura 128 - Especificações da corrente de Benzeno para o exercício 3.3.

The screenshot shows the 'Flash Options' tab for a 'Mixed' stream. 'Flash Type' is set to 'Temperature' and 'Pressure'. 'State variables' show 'Temperature' as 90 °C and 'Pressure' as 5 bar. 'Total flow basis' is 'Mole' and 'Total flow rate' is in kmol/hr. The 'Composition' section shows 'Mole-Flow' in kmol/hr. A table lists components: N-BUTANE, N-PENTAN, and BENZENE, with N-BUTANE having a value of 40. The total is 40.

Component	Value
N-BUTANE	40
N-PENTAN	
BENZENE	
Total:	40

Figura 129 - Especificações da corrente de Butano para o exercício 3.3.

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: **80** **C**

Pressure: **5** **bar**

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mole**

Total flow rate: **kmol/hr**

Solvent:

Composition

Mole-Flow **kmol/hr**

Component	Value
N-BUTANE	
N-PENTAN	20
BENZENE	

Total: **20**

Figura 130 - Especificações da corrente de Pentano para o exercício 3.3.

As informações sobre temperatura e pressão foram dadas no enunciado. As vazões de cada corrente foram feitas de acordo com a composição da corrente de saída, que foi dada no enunciado, com uma base molar de 100 kmol/h.

Clicando no botão *Next* novamente, o Aspen nos leva às especificações do *Heater*. Essas especificações também podem ser acessadas pela árvore *Blocks > TC > Input*.

Flash specifications

Flash Type: **Pressure**

Duty

Temperature: **C**

Temperature change: **C**

Degrees of superheating: **C**

Degrees of subcooling: **C**

Pressure: **5** **bar**

Duty: **500** **J/sec**

Vapor fraction:

Pressure drop correlation parameter:

Valid phases

Vapor-Liquid

Figura 131 - Especificações do Heater para a letra a) do exercício 3.3.

Sabe-se que a pressão de operação do equipamento será de 5 bar e a carga térmica (*Duty*) para a letra a) é de 500J/s. Feito isso, podemos clicar no botão *Next* e rodar a simulação.

O resultado da temperatura da corrente de saída pode ser obtido indo em *Results Summary – Streams*, onde uma tabela semelhante à da Figura 132 aparecerá.

Material	Heat	Load	Work	Vol.% Curves	Wt.% Curves	Petroleum	Polymers	Solids
Display: All streams	Format: GEN_M	Stream Table	Copy All					
	EBENZ	EBUT	EPENT	SAIDA				
Temperature C	65	90	80	84,5				
Pressure bar	5	5	5	5				
Vapor Frac	0	1	0	0,283				
Mole Flow kmol/hr	40	40	20	100				
Mass Flow kg/hr	3124,55	2324,94	1443,01	6892,49				
Volume Flow cum/hr	3,761	241,548	2,571	176,08				
Enthalpy Gcal/hr	0,524	-1,136	-0,776	-1,388				
Mole Flow kmol/hr								
N-BUTANE		40		40				
N-PENTAN			20	20				
BENZENE	40			40				

Figura 132- Resultados das temperaturas das correntes do exercício 3.3.

Assim, a temperatura da corrente de saída é de 84,5°C.

Na segunda questão, quer-se saber as temperaturas de bolha e orvalho para a composição da corrente de saída. Para isso, basta mudarmos as especificações do *Heater*, definindo pressão e, dessa vez, fração de vapor. Quando quisermos a temperatura de bolha a fração de vapor é 0 e, quando quisermos a temperatura de orvalho, é equivalente a 1.

Specifications
Flash Options
Utility
Information

Flash specifications

Flash Type:

Pressure

Vapor fraction

Temperature:

C

Temperature change:

C

Degrees of superheating:

C

Degrees of subcooling:

C

Pressure:

5

bar

Duty:

500

J/sec

Vapor fraction:

0

Pressure drop correlation parameter:

Valid phases

Vapor-Liquid

Figura 133 - Especificações do Heater para determinar a temperatura de bolha para o exercício 3.3.

Para obter o resultado, podemos ir novamente à temperatura da corrente de saída, pois ela terá fração de vapor igual a 0, sendo, portanto, o ponto de bolha do sistema.

Material

Heat

Load

Work

Vol.% Curves

Wt. % Curves

Petroleum

Polymers

Solids

Display: All streams

Format: GEN_M

Stream Table

Copy All

	EBENZ	EBUT	EPENT	SAIDA	
Temperature C	65	90	80	75,5	
Pressure bar	5	5	5	5	
Vapor Frac	0	1	0	0	
Mole Flow kmol/hr	40	40	20	100	
Mass Flow kg/hr	3124,55	2324,94	1443,01	6892,49	
Volume Flow cum/hr	3,761	241,548	2,571	10,739	
Enthalpy Gcal/hr	0,524	-1,136	-0,776	-1,561	
Mole Flow kmol/hr					
N-BUTANE		40		40	
N-PENTAN			20	20	
BENZENE	40			40	

Figura 134- Resultados das correntes do processo para o Ponto de Bolha do exercício 3.3.

Dessa forma, temos que a temperatura de bolha para a composição da corrente de saída será de 75,5°C.

O mesmo é feito no caso da temperatura de orvalho, porém com fração de vapor igual a 1.

Material

Heat

Load

Work

Vol.% Curves

Wt. % Curves

Petroleum

Polymers

Solids

Display: All streams

Format: GEN_M

Stream Table

Copy All

	EBENZ	EBUT	EPENT	SAIDA	
Temperature C	65	90	80	111,3	
Pressure bar	5	5	5	5	
Vapor Frac	0	1	0	1	
Mole Flow kmol/hr	40	40	20	100	
Mass Flow kg/hr	3124,55	2324,94	1443,01	6892,49	
Volume Flow cum/hr	3,761	241,548	2,571	639,298	
Enthalpy Gcal/hr	0,524	-1,136	-0,776	-0,887	
Mole Flow kmol/hr					
N-BUTANE		40		40	
N-PENTAN			20	20	
BENZENE	40			40	

Figura 135 - Resultados das correntes do processo para o Ponto de Orvalho do exercício 3.3.

Portanto, a temperatura de orvalho para composição da corrente de saída é de 111,3°C.

Na última questão queremos determinar a carga térmica necessária para que a corrente de saída possua uma fração de vapor de 0,85. Para isso, especificamos o *Heater* com *Vapor fraction* igual a 0,85, e a caixa de diálogo fica da seguinte maneira:

Specifications Flash Options Utility Information

Flash specifications

Flash Type: Pressure

Vapor fraction: Vapor fraction

Temperature: C

Temperature change: C

Degrees of superheating: C

Degrees of subcooling: C

Pressure: 5 bar

Duty: 500 J/sec

Vapor fraction: 0,85

Pressure drop correlation parameter:

Valid phases

Vapor-Liquid

Figura 136 - Especificações do Heater para a questão c) do exercício 3.3.

Clicando em *Next* e rodando a simulação temos que a carga necessária pode ser encontrada em *Results* associado ao TC, e será de 457,324kW.

Summary Balance Phase Equilibrium Utility Usage Status

Outlet temperature: 106,405 C

Outlet pressure: 5 bar

Vapor fraction: 0,85

Heat duty: 457,324 kW

Net duty: 457,324 kW

1st liquid / Total liquid: 1

Pressure-drop correlation parameter:

Figura 137 - Carga térmica necessária para atingir uma fração de vapor de 0,85 para o exercício 3.3.

Exercício 3.2. Trocador de calor cocorrente

a) $T_{2,fria} = 82,4^{\circ}\text{C}$ e $T_{2,quente} = 87,9^{\circ}\text{C}$

b) $\text{LMTD} = 43,82^{\circ}\text{C}$.

Fluxograma proposto :

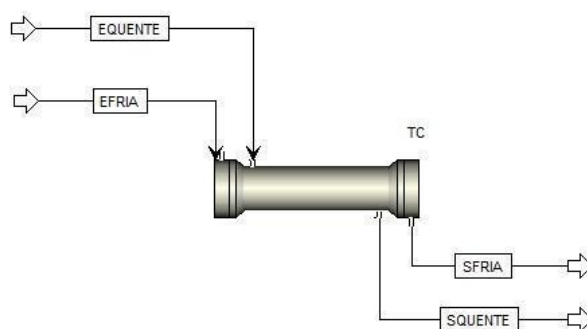


Figura 138 - Fluxograma proposto para o exercício 3.4.

Após montar o fluxograma utilizando um modelo TEMA tipo E (*HeatX > E-HT-1CO*), em configuração cocorrente, clicamos no botão *Next* o que nos leva para o *Components*, onde vamos definir os componentes envolvidos no processo, conforme a Figura 139.

Selection **Petroleum** Nonconventional **Databanks** Information

Select components:

Component ID	Type	Component name	Alias
ACETONE	Conventional	ACETONE	C3H6O-1
ETHER	Conventional	DIETHYL-ETHER	C4H10O-5

Find Elec Wizard User Defined Reorder Review

Figura 139 - Componentes envolvidos no exercício 3.4.

Clicando em *Next* novamente, vamos definir o modelo termodinâmico a ser utilizado nesta simulação. Você pode escolher o modelo caso já saiba qual é o mais adequado aos seus componentes ou utilizar o *Methods assistant* para que o Aspen o ajude a encontrar o melhor modelo. Utilizando esse artifício, os métodos sugeridos foram NRTL, Wilson, UNIQUAC ou UNIFAC. Vamos utilizar o modelo de Wilson.

Global Flowsheet Sections Referenced Information

Property methods & options

Method filter: COMMON

Base method: WILSON

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method: STEAM-TA

Water solubility: 3

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Method name: WILSON Methods assistant...

☐ Modify

Vapor EOS: ESIG

Data set: 1

Liquid gamma: GMWILSON

Data set: 1

Liquid molar enthalpy: HLMX85

Liquid molar volume: VLMX01

☒ Heat of mixing

☐ Poynting correction

☐ Use liquid reference state enthalpy

Figura 140 - Modelo termodinâmico utilizado no exercício 3.4.

Clicando em *Next* o Aspen nos mostrará os parâmetros utilizados pelo modelo de Wilson para os componentes em questão. Podemos clicar em *Next* novamente e, escolhendo *Go to Simulation environment*, clicamos em *Next* para especificar as correntes. Automaticamente, a primeira corrente a ser especificada é a corrente EFRIA, mas poderíamos começar a descrever a EQUENTE se quiséssemos, apenas alterando o *Input* na árvore para o *Input* correspondente a corrente que desejamos descrever.

Mixed CI Solid NC Solid Flash Options EO Options Costing Information

Flash Type: Temperature Pressure

State variables

Temperature: 0 C

Pressure: 10 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Mole

Total flow rate: 150 kmol/hr

Composition: Mole-Frac

Component	Value
ACETO-01	1
DIETH-01	

Total: 1

Figura 141 - Especificações da corrente fria para o exercício 3.4.

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: **150** **C**

Pressure: **10** **bar**

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mole**

Total flow rate: **kmol/hr**

Solvent:

Composition

Mole-Flow **kmol/hr**

Component	Value
ACETONE	
ETHER	50

Total: **50**

Figura 142 - Especificações da corrente quente para o exercício 3.4.

Clicando novamente no botão *Next* vamos especificar o equipamento utilizado, um trocador de calor de modelo *HeatX*. Não se esqueça de estabelecer U constante de $500\text{W/m}^2\cdot\text{K}$ na aba *U Methods*. A caixa de diálogo abaixo pode ter um design um pouco diferente a depender da versão do software, mas as entradas do usuário necessárias são possíveis de serem adicionadas normalmente.

Specifications Streams LMTD Pressure Drop **U Methods** Film Coefficients Utilities Information

Calculation

☒ Shortcut

☐ Detailed

☐ Rigorous

Size Shell&Tube

☐ Use Design Template File

Flow arrangement

Hot fluid:

Flow direction: **Co-current**

No. shells in series: **1**

☐ Calculate number of shells

Rigorous Model

☐ Shell&Tube

☐ AirCooled

☐ Plate

Transfer UA to shortcut

Type: **Simulation**

Exchanger type: **Heat exchanger**

Exchanger specification

Specification:

Value:

Exchanger area: **20** **sqm**

Constant UA: **cal/sec-K**

Minimum temperature approach: **1** **C**

Figura 143 - Especificações do HeatX juntamente com a aba U Methods para o exercício 3.4.

Aqui vamos utilizar o método de cálculo *Shortcut* que não leva em consideração a geometria do equipamento e utiliza o coeficiente global como um valor constante e estipulado pelo usuário. Vamos utilizar o modo *Simulation*, pois esse modo de simulação irá calcular as condições de saída tendo todas as informações de entrada, além da área de troca térmica e o coeficiente global de troca térmica.

Clicando em *Next* podemos rodar a simulação. Encontramos os resultados das temperaturas de saída indo em *Results Summary – Streams*.

Material Heat Load Work Vol.% Curves Wt. % Curves Petroleum Polymers Solids						
Display: All streams		Format: GEN_M		Stream Table		Copy All
	EFRIA	EUENTE	SFRIA	SQUENTE		
Temperature C	0	150	82,4	87,9		
Pressure bar	10	10	10	10		
Vapor Frac	0	1	0	0		
Mole Flow kmol/hr	150	50	150	50		
Mass Flow kg/hr	8712,01	3706,14	8712,01	3706,14		
Volume Flow cum/hr	10,662	175,91	12,155	5,914		
Enthalpy Gcal/hr	-8,95	-2,813	-8,574	-3,19		
Mole Flow kmol/hr						
ACETONE	150		150			
ETHER		50		50		

Figura 144 - Resultados das correntes do exercício 3.4.

Portanto, a temperatura de saída da corrente quente será de 87,9°C e a temperatura de saída da corrente fria será de 82,4°C.

Para determinar a LMTD (diferença de temperatura média logarítmica) vamos em resultados do *HeatX*, *Thermal Results* e *Exchanger Details*.

Summary	Balance	Exchanger Details	Pres Drop/Velocities	Zones	Utility Usage	Status
Exchanger details						
Calculated heat duty:	0,376625	Gcal/hr				
Required exchanger area:	19,9911	sqm				
Actual exchanger area:	20	sqm				
Percent over (under) design:	0,0443294					
Average U (Dirty):	429,923	kcal/hr-sqm-K				
Average U (Clean):						
UA:	2387,4	cal/sec-K				
▶ LMTD (Corrected):	43,8208681	C				
▶ LMTD correction factor:	1					
▶ Thermal effectiveness:						
▶ Number of transfer units:						
▶ Number of shells in series:	1					
▶ Number of shells in parallel:						

Figura 145 - Resultados referentes ao HeatX do exercício 3.4.

Exercício 3.3. Trocador de calor contracorrente

a) $Q = 0,555881 \text{ Gcal/hr}$

b) $A = 66,246 \text{ m}^2$

c) $\text{LMTD} = 19,5^\circ\text{C}$

d) $T = 9,5^\circ\text{C}$

Fluxograma proposto:

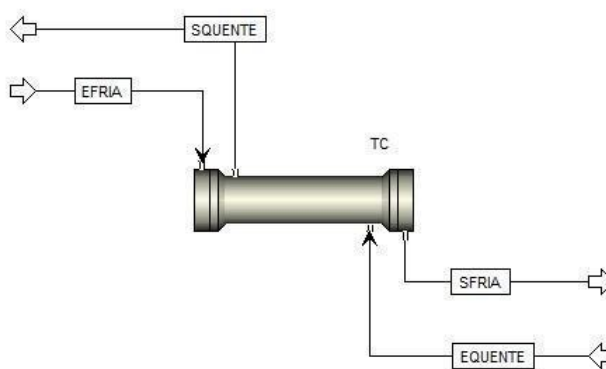


Figura 146 - Fluxograma proposto para o exercício 3.5.

Após montar o fluxograma utilizando um modelo TEMA tipo E e em configuração contracorrente, clicamos no botão Next o que nos leva para o *Components*, onde vamos definir os componentes envolvidos no processo.

Como o exercício 3.5. utiliza os mesmos componentes do exercício 3.4. e as mesmas correntes, as suas especificações são feitas de maneira análoga.

Feitas essas etapas, clicamos em *Next* e vamos especificar o nosso equipamento.

Figura 147 - Especificações do modelo HeatX para o exercício 3.5.

O valor da temperatura de saída da acetona foi dada no enunciado e utilizaremos o modo *Design* para determinar a área de troca térmica necessária para essa transferência de calor. Não se pode esquecer de definir o valor do coeficiente global de troca térmica na aba *U Methods*, que será de $500 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$.

Clicando em *Next* novamente, podemos rodar a simulação.

Os resultados referentes à carga térmica, área de troca térmica e LMTD podem ser encontrados indo em *Blocks – TC – Thermal Results – Exchanger Details*, conforme a Figura 148.

Summary	Balance	Exchanger Details	Pres Drop/Velocities	Zones	Utility Usage	Status
Exchanger details						
Calculated heat duty:	0,555881	Gcal/hr				
Required exchanger area:	66,246	sqm				
Actual exchanger area:	66,246	sqm				
Percent over (under) design:	0					
Average U (Dirty):	429,923	kcal/hr-sqm-K				
Average U (Clean):						
UA:	7911,29	cal/sec-K				
LMTD (Corrected):	19,5179	C				
LMTD correction factor:	1					
Thermal effectiveness:						
Number of transfer units:						
Number of shells in series:	1					
Number of shells in parallel:						

Figura 148 - Resultados do HeatX para o exercício 3.5.

Portanto, a carga térmica é de 0,555881 Gcal/hr, a área é de 66,246 m² e a LMTD é de 19,5 °C. Para encontrar o valor da temperatura de saída do éter, vamos em *Results Summary* e *Streams*, conforme a seguinte figura, onde esse valor equivale a 9,5 °C.

Material	Heat	Load	Work	Vol.% Curves	Wt. % Curves	Petroleum	Polymers	Solids
Display: All streams Format: GEN_M Stream Table Copy All								
	EFRIA	EQUENTE	SFRIA	SQUENTE				
Temperature C	0	150	115	9,5				
Pressure bar	10	10	10	10				
Vapor Frac	0	1	0	0				
Mole Flow kmol/hr	150	50	150	50				
Mass Flow kg/hr	8712,01	3706,14	8712,01	3706,14				
Volume Flow cum/hr	10,662	175,91	12,988	5,093				
Enthalpy Gcal/hr	-8,95	-2,813	-8,394	-3,369				
Mole Flow kmol/hr								
ACETONE	150		150					
ETHER		50		50				

Figura 149 - Resultados das correntes do exercício 3.5.

Exercício 3.4. Reaproveitamento de calor na produção de acetaldeído

- $Q = -4334,82 \text{ kW}$
- 2,28152854 Gcal/hr
- Vazão de produtos = 400,22 kmol/h. Vazão de acetaldeído = 40,32 kmol/h.

d) Emissão de $\text{CO}_2 = 709,79\text{kg/h}$ e 6 858,6 toneladas/ano.

Fluxograma proposto:

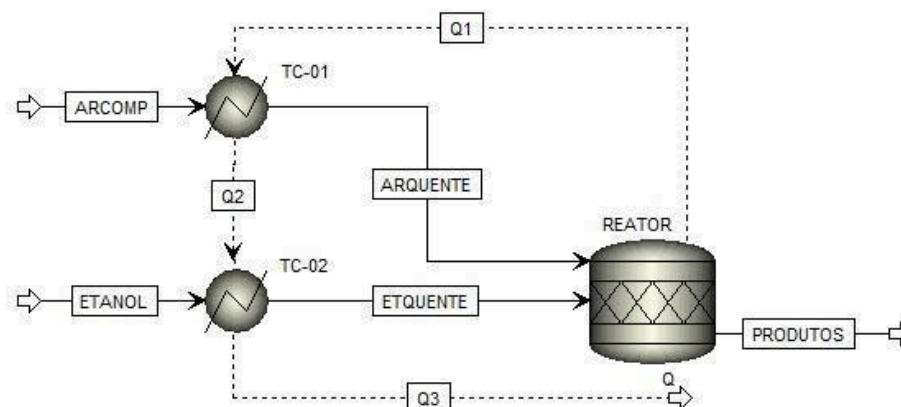


Figura 150 - Fluxograma proposto para o exercício 3.6.

Após montar o fluxograma, vamos clicar em Next o que nos levará para a página *Components*, onde vamos definir os componentes utilizados no processo, conforme a Figura 151.

Selection Petroleum Nonconventional Databanks Information

Select components:

Component ID	Type	Component name	Alias
ETHANOL	Conventional	ETHANOL	C2H6O-2
ACETALDE	Conventional	ACETALDEHYDE	C2H4O-1
OXYGEN	Conventional	OXYGEN	O2
NITROGEN	Conventional	NITROGEN	N2
WATER	Conventional	WATER	H2O
CARBONDI	Conventional	CARBON-DIOXIDE	CO2

Find Elec Wizard User Defined Reorder Review

Figura 151 - Componentes envolvidos no exercício 3.6.

Ao invés de colocarmos Ar como um componente, colocamos oxigênio e nitrogênio separados, pois o processo envolve reações em que o O_2 é um reagente.

Feito isso, clicamos no botão *Next* e vamos à escolha do modelo termodinâmico utilizado. Pode-se utilizar o *Methods Assistant* ou escolher um modelo que considere bom para o caso. Nesse exercício vamos utilizar o modelo *Wilson*, visto que essa planta não opera em altas pressões (>10bar).

Figura 152 - Modelo termodinâmico utilizado no exercício 3.6.

Podemos dar um Next e o Aspen nos mostrará os parâmetros envolvidos no modelo de Wilson para os componentes do processo. Clicando em Next novamente, escolhemos *Go to Simulation environment* e, clicando em Next, vamos definir as correntes de entrada: ArComp e Etanol, de acordo com a Figura 153 e a Figura 154.

Component	Value
ETHANOL	
ACETALDE	
OXYGEN	0,21
NITROGEN	0,79
WATER	
CARBONDI	
Total:	1

Figura 153 - Especificações de entrada da corrente de Ar comprimido para o exercício 3.6.

Faz-se de maneira análoga para o etanol, não esquecendo que trata-se de etanol 70% (0,3 água e 0,7 etanol nas frações molares). As condições de operação foram todas dadas no enunciado.

Component	Value
ETHANOL	0,7
ACETALD	
O2	
N2	
WATER	0,3
CO2	
Total:	1

Figura 154 - Especificações de entrada da corrente de etanol do exercício 3.6.

Clicando em *Next*, vamos agora definir as condições do Reator conforme as figuras abaixo:

Specifications Reactions Combustion Heat of Reaction Selectivity PSD Component Attr. Utility Information

Operating conditions

Flash Type: Temperature Pressure

Temperature: 360 C

Pressure: 3,6 bar

Duty: Gcal/hr

Vapor fraction:

Valid phases

Vapor-Liquid

Figura 155 - Especificações do reator temperatura e pressão do exercício 3.6.

A temperatura é de 360°C, considerando que a temperatura de saída dos componentes é a mesma que a de operação.

Agora vamos definir as reações envolvidas. Para inserir reações vamos na aba *Reactions*. Em seguida clicamos no botão *New* e, então, são colocados os componentes e seus coeficientes estequiométricos, bem como a conversão de um deles. No caso, a conversão dada foi a do etanol, que é de 80%.

Specifications Reactions Combustion Heat of Reaction Selectivity PSD Component Attr. Utility Information

Reactions

Rxn No. 1

Reactions occur

Edit Stoichiometry

Reaction No.: 1

Reactants

Component	Coefficient
ETHANOL	-1
OXYGEN	-0,5

Products

Component	Coefficient
ACETALDE	1
WATER	1

Products generation

☐ Molar extent: kmol/hr

☒ Fractional conversion: 0,8 of component ETHANOL

Close

Figura 156 - Especificações da reação de oxidação do exercício 3.6.

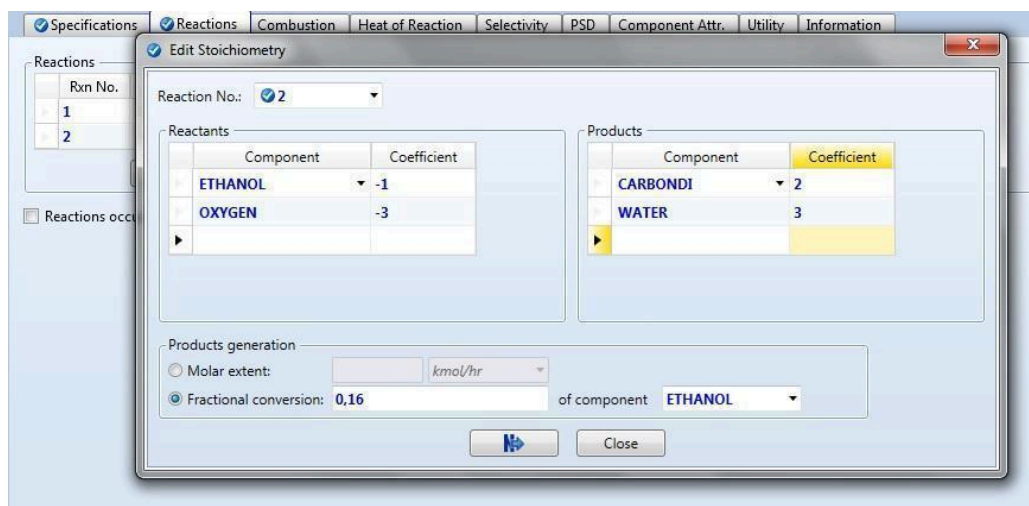


Figura 157 - Especificação para a reação de queima do etanol do exercício 3.6.

A conversão da reação 2 é igual a conversão da reação 1 dividida por 5, também de acordo com o enunciado, totalizando 0,16.

Vamos, então, definir as condições de operação dos trocadores de calor, conforme a Figura 230.

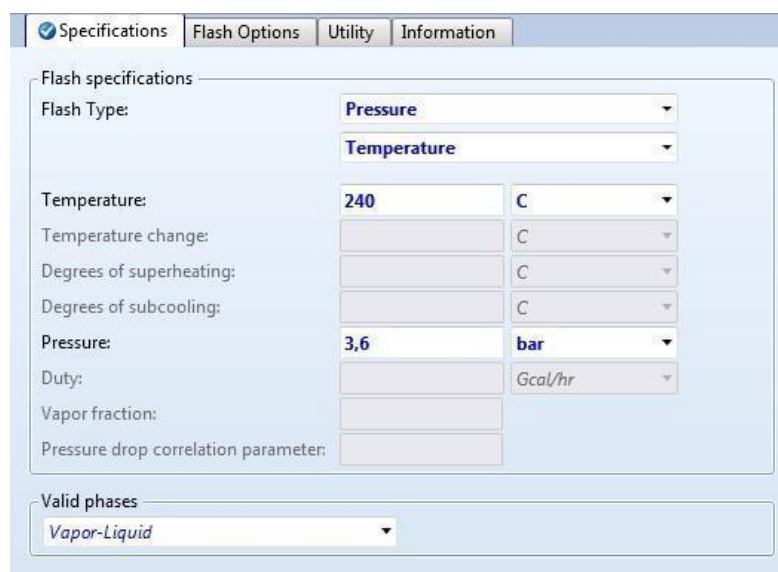


Figura 158 - Especificações para o TC-01 do exercício 3.6.

O TC-01 é o aquecedor do ar comprimido, e suas condições foram dadas no enunciado.

Analogamente, faz-se o mesmo para o trocador de calor TC02, evaporador de etanol. As condições de operação são as mesmas que as do TC01, conforme o enunciado.

Feitos todos os passos, podemos clicar no botão *Next* e rodar a simulação.

Para determinar a carga térmica do reator vamos em *Blocks – Reator - Results* e, então, uma tabela semelhante a da figura abaixo aparecerá.

Summary	Balance	Phase Equilibrium	Reactions	Selectivity	Utility Usage	Status
Outlet temperature:	360	C				
Outlet pressure:	3,6	bar				
Heat duty:	-4334,82	kW				
Net heat duty:	-4334,82	kW				
Vapor fraction:	1					
1st liquid / Total liquid:						

Figura 159 - Especificações para o TC-01 do exercício 3.6.

Portanto, a carga térmica do reator é de -4335kW. Para determinarmos a quantidade de energia restante na corrente de calor Q3, vamos em *Streams – Q3 – Results*, conforme a figura abaixo. O resultado foi de 2,3 Gcal/hr.

Heat		Status
Display:		Streams
	Q3	
QCALC Gcal/hr	2,28152854	
TBEGIN C	25,	
TEND C	240,	

Figura 160 - Resultado da corrente de calor Q3 do exercício 3.6.

A questão c) requer a determinação da composição da corrente de produtos. Para tal, vamos em *Streams – Produtos – Results*, conforme a seguinte figura. Sendo a vazão total equivalente a 400 kmol/h e a quantidade de acetaldeído nessa corrente é de 40,32 kmol/h.

Material	Vol.% Curves	Wt. % Curves	Petroleum	Polymers	Solids	Status
Display: Streams	Format: GEN_M	Stream Table				
		PRODUTOS				
▶ Temperature C	360					
▶ Pressure bar	3,6					
▶ Vapor Frac	1					
▶ Mole Flow kmol/hr	400,224					
▶ Mass Flow kg/hr	11366,1					
▶ Volume Flow cum/hr	5852,41					
▶ Enthalpy Gcal/hr	-7,098					
▶ Mole Flow kmol/hr						
▶ ETHANOL	2,016					
▶ ACETALDE	40,32					
▶ OXYGEN	18,648					
▶ NITROGEN	237					
▶ WATER	86,112					
▶ CARBONDI	16,128					

Figura 161 - Resultado da corrente de produtos do exercício 3.6.

Em seguida, quer-se saber a emissão de dióxido de carbono nessa planta por hora e por ano. Para isso, vamos em *Results Summary - CO2 Emissions*. O valor encontrado deve ser de, aproximadamente, 710 kg/h e de 6 860 toneladas por ano.

Summary		
Hierarchy:	PLANT	
Net stream CO2e:	709,79	kg/hr
Utility CO2e:	0	kg/hr
Total CO2e:	709,79	kg/hr
Net carbon fee / tax:	0	\$/hr

Figura 162 - Resultados quanto à emissão de CO2 pela planta do exercício 3.6.

CAPÍTULO 4

4 SEPARAÇÃO LÍQUIDO-LÍQUIDO E VAPOR-LÍQUIDO, ANÁLISE DE SENSIBILIDADE E OTIMIZAÇÃO

4.1 OBJETIVOS

O objetivo deste capítulo é apresentar os equipamentos de separação que envolvem o equilíbrio entre duas ou mais fases, como líquido-líquido, líquido-vapor e comentaremos sobre o cálculo líquido-líquido-vapor, deste modo revisaremos os conhecimentos adquiridos nas aulas anteriores.

Também estudaremos a otimização de processos e faremos uma análise de sensibilidade das variáveis envolvidas através de ferramentas que poderão ser aplicadas não só para estes equipamentos, mas para as operações estudadas nas demais aulas.

4.2 EQUILÍBRIO LÍQUIDO-LÍQUIDO

Um dos problemas mais recorrentes no campo da Engenharia Química é a separação de componentes em uma solução líquida. Considere uma solução diluída de duas substâncias, a qual deseja-se separar seus componentes com recuperação de cada um na sua forma praticamente pura. Existem várias técnicas disponíveis para a/o engenheira/o em que essa separação pode ser alcançada, das quais algumas são impraticáveis devido a certas propriedades físicas peculiares do sistema em questão. Devido à exigência de pureza dos materiais, as técnicas aplicadas são geralmente físicas em vez de químicas. Muitas delas dependem do equilíbrio de fases e da forma como a substância se distribui entre duas fases mutuamente insolúveis. (TREYBAL, 1951)

Um dos métodos mais empregados é a destilação, que iremos abordar mais a frente, onde a diferença de volatilidade entre os componentes permite uma separação por meio da evaporação de parte da mistura, porém este método exige um grande gasto de energia, e pode ser dificultado por pontos de azeotropia ou pela fragilidade de um ou mais componentes.

No caso da existência de azeótropos, pode ser usada a destilação azeotrópica ou a destilação extrativa. No caso da azeotrópica, um terceiro componente é adicionado à mistura original, que formará com um dos componentes da mistura um azeótropo que pode ser facilmente separado da solução, o que deve ser feito por outros métodos. A extrativa envolve a adição de um terceiro componente relativamente não volátil, o que aumenta o grau de separação da destilação dos componentes originais e pode ser facilmente separada da mistura. (TREYBAL, 1951)

Entre outras técnicas, também temos a extração líquida, que pode ser conduzida de diversas formas, mas todas envolvem a distribuição da substância entre duas fases líquidas mutuamente insolúveis. A solução original pode ser lavada por um segundo líquido, imiscível no solvente da solução original e que preferencialmente dissolva o soluto. A solução original pode ser resfriada ou aquecida, a fim de formar duas fases líquidas, onde as concentrações do soluto em cada fase serão diferentes. O resfriamento ou aquecimento pode ser feito após a adição de um terceiro líquido. Nas mais complexas dessas operações, dois líquidos mutuamente imiscíveis são adicionados à solução original, os quais dissolvem preferencialmente componentes diferentes da original, operação denominada extração fracionada. Em outras ocasiões, também pode ocorrer simultaneamente uma reação química e uma extração líquida, sendo essa técnica chamada extração reativa. (TREYBAL, 1951)

4.2.1 Decantadores

Para realizar o cálculo de extração líquido-líquido vamos até a aba dos equipamentos Separators, onde encontramos o bloco Decanter, este bloco possui as opções: BLOCK, H-DRUM e V-DRUM, que representam respectivamente um tanque de decantação genérico, um tanque horizontal e outro vertical. Do ponto de vista termodinâmico não existe uma diferença entre estes blocos e o resultado obtido pelos três deve ser o mesmo, a diferença encontrasse apenas na estética do fluxograma podendo facilitar uma identificação do equipamento.

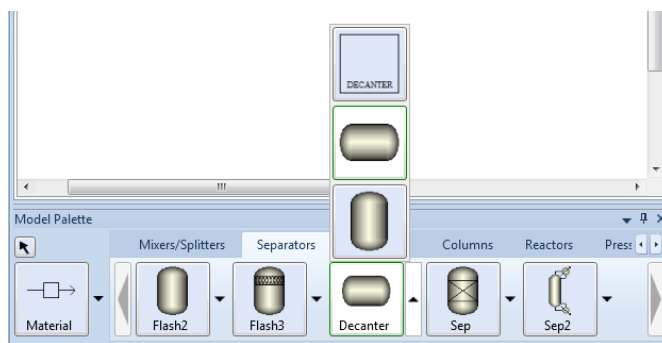


Figura 114 - Bloco Decanter.

Neste bloco existe apenas uma etapa de separação, onde as duas fases atingem um equilíbrio termodinâmico e são separados nas duas correntes obrigatórias, podemos perceber que existe apenas uma corrente de entrada obrigatória, deste modo ela pode conter as duas fases que entram no equipamento, ou podemos misturar mais de uma corrente utilizando as entradas opcionais.

Ao trabalharmos com este bloco será pedida a temperatura e pressão do equipamento, pois o estado de equilíbrio é dado por estas duas variáveis mais a concentração global, de modo a satisfazer os graus de liberdade do sistema, como a corrente de entrada define as composições, resta informar a temperatura e pressão do equipamento, como vemos na Figura 115.

 The image shows the 'Specifications' tab of the Decanter specifications dialog box. It includes fields for 'Pressure' (set to 'bar'), 'Temperature' (set to 'C'), and 'Duty' (set to 'cal/sec'). There is a section for 'Key components to identify 2nd liquid phase' with 'Available components' and 'Key components' lists, and a 'Key component threshold for 2nd liquid phase' section with a 'Component mole fraction' field.

Figura 115 - Dados de entrada para o bloco decanter.

Podemos também operar de maneira adiabática o decantador, informando a troca térmica da operação, marcando a opção *Duty*.

Também devemos fornecer os componentes chave das duas fases, passando os componentes mais ricos de cada fase do campo Available components para *Key components*.

Ao se trabalhar com o equilíbrio de fases utilizaremos o conceito de isofugacidade ou minimização da energia livre de Gibbs do sistema, mas em ambos os casos estaremos admitindo que o sistema alcança o equilíbrio, o que pode não ocorrer na prática pois este equilíbrio pode exigir um tempo muito longo, deste modo podemos alterar a eficiência do equipamento para simular um processo mais realista, para isso, utilizamos a aba *Efficiency* do *Decanter*, que pode ser visto na parte superior da Figura 115, ou expandido na Figura 116.

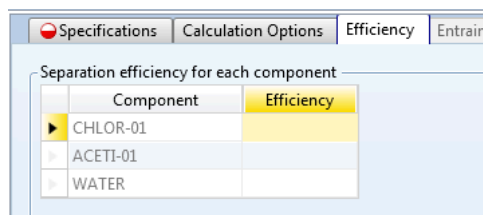


Figura 116 - Especificações da eficiência.

A eficiência só pode ser especificada quando o método utilizado calcula o coeficiente de partição, ou seja, quando o equilíbrio é encontrado através da fugacidade das fases e não da energia livre de Gibbs, podemos notar também que a eficiência é dada para um certo composto, para entender isso podemos observar a equação utilizada pelo Aspen para calcular o equilíbrio:

$$\frac{x_{2i}}{x_{1i}} = E_i K_i \quad (4.1)$$

Onde x representa a concentração do componente i na fase do sub índice, K_i é o coeficiente de partição do componente i e E_i é a eficiência de separação, que caso não especificado é igual a 1.

4.2.2 Extração em múltiplas fases

Se abrirmos a aba Columns iremos encontrar entre as opções o bloco Extract, que é um modelo rigoroso para a simulação de colunas de extração. Ele calcula o coeficiente de partição líquido-líquido da mesma forma que o bloco *Decanter*.

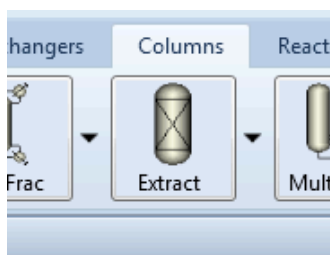


Figura 117 - Bloco Extract .

A diferença entre este bloco e o decantador é que agora utilizaremos múltiplas fases de separação para aumentar a eficiência da separação, se selecionarmos este bloco teremos uma interface como a imagem 118 onde são especificadas as condições de operação do equipamento.

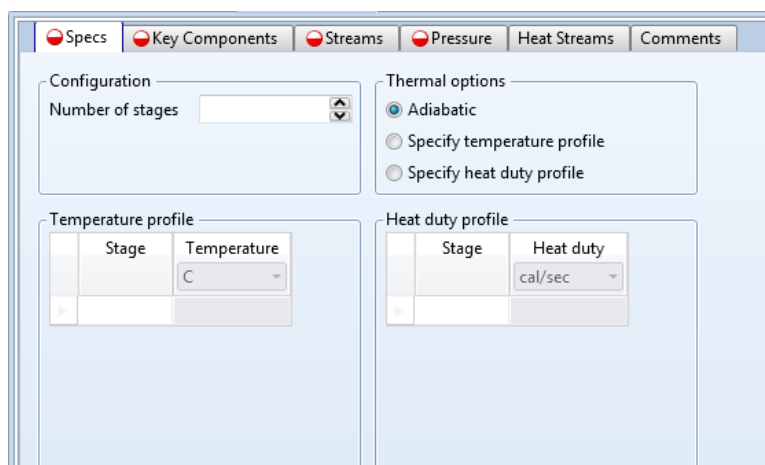


Figura 118 - Especificação de um bloco tipo *Extract* no Aspen Plus.

No campo Configuration entramos com o número de estágios da coluna, no campo Thermal options podemos escolher a maneira como a coluna opera, adiabaticamente, com a especificação do perfil de temperatura ou a do perfil da carga térmica, que serão ou não informados nos dois campos logo abaixo, dependendo da opção selecionada para a operação.

Além disso, na aba *Key Components*, deve-se definir os componentes-chave de cada fase líquida. Na aba *Pressure*, deve-se informar pelo menos a pressão em um dos estágios. E, dentro da pasta de trabalho do bloco, em *Estimates*, deve-se pelo menos estimar a temperatura para um dos estágios.



Figura 119 - Extração líquido-líquido na indústria. (a) Coluna de extração. (b) Recheio estruturado muito usado em colunas.

4.3 EQUILÍBRIO LÍQUIDO-VAPOR

4.3.1 Destilação

O principal objetivo da destilação é a separação de componentes que possuem diferentes volatilidades em uma dada temperatura. A palavra “destilação” se refere à separação física de uma mistura em duas ou mais frações que possuem diferentes pontos de ebulição. Se uma mistura líquida de dois materiais voláteis é aquecida, o vapor gerado terá maior concentração do material de menor ponto de ebulição que o líquido de onde foi gerado. Analogamente, se um vapor é resfriado, o material com maior temperatura de ebulição possui a tendência de condensar em maior proporção que o material mais volátil (HOLLAND, 1981).

As primeiras destiladoras de álcool aplicavam esses princípios fundamentais. Mesmo que a operação fosse conhecida e praticada na antiguidade e comercialmente desenvolvida por Coffey em 1832, a teoria dessa operação unitária não foi estudada até o trabalho de Sorel em 1893. Com a tecnologia atual é possível a separação em larga escala por destilação de componentes com temperaturas de ebulição muito próximas, como a de etilbenzeno e p-xileno, que possuem diferença de temperatura de ebulição de apenas 3,9°F (HOLLAND, 1981).

Para obter uma separação superior a executada em um tanque Flash, múltiplos estágios podem ser usados, atingindo um maior grau de pureza do componente desejado. Isso é análogo a uma coluna de destilação. A sua simulação não é tão simples, e o Aspen Plus® traz opções de blocos que realizam cálculos rigorosos, mas que requerem estimativas iniciais para executá-los. Assim, limitar-nos-emos somente ao método Shortcut, o *DSTWU*.

O modelo utilizado pelo *DSTWU* se apoia em duas hipóteses:

1. Sobrefluxo equimolar: ocorre quando o calor de vaporização molar da fase líquida é essencialmente igual ao da fase vapor, isto é, o calor necessário para vaporizar um mol do líquido é praticamente o mesmo liberado quando um mol de vapor é condensado. Consequentemente, qualquer condensação em um estágio é balanceada pela vaporização e as vazões ao longo da coluna são alteradas somente pelas vazões de alimentação ou de produto. (PRICE, 2008)
2. Volatilidades relativas constantes: a volatilidade relativa (α_{ij}) é a razão entre os coeficientes de partição de dois componentes i e j . Com essa hipótese, sua expressão pode ser manipulada para se plotar uma curva de equilíbrio, mostrada na Equação 4.2. (PRICE, 2008)

$$y_i = \frac{x_i \alpha_{ij}}{1 + x_i (\alpha_{ij} - 1)} \quad (4.2)$$

A Figura 120 mostra a janela de especificação de um bloco *DSTWU*.

Figura 120 - Especificação de um bloco tipo *DSTWU* no Aspen Plus.

1. *Especificações da coluna de destilação*: escolhendo o número de estágios, o Aspen determinará a razão de refluxo requerida para a operação. Escolhendo uma razão de refluxo, o Aspen determinará o número mínimo de estágios teóricos para a destiladora.
2. *Recuperação dos componentes-chave*: refere-se à fração da quantidade alimentada daquele componente que é recuperada no topo da destiladora.
3. *Pressão*: especificar a pressão de operação do condensador de topo e do refeedor da coluna. Obrigatoriamente, esses valores devem ser iguais.
4. Especificações do condensador de topo: condensador total ou parcial.
5. **ATENÇÃO**: os componentes-chave são aqueles que determinarão como funcionará a operação da coluna destiladora. Recomenda-se colocar todos os componentes da carga em ordem decrescente de volatilidade para que a escolha do componente-chave leve (LK) e do componente-chave pesado (HK) faça sentido. Essa escolha é fundamental, pois determinará o número de estágios, a razão de refluxo e a distribuição dos componentes da coluna, da seguinte forma:
 - Os componentes-chave deverão estar obrigatoriamente distribuídos na coluna, ou seja, jamais será possível recuperar 100% de um LK ou não obter no topo concentrações de HK;
 - Os componentes mais voláteis que o componente-chave leve escolhido serão completamente recuperados no topo ou, dependendo da diferença de volatilidade em relação ao LK, estarão em baixíssima quantidade no fundo;
 - Da mesma forma, os componentes mais pesados que o componente-chave pesado estarão completamente presentes no fundo ou uma pequena quantidade será arrastada no vapor, também de acordo com a diferença de volatilidade entre o HK e os componentes mais pesados;

A conclusão que se tira disso é que se, por exemplo, tivermos três componentes A, B e C em ordem decrescente de volatilidade, ao escolhermos o componente A como LK e o componente B como HK, se tiverem ponto de ebulição próximo, a coluna deverá ter um grande número de estágios e C deverá sair em alta quantidade no fundo ou completamente recuperado nessa corrente. Escolhendo A e C como LK e HK, respectivamente, teremos todos os componentes distribuídos na coluna e o número de estágios necessários será menor em comparação ao caso anterior. Assim, se o nosso processo deseja a purificação de A, devemos escolher B e C como LK e HK para que, dessa forma, tenhamos no produto de topo somente A e B ou principalmente esses componentes.

As equações e modelos utilizados pelo bloco *DSTWU* são:

- Winn – para estimar o mínimo número de estágios e o melhor local para alimentação em refluxo;
- Underwood – para estimar a mínima razão de refluxo;
- Gilliland – para estimar a razão de refluxo requerida e o melhor local para a alimentação para o número de estágios especificado, ou o número de estágios requeridos e a melhor posição para a alimentação para a razão de refluxo especificada.

A correlação de Gilliland pode ser obtida na sua forma analítica pela Equação 4.2 e o gráfico da correlação na Figura 121 (SCHEFFLAN, 2011)

$$\frac{N-N_{min}}{N+1} = 1 - \exp\left(\frac{1+54,4X}{11+117,2X} \times \frac{X-1}{\sqrt{X}}\right) \quad (4.3)$$

$$X = \frac{R-R_{min}}{R+1} \quad (4.4)$$

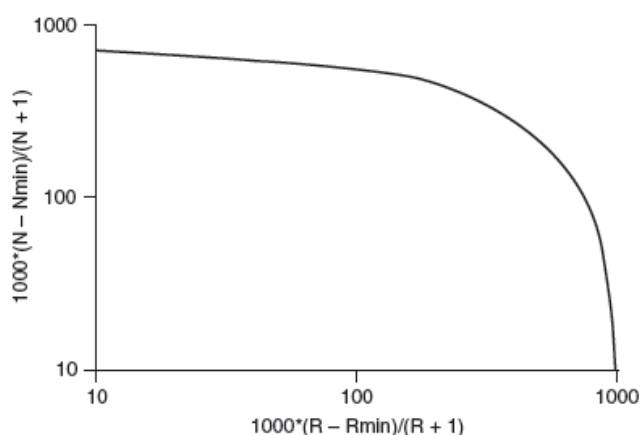


Figura 121 - Correlação de Gilliland. (SCHEFFLAN, 2011)

A mínima razão de refluxo, obtida pelo método de Underwood, aplicável a sistemas binários ou multicomponentes. Neste caso, os componentes chave leve e chave pesada devem ser definidos para encontrar as raízes da Equação 4.3 (SCHEFFLAN, 2011).

$$\sum_i \frac{\alpha_i z_i}{\alpha_i - \theta} = 1 - q \quad (4.5)$$

Na equação, α_i é a volatilidade relativa do componente i , z_i é a fração molar do componente i na alimentação, q é o estado térmico da alimentação, obtido pelo método de McCabe-Thiele e θ é uma raiz da equação. Para o cálculo da mínima razão de refluxo, θ deve ser substituído na Equação 4.4 (SCHEFFLAN, 2011).

$$R_{min} + 1 = \sum_i \frac{\alpha_i x_i^D}{\alpha_i - \theta} \quad (4.6)$$

O mínimo número de estágios é calculado pela equação de Winn (1958), que é uma melhoria da equação de Fenske (1932), como mostra a Equação 4.7. As constantes β_{LK}/HK e θ_{LK} são calculadas com pressão fixada e avaliadas pelos valores de K para os componentes chave-leve e chave-pesada na temperatura de topo e na temperatura de fundo. As constantes se relacionam pela Equação 4.8. (ASPENTECH, 2013)

$$N_{min} = \frac{\ln \left[\frac{x_{LK,D}}{x_{LK,B}} \left(\frac{x_{HK,B}}{x_{HK,D}} \right)^{\theta_{LK}} \right]}{\ln \beta_{LK/HK}} \quad (4.7)$$

$$\beta_{LK/HK} = \frac{K_{LK}}{(K_{HK})^{\theta_{LK}}} \quad (4.8)$$

Em que B e D se referem ao fundo (Botton) e ao topo (distilled) da destiladora, respectivamente. LK e HK se referem ao componente chave-leve e ao chave-pesada, respectivamente e x é a fração molar no líquido.



Figura 122 - Colunas de destilação em uma refinaria de petróleo.

4.3.2 Absorção e dessorção

Absorção de gases é uma operação na qual uma mistura gasosa é submetida ao contato com um líquido com o propósito de dissolver preferencialmente um ou mais componentes dessa mistura e obter uma solução deles no líquido. Por exemplo, o gás do subproduto de fornos de coque é lavado com água para remover amônia e novamente com um óleo para remover vapores de benzeno e tolueno. Gás sulfídrico é também removido desta forma ou de hidrocarbonetos gasosos pela lavagem com várias soluções alcalinas nas quais é absorvido. Vapores de solventes valiosos carregados por uma corrente gasosa podem ser recuperados para serem novamente utilizados no processo pela lavagem dos gases com um solvente apropriado. (TREYBAL, 1951)

Tais operações requerem a transferência de massa da substância da corrente gasosa para o líquido. Quando a transferência de massa ocorre inversamente, por exemplo, do líquido para o gás, a operação é chamada dessorção ou stripping. Por exemplo, benzeno e tolueno são removidos do óleo absorvente mencionado anteriormente pelo contato da solução líquida com vapor d'água, onde os vapores entram na corrente gasosa e são carregados e o óleo pode novamente ser usado. Isso mostra que a absorção e a dessorção se baseiam no mesmo princípio. Geralmente, essas operações são usadas somente para recuperação ou remoção de soluto. A separação de solutos uns dos outros a uma extensão satisfatória requer técnicas de fracionamento como a destilação. (TREYBAL, 1951)

Neste curso, veremos apenas exemplos de absorção. No Aspen Plus®, colunas de absorção podem ser simuladas pelo bloco *RadFrac*. Esse é um bloco com diferentes utilidades além da simulação de absorvedoras. É possível simular com ele colunas de destilação rigorosamente, colunas de esgotamento ou *stripping* e colunas de retificação, por exemplo. Por isso, o programa traz diferentes ilustrações que podem representar a operação unitária desejada no fluxograma do processo, como mostra a Figura 123.

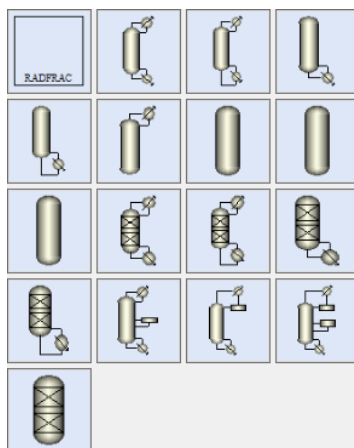


Figura 123 - Ilustrações do bloco *RadFrac*.

Na janela de especificação do bloco *RadFrac*, temos três abas que devem ser preenchidas, conforme a Figura 124.

Figura 124 - Janela de especificação do bloco *RadFrac*, aba *Configuration*.

Na aba *Configuration*, escolhemos as principais informações sobre a coluna, como o número de estágios e a presença ou não de um condensador no topo ou um refeedor no fundo da coluna. Com absorvedoras, trabalharemos sem condensador ou refeedor. Assim, ao especificar um bloco para esse tipo de simulação, bastará definir o número de estágios da coluna.

Na aba *Stream*, deve ser escolhido o estágio em que as correntes são alimentadas e retiradas na coluna de acordo com o processo. Sendo este bloco utilizado para cálculos rigorosos de colunas, é possível definir várias alimentações ao longo da coluna e, também, várias retiradas laterais.

Na aba *Pressure* (Figura 125), você deve fornecer informações sobre a pressão da coluna. Quando especificar a pressão no modo *Top/Bottom*, você deve informar pelo menos a pressão no primeiro estágio (topo ou condensador). É opcional atribuir uma pressão para o segundo estágio, assim como a perda de carga da coluna. Outras opções envolvem especificar um perfil de pressões (*Pressure profile*) ou a perda de carga para cada seção da coluna, isto é, um intervalo de número de estágios, após definir a pressão no primeiro (*Section pressure drop*).

Figura 125 - Janela de especificação do bloco *RadFrac*, aba *Pressure*.

4.4 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

A análise de sensibilidade tem como objetivo avaliar o efeito de uma determinada variável (ou mais) sobre o valor total de uma função. Isso é bastante útil para identificar variáveis críticas no processo, cuja mudança traz impactos significativos sobre o seu desempenho. Como será visto no estudo de Otimização e no uso de Especificações de Projeto, a Análise de Sensibilidade no Aspen Plus® permite o uso de programação em Fortran para que seja feita. A seguir, observaremos os passos necessários para construir uma análise de sensibilidade. Para entender melhor como o Aspen trabalha com variáveis e sentenças em Fortran, leia o Apêndice C.

4.4.1 Escolha das variáveis cujo efeito será calculado

Na janela que se configura a simulação, você encontra várias pastas no lado esquerdo da tela. Comece abrindo a pasta *Model Analysis Tools* e, dentro dela, a pasta *Sensitivity*. Clique em *New*. O programa pedirá um nome para a análise de sensibilidade. Você encontrará várias abas para configurar esse estudo, mas três delas são obrigatórias de serem preenchidas e serão essas as abas tratadas nesta seção da apostila.

Na aba *Vary* (Figura 126), você deve escolher quais variáveis serão manipuladas para a análise. Para escolher uma nova variável, clique em *<New>* abaixo de *Variable*. Um número será dado a essa variável automaticamente. Em seguida, você deve definir o tipo e demais informações sobre essa variável. Ela pode ser uma variável que adquire o dado da temperatura de uma corrente, da fração mássica de um determinado componente em uma mistura, do número de estágios em uma coluna de destilação, enfim, qualquer dado de entrada na sua simulação.

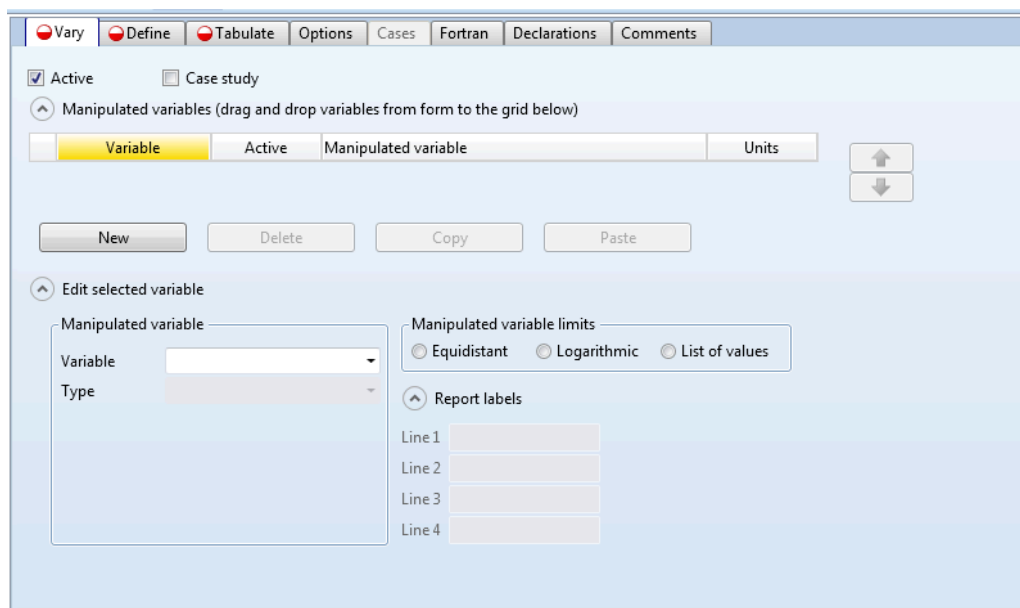


Figura 126 - Janela de configuração de uma análise de sensibilidade, aba *Vary*.

Escolhida a variável manipulada, você deve determinar, é claro, os valores que ela assumirá na análise. A primeira opção é *List of values*, onde você pode especificar em células separadas diferentes valores manualmente. As outras opções, *Equidistant* e *Logarithmic*, permite que você escolha um intervalo de valores utilizados na análise. Esse intervalo pode ser varrido por um determinado número de pontos (*Number of points*), em passos dentro de um intervalo (*Increment*) ou por um ponto inicial e um final (*Start point* e *End point*).

4.4.2 Definição das variáveis presentes na função estudada

Manipulando uma variável, podem acontecer efeitos sobre outra variável de processo ou sobre um conjunto de variáveis do processo. O conjunto pode ser representado por uma função que necessitará das variáveis alteradas pelas variáveis manipuladas.

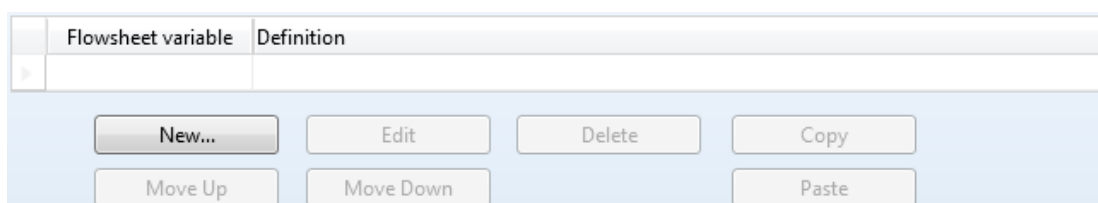


Figura 127 - Definição de variáveis da análise de sensibilidade.

Podemos definir essas variáveis de duas formas. Uma delas é obrigatória, na aba *Define*, como mostra a Figura 128. Nela, escolhemos variáveis de processo da mesma forma como fizemos no primeiro passo, porém trabalhamos com variáveis de saída do programa, isto é, a composição calculada para a corrente de saída de um equipamento ou a carga térmica em uma operação unitária, por exemplo. Passando pelas categorias e outros filtros para a escolha da variável, existem algumas categorias com um número muito grande de variáveis disponíveis que são identificadas por termos não muito familiares. Você pode se ajudar clicando no ícone de busca ao lado do campo *Variable*, em que uma janela abrirá para você pesquisar qual variável deseja, como aparece na Figura 128.

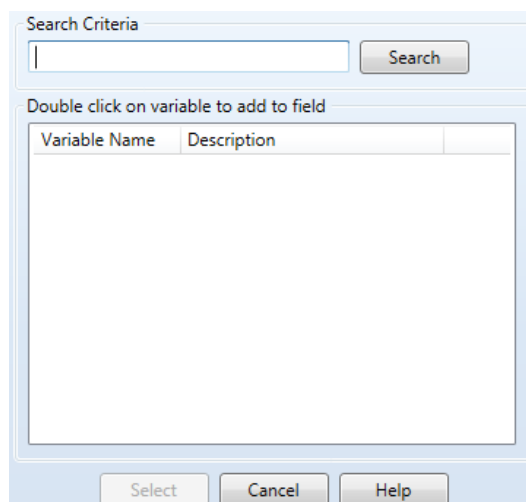


Figura 128 - Mecanismo de busca de variáveis do processo.

Selecionada a variável e suas demais informações na caixa *Reference*, mostrada na Figura 129, a tabela mostrará todas as variáveis que você definiu e, na coluna *Definition*, seus parâmetros. A outra forma para definir variáveis pode ser feita na aba *Fortran*, em que se pode usar sentenças em Fortran para definir variáveis em função das que escolhemos na aba *Define* (como a soma de duas variáveis, por exemplo) ou simplesmente variáveis numéricas ou resultados de equações numéricas.

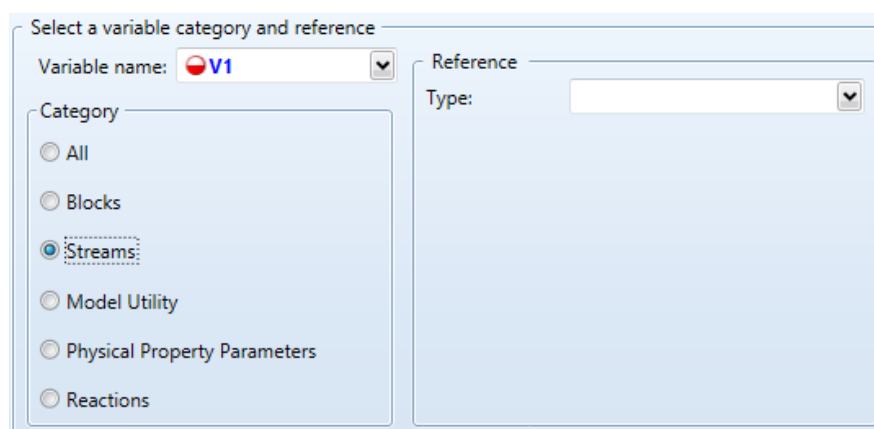


Figura 129 - Seleção da variável de processo dentro de uma categoria e demais informações na caixa *Reference*.

4.4.3 Definição da função analisada

Agora que temos as variáveis manipuladas e as variáveis para serem analisadas, devemos estabelecer expressões ou variáveis que apresentarão o resultado da simulação. Em um processo, existem diversas variáveis que podem alterar a composição da corrente com os produtos desejados. Se você desejasse avaliar o efeito da temperatura de operação de um reator sobre a fração mássica do produto de interesse, criaríamos a variável correspondente a essa temperatura na aba *Vary*, a variável correspondente a essa vazão mássica na aba *Define* e, sendo esta o resultado da análise, colocaríamos o nome dessa variável como expressão na aba *Tabulate*. Neste caso, em que o resultado da análise de sensibilidade é puramente uma variável, podemos clicar em *Fill Variables*, botão localizado logo abaixo da tabela. Assim, cada linha será preenchida com o nome das variáveis presentes na aba *Define*. Também podemos escrever uma expressão, como uma operação aritmética ou função matemática que trabalhe com variáveis de processo ou criadas em sentenças em *Fortran*. Para escolher variáveis direto da lista das variáveis que foram definidas, clique com o botão direito na célula e clique em *Variables List*.

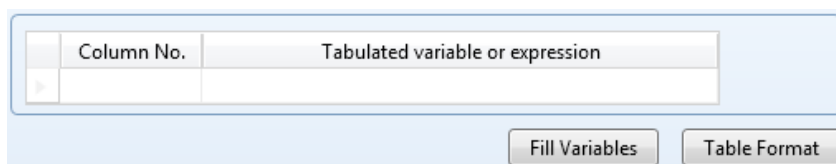


Figura 130 - Escolha das variáveis ou expressões que serão analisadas.

4.5 OTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS

Nem muito nem pouco; a questão é saber qual é a situação ótima. Na indústria química, a otimização assume papel fundamental na busca por processos que atinjam o maior desempenho com o menor custo, seja ele financeiro ou na forma de recursos materiais ou energéticos. Nesta seção, abordaremos as noções básicas quanto ao uso da otimização no Aspen Plus®. É um tópico bastante amplo e que cabe muito aprofundamento. Com as noções básicas abordadas neste curso, esperamos que o aluno tenha condições de estudar melhor o assunto. Vamos seguir o passo-a-passo como o programa traz a janela para configurar um estudo de otimização.

4.5.1 Definição das variáveis presentes na função objetivo

Abra a janela com as configurações da simulação. Assim como a análise de sensibilidade, o estudo de otimização está na pasta *Model Analysis Tools*. Para criar um novo estudo, clique em *New* e dê um nome a ele. Essas variáveis são definidas da mesma forma como na análise de sensibilidade. Vide Seção 4.2.2. Deve-se lembrar de que são variáveis que recebem dados de saída ou calculados na simulação.

4.5.2 Função objetivo e restrições

Na segunda aba, *Objective & Constraints*, você deverá escrever a função objetivo do problema e escolher se ela deverá ser maximizada ou minimizada, como ilustra a Figura 131. Ainda, é possível escolher restrições para ela. No campo *Objective function*, escreva a expressão da função objetivo tal como fizemos na aba *Tabulate* da análise de sensibilidade. Você pode escrever o nome de uma variável de saída ou uma equação que utilize variáveis do processo ou criadas em sentenças em Fortran.

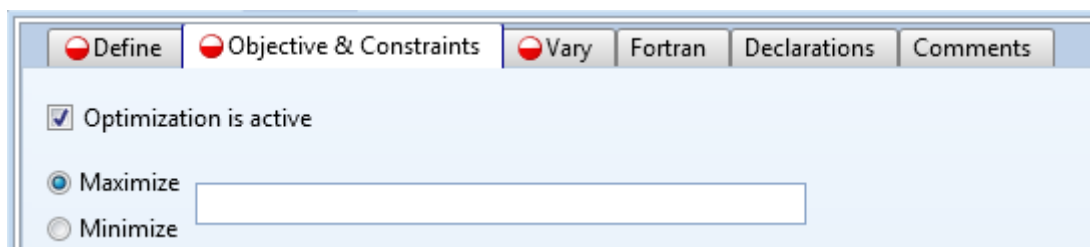


Figura 131 - Configuração de um estudo de otimização, aba *Objective & Constraints*.

Restrições podem ser criadas em outra pasta de *Model Analysis Tools*. Vá à pasta *Constraint* e crie restrições quando exigidas pelo problema. Novamente, você precisará definir variáveis em uma aba *Define* como temos feito até então. Na aba *Spec*, configuramos essa restrição, como mostra a Figura 132. À direita, na caixa *Constraint expressions*, você encontrará três linhas em branco. A primeira corresponde ao campo *Specification*. Nele, você pode escrever uma variável ou uma expressão que utilize as variáveis que você tenha definido na primeira aba. A segunda linha é a restrição propriamente dita. À esquerda, você pode escolher o sinal da inequação e à direita, um valor numérico para a inequação.

The screenshot shows the 'Spec' tab of a software window. It has a tab bar with 'Define', 'Spec', 'Fortran', 'Declarations', and 'Comments'. The 'Spec' tab is active. Below the tab bar, there are two main sections. The first section is 'Constraint expressions' and contains a 'Specification' field with a dropdown arrow and a 'Tolerance' field. The second section is 'Vector constraint information' and contains a checkbox labeled 'This is a vector constraint'. Below the checkbox are two fields: 'First element' with a value of '1' and a spin button, and 'Last element' with a spin button.

Figura 132 - Configuração de uma restrição, aba *Spec*.

No estudo de otimização que você esteja configurando, depois de criadas as restrições, elas aparecerão em *Available constraints* na aba *Objective & Constraints*. Você não deve esquecer-se de selecionar as restrições que você estabeleceu para a função objetivo. Do contrário, resultados indesejáveis podem ser obtidos.

4.5.3 Definição do intervalo numérico para variáveis manipuladas

Esta etapa é igual à que fizemos para a análise de sensibilidade. Vide Seção 4.2.1. A diferença aqui é que a única opção para variar as variáveis independentes é com um intervalo numérico. Na aba *Vary*, você pode definir o tamanho do passo de iteração padrão e o valor máximo que pode assumir, uma vez que o algoritmo ajusta o tamanho do passo em função do processo de convergência da função objetivo.

The screenshot shows the 'Vary' tab of a software window. It has a tab bar with 'Define', 'Objective & Constraints', 'Vary', 'Fortran', 'Declarations', and 'Comments'. The 'Vary' tab is active. Below the tab bar, there is a section titled 'Manipulated variables (drag and drop variables from form to the grid below)'. It contains a table with the following columns: 'Variable', 'Active', 'Manipulated variable', 'Lower limit', 'Upper limit', 'Step size', 'Maximum step size', and 'Units'. Below the table are buttons for 'New', 'Delete', 'Copy', and 'Paste'. Below these buttons is a section titled 'Edit selected variable'. It contains two sub-sections. The first is 'Manipulated variable' with 'Variable' and 'Type' dropdowns. The second is 'Manipulated variable limits' with 'Lower', 'Upper', 'Step size', and 'Maximum step size' fields. Below these is a section titled 'Report labels' with 'Line 1', 'Line 2', 'Line 3', and 'Line 4' fields.

Figura 133 - Escolha da variável e do intervalo numérico em que será manipulada para o estudo de otimização.

4.6 EXERCÍCIOS

Exercício 4.1. Destilação

Deseja-se fazer a destilação de uma corrente de 100 kmol/h contendo 20% de etanol e o restante, água. Foi proposto o uso de uma coluna destiladora com 10 estágios, cujo condensador de topo e cujo refeedor operam a 3 bar. Verifique se é possível obter uma recuperação de 95% do etanol alimentado, com, no máximo, 1% da água alimentada na corrente de topo. No Aspen Plus®, construa o fluxograma para essa operação. Selecione o modelo termodinâmico mais adequado, tendo em mente que esta é uma operação de separação líquido-vapor. Se necessário, faça uso do assistente ou do arquivo de ajuda. Especifique todos os componentes do processo, etanol (*ETHANOL/C₂H₆O-2*) e água (*WATER/H₂O*). Não sendo possível operar a destiladora com essas condições de processo, utilize outros valores para a recuperação de etanol e água na corrente de topo.

Para auxiliá-lo na decisão, construa o diagrama de fases binário à pressão constante de 3 bar no Aspen Properties.

Exercício 4.2. Componente-chave leve e componente-chave pesado na destilação

A uma coluna de destilação será alimentada uma mistura com vários hidrocarbonetos como mostra a Tabela 17. Essa corrente tem vazão de 3000 kg/h a 160°C e 3 bar. Utilizando o método *CHAO-SEADER*, verifique e discuta as diferentes formas de especificar o bloco *DSTWU* quanto à escolha dos componentes-chave, utilizando recuperação de 95% do componente-chave leve e 5% do componente-chave pesado, para uma coluna de destilação com 20 estágios operando a 3 bar com condensador total.

Componente	Porcentagem em massa	Componente	Porcentagem em massa
Metano	14,2%	N-hexano	9,3%
Etano	18,4%	N-octano	6,7%
Propano	16,6%	Benzeno	2,1%
N-butano	15,4%	Tolueno	1,3%
N-pentano	14,9%	O-xileno	1,1%

Tabela 16 - Componentes da alimentação da coluna de destilação do exercício 4.2.

Exercício 4.3. Estudo de sensibilidade de uma coluna de absorção

Uma corrente gasosa contendo 30% de amônia (*AMMONIA/H3N*) e 70% de ar (*AIR*) deve ser submetida a um processo de purificação de ar em uma coluna de absorção (*RadFrac*) com 10 estágios teóricos e, para isso, água (*WATER/H2O*) deverá ser usada como solvente. A carga contaminada é alimentada no último estágio e o solvente, no primeiro. A coluna opera isobaricamente a 1 atm. A carga é alimentada a uma vazão de 100 kmol/h a 20 °C e 1,5 atm e o solvente, a 60°C e 2 atm.

- Determine a fração molar de amônia na corrente que deixa o topo da absorvedora utilizando 90 kmol/h de água.
- Faça um estudo de sensibilidade na coluna de absorção para averiguar como se comporta a fração de amônia na corrente de topo para vazões de água de 50 a 1000 kmol/h de água, a passos de 50 kmol/h.

Exercício 4.4. Otimização de uma coluna de destilação

Deseja-se fazer o projeto preliminar de uma coluna de destilação em um processo de produção de cloreto de vinila. O projeto prevê que a coluna dure dez anos operando 300 dias completos por ano. O projeto deve ser tal que o custo para construí-la e mantê-la em operação pelo tempo de projeto seja o menor possível. O custo total é representado pela seguinte função objetivo:

$$\varphi = NP * CI + CQ * CC * TV + RQ * CS * TV + CO * TV + CM * TV$$

Em que as variáveis representadas são:

- Número de estágios teóricos, NP;
- Custo de instalação da coluna em função do número de estágios, CI (\$/estágio teórico);
- Tempo de vida esperado para a coluna, TV (segundos);
- Custo de manutenção anual da coluna, CM (\$/s);
- Carga térmica do refeedor, RQ (cal/s);

- Carga térmica do condensador, CQ (cal/s);
- Custo do aquecimento, CS (\$/cal);
- Custo do resfriamento, CC (\$/cal);
- Custo com mão-de-obra, CO (\$/s).

A coluna recebe uma carga na forma de líquido saturado à pressão de 26 atm com vazão de 100 kmol/h, composta por 43,2% de cloreto de vinila (*VINYL-CHLORIDE/C₂H₃CL*), 47,8% de ácido clorídrico (*HYDROGEN-CHLORIDE/HCL*), 8,6% de 1,2-dicloroetano (*1,2-DICHLOROETHANE/C₂H₄CL₂-2*) e 0,4% de acetileno (*ACETYLENE/C₂H₂*). A destiladora opera a 12 bar e com um condensador total. Na corrente de topo, deve-se recuperar 95% do cloreto de vinila alimentado e, no máximo, 1% do 1,2-dicloroetano alimentado deverá estar nessa corrente. Na Tabela 18 estão os custos associados à coluna. Ao final da simulação, verifique o número de estágios, a razão de refluxo e o custo da destiladora calculado.

Custo de instalação de cada estágio (\$/estágio)	5000
Custo do aquecimento (\$/cal)	$1,5 \times 10^{-6}$
Custo do resfriamento (\$/cal)	2,5 vezes o custo de aquecimento
Custo de operação (\$/hora)	20
Custo de manutenção (\$/ano)	10% do custo de instalação da coluna

Tabela 17 - Custos associados à construção da coluna de destilação.

A seguir, as sentenças em FORTRAN para a rotina de otimização. Ao utilizá-la, tome cuidado com as unidades.

```

C      CI CUSTO DE INSTALACAO POR ESTAGIO ($/prato)
      CI = 5000.

C      TV TEMPO DE VIDA DA COLUNA EM PROJETO (sec)
      TV = 10.*300.*24.*3600.

C      CS CUSTO DO VAPOR PARA AQUECIMENTO ($/cal)
      CS = 1.5/1000000.

C      CC CUSTO DO FLUIDO REFRIGERANTE ($/cal)
      CC = 2.5*CS

C      CO CUSTO DE OPERACAO ($/sec)
      CO = 20./3600.

C      CM CUSTO DE MANUTENCAO ($/sec)
      CM = .01*NP*CI/300./24./3600.

C      NP NUMERO DE ESTAGIOS

      PHI = NP*CI + CQ*CC*TV + RQ*CS*TV + CO*TV + CM*TV

```

CAPÍTULO 5

5 REATORES E ESPECIFICAÇÕES DE PROJETO

5.1 OBJETIVOS

Nesta aula, será abordado o uso de alguns dos sete blocos de simulação de reatores químicos, bem como iniciar o aluno do curso à simulação com especificações de projeto. Com isso, será possível compreender e explorar as ferramentas necessárias para a simulação de processos em que estejam presentes reatores químicos, fazendo uso de conhecimento das disciplinas de Reatores Homogêneos e Reatores Heterogêneos. A ferramenta do pacote *Aspentech* utilizada nesta aula será somente o *Aspen Plus®*.

5.2 CONCEITOS FUNDAMENTAIS DE REATORES QUÍMICOS

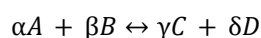
Os processos químicos industriais são concebidos para obter um produto de interesse, de forma economicamente viável, a partir de uma variedade de matérias-primas em uma sucessão de etapas de tratamento e processamento. Uma das etapas mais importantes de um processo é a que ocorre no reator. Entretanto, mesmo que o reator tenha um baixo custo, é possível que o processo como todo trane-se tornar muito mais caro devido à necessidade de operações de separação e tratamento dispendiosas. Assim, o projeto de reatores reúne diversos conhecimentos, dentre eles não só a cinética de reações químicas, a termodinâmica, a mecânica de fluidos e a transferência de massa, mas também a economia (LEVENSPIEL, 1999).

Para saber o que o reator será capaz de realizar, deve-se conhecer a cinética, a forma de contato entre os reagentes e a equação de desempenho, que busca relacionar as condições de saída com as de entrada (LEVENSPIEL, 1999). Quando se estuda reações químicas, é preciso determinar quais são os reagentes e os produtos necessários, até que extensão a reação avançará e quão rápido ela se desenvolverá.

No estudo desses fatores, aliados ao projeto detalhado de um reator, fundamenta-se a engenharia de reações químicas, na qual a simulação computacional de processos serve como grande ajuda. O Aspen Plus® possui várias bibliotecas para modelar processos reativos. A seleção do modelo ideal depende das especificações disponíveis e do tipo de simulação (HUSSAIN).

5.2.1 Balanço de massa em sistemas reativos

Considere a seguinte reação genérica:



Ela ocorre em um processo mostrado na Figura 134, em que também há a presença de inertes. A vazão de cada componente entrando no sistema é conhecida e o objetivo é determinar a composição de saída.

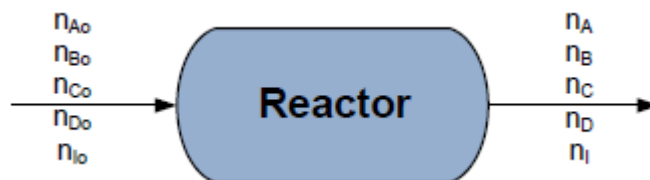


Figura 134 - Representação genérica de um sistema reacional.

Uma aproximação para resolver esse balanço material é usar a **conversão** de um dos materiais, que é definida como mostra a Equação 5.1.

$$X_i = \frac{n_{i0} - n_i}{n_{i0}} \quad (5.1)$$

Usando a estequiometria da reação, a saída dos outros componentes pode ser calculada em função da conversão. Alternativamente, pode-se usar o grau de avanço de uma reação, que pode ser entendido como a quantidade de vezes (em mol ou mol/s) em que a reação em questão se processou em um determinado. O grau de avanço (ξ) é usado para calcular a saída de uma reação usando a Equação 5.2.

$$n_i = n_{i0} + \sum v_{i,j} \xi_j \quad (5.2)$$

Até aqui, recordou-se que tanto a conversão como o grau de avanço de uma reação são métodos baseados na estequiometria e requerem conhecimento preciso das reações estudadas.

Entretanto, em alguns casos, informações detalhadas sobre a reação estão indisponíveis e diferentes abordagens devem ser consideradas, as quais não necessitem conhecer totalmente a reação. Por exemplo, reações envolvendo materiais não convencionais, como óleo cru e alimentos, podem ser difíceis de representar em uma reação química. Em casos como esses, um conhecimento geral ou superficial dos reagentes e produtos presentes na saída pode ser usado. Nisso, surge o conceito de rendimento:

$$\text{Rendimento} = \frac{\text{Quantidade de produto produzida}}{\text{Quantidade alimentada}}$$

Nesses casos, sendo a estequiometria desconhecida, o rendimento de cada produto deve ser informado. No entanto, se o rendimento é usado em uma reação cuja estequiometria é conhecida, os rendimentos podem todos ser relacionados por coeficientes estequiométricos.

5.2.2 Equilíbrio químico

Os modelos apresentados na Seção 5.2.1 são bastante simples, porém, nem sempre as informações necessárias para empregá-las estão disponíveis e, portanto, deve-se buscar alternativas. Para isso está a Termodinâmica, que propõe o conceito de equilíbrio químico. Para uma reação reversível, pode-se descrever sua condição final com uma constante de equilíbrio, K , que é definida conforme a Equação 5.3.

$$K = \prod_i \left(\frac{f_i}{f_i^0} \right)^{v_i} = \exp\left(\frac{-\Delta G}{RT}\right) \quad (5.3)$$

A constante de equilíbrio químico é função somente da temperatura. Assim, para calculá-la com as energias livres de Gibbs, nem sempre há dados disponíveis na temperatura em que é necessário. Pode-se então calcular uma constante de equilíbrio para uma temperatura de referência (como 273,15K ou 298,15K) e a partir dela calcular a constante na temperatura desejada. Uma forma para isso, com simplificações, é a equação de Van't Hoff, que considera que a entalpia de reação não varia no intervalo de temperatura considerado, como mostra a Equação 5.4.

$$\ln \left[\frac{K(T,P)}{K(T_{ref},P)} \right] = \frac{-\Delta H_{ref}^0}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \quad (5.4)$$

Em casos em que a estequiometria é desconhecida e, especialmente, há equilíbrio de fases junto com a reação, uma abordagem baseada na minimização da energia livre de Gibbs da solução pode ser usada. Nessa aproximação, a energia de Gibbs total de todos os componentes (reagentes, produtos e inertes) é minimizada. Por exemplo, a energia de Gibbs de uma mistura ideal é dada pela Equação 5.5.

$$G_{mix} = \sum_i x_i G_i + RT \sum_i x_i \ln(x_i) \quad (5.5)$$

A energia de Gibbs mínima do sistema pode ser calculada derivando a Equação 5.5 e igualando-a a zero. Uma abordagem similar pode ser aplicada para sistemas mais complexos com múltiplas fases.

5.2.3 Cinética química

Reatores são geralmente projetados com o auxílio de equações de taxa e a cinética química possui importante papel na construção dessas equações. Uma vez que existem diferentes teorias para descrever o comportamento fenomenológico das reações químicas, apresentar-se-ão duas expressões de taxa de reação utilizadas no Aspen Plus®.

- Lei de potência (*Power law*):

$$r = k \left(\frac{T}{T_{ref}} \right)^a \exp \left[\frac{-E}{R} \left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T_{ref}} \right) \right] \underbrace{\quad}_{\text{fatorcinético}} \prod_i \left(K_i^D C_i \right)^{\beta_i} \quad (5.6)$$

Nela, a concentração (C_i) é multiplicada por um fator dependente da temperatura (K_i^D), que representa um fator ponderal para a dependência da taxa de reação sobre a concentração de diferentes componentes. O expoente (β_i) pode possuir valor igual ao coeficiente estequiométrico e, neste caso, a reação é chamada reação elementar, ou também possuir algum outro valor para reações não elementares.

- Modelo de Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson (LHHW):

Em muitos casos, um catalisador é usado em reações de forma que sua energia de ativação seja reduzida, diminuindo o tempo de reação. No caso da catálise heterogênea, a adsorção de diferentes materiais sobre o catalisador pode ser um importante processo que afeta a taxa de reação. Em casos assim, a Equação 5.6 deve ser modificada para levar em conta esse efeito. Uma expressão muito utilizada para isso é o modelo de Langmuir-Hinshelwood-Hougen-Watson, bastante parecida com a lei de potência, exceto pela adição de um termo de adsorção no denominador:

$$\text{Taxa de reação} = \frac{(\text{fatorcinético})(\text{forçamotriz})}{(\text{termodeadsorção})}$$

O termo de adsorção é dado pela Equação 5.7.

$$\text{Termodeadsorção} = \sum K_i \prod (C_j)^y \quad (5.7)$$

Em ambos modelos, existe um fator cinético. Para descrevê-lo, existem diferentes abordagens que são vistas na disciplina de Reatores Homogêneos. O resultado de cada modelo é como a temperatura afeta esse fator.

- Lei de Arrhenius

A Lei de Arrhenius é a mais utilizada devido à sua simplicidade e fidelidade aos resultados experimentais. Ela expressa o fator cinético como mostra a Equação 5.8.

$$\text{fatorcinético} = k \exp \left(\frac{-E}{RT} \right) \quad (5.8)$$

O termo exponencial acompanha uma constante, chamada fator de frequência ou fator pré-exponencial, que pode ser interpretada como o total de choques entre as moléculas em uma reação. Por isso, ela é multiplicada pelo termo exponencial, que varia de 0 a 1 e representa a fração efetiva dessas colisões, ou seja, a quantidade de choques que levam à formação dos produtos. Não há um consenso sobre o numerador do termo exponencial, comumente chamado de energia de ativação. Para alguns autores, é somente um parâmetro de

ajuste sem significado físico. Outros dizem que ele representa uma barreira energética para o procedimento da reação.

- Teoria das colisões

A teoria das colisões se fundamenta na Teoria Cinética dos Gases e na hipótese de que as partículas que se chocam e reagem são esféricas e, assim como diz a Lei de Arrhenius, somente uma fração dessas colisões é efetiva. Sua expressão é dada pela Equação 5.9.

$$f_{\text{atorcinético}} = kT^{0,5} \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) \quad (5.9)$$

- Teoria do Complexo Ativado

A teoria das colisões se limita à hipótese de que os componentes na reação são partículas esféricas. Buscando uma abordagem mais aprofundada, surgiu a teoria do complexo ativado, que coloca uma etapa intermediária em uma reação, onde ocorre a formação desse complexo. A teoria admite que a reação de formação desse complexo seja muito rápida e, então, o equilíbrio é instantaneamente atingido. Neste caso, a energia de ativação corresponde à entalpia de reação de formação do complexo ativado e o fator cinético pode ser expresso pela Equação 5.8.

$$f_{\text{atorcinético}} = kT \exp\left(\frac{-E}{RT}\right) \quad (5.8)$$

Além da dependência do fator cinético quanto à temperatura, cada modelo tem sua forma particular de determinar o fator pré-exponencial. Enquanto a lei de Arrhenius se baseia no empirismo, a teoria das colisões e a teoria do complexo ativado possuem seu lado teórico na determinação desse fator.

5.2.4 Reatores ideais

A modelagem de qualquer fenômeno será tão mais complexa quanto mais rigorosa for a análise ao estabelecer um modelo. A adoção de hipóteses e simplificações auxilia na construção dos modelos e permite encontrar condições de projetar equipamentos de funcionamento complexo, como podem ser os reatores químicos. No projeto de reatores homogêneos, pode-se encontrar três tipos de reatores ideais, como mostra a Figura 135.

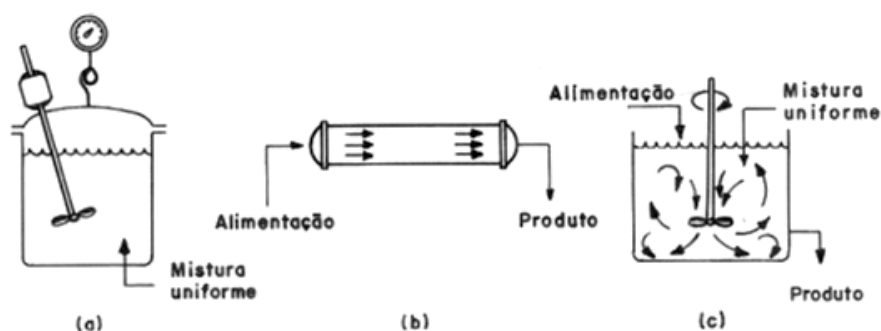


Figura 135 - Principais tipos de reatores ideais: (a) o reator descontínuo, (b) o reator de fluxo contínuo e (c) o reator de mistura (Fonte: LEVENSPIEL, 2000).

- Reator descontínuo, Batch ou batelada

Um reator batelada, ou Batch, é utilizado para operações em pequena escala, para testar novos processos que não foram completamente desenvolvidos, para manufatura de produtos de custo elevado e processos nos quais há dificuldade para convertê-lo em uma operação contínua.

O reator batelada possui a vantagem de exibir uma alta conversão, que pode ser obtida com um alto tempo de residência dos reagentes no recipiente onde é conduzida a reação. Entretanto, requer um alto custo

de mão de obra e existe variabilidade de composição nos produtos obtidos em ciclos diferentes e há dificuldade de implementá-lo numa produção em larga escala. Seu projeto pode ser feito com a Equação 5.10.

$$t = n_{A0} \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)V} \quad (5.10)$$

Nessa equação, V é o volume reacional. Deve-se avaliar se há variação no volume do sistema durante a reação, o que afeta o seu dimensionamento. No caso de reatores batelada alimentada, a resolução é feita por um sistema de equações em que se leva em conta o balanço mássico global, o balanço mássico do componente limitante e, caso o reator não seja isotérmico, o balanço energético.

- Reatores contínuos e sua classificação quanto ao grau de mistura

Em reatores contínuos, a hidrodinâmica do processo constitui papel fundamental no projeto desses equipamentos, assim o critério mais importante para classificá-los é o grau de mistura da massa reacional e são colocados dois reatores ideais nos extremos do grau de mistura: o PFR para total ausência de mistura e o CSTR para mistura perfeita.



Na realidade, nenhum desses reatores existe, assim, o engenheiro deve estar atento para a forma de construção de seu reator, para que a hidrodinâmica permita que os resultados esperados para o projeto do reator ideal sejam próximos dos observados na realidade. No caso de problemas de hidrodinâmica, existe a abordagem de distribuição de tempos de residência (DTR) para corrigir os efeitos devido à geometria e ao escoamento sobre o grau de mistura. Além disso, outros dois fatores podem ser analisados: o estado de agregação do material em escoamento, sua tendência em se aglomerar ou a tendência de moléculas se moverem juntas; e o retardo ou antecipação da mistura do material.

- Reator tipo tanque com agitação contínua (CSTR)

O CSTR é o reator ideal em que se considera a alimentação e a retirada do material continuamente e que, devido à perfeita agitação, a composição e as propriedades físico-químicas no reator são homogêneas. Sua equação de projeto é apresentada pela Equação 5.11.

$$\frac{V}{F_{A0}} = \frac{\Delta X_A}{(-r_A)} \quad (5.11)$$

- Reator de fluxo empistonado (PFR)

O PFR é o reator ideal tipo tubo em que não há mistura no sentido axial. Essa consideração é feita tendo-se em vista que o modelo considera que não existe perfil de velocidades em cada seção transversal do comprimento do reator. Também, em virtude da ausência de mistura, estamos dizendo que o mecanismo convectivo de transferência de massa predomina plenamente sobre o mecanismo difusivo. Enquanto o CSTR é adequado para operar com reações em fase líquida, o PFR pode trabalhar com reações em fase líquida ou gasosa. Sua equação de projeto é vista na Equação 5.12.

$$\frac{V}{F_{A0}} = \int_{X_{A0}}^{X_A} \frac{dX_A}{(-r_A)} \quad (5.12)$$

5.3 MODELOS DE REATORES NO ASPEN PLUS

O Aspen Plus® disponibiliza sete modelos diferentes de reatores que atendem às mais diversas necessidades e informações disponíveis para o projeto de reatores. Como você viu na introdução deste capítulo, de acordo com o que você conhece do sistema reacional, existe uma abordagem mais adequada que outra. Foram reunidas as principais informações sobre cada modelo na Tabela 18.

Modelo	Descrição	Objetivo	Quando deve ser usado
	Reator Estequiométrico	Modela reatores estequiométricos com o grau de avanço ou conversão para as reações	Reatores em que a cinética das reações são desconhecidas ou irrelevantes, mas sabe-se a estequiometria e a extensão das reações.
	Reator de Rendimento	Modela reatores com rendimentos dos produtos especificados	Reatores em que a estequiometria e a cinética são desconhecidas ou irrelevantes, mas sabe-se a distribuição de rendimentos.
	Reator de Equilíbrio	Executa cálculos de equilíbrio químico e de fase por cálculos estequiométricos	Reatores com equilíbrio químico, estequiometria conhecida e cinética desprezível.
	Reator de Equilíbrio pela Minimização de energia livre de Gibbs	Executa cálculos de equilíbrio químico e de fase minimizando a energia livre de Gibbs do sistema	Reatores com equilíbrio de fases e/ou químico. Cálculo de equilíbrio de fases para soluções sólidas, sistemas sólido-líquido-vapor e múltiplas fases líquidas.
	CSTR	Modela reatores tipo tanque com agitação contínua (CSTR)	Reatores tanque mono, bi ou trifásicos projetados com equação de taxa e reações reversíveis em qualquer fase baseadas em estequiometria e cinética conhecidas.
	PFR	Modela reatores de fluxo empistonado (PFR)	Reatores tubulares de fluxo empistonados mono, bi ou trifásicos projetados com equação de taxa de reação em qualquer fase baseada em estequiometria e cinética conhecidas.
	Reator Batelada	Modela reatores batelada ou semi-batelada	Reatores batelada e semi-batelada mono, bi ou trifásicos projetados com equação de taxa de reação em qualquer fase baseada em estequiometria e cinética conhecidas.

Tabela 18 - Quadro comparativo dos diversos modelos de reatores do Aspen Plus.

5.4 ESPECIFICAÇÕES DE PROJETO (DESIGN SPECS)

Até aqui, todos os exercícios trabalhados tinham disponibilizadas todas as informações de entrada do processo para que fossem determinadas condições de saída ou alguma característica de um ou mais equipamentos. Assim como fizemos com trocadores de calor e aparelhos de separação sólido-gás, é interessante que sejam calculadas variáveis do processo para atender a uma determinada necessidade, como a quantidade do produto de interesse gerado. Nesse tipo de situação, as ferramentas de especificações de projeto no Aspen Plus® podem vir a ser extremamente úteis.

Especificações de projeto (*Design Specifications*) permitem que uma determinada característica do projeto seja definida para um valor desejado e esse objetivo é alcançado manipulando uma variável de entrada específica, como a temperatura ou a pressão de uma corrente. Deve-se estar atento, pois, uma vez que especificações de projeto estejam em uso para uma simulação, os resultados e dados apresentados ao final da simulação serão os resultados calculados para aquelas especificações. Neste caso, os dados de entrada que o usuário insere no programa serão usados somente como estimativas iniciais para o procedimento iterativo.

A seguir, serão tratadas as três etapas obrigatórias para estabelecer uma especificação de projeto no Aspen Plus®. O procedimento é muito semelhante à análise de sensibilidade e à otimização.

5.4.1 Definição das variáveis da especificação

As especificações de projeto são criadas na pasta *Flowsheeting Options*. Dentro dela, há a pasta *Design Specs*, a qual será trabalhada nessa parte. A especificação de projeto pode ser uma única variável do processo ou uma equação expressa em função de mais de uma variável do processo. A definição de variáveis no *Design Specs* é feita da mesma forma como visto na parte de análise de sensibilidade na seção 4.6.2. Lá, cria-se uma variável, põe-se um nome nela (tomando cuidado com as exigências da linguagem de programação trabalhada no *Aspen*) e escolhem-se seus parâmetros.

5.4.2 Definição da especificação de projeto

Na aba *Spec*, define-se a especificação de projeto desejada. Na primeira linha, deve-se escrever o nome da variável criada no passo anterior ou uma expressão que seja função das variáveis criadas anteriormente. Em seguida, deve-se colocar na linha *Target* o valor desejado para a especificação e, na terceira, a tolerância usada como critério de parada dos cálculos iterativos do programa. Isso tudo está mostrado na Figura 136.

A interface mostra a aba 'Spec' selecionada entre 'Define', 'Spec', 'Vary', 'Fortran', 'Declarations', 'EO Options' e 'Information'. Abaixo, há uma seção 'Design specification expressions' com três campos de entrada rotulados 'Spec:', 'Target:' e 'Tolerance:'.

Figura 136 - A especificação de projeto.

5.4.3 Configurações da variável manipulada

A função *Design Spec* do Aspen Plus® possui uma desvantagem. Utilizando a ferramenta já implementada no *software*, só é possível escolher uma variável para ser manipulada a fim de atingir a especificação de processo desejada. Por isso, na aba *Vary*, deve-se escolher a variável e seus parâmetros e o intervalo numérico que será varrido para os cálculos em cada iteração, como mostra a Figura 137.

A interface mostra a aba 'Vary' selecionada. O formulário 'Manipulated variable' contém uma seção 'Type:' com uma lista suspensa. À direita, há uma seção 'Manipulated variable limits' com campos para 'Lower:', 'Upper:', 'Step size:' e 'Maximum step size:'. Abaixo disso, há uma seção 'Report labels' com quatro campos rotulados 'Line 1:', 'Line 2:', 'Line 3:' e 'Line 4:'. Na base, há uma seção 'EO input' com campos para 'Open variable:' e 'Description:'.

Figura 137 - Escolha da variável manipulada nos cálculos de especificação de projeto.

Esta é uma poderosa ferramenta no projeto de reatores e de uma planta industrial. Por exemplo, geralmente um reator é projetado para que se consiga uma determinada produção em condições satisfatórias. Neste caso, pode-se ter um reator já dimensionado e verificar se é possível saber qual devem ser a vazão alimentada ou as condições de operação desse reator para atingir determinada conversão ou, para uma

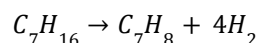
determinada produção desejada e condições de operação e vazão de alimentação definidas pelo processo, determinar o comprimento de um PFR que atenda ao que se deseja.

5.5 EXERCÍCIOS

Exercício 5.1. Aromatização de n-heptano

A reforma de hidrocarbonetos é um dos principais processos de refino de petróleo, onde moléculas na faixa da gasolina, incluindo as formadas a partir de hidrocarbonetos longos por craqueamento, são constituídas ou convertidas sem mudar seus números de átomos de carbonos. A aromatização é uma das reações de refino de petróleo que, entre outras, levam a um aumento considerável na qualidade do combustível medido pelo número de octanas (LOPES, 2003).

(HUSSAIN, 2011) Uma alimentação virgem de 20 lbmol/h de n-heptano (*N-HEPTANE/C7H16-1*) puro a 77°F e a 1atm é combinada com o reciclo de um extrator e aquecida a 425°F. Essa corrente é alimentada a um reator onde a aromatização do n-heptano é conduzida:

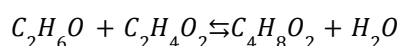


A conversão baseada no n-heptano é 15%. Os produtos da reação são resfriados a 180°F e depois o hidrogênio (*HYDROGEN/H2*) é completamente separado dos produtos da reação em um primeiro separador (*Sep*). 100lbmol/h de benzeno (*BENZENE/C6H6*) a 180°F e a 1atm são combinados com os produtos remanescentes da reação para extrair o tolueno (*TOLUENE/C7H8*). Todo o tolueno e o benzeno deixam esse extrator (*Sep*) como produto do processo. O n-heptano não reagido é reciclado ao misturador (*Mixer*), onde é combinado com a alimentação virgem do processo. Selecione o modelo de reator mais adequado para realizar a simulação com essas informações e use o modelo Chao-Seader para calcular as propriedades físicas dos componentes.

Com a simulação, determine o rendimento percentual de tolueno com relação à alimentação virgem.

Exercício 5.2. Produção de acetato de etila

A um reator tipo CSTR de 140 litros é alimentada uma corrente líquida a 70°C e 1 atm com vazão de 9 kmol/h de água (*WATER/H2O*), 187 kmol/h de etanol (*ETHANOL/C2H6O-2*) e 194 kmol/h de ácido acético (*ACETIC ACID/C2H4O2-1*). No reator, ocorre a seguinte reação de esterificação:

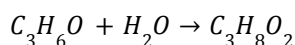


Determinou-se experimentalmente que a equação é de primeira ordem com relação a cada reagente e, para determinar a taxa de reação, utilize uma lei de potência com fator pré-exponencial de $1,9 \times 10^8$ e energia de ativação de $5,95 \times 10^7$ J/kmol para a reação direta e, para a reação inversa, o fator pré-exponencial é $5,0 \times 10^7$ e a energia de ativação é a mesma da reação direta. A reação é homogênea e ocorre em fase líquida e os fatores exponenciais foram dados com base na composição molar da mistura.

A partir desses dados, determine a produção de acetato de etila (*ETHYL ACETATE/C4H8O2-3*) no processo.

Exercício 5.3. Produção de propilenoglicol pela hidratação de óxido de propileno

Deseja-se produzir propilenoglicol (*PROPANEDIOL-1,2/C3H8O2-2*) pela hidratação de óxido de propileno, como mostra a reação:



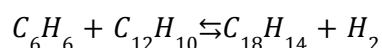
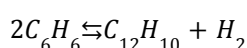
Experimentalmente, foi observado que se trata de uma reação de segunda ordem com relação ao óxido de propileno e a equação da taxa pode ser escrita como uma lei de potência com constante pré-exponencial igual a $9,15 \times 10^{22}$ m³/kmol.s e a energia de ativação é $1,556 \times 10^8$ J/kmol. A reação será processada em um reator batelada ao qual serão alimentados 18,7 kmol/h de óxido de propileno (*PROPYLENE-OXIDE/C3H6O-4*) e 300

kmol/h de água (*WATER/H₂O*) sob uma pressão de 3 bar e a 24°C. O reator é operado adiabaticamente em ciclos de 12 min.

Determine a produção de propilenoglicol e o perfil de temperatura ao longo do tempo para essas condições.

Exercício 5.4. Produção de fenilbenzeno pela desidrogenação de benzeno

Fenilbenzeno (*DIPHENYL/C₁₂H₁₀*) é um importante intermediário na indústria química. Sendo um componente pouco reativo, é usado principalmente como agente de transferência de calor como uma mistura eutética com éter difenílico, em que é estável a 400°C. Uma das rotas para sua produção envolve a desidrogenação de benzeno (*BENZENE/C₆H₆*). Neste processo, m-terfenilo (*M-TERPHENYL/C₁₈H₁₄-2*) é formado como subproduto e o quarto componente presente na reação é o hidrogênio (*HYDROGEN/H₂*) em ambas as reações, que ocorrem em fase gasosa:



Ao reator, será alimentada uma corrente de benzeno puro a 760°C e a 1,5 bar. O reator é um PFR com 10 m de comprimento e ½" de diâmetro. As taxas de reação devem ser expressas por uma lei de potência com força propulsora baseada na pressão parcial dos componentes. Considere também que as reações sejam elementares. As constantes necessárias estão apresentadas na Tabela 19.

Reação	Fator pré-exponencial (SI)	Energia de ativação (cal/mol)
Desidrogenação (reação direta)	$3,235 \times 10^{-6}$	30190
Desidrogenação (reação inversa)	$1,0205 \times 10^{-5}$	30190
Secundária (reação direta)	$3,7545 \times 10^{-6}$	30190
Secundária (reação inversa)	$7,9544 \times 10^{-6}$	30190

Tabela 19 - Fatores pré-exponenciais e energias de ativação das reações do exercício 5.4.

- Construa os perfis de concentração para o reator operando isotermicamente com alimentação de 10 kg/h.
- Trabalhando agora com um reator tipo PFR isotérmico com 5m de comprimento e mesmo diâmetro da situação anterior, determine a pressão da corrente de alimentação necessária para uma produção de 25 kg/h, alimentando-se 100 kg/h de benzeno puro.

CAPÍTULO 1

5.6 EXERCÍCIOS

Exercício 6.1. Bombas 1

Em uma planta de produção de cloreto de vinila, monômero usado na fabricação do PVC, é feita a pirólise do DCE na sua forma gasosa. Para isso, DCE líquido deve ser vaporizado e, antes de um evaporador, há uma bomba que transporta uma vazão de 28 kmol/h composta de 95% de 1,2-dicloro-etano e 5% de cloreto de vinila a 90°C. O líquido chega com pressão de 3 bar e na descarga tem pressão de 25 bar. Calcule:

- a) A carga da bomba.
- b) O NPSH disponível da bomba em metros.
- c) A sua eficiência.
- d) Faça os mesmos cálculos utilizando uma temperatura igual à 70°C e compare os resultados obtidos.

Exercício 6.2. Bombas 2

Uma mistura, proveniente da destilação de etanol, contém 30% molar em água e 70% de etanol. Devem ser bombeados 3 m³/h dessa solução por duas bombas idênticas, nas quais irão repartir igualmente esta vazão. Todo o processo estará a temperatura ambiente (25°C) e a alimentação está a pressão atmosférica. A pressão de descarga da bomba é igual a 3 bar. Encontrar as informações necessárias para a escolha de uma bomba:

- a) A carga da bomba.
- b) O NPSH disponível da bomba em metros.
- c) A sua eficiência.

Exercício 6.3. Tubulações

A indústria *Engenharia Química e Você* produz gás natural e tem a sua planta em Cidade Alegre. Ela necessita levar uma corrente de fluido para uma distribuidora, cuja distância equivale à 27 km. Na saída da planta, duas correntes são misturadas, a corrente de gás a 42 bar, 38°C e a de condensado com 24°C e 42 bar. A vazão da primeira é de 410 kmol/h e da segunda é 121 L/min.

Essa tubulação percorre 15 km, divididas em 3 segmentos iguais com diâmetro igual a 8 polegadas. O segundo segmento possui elevação igual a 152m, devido à um desnível da região. A temperatura ambiente dos segmentos tem valores iguais à 20°C, 15°C e 10°C, respectivamente.

Após os 15 km, uma terceira corrente, (Metano) com temperatura igual a 80°C, pressão de 35 bar e vazão de 9440 m³/dia, une-se às outras e passa em um compressor politrópico com eficiência igual a 65%, e pressão de descarga de 40 bar. Em seguida, essa nova corrente percorre 12 km em um único segmento com diâmetro igual a 12 polegadas e com elevação igual a do segundo segmento. O coeficiente de transferência de calor para a primeira tubulação tem valor igual a 10W/m²K.

De acordo com as informações, crie uma simulação e responda as questões a seguir.

Dióxido de Carbono	CARBON-DIOXIDE (CO ₂)
Nitrogênio	NITROGEN (N ₂)
Metano	METHANE (CH ₄)
Etano	ETHANE (C ₂ H ₆)
Propano	PROPANE (C ₃ H ₈)
i-Butano	ISOBUTANE (C ₄ H ₁₀ -1)
n-Butano	N-BUTANE (C ₄ H ₁₀ -2)
i-Pentano	2-METHYL-BUTANE (C ₅ H ₁₂ -1)
n-Pentano	N-PENTANE (C ₅ H ₁₂ -1)
n-Hexano	N-HEXANE (C ₆ H ₁₄ -1)
n-Heptano	N-HEPTANE (C ₇ H ₁₆ -1)

Tabela 20 - Nomes dos componentes do exercício 6.3.

Condensado		Gás		Metano	
Vazão (L/min)	121	Vazão (Kmol/h)	410	Vazão (m ³ /dia)	9440
Temperatura (°C)	24	Temperatura (°C)	38	Temperatura (°C)	80
Pressão (bar)	42	Pressão (bar)	42	Pressão (bar)	35
Componente	%	Componente	%	Componente	%
Dióxido de Carbono	0	Dióxido de Carbono	0,2	Dióxido de Carbono	0,1
Nitrogênio	0	Nitrogênio	0,5	Nitrogênio	5,8
Metano	3,5	Metano	84,3	Metano	80
Etano	3,5	Etano	5	Etano	6,5
Propano	15	Propano	5	Propano	3,7
i-Butano	15	i-Butano	1,5	i-Butano	1
n-Butano	14	n-Butano	1,5	n-Butano	1
n-Heptano	4	n-Heptano	0,5	n-Heptano	0,5
n-Hexano	23	n-Hexano	0,5	n-Hexano	0,4
i-Pentano	11	i-Pentano	0,7	i-Pentano	0,6
n-Pentano	11	n-Pentano	0,3	n-Pentano	0,4

Tabela 21 - Descrição das correntes do exercício 6.3.

- a) A simulação rodou sem erros ou avisos? Caso não tenha rodado, sugira uma solução.

- b) Qual é a pressão e temperatura na saída das tubulações?
- c) Por que a temperatura da corrente na entrada e saída da segunda tubulação possui temperatura constante?
- d) Qual é a energia necessária para o compressor?
- e) Qual é a carga térmica do trocador de calor?

Exercício 6.4. Compressores 1

Uma mistura gasosa composta por metano, dióxido de carbono e nitrogênio é separada em uma lavadora, utilizada na produção de clorometano a partir do gás natural. Essa mistura deve ser comprimida de 1 a 16 bar, utilizando dois compressores isentrópicos, para ser enviada a uma adsorvedora. A mistura é composta por 0,5 molar de metano, 0,3 de nitrogênio e 0,2 de dióxido de carbono. As condições da corrente de alimentação são: 30°C, 1 bar, 200 kmol/h de mistura. Encontre:

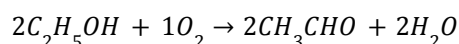
- a) Temperatura na saída do primeiro e segundo compressor.
- b) Potência Requerida por cada compressor.

Exercício 6.5. Compressores 2

Deseja-se produzir acetaldeído a partir da oxidação do etanol. Um reator que opera a 250°C e 3 bar é alimentado com ar atmosférico a uma vazão de 42 kmol/h de ar atmosférico, previamente aquecido a 210°C e com pressão de 1 bar, usando um compressor Isentrópico, e com 10 kmol/h de etanol a 240°C e 1 bar antes da compressão através de um segundo compressor Isentrópico. Sabendo que os compressores devem elevar a pressão das correntes que passam por eles até a de operação do reator, calcule:

- a) As eficiências e potências dos compressores;
- b) A vazão molar de cada componente na saída do reator.

Reação de Oxidação do Etanol:



*Considerar conversão de 100% para a oxidação do etanol.

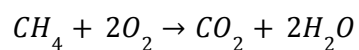
Exercício 6.6. Ciclo combinado a gás e vapor

A geração de energia a partir da combustão de combustíveis fósseis apresenta baixa eficiência. Visando aperfeiçoar essa forma de obtenção de energia, usa-se, por exemplo, o ciclo combinado a gás e a vapor, em que a energia obtida pela combustão de um gás combustível que não é transformada em energia elétrica é reaproveitada para levar água ao estado de vapor e mover outra turbina, gerando mais energia. *A UEGA (Usina Elétrica a Gás de Araucária) utiliza esta técnica e apresenta bons resultados de eficiência (na faixa de 42 a 58%). Além do aumento da eficiência, os gases de combustão deixam a planta a uma temperatura menor que se sua energia térmica não fosse aproveitada, reduzindo a poluição térmica provocada pela instalação.*

Gás metano é comprimido isentropicamente e enviado a uma câmara de combustão, onde é queimado completamente e os gases de combustão movem uma turbina isentrópica ligada a um gerador elétrico, e então passam por uma caldeira em contracorrente com água líquida, até que deixam a planta. A água, aquecida pelos gases de combustão, é vaporizada e passa por uma turbina isentrópica ligada a um gerador elétrico e é enviada para posterior resfriamento e condensação. Calcule a potência gerada por este ciclo com as seguintes

informações. Alimentação no ciclo a gás: 10 kmol/h de metano e 120 kmol/h de ar, ambos a condições ambientes.

1. Alimentação no ciclo a vapor: 25 kmol/h de água a 25 °C e 1 atm.
2. Pressão de saída no compressor de gás e na bomba para a água: 20 bar.
3. Pressão na saída das duas turbinas: 1 atm.
4. Temperatura e pressão de operação da câmara de combustão: 900 °C e 20 bar.
5. Temperatura dos gases de combustão na saída da caldeira: 120°C.
6. Reação de combustão completa do metano, com conversão de 100% do metano:



GABARITO

CAPÍTULO 2

Exercício 2.1. Tanque Flash

- a) Para as simulações 1 e 4 não foi possível obter a separação dos componentes, em que o resultado obtido foi de 100% líquido e 100% vapor, respectivamente. Isso significa que essas condições de processo não estavam nas condições para a separação de fases, ou seja, estavam fora da região de ELV, ao contrário das condições das simulações 2 e 3.
- b) O diagrama PxT gerado utilizando como modelo termodinâmico o modelo Wilson é mostrado na Figura 172. Observa-se que os resultados obtidos no item (a) são coerentes. As condições de operação das simulações 1 e 4 estão fora da região de ELV, ao contrário das condições das simulações 2 e 3.

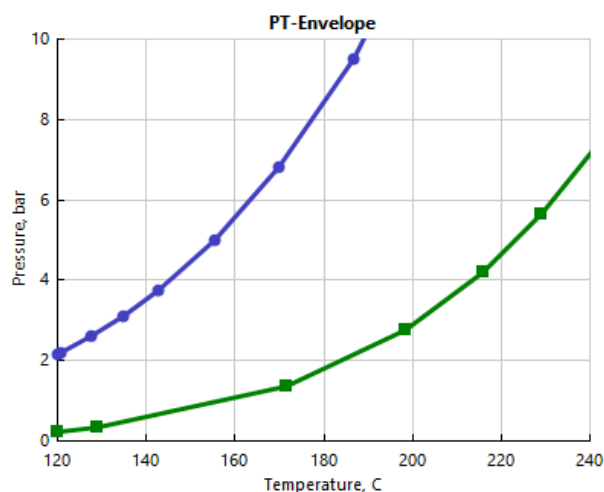


Figura 172 - Diagrama de fases PxT do exercício 2.1.

- c) O diagrama construído no Aspen Properties com o modelo Wilson está abaixo. A temperatura desejada é de aproximadamente 181,1°C. A determinação foi feita com o auxílio do *Tracker*, clicando com o botão direito na curva de orvalho e marcando a opção *Show Tracker*. Isso foi feito no Aspen Properties V8.0. Com a escala usada, a partir de uma alimentação equimolar, há três quadrados à direita do ponto marcado na linha de amarração e dois e meio à esquerda, em um total de cinco quadrados e meio. Assim, podemos determinar a proporção entre a fase líquida e a fase vapor geradas. O resultado estimado é de 45,5% fase líquida e 55,5% fase vapor, o que corresponde a 54,5 kmol/h de líquido e 65,5 kmol/h, respectivamente. Executando a simulação com essas condições, as vazões serão 55,0 kmol/h de líquido e 65,0 kmol/h de vapor contendo 16,24 kmol/h de fenol, o que corresponde a 25,0% dessa corrente, como desejado.

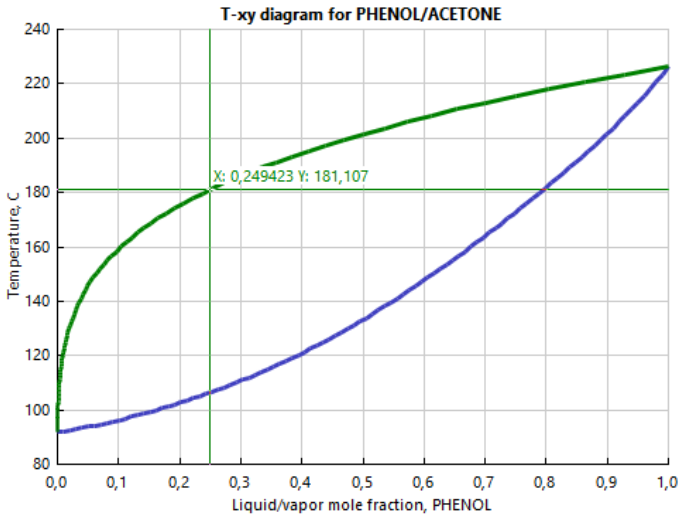


Figura 173 - Identificação da temperatura no diagrama T-xy do exercício 2.1.

- d) A temperatura de saída é 117,6 °C. Como o equipamento é adiabático, a energia necessária para haver mudança de fase e expansão devido à queda de pressão é retirada da energia interna da mistura, resultando no abaixamento da sua temperatura.

Fluxograma sugerido:

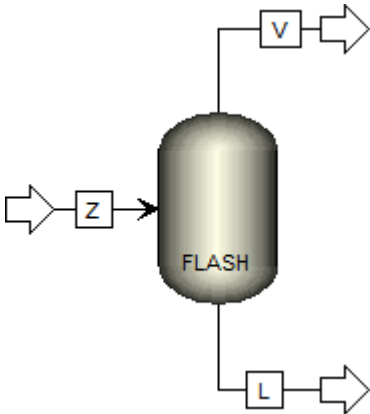


Figura 174 - Fluxograma sugerido para o exercício 2.1.

Item a)

Os dois passos a seguir são os mesmos passos iniciais, tanto para o Aspen Plus® como para o Aspen Properties. Comece especificando os componentes do processo, conforme a Figura 175.

Select components:

	Component ID	Type	Component name	Alias
▶	PHENOL	Conventional	PHENOL	C6H6O
▶	ACETONE	Conventional	ACETONE	C3H6O-1
▶				

Find

Elec Wizard

User Defined

Reorder

Review

Figura 175 - Componentes selecionados para o exercício 2.1

Especificar um modelo termodinâmico adequado. Para a resolução do exercício, utilizamos o modelo Wilson, como mostra a Figura 176.

Property methods & options

Method filter: **COMMON**

Base method: **WILSON**

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method: **STEAM-TA**

Water solubility: **3**

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Figura 176 - Modelo termodinâmico selecionado para o exercício 2.1.

No Aspen Plus®, especificar a corrente de alimentação, conforme a Figura 177.

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: **100** **C**

Pressure: **8** **bar**

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mole**

Total flow rate: **120** **kmol/hr**

Solvent:

Composition

Mole-Frac

Component	Value
ETHANOL	
WATER	
BENZENE	
PHENOL	0,5
ACETONE	0,5
Total:	1

Figura 177 - Especificação da corrente de alimentação do exercício 2.1.

E o tanque Flash, seguindo a Figura 178.

Flash specifications

Flash Type: **Pressure** **Temperature**

Temperature: **160** **C**

Pressure: **8** **bar**

Duty: **0** **cal/sec**

Vapor fraction:

Valid phases

Vapor-Liquid

Figura 178 - Especificação do tanque Flash na primeira simulação do exercício 2.1.

Em cada simulação do item (a), basta mudar as condições de operação nas especificações do tanque Flash e mandar o programa executar os cálculos novamente. Nos resultados mostrados em *Stream Results*, verificar as vazões de saída (V e L) do equipamento, apresentadas na Figura 179.

	Z	V	L
ETHANOL	0	0	0
WATER	0	0	0
BENZENE	0	0	0
PHENOL	60	0	60
ACETONE	60	0	60
Total Flow kmol/hr	120	0	120
Total Flow kg/hr	9131,59	0	9131,59

Figura 179 - Resultados da primeira simulação do exercício 2.1.

Na primeira simulação, as vazões na corrente de vapor são todas zero. Isso significa que não houve separação de fases com as condições usadas. O resultado para as outras simulações já foram comentados. Na quarta simulação, o problema ocorrerá com as vazões da corrente líquida, o que significa que toda a alimentação foi evaporada.

Item b)

No Aspen Properties, criar um estudo em *Analysis* do tipo PTENVELOPE. Coloque temperatura reduzida final igual a 1 e temperatura inicial 120 °C. Execute a simulação e plote o gráfico dos resultados com o auxílio do assistente de criação de gráficos tipo PTENVELOPE (Plot Wizard). O gráfico gerado é o que foi mostrado na Figura 172.

Item c)

No Aspen Properties, criar um property set com as propriedades TBUB e TDEW, como mostrado no exemplo da apostila. Em seguida, construir uma análise tipo GENERIC com intervalo de fração molar do fenol de 0 a 1 com o número de pontos desejado. Com os resultados, criar o gráfico selecionando as temperaturas como eixo y e as frações como eixo x. O gráfico gerado é o que foi mostrado na Figura 173.

Item d)

No Aspen Plus®, ir ao formulário de especificação da corrente de alimentação e mudar a temperatura para 160°C, como mostra a Figura 180.

Flash Type:		Temperature	Pressure
State variables			
Temperature:	160	C	
Pressure:	8	bar	
Vapor fraction:			
Total flow basis:	Mole		
Total flow rate:	120	kmol/hr	
Solvent:			

Composition	
Mole-Frac	
Component	Value
ETHANOL	
WATER	
BENZENE	
PHENOL	0,5
ACETONE	0,5
Total: 1	

Figura 180 - Novas especificações da corrente de alimentação do exercício 2.1.

E, no formulário de especificação do Tanque Flash, mudar as condições de operação. Sendo a pressão de operação a ambiente, mudar para 1 atm e, sendo um Flash adiabático, colocar 0 no campo da carga térmica (Heat Duty). As especificações são mostradas na Figura 181.

Flash specifications			
Flash Type:	Duty	Pressure	
Temperature:	160	C	
Pressure:	1	atm	
Duty:	0	cal/sec	
Vapor fraction:			

Valid phases	
Vapor-Liquid	

Figura 181 - Especificações do Flash adiabático do exercício 2.1.

Em seguida, executar a simulação. Na pasta *Stream Results*, encontrar a temperatura das correntes de saída junto ao balanço energético do processo.

CAPÍTULO 3

Exercício 3.1. Resfriamento de metanol e água utilizando Heaters

- $T = 56,8^{\circ}\text{F}$
- $Q = 40\text{kW}$. O trabalho de ceder calor recebe o sinal negativo.
-

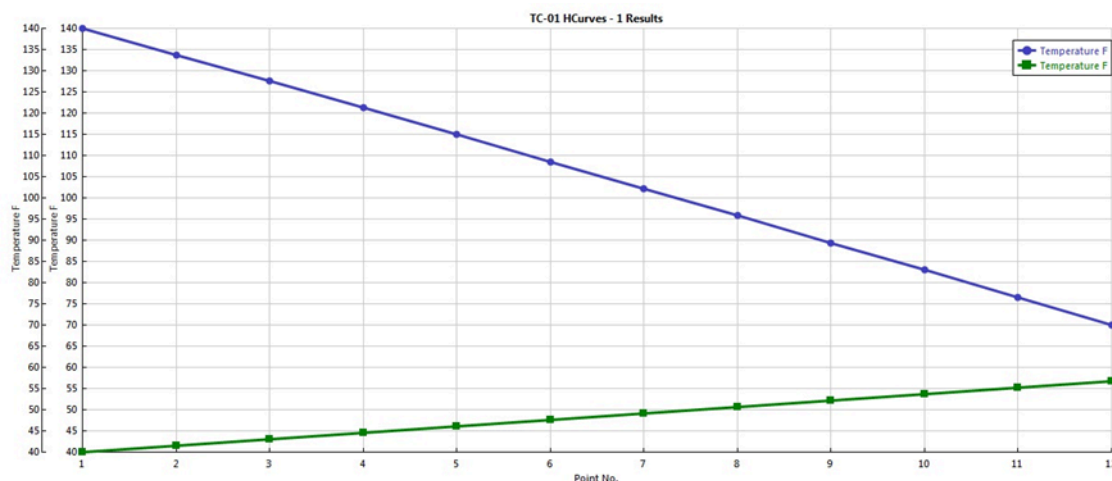


Figura 182 - Gráfico representando o perfil de temperaturas ao longo do trocador de calor do exercício 3.1.

- $Q = 48\text{kW}$ e $T = 60,3^{\circ}\text{F}$. A temperatura da corrente fria é maior nesse caso, pois como a corrente quente está sendo resfriada a uma temperatura menor, os fluidos estão trocando mais calor. Portanto, a corrente quente está cedendo mais calor para a corrente fria, que por sua vez, esquenta mais.

Fluxograma sugerido:

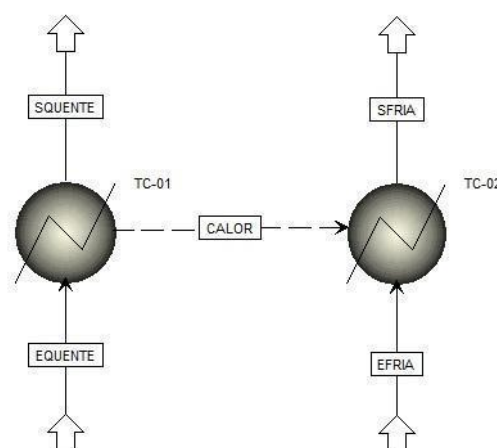


Figura 183 - Fluxograma sugerido para o exercício 3.1.

Primeiramente, criamos uma simulação com unidades no sistema inglês. Em seguida, vamos montar o fluxograma nomeando as correntes e os trocadores de calor. Após, clicamos no botão *Next*, o qual nos levará à aba *Components*, onde vamos definir os componentes utilizados no processo, que são metanol, água e etilenoglicol.



Figura 184 - Componentes do exercício 3.1.

Para localizar os componentes pode-se buscá-los pela sua fórmula molecular na coluna *Alias*, pelo seu nome na coluna *Component name*, ou ainda, caso não seja possível encontrá-lo por esses dois métodos podemos clicar no botão *Find* onde uma nova janela aparecerá com mais opções de busca.

Clicando novamente no botão *Next*, vamos escolher o modelo termodinâmico que será utilizado na simulação. Você pode escolher o modelo caso já saiba qual é mais adequado aos seus componentes ou utilizar o *Methods assistant* para que o Aspen o ajude a encontrar o melhor modelo. Utilizando esse artifício, os métodos sugeridos foram NRTL, Wilson, UNIQUAC ou UNIFAC. Vamos utilizar o UNIFAC, mas qualquer um dos outros também pode ser utilizado.

Figura 185 - Modelo Termodinâmico do exercício 3.1.

Ao clicarmos no botão *Next* seremos levados a uma janela, onde escolhemos *Go to Simulation environment*, onde clicamos em *Next*, novamente, o que nos levará para a definição das correntes (*Streams*) de entrada. Vamos começar pela corrente fria de entrada, conforme a Figura 186.

Component	Value
METHA-01	
WATER	
ETHYL-01	15000
Total:	15000

Figura 186 - Especificações de entrada da corrente fria do exercício 3.1.

O mesmo é feito para a corrente quente de entrada, com os dados fornecidos pelo enunciado.

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: **140** **F**

Pressure: **14,6** **psia**

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mole**

Total flow rate: **lbmol/hr**

Solvent:

Composition

Mass-Flow **lb/hr**

Component	Value
METHA-01	200
WATER	1800
ETHYL-01	

Total: **2000**

Figura 187 - Especificações de entrada da corrente quente do exercício 3.1.

Clicando novamente em *Next* vamos especificar os equipamentos (*Blocks*), começando pelo TC-01 conforme a Figura 188.

Specifications

Flash specifications

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

Temperature: **70** **F**

Temperature change: **F**

Degrees of superheating: **F**

Degrees of subcooling: **F**

Pressure: **0** **psia**

Duty: **Btu/hr**

Vapor fraction:

Pressure drop correlation parameter:

Valid phases

Vapor-Liquid

Figura 188 - Especificações do TC-01 para o exercício 3.1.

As especificações do TC-01 foram feitas com os dados fornecidos no enunciado. Sabe-se que a corrente quente será resfriada até 70°F, de modo que a temperatura do trocador de calor da corrente quente deverá ter uma temperatura de operação igual a 70°F. Quanto à pressão, sabe-se que não há perda de carga nos trocadores de calor, de modo que no campo *Pressure* vamos inserir o número 0, significando que a perda de carga no equipamento é nula.

Com outro *Next* vamos especificar o TC-02, como na Figura 189.

Specifications Flash Options Utility Information

Flash specifications

Flash Type: Pressure

Inlet heat stream

Temperature: F

Temperature change: F

Degrees of superheating: F

Degrees of subcooling: F

Pressure: 0 psia

Duty: Btu/hr

Vapor fraction:

Pressure drop correlation parameter:

Valid phases

Vapor-Liquid

Figura 189 - Especificações do TC-02 para o exercício 3.1.

Nota-se que o Aspen requer somente uma propriedade a ser fornecida para o TC-02. Isso porque no fluxograma foi colocada uma corrente de calor saindo do TC-01 e indo para o TC-02, o que indica que todo o calor que sai de um trocador, vai para o outro. Como já se sabe que o calor trocado pelo TC-02 será o mesmo que o calor trocado pelo TC-01, só há necessidade de definir uma propriedade. No caso, sabemos que a perda de carga do segundo trocador de calor também é 0.

Feitas todas essas etapas, podemos rodar a simulação.

Para encontrar a temperatura de saída da corrente fria, vamos em *Results Summary – Streams*, onde há uma tabela semelhante à da Figura 190.

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

Display: All streams Format: GEN_E Stream Table Copy All

	EFRIA	EQUENTE	SFRIA	SQUENTE	
Temperature F	40	140	56,8	70	
Pressure psia	14,6	14,6	14,6	14,6	
Vapor Frac	0	0	0	0	
Mole Flow lbmol/hr	241,669	106,157	241,669	106,157	
Mass Flow lb/hr	15000	2000	15000	2000	
Volume Flow cuft/hr	211,23	34,368	212,782	32,984	
Enthalpy MMBtu/hr	-47,934	-12,795	-47,798	-12,932	
Mole Flow lbmol/hr					
METHA-01		6,242		6,242	
WATER		99,915		99,915	
ETHYL-01	241,669		241,669		

Figura 190 - Resultados das correntes do exercício 3.1.

Dessa forma, tem-se que a temperatura de saída da corrente fria é de aproximadamente 56,8°F.

Na segunda questão, pede-se a carga térmica dos trocadores de calor. Para obter essa informação vamos em *Blocks*, então em TC-01 e TC-02 e, por, fim, em *Results*. As cargas térmicas são de aproximadamente -40kW e +40kW, respectivamente, sendo que a carga térmica do trocador que cede calor tem sinal negativo.

Na questão seguinte, vamos plotar um gráfico com os perfis de temperaturas ao longo dos equipamentos para as duas correntes.

Para tal, primeiro vamos utilizar o recurso Hcurves. Vamos em *Blocks*, TC01, *Hcurves* e vamos criar um *Hcurve* com o *Heatduty* (carga térmica) como variável independente, já que esta não varia ao longo do trocador de calor.

Setup Additional Properties Results

Independent variable

☒ Heat duty ☐ Temperature ☐ Vapor fraction

Range for heat duty

☒ Number of data points: 10 ☐ Increment size: ☐ List of values:

Pressure profile

Pressure profile option: Constant

Pressure drop: 0 psi

Figura 191 - Criando uma Hcurve com a carga térmica como variável independente, referente ao exercício 3.1.

Dando um *Run*, obtemos os resultados, assim:

	Point No.	Status	Heat duty	Pressure	Temperature	Vapor fraction
			Btu/hr	psia	F	
▶	1	OK	0	14,6	140	0
▶	2	OK	-12387,9	14,6	133,769	0
▶	3	OK	-24775,8	14,6	127,51	0
▶	4	OK	-37163,7	14,6	121,225	0
▶	5	OK	-49551,5	14,6	114,912	0
▶	6	OK	-61939,4	14,6	108,574	0
▶	7	OK	-74327,3	14,6	102,209	0
▶	8	OK	-86715,2	14,6	95,8176	0
▶	9	OK	-99103,1	14,6	89,4009	0
▶	10	OK	-111490	14,6	82,9587	0
▶	11	OK	-123880	14,6	76,4916	0
▶	12	OK	-136270	14,6	70	0

Figura 192 - Resultados Hcurves do exercício 3.1.

Agora vamos plotar um gráfico com a temperatura no eixo y e o número de pontos no eixo x. Faz-se o mesmo agora para o TC02 plotando essa segunda curva no mesmo gráfico da primeira. Ficando como na Figura 193.

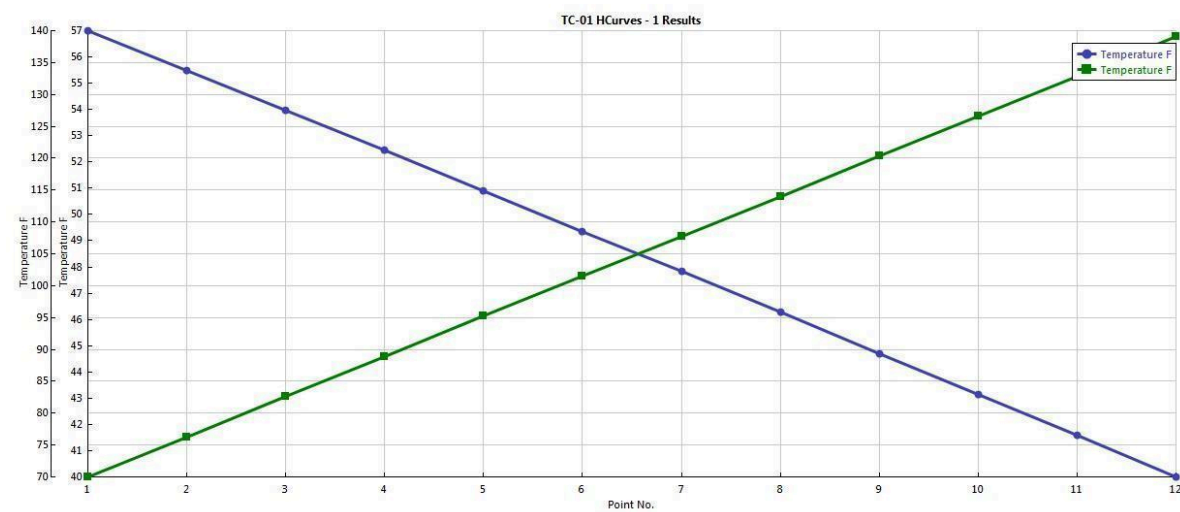


Figura 193 - Gráfico resultante dos perfis de temperatura para a questão c) do exercício 3.1.

É fácil perceber que o gráfico está estranho, mas não errado. O que ocorreu é que o Aspen criou dois eixos y com diferentes medidas. Para arrumá-lo, vamos fazer com que os limites inferior e superior de ambos os eixos y sejam iguais. Mín = 40 e máx = 140. Basta clicar em cima do eixo para arrumar, os valores na parte superior da tela.

O gráfico fica como na Figura 194.

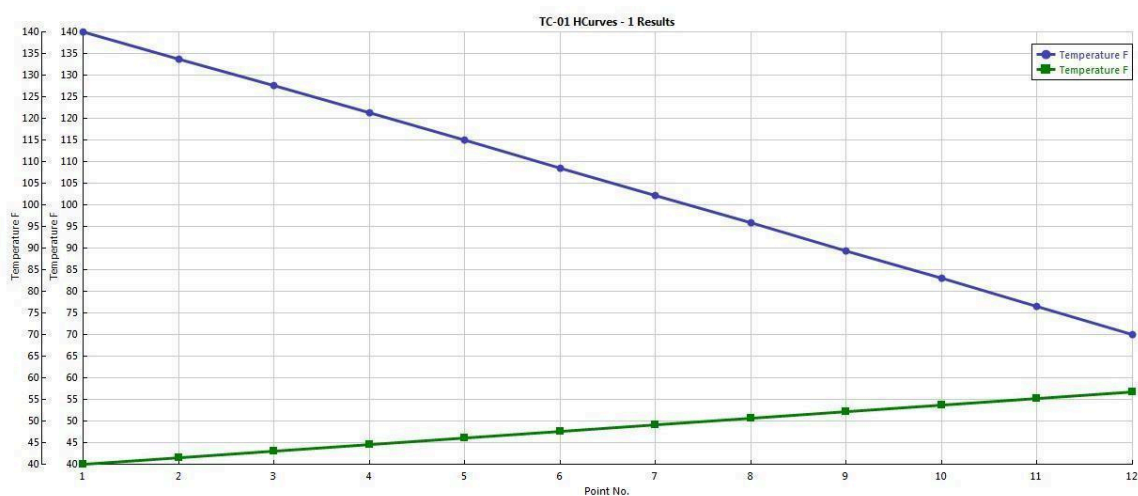


Figura 194 - Gráfico resultante dos perfis de temperatura com os eixos ajustados para a questão c) do exercício 3.1.

Na última questão, vamos modificar a especificação do TC-01, já que queremos que a corrente quente se resfrie até 55°F, da seguinte forma.

Figura 195 - Especificações do TC-01 questão d) do exercício 3.1.

Clicando em *Next*, vamos rodar a simulação.

A carga térmica nesse caso será de 48kW e indo em *Results Summary – Streams*, obtemos a seguinte tabela, na qual a temperatura de saída da corrente fria é de 60,3°F. De fato ela é maior que na primeira situação e isso se deve pelo fato de que os fluidos estão trocando mais calor: a corrente quente resfria mais e a corrente fria, por sua vez, deve receber mais calor.

Material	Heat	Load	Work	Vol.% Curves	Wt. % Curves	Petroleum	Polymers	Solids
Display:	All streams	Format:	GEN_M	Stream Table	Copy All			
	EFRIA	EQUENTE	SFRIA	SQUENTE				
Temperature F	40	140	60,3	55				
Pressure psia	14,6	14,6	14,6	14,6				
Vapor Frac	0	0	0	0				
Mole Flow lbmol/hr	241,669	106,157	241,669	106,157				
Mass Flow lb/hr	15000	2000	15000	2000				
Volume Flow cuft/hr	211,23	34,368	213,108	32,71				
Enthalpy Gcal/hr	-12,079	-3,224	-12,038	-3,266				
Mole Flow lbmol/hr								
METHA-01		6,242		6,242				
WATER		99,915		99,915				
ETHYL-01	241,669		241,669					

Figura 196 - Resultados das temperaturas das correntes para a questão d) do exercício 3.1.

Exercício 3.2. Mistura de correntes - Pontos de bolha e orvalho

- $T = 84,5^{\circ}\text{C}$ ($U=500\text{J/s}$)
- $T_{\text{Bolha}} = 75,5^{\circ}\text{C}$ e $T_{\text{Orvalho}} = 111,3^{\circ}\text{C}$
- $Q = 457,324\text{kW}$

Fluxograma proposto:

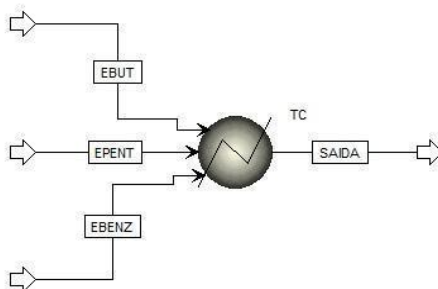


Figura 197 - Fluxograma proposto para o exercício 3.3.

Após montar o fluxograma, vamos clicar em *Next*, o que nos levará para a página *Components*, onde vamos definir os componentes utilizados no processo, conforme a Figura 198.

Component ID	Type	Component name	Alias
N-BUTANE	Conventional	N-BUTANE	C4H10-1
N-PENTANE	Conventional	N-PENTANE	C5H12-1
BENZENE	Conventional	BENZENE	C6H6

Figura 198 - Definição dos componentes para o exercício 3.3.

Para localizar os componentes pode-se buscá-los pela sua fórmula molecular na coluna *Alias*, pelo seu nome na coluna *Component name*, ou ainda, caso não seja possível encontrá-lo por esses dois métodos, podemos clicar no botão *Find*, onde uma nova janela aparecerá com mais opções de busca.

Clicando novamente no botão *Next*, vamos escolher o modelo termodinâmico que será utilizado na simulação. Você pode escolher o modelo caso já saiba qual é o mais adequado aos seus componentes ou utilizar o *Methods assistant* para que o Aspen o ajude a encontrar o melhor modelo. Utilizando esse artifício, os métodos sugeridos foram NRTL, Wilson, UNIQUAC ou UNIFAC. Vamos utilizar o modelo NRTL, que é bom para prever tanto equilíbrios entre líquido-líquido e líquido-vapor.

Global Flowsheet Sections Referenced Information

Property methods & options

Method filter: COMMON

Base method: NRTL

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method: STEAM-TA

Water solubility: 3

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Method name: NRTL

Methods assistant...

☐ Modify

Vapor EOS: ESIG

Data set: 1

Liquid gamma: GMRENON

Data set: 1

Liquid molar enthalpy: HLMX86

Liquid molar volume: VLMX01

☒ Heat of mixing

☐ Poynting correction

☐ Use liquid reference state enthalpy

Figura 199 - Modelo termodinâmico para o exercício 3.3.

Ao clicarmos em *Next*, o Aspen nos mostrará os parâmetros referentes ao modelo NRTL para os componentes envolvidos. Clicando novamente em *Next*, escolhemos *Go to Simulation environment*. Com o *Next* novamente, vamos especificar as correntes do processo conforme a Figura 200, Figura 201 e a Figura 202.

Mixed CI Solid NC Solid Flash Options EO Options Costing Information

Flash Type: Temperature Pressure

State variables

Temperature: 65 C

Pressure: 5 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Mole

Total flow rate: kmol/hr

Solvent:

Composition

Mole-Flow kmol/hr

Component	Value
N-BUTANE	
N-PENTAN	
BENZENE	40

Total: 40

Figura 200 - Especificações da corrente de Benzeno para o exercício 3.3.

Mixed CI Solid NC Solid Flash Options EO Options Costing Information

Flash Type: Temperature Pressure

State variables

Temperature: 90 C

Pressure: 5 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Mole

Total flow rate: kmol/hr

Solvent:

Composition

Mole-Flow kmol/hr

Component	Value
N-BUTANE	40
N-PENTAN	
BENZENE	

Total: 40

Figura 201 - Especificações da corrente de Butano para o exercício 3.3.

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: 80 C

Pressure: 5 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Mole

Total flow rate: kmol/hr

Solvent:

Composition

Mole-Flow kmol/hr

Component	Value
N-BUTANE	
N-PENTAN	20
BENZENE	
Total:	20

Figura 202 - Especificações da corrente de Pentano para o exercício 3.3.

As informações sobre temperatura e pressão foram dadas no enunciado. As vazões de cada corrente foram feitas de acordo com a composição da corrente de saída, que foi dada no enunciado, com uma base molar de 100 kmol/h.

Clicando no botão *Next* novamente, o Aspen nos leva às especificações do *Heater*.

Flash specifications

Flash Type: **Pressure** **Duty**

Temperature: C

Temperature change: C

Degrees of superheating: C

Degrees of subcooling: C

Pressure: 5 bar

Duty: 500 J/sec

Vapor fraction:

Pressure drop correlation parameter:

Valid phases

Vapor-Liquid

Figura 203 - Especificações do Heater para a letra a) do exercício 3.3.

Sabe-se que a pressão de operação do equipamento será de 5 bar e a carga térmica para a letra a) é de 500J/s. Feito isso, podemos clicar no botão *Next* e rodar a simulação.

O resultado da temperatura da corrente de saída pode ser obtido indo em *Results Summary – Streams*, onde uma tabela semelhante à da Figura 204 aparecerá.

Material	Heat	Load	Work	Vol.% Curves	Wt.% Curves	Petroleum	Polymers	Solids
Display: All streams	Format: GEN_M	Stream Table	Copy All					
	EBENZ	EBUT	EPENT	SAIDA				
Temperature C	65	90	80	84,5				
Pressure bar	5	5	5	5				
Vapor Frac	0	1	0	0,283				
Mole Flow kmol/hr	40	40	20	100				
Mass Flow kg/hr	3124,55	2324,94	1443,01	6892,49				
Volume Flow cum/hr	3,761	241,548	2,571	176,08				
Enthalpy Gcal/hr	0,524	-1,136	-0,776	-1,388				
Mole Flow kmol/hr								
N-BUTANE		40		40				
N-PENTAN			20	20				
BENZENE	40			40				

Figura 204 - Resultados das temperaturas das correntes do exercício 3.3.

Assim, a temperatura da corrente de saída é de 84,5°C.

Na segunda questão, quer-se saber as temperaturas de bolha e orvalho para a composição da corrente de saída. Para isso, basta mudarmos as especificações do *Heater*, definindo pressão e, dessa vez, fração de vapor. Quando quisermos a temperatura de bolha a fração de vapor é 0 e, quando quisermos a temperatura de orvalho, é equivalente a 1.

Specifications	Flash Options	Utility	Information
Flash specifications			
Flash Type:	Pressure		
	Vapor fraction		
Temperature:		C	
Temperature change:		C	
Degrees of superheating:		C	
Degrees of subcooling:		C	
Pressure:	5	bar	
Duty:	500	J/sec	
Vapor fraction:	0		
Pressure drop correlation parameter:			
Valid phases			
Vapor-Liquid			

Figura 205 - Especificações do Heater para determinar a temperatura de bolha para o exercício 3.3.

Para obter o resultado, podemos ir novamente à temperatura da corrente de saída, pois ela terá fração de vapor igual a 0, sendo, portanto, o ponto de bolha do sistema.

Material	Heat	Load	Work	Vol.% Curves	Wt. % Curves	Petroleum	Polymers	Solids
Display: All streams Format: GEN_M Stream Table Copy All								
	EBENZ	EBUT	EPENT	SAIDA				
► Temperature C	65	90	80	75,5				
► Pressure bar	5	5	5	5				
► Vapor Frac	0	1	0	0				
► Mole Flow kmol/hr	40	40	20	100				
► Mass Flow kg/hr	3124,55	2324,94	1443,01	6892,49				
► Volume Flow cum/hr	3,761	241,548	2,571	10,739				
► Enthalpy Gcal/hr	0,524	-1,136	-0,776	-1,561				
► Mole Flow kmol/hr								
► N-BUTANE		40		40				
► N-PENTAN			20	20				
► BENZENE	40			40				

Figura 206 - Resultados das correntes do processo para o Ponto de Bolha do exercício 3.3.

Dessa forma, temos que a temperatura de bolha para a composição da corrente de saída será de 75,5°C.

O mesmo é feito no caso da temperatura de orvalho, porém com fração de vapor igual a 1.

Material	Heat	Load	Work	Vol.% Curves	Wt. % Curves	Petroleum	Polymers	Solids
Display: All streams Format: GEN_M <button>Stream Table</button> <button>Copy All</button>								
	EBENZ	EBUT	EPENT	SAIDA				
► Temperature C	65	90	80	111,3				
► Pressure bar	5	5	5	5				
► Vapor Frac	0	1	0	1				
► Mole Flow kmol/hr	40	40	20	100				
► Mass Flow kg/hr	3124,55	2324,94	1443,01	6892,49				
► Volume Flow cum/hr	3,761	241,548	2,571	639,298				
► Enthalpy Gcal/hr	0,524	-1,136	-0,776	-0,887				
► Mole Flow kmol/hr								
► N-BUTANE		40		40				
► N-PENTAN			20	20				
► BENZENE	40			40				

Figura 207 - Resultados das correntes do processo para o Ponto de Orvalho do exercício 3.3.

Portanto, a temperatura de orvalho para composição da corrente de saída é de 111,3°C.

Na última questão queremos determinar a carga térmica necessária para que a corrente de saída possua uma fração de vapor de 0,85. Para isso, especificamos o *Heater* da seguinte maneira.

Specifications Flash Options Utility Information

Flash specifications

Flash Type: Pressure

Vapor fraction: Vapor fraction

Temperature: C

Temperature change: C

Degrees of superheating: C

Degrees of subcooling: C

Pressure: 5 bar

Duty: 500 J/sec

Vapor fraction: 0,85

Pressure drop correlation parameter:

Valid phases

Vapor-Liquid

Figura 208 - Especificações do Heater para a questão c) do exercício 3.3.

Clicando em *Next* e rodando a simulação temos que a carga necessária será de 457,324kW.

Summary Balance Phase Equilibrium Utility Usage Status

Outlet temperature: 106,405 C

Outlet pressure: 5 bar

Vapor fraction: 0,85

Heat duty: 457,324 kW

Net duty: 457,324 kW

1st liquid / Total liquid: 1

Pressure-drop correlation parameter:

Figura 209 - Carga térmica necessária para atingir uma fração de vapor de 0,85 para o exercício 3.3.

Exercício 3.3. Trocador de calor cocorrente

a) $T_{2,fria} = 82,4^{\circ}\text{C}$ e $T_{2,quente} = 87,9^{\circ}\text{C}$

b) $\text{LMTD} = 43,82^{\circ}\text{C}$.

Fluxograma proposto :

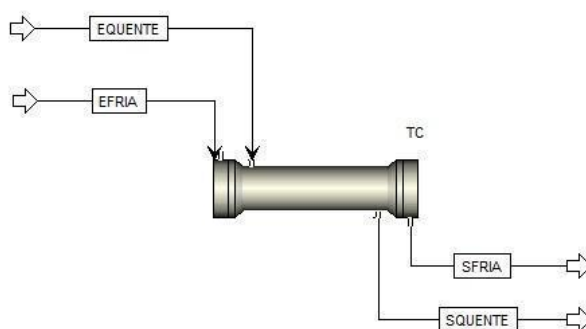


Figura 210 - Fluxograma proposto para o exercício 3.4.

Após montar o fluxograma utilizando um modelo TEMA tipo E, em configuração cocorrente, clicamos no botão *Next* o que nos leva para o *Components*, onde vamos definir os componentes envolvidos no processo, conforme a Figura 211.

Component ID	Type	Component name	Alias
ACETONE	Conventional	ACETONE	C3H6O-1
ETHER	Conventional	DIETHYL-ETHER	C4H10O-5

Figura 211 - Componentes envolvidos no exercício 3.4.

Clicando em *Next* novamente, vamos definir o modelo termodinâmico a ser utilizado nessa simulação. Você pode escolher o modelo caso já saiba qual é o mais adequado aos seus componentes ou utilizar o *Methods assistant* para que o Aspen o ajude a encontrar o melhor modelo. Utilizando esse artifício, os métodos sugeridos foram NRTL, Wilson, UNIQUAC ou UNIFAC. Vamos utilizar o modelo de Wilson.

Property methods & options

Method filter: COMMON

Base method: WILSON

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method: STEAM-TA

Water solubility: 3

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Method name: WILSON

Methods assistant...

Modify

Vapor EOS: ESIG

Data set: 1

Liquid gamma: GMWILSON

Data set: 1

Liquid molar enthalpy: HLMX85

Liquid molar volume: VLMX01

☒ Heat of mixing

☐ Poynting correction

☐ Use liquid reference state enthalpy

Figura 212 - Modelo termodinâmico utilizado no exercício 3.4.

Clicando em *Next* o Aspen nos mostrará os parâmetros utilizados pelo modelo de Wilson para os componentes em questão. Podemos clicar em *Next* novamente e, escolhendo *Go to Simulation environment*, clicamos em *Next* para especificar as correntes.

Flash Type: Temperature Pressure

State variables

Temperature: 0 C

Pressure: 10 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Mole

Total flow rate: 150 kmol/hr

Composition

Mole-Frac

Component	Value
ACETO-01	1
DIETH-01	

Total: 1

Figura 213 - Especificações da corrente fria para o exercício 3.4.

Flash Type: Temperature Pressure

State variables

Temperature: 150 C

Pressure: 10 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Mole

Total flow rate: kmol/hr

Solvent:

Composition

Mole-Flow kmol/hr

Component	Value
ACETONE	
ETHER	50

Total: 50

Figura 214 - Especificações da corrente quente para o exercício 3.4.

Clicando novamente no botão *Next* vamos especificar o equipamento utilizado, um trocador de calor de modelo *HeatX*. Não se esquecer de estabelecer U contante de $500\text{W/m}^2\cdot\text{K}$ na aba *U Methods*.

The screenshot shows the 'U Methods' tab in the HeatX software. The 'Calculation' section has 'Shortcut' selected. The 'Flow arrangement' section shows 'Hot fluid:' (empty), 'Flow direction:' set to 'Co-current', and 'No. shells in series:' set to '1'. The 'Rigorous Model' section has 'Simulation' selected. The 'Exchanger specification' section shows 'Specification:' (empty), 'Value:' (empty), 'Exchanger area:' set to '20' with units 'sqm', 'Constant UA:' set to 'cal/sec-K', and 'Minimum temperature approach:' set to '1' with units 'C'.

Figura 215 - Especificações do HeatX juntamente com a aba U Methods para o exercício 3.4.

Aqui vamos utilizar o método de cálculo *Shortcut* que não leva em consideração a geometria do equipamento e utiliza o coeficiente global como um valor constante e estipulado pelo usuário. Vamos utilizar o modo *Simulation*, pois esse modo de simulação irá calcular as condições de saída tendo todas as informações de entrada, além da área de troca térmica e o coeficiente global de troca térmica.

Clicando em *Next* podemos rodar a simulação. Encontramos os resultados das temperaturas de saída indo em *Results Summary – Streams*.

Material	Heat	Load	Work	Vol.% Curves	Wt. % Curves	Petroleum	Polymers	Solids
Display:	All streams	Format:	GEN_M	Stream Table	Copy All			
	EFRIA	EQUENTE	SFRIA	SQUENTE				
Temperature C	0	150	82,4	87,9				
Pressure bar	10	10	10	10				
Vapor Frac	0	1	0	0				
Mole Flow kmol/hr	150	50	150	50				
Mass Flow kg/hr	8712,01	3706,14	8712,01	3706,14				
Volume Flow cum/hr	10,662	175,91	12,155	5,914				
Enthalpy Gcal/hr	-8,95	-2,813	-8,574	-3,19				
Mole Flow kmol/hr								
ACETONE	150		150					
ETHER		50		50				

Figura 216 - Resultados das correntes do exercício 3.4.

Portanto, a temperatura de saída da corrente quente será de 87,9°C e a temperatura de saída da corrente fria será de 82,4°C.

Para determinar a LMTD (diferença de temperatura média logarítmica) vamos em resultados do *HeatX*, *Thermal Results* e *Exchanger Details*.

Summary	Balance	Exchanger Details	Pres Drop/Velocities	Zones	Utility Usage	Status
Exchanger details						
Calculated heat duty:	0,376625	Gcal/hr				
Required exchanger area:	19,9911	sqm				
Actual exchanger area:	20	sqm				
Percent over (under) design:	0,0443294					
Average U (Dirty):	429,923	kcal/hr-sqm-K				
Average U (Clean):						
UA:	2387,4	cal/sec-K				
LMTD (Corrected):	43,8208681	C				
LMTD correction factor:	1					
Thermal effectiveness:						
Number of transfer units:						
Number of shells in series:	1					
Number of shells in parallel:						

Figura 217 - Resultados referentes ao HeatX do exercício 3.4.

Exercício 3.4. Trocador de calor contracorrente

a) $Q = 0,555881 \text{ Gcal/hr}$

b) $A = 66,246 \text{ m}^2$

c) $\text{LMTD} = 19,5^\circ\text{C}$

d) $T = 9,5^\circ\text{C}$

Fluxograma proposto:

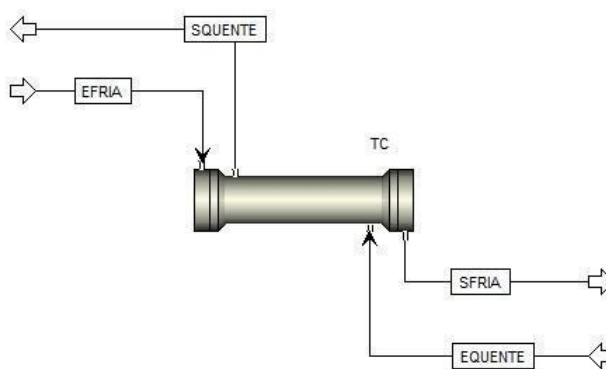


Figura 218 - Fluxograma proposto para o exercício 3.5.

Após montar o fluxograma utilizando um modelo TEMA tipo E e em configuração contracorrente, clicamos no botão *Next* o que nos leva para o *Components*, onde vamos definir os componentes envolvidos no processo.

Como o exercício 3.5. utiliza os mesmos componentes do exercício 3.4. e as mesmas correntes, as suas especificações são feitas de maneira análoga.

Feitas essas etapas, clicamos em *Next* e vamos especificar o nosso equipamento.

Figura 219 - Especificações do modelo HeatX para o exercício 3.5.

O valor da temperatura de saída da acetona foi dada no enunciado e utilizaremos o modo *Design* para determinar a área de troca térmica necessária para essa transferência de calor. Não se pode esquecer de definir o valor do coeficiente global de troca térmica na aba *U Methods*, que será de $500 \text{ W/m}^2 \cdot \text{K}$.

Clicando em *Next* novamente, podemos rodar a simulação.

Os resultados referentes à carga térmica, área de troca térmica e LMTD podem ser encontrados indo em *Blocks – TC – Thermal Results – Exchanger Details*, conforme a Figura 220.

Summary	Balance	Exchanger Details	Pres Drop/Velocities	Zones	Utility Usage	Status
Exchanger details						
Calculated heat duty:	0,555881	Gcal/hr				
Required exchanger area:	66,246	sqm				
Actual exchanger area:	66,246	sqm				
Percent over (under) design:	0					
Average U (Dirty):	429,923	kcal/hr-sqm-K				
Average U (Clean):						
UA:	7911,29	cal/sec-K				
LMTD (Corrected):	19,5179	C				
LMTD correction factor:	1					
Thermal effectiveness:						
Number of transfer units:						
Number of shells in series:	1					
Number of shells in parallel:						

Figura 220 - Resultados do HeatX para o exercício 3.5.

Portanto, a carga térmica é de 0,555881 Gcal/hr, a área é de 66,246m² e a LMTD é de 19,5°C. Para encontrar o valor da temperatura de saída do éter, vamos em *Results Summary* e *Streams*, conforme a seguinte figura, onde esse valor equivale a 9,5°C.

Material	Heat	Load	Work	Vol.% Curves	Wt. % Curves	Petroleum	Polymers	Solids
Display: All streams Format: GEN_M Stream Table Copy All								
	EFRIA	EQUENTE	SFRIA	SQUENTE				
Temperature C	0	150	115	9,5				
Pressure bar	10	10	10	10				
Vapor Frac	0	1	0	0				
Mole Flow kmol/hr	150	50	150	50				
Mass Flow kg/hr	8712,01	3706,14	8712,01	3706,14				
Volume Flow cum/hr	10,662	175,91	12,988	5,093				
Enthalpy Gcal/hr	-8,95	-2,813	-8,394	-3,369				
Mole Flow kmol/hr								
ACETONE	150		150					
ETHER		50		50				

Figura 221 - Resultados das correntes do exercício 3.5.

Exercício 3.5. Reaproveitamento de calor na produção de acetaldeído

- $Q = -4334,82\text{kW}$
- 2,28152854 Gcal/hr

c) Vazão de produtos = 400,22 kmol/h. Vazão de acetaldeído = 40,32 kmol/h.

d) Emissão de CO₂ = 709,79kg/h e 6 858,6 toneladas/ano.

Fluxograma proposto:

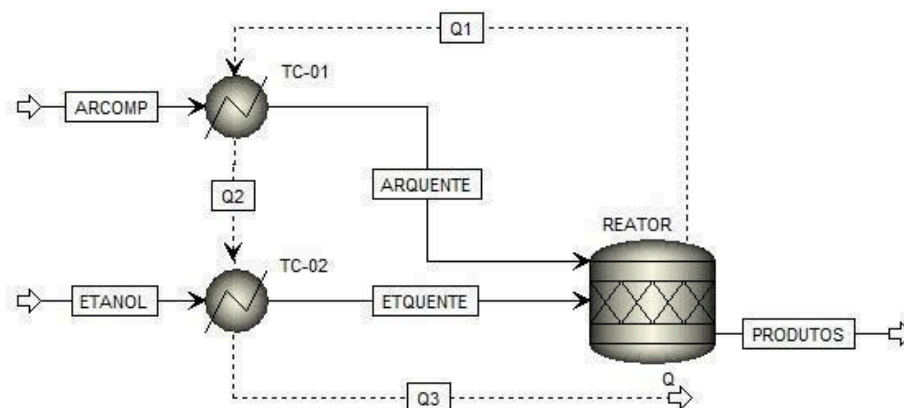


Figura 222 - Fluxograma proposto para o exercício 3.6.

Após montar o fluxograma, vamos clicar em Next o que nos levará para a página *Components*, onde vamos definir os componentes utilizados no processo, conforme a Figura 223.

Selection Petroleum Nonconventional Databanks Information

Select components:

Component ID	Type	Component name	Alias
ETHANOL	Conventional	ETHANOL	C2H6O-2
ACETALDE	Conventional	ACETALDEHYDE	C2H4O-1
OXYGEN	Conventional	OXYGEN	O2
NITROGEN	Conventional	NITROGEN	N2
WATER	Conventional	WATER	H2O
CARBONDI	Conventional	CARBON-DIOXIDE	CO2

Find Elec Wizard User Defined Reorder Review

Figura 223 - Componentes envolvidos no exercício 3.6.

Ao invés de colocarmos Ar como um componente, colocamos oxigênio e nitrogênio separados, pois o processo envolve reações em que o O₂ é um reagente.

Feito isso, clicamos no botão *Next* e vamos à escolha do modelo termodinâmico utilizado. Pode-se utilizar o *Methods Assistant* ou escolher um modelo que considere bom para o caso. Nesse exercício vamos utilizar o modelo *Wilson*, visto que essa planta não opera em altas pressões (>10bar).

Figura 224 - Modelo termodinâmico utilizado no exercício 3.6.

Podemos dar um Next e o Aspen nos mostrará os parâmetros envolvidos no modelo de Wilson para os componentes do processo. Clicando em Next novamente, escolhemos *Go to Simulation environment* e, clicando em Next, vamos definir as correntes de entrada: ArComp e Etanol, de acordo com a Figura 225 e a Figura 226.

Component	Value
ETHANOL	
ACETALDE	
OXYGEN	0.21
NITROGEN	0.79
WATER	
CARBONDI	
Total:	1

Figura 225 - Especificações de entrada da corrente de Ar comprimido para o exercício 3.6.

Faz-se de maneira análoga para o etanol, não esquecendo que trata-se de etanol 70% (0,3 água e 0,7 etanol nas frações molares). As condições de operação foram todas dadas no enunciado.

Component	Value
ETHANOL	0.7
ACETALD	
O2	
N2	
WATER	0.3
CO2	
Total:	1

Figura 226 - Especificações de entrada da corrente de etanol do exercício 3.6.

Clicando em *Next*, vamos agora definir as condições do Reator conforme as figuras abaixo:

Specifications Reactions Combustion Heat of Reaction Selectivity PSD Component Attr. Utility Information

Operating conditions

Flash Type: Temperature Pressure

Temperature: 360 C

Pressure: 3,6 bar

Duty: Gcal/hr

Vapor fraction:

Valid phases

Vapor-Liquid

Figura 227 - Especificações do reator temperatura e pressão do exercício 3.6.

A temperatura é de 360°C, considerando que a temperatura de saída dos componentes é a mesma que a de operação.

Agora vamos definir as reações envolvidas. Para inserir reações vamos na aba *Reactions*. Em seguida clicamos no botão New e, então, são colocados os componentes e seus coeficientes estequiométricos, bem como a conversão de um deles. No caso, a conversão dada foi a do etanol, que é de 80%.

Specifications Reactions Combustion Heat of Reaction Selectivity PSD Component Attr. Utility Information

Reactions

Rxn No. 1

Reactions occur

Edit Stoichiometry

Reaction No.: 1

Reactants

Component	Coefficient
ETHANOL	-1
OXYGEN	-0,5

Products

Component	Coefficient
ACETALDE	1
WATER	1

Products generation

☐ Molar extent: kmol/hr

☒ Fractional conversion: 0,8 of component ETHANOL

Close

Figura 228 - Especificações da reação de oxidação do exercício 3.6.

Specifications Reactions Combustion Heat of Reaction Selectivity PSD Component Attr. Utility Information

Reactions

Rxn No. 2

Reactions occur

Edit Stoichiometry

Reaction No.: 2

Reactants

Component	Coefficient
ETHANOL	-1
OXYGEN	-3

Products

Component	Coefficient
CARBONDI	2
WATER	3

Products generation

☐ Molar extent: kmol/hr

☒ Fractional conversion: 0,16 of component ETHANOL

Close

Figura 229 - Especificação para a reação de queima do etanol do exercício 3.6.

A conversão da reação 2 é igual a conversão da reação 1 dividida por 5, também de acordo com o enunciado, totalizando 0,16.

Vamos, então, definir as condições de operação dos trocadores de calor, conforme a Figura 230.

Flash specifications		
Flash Type:	Pressure	
	Temperature	
Temperature:	240	C
Temperature change:		C
Degrees of superheating:		C
Degrees of subcooling:		C
Pressure:	3,6	bar
Duty:		Gcal/hr
Vapor fraction:		
Pressure drop correlation parameter:		
Valid phases		
Vapor-Liquid		

Figura 230 - Especificações para o TC-01 do exercício 3.6.

O TC-01 é o aquecedor do ar comprimido, e suas condições foram dadas no enunciado.

Analogamente, faz-se o mesmo para o trocador de calor TC02, evaporador de etanol. As condições de operação são as mesmas que as do TC01, conforme o enunciado.

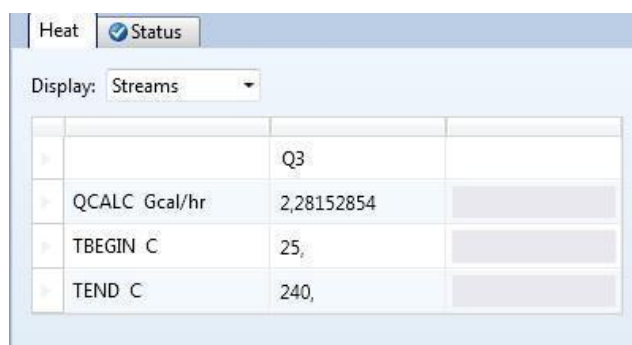
Feitos todos os passos, podemos clicar no botão *Next* e rodar a simulação.

Para determinar a carga térmica do reator vamos em *Blocks – Reator - Results* e, então, uma tabela semelhante a da figura abaixo aparecerá.

Summary		
Outlet temperature:	360	C
Outlet pressure:	3,6	bar
Heat duty:	-4334,82	kW
Net heat duty:	-4334,82	kW
Vapor fraction:	1	
1st liquid / Total liquid:		

Figura 231 - Especificações para o TC-01 do exercício 3.6.

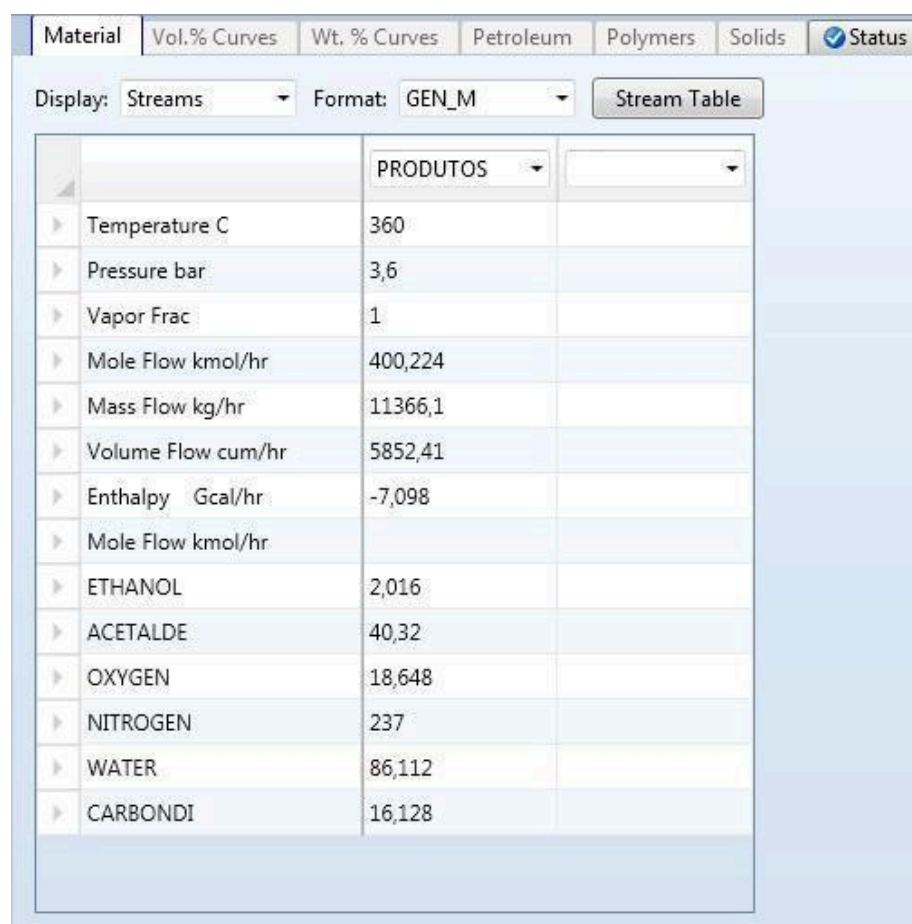
Portanto, a carga térmica do reator é de -4335kW. Para determinarmos a quantidade de energia restante na corrente de calor Q3, vamos em *Streams – Q3 – Results*, conforme a figura abaixo. O resultado foi de 2,3 Gcal/hr.



Heat		Status
Display: Streams		
	Q3	
QCALC Gcal/hr	2,28152854	
TBEGIN C	25,	
TEND C	240,	

Figura 232 - Resultado da corrente de calor Q3 do exercício 3.6.

A questão c) requer a determinação da composição da corrente de produtos. Para tal, vamos em *Streams – Produtos – Results*, conforme a seguinte figura. Sendo a vazão total equivalente a 400kmol/h e a quantidade de acetaldeído nessa corrente é de 40,32kmol/h.



Material		Vol. % Curves	Wt. % Curves	Petroleum	Polymers	Solids	Status
Display: Streams		Format: GEN_M		Stream Table			
	PRODUTOS						
Temperature C	360						
Pressure bar	3,6						
Vapor Frac	1						
Mole Flow kmol/hr	400,224						
Mass Flow kg/hr	11366,1						
Volume Flow cum/hr	5852,41						
Enthalpy Gcal/hr	-7,098						
Mole Flow kmol/hr							
ETHANOL	2,016						
ACETALDE	40,32						
OXYGEN	18,648						
NITROGEN	237						
WATER	86,112						
CARBONDI	16,128						

Figura 233 - Resultado da corrente de produtos do exercício 3.6.

Em seguida, quer-se saber a emissão de dióxido de carbono nessa planta por hora e por ano. Para isso, vamos em *Results Summary - CO2 Emissions*. O valor encontrado deve ser de, aproximadamente, 710kg/h e de 6 860 toneladas por ano.

Summary		
Hierarchy:	PLANT	
Net stream CO2e:	709,79	kg/hr
Utility CO2e:	0	kg/hr
Total CO2e:	709,79	kg/hr
Net carbon fee / tax:	0	\$/hr

Figura 234 - Resultados quanto a emissão de CO2 pela planta do exercício 3.6.

CAPÍTULO 4

Exercício 4.1. Destilação

A proposta não é válida, pois o sistema etanol/água forma um azeótropo, impedindo que se alcance a pureza desejada. Mantendo o número de estágios e mudando a recuperação de água e etanol para 10% e 90%, respectivamente, a simulação convergirá. A temperatura da corrente de topo é 109,2°C e a de fundo, 126,4°C e as cargas térmicas do condensador de topo e a do refeedor são, respectivamente, 528,91kW e 790,57kW.

Fluxograma sugerido:

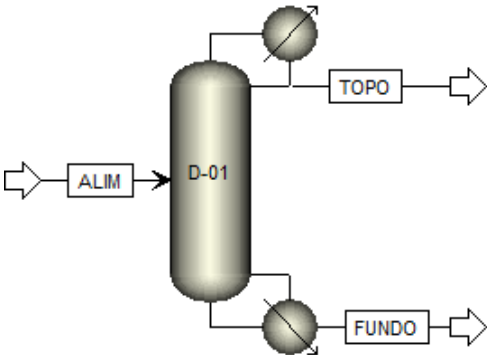


Figura 235 - Fluxograma sugerido para o exercício 4.1

Especificação dos componentes:

Select components:				
	Component ID	Type	Component name	Alias
▶	WATER	Conventional	WATER	H2O
▶	ETHANOL	Conventional	ETHANOL	C2H6O-2
▶				
Find Elec Wizard User Defined Reorder Review				

Figura 236 - Componentes selecionados para o exercício 4.1.

Selecionar um modelo termodinâmico adequado. Para a resolução deste exercício, usamos o modelo UNIQUAC, como mostra a Figura 237.

Property methods & options

Method filter: **COMMON**

Base method: **UNIQUAC**

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method: **STEAM-TA**

Water solubility: **3**

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Figura 237 - Modelo termodinâmico selecionado para o exercício 4.1.

Especificar a corrente de alimentação, como mostra a Figura 238.

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: **25** **C**

Pressure: **1** **atm**

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mole**

Total flow rate: **100** **kmol/hr**

Solvent:

Composition

Mole-Frac

Component	Value
WATER	0,8
ETHANOL	0,2

Total: **1**

Figura 238 - Especificação da corrente de alimentação do exercício 4.1.

Especificar as condições de operação da destiladora conforme proposto no enunciado, como mostra a Figura 239.

Column specifications

☒ Number of stages: **10**

☐ Reflux ratio:

Key component recoveries

Light key:

Comp: **ETHANOL**

Recov: **0,95**

Heavy key:

Comp: **WATER**

Recov: **0,01**

Pressure

Condenser: **3** **bar**

Reboiler: **3** **bar**

Condenser specifications

☒ Total condenser

☐ Partial condenser with all vapor distillate

☐ Partial condenser with vapor and liquid distillate

Distillate vapor fraction: **0**

Figura 239 - Especificações da coluna destiladora do exercício 4.1.

Ao realizar a simulação, um erro será listado, devido à alta recuperação de etanol utilizada, o que está além do ponto de azeotropia. O diagrama T-xy para o sistema a 3 bar pode ser construído no Aspen Properties da forma como fizemos nos exercícios e exemplos anteriores. Crie um Property Set com as propriedades TBUB e TDEW e uma análise tipo GENERIC com pressão de 3 bar e fração molar de etanol variando de 0 a 1 com o número de pontos desejado. O gráfico plotado para os resultados deve estar de acordo com a Figura 240.

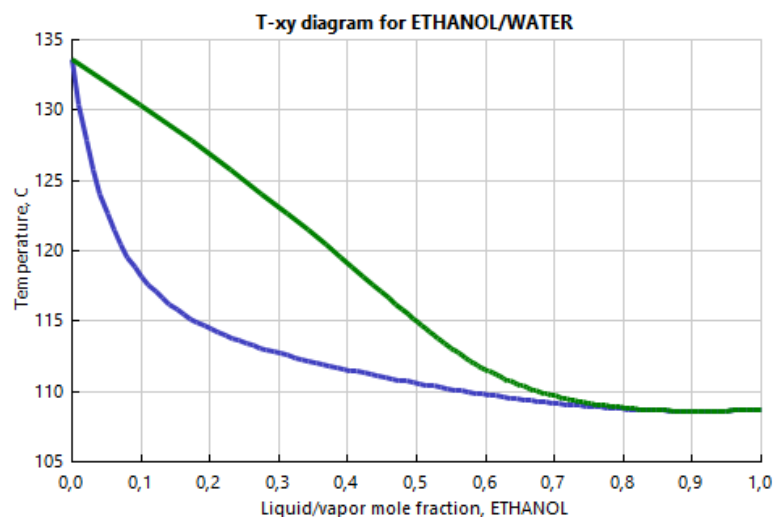


Figura 240 - Diagrama de fases T-xy para o exercício 4.1.

Testando com recuperação de 90% de etanol e 10% de água na corrente de topo, os resultados convergirão. Em *Results*, na pasta da destiladora D-01, os resultados calculados podem ser encontrados, como mostra a Figura 241.

Results		
▶ Minimum reflux ratio:	0,423633	
▶ Actual reflux ratio:	0,973084	
▶ Minimum number of stages:	5,93968	
▶ Number of actual stages:	10	
▶ Feed stage:	9,46122	
▶ Number of actual stages above feed:	8,46122	
▶ Reboiler heating required:	188824	cal/sec
▶ Condenser cooling required:	126328	cal/sec
▶ Distillate temperature:	109,213	C
▶ Bottom temperature:	126,403	C
▶ Distillate to feed fraction:	0,26	

Figura 241 - Resultados da destiladora do exercício 4.1.

Exercício 4.2. Componente-chave leve e componente-chave pesado na destilação

Este exercício consiste em, dependendo do produto de topo e/ou de fundo desejado, qual componente deve ser selecionado como chave leve ou chave pesado para o projeto preliminar da coluna de destilação. Na resolução não foi feito isto, mas é recomendável organizar a lista de componentes em ordem decrescente de volatilidade para que a escolha fique mais fácil. A resolução foi feita para uma das formas possíveis de se obter um destilado com elevada recuperação de metano e propano e com um produto de fundo com maior quantidade de benzeno, tolueno e o-xileno. Outras escolhas podem ser feitas, como escolher um componente mais pesado que o propano como chave leve e/ou um componente mais leve que o n-hexano como chave pesado.

Fluxograma sugerido:

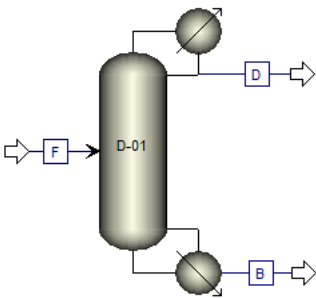


Figura 242 - Fluxograma sugerido para o exercício 4.2.

Especificando os componentes, tem-se:

	Component ID	Type	Component name	Alias
►	METHANE	Conventional	METHANE	CH4
►	ETHANE	Conventional	ETHANE	C2H6
►	PROPANE	Conventional	PROPANE	C3H8
►	BUTANO	Conventional	N-BUTANE	C4H10-1
►	PENTANO	Conventional	N-PENTANE	C5H12-1
►	HEXANO	Conventional	N-HEXANE	C6H14-1
►	OCTANO	Conventional	N-OCTANE	C8H18-1
►	BENZENE	Conventional	BENZENE	C6H6
►	TOLUENE	Conventional	TOLUENE	C7H8
►	O-XYLENE	Conventional	O-XYLENE	C8H10-1
►				

Figura 243 - Especificação dos componentes do exercício 4.2.

Escolha do método termodinâmico. Como sugerido pelo enunciado, usamos o método CHAO-SEADER.

Property methods & options

Method filter:

COMMON

Base method:

CHAO-SEA

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method:

STEAM-TA

Water solubility:

3

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

Use true components

☒

Figura 244 - Escolha do método termodinâmico para o exercício 4.2.

Especificação da corrente de alimentação da coluna de destilação:

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: **160** **C**

Pressure: **3** **bar**

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mass**

Total flow rate: **3000** **kg/hr**

Solvent:

Composition

Mass-Frac

Component	Value
METHANE	0,142
ETHANE	0,184
PROPANE	0,166
BUTANO	0,154
PENTANO	0,149
HEXANO	0,093
OCTANO	0,067
BENZENE	0,021
TOLUENE	0,013
O-XYLENE	0,011
Total:	1

Figura 245 - Especificação da corrente de alimentação da destiladora no exercício 4.2.

Dados de projeto para a coluna de destilação:

Column specifications

☒ Number of stages: **20**

☐ Reflux ratio:

Key component recoveries

Light key:

Comp: **PROPANE**

Recov: **0,95**

Heavy key:

Comp: **HEXANO**

Recov: **0,05**

Pressure

Condenser: **3** **bar**

Reboiler: **3** **bar**

Condenser specifications

☒ Total condenser

☐ Partial condenser with all vapor distillate

☐ Partial condenser with vapor and liquid distillate

Distillate vapor fraction:

Figura 246 - Inserção dos dados da destiladora no exercício 4.2.

Resultados do balanço de massa na coluna de destilação. Observe que com a escolha dos componentes-chave obtemos uma boa recuperação de metano e etano e a maior parte do benzeno, tolueno e o-xileno estão presentes no produto de fundo.

	B	D	F
Mole Flow kmol/hr			
METHANE	0,0118941	26,5421	26,554
ETHANE	0,122502	18,2349	18,3574
PROPANE	0,56467	10,7287	11,2934
BUTANO	2,5416	5,40701	7,94861
PENTANO	4,71002	1,48538	6,1954
HEXANO	3,07564	0,161876	3,23752
OCTANO	1,75622	0,0033696	1,75959
BENZENE	0,745057	0,0614605	0,806517
TOLUENE	0,417378	0,00588891	0,423267
O-XYLENE	0,310187	0,000642872	0,31083

Figura 247 - Resultados do balanço mássico na destiladora do exercício 4.2.

Exercício 4.3. Estudo de sensibilidade de uma coluna de absorção

Como é de se esperar, ao usarmos uma quantidade maior de solvente para absorção, conseguiremos uma melhor purificação do ar contaminado, reduzindo a concentração de amônia no ar que será lançado na atmosfera. Os resultados da análise de sensibilidade podem ser plotados em um gráfico com o auxílio do *Wizard Plot*. O segundo ponto representado no gráfico corresponde à vazão de 90 kmol/h de água, a pedida para o item A.

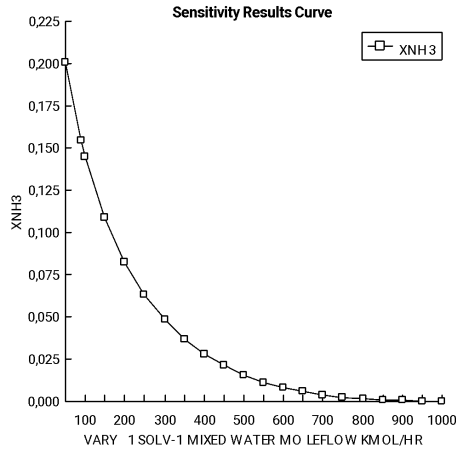


Figura 248 - Gráfico dos resultados da análise de sensibilidade do exercício 4.3.

Fluxograma sugerido:

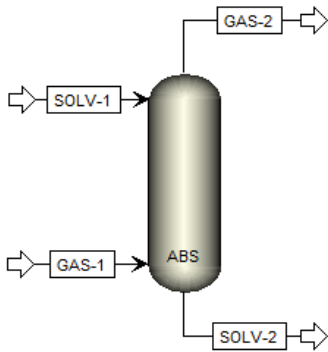


Figura 249 - Fluxograma sugerido para o exercício 4.3.

Especificando os componentes, tem-se:

Component ID	Type	Component name	Alias
AMMONIA	Conventional	AMMONIA	H3N
WATER	Conventional	WATER	H2O
AIR	Conventional	AIR	AIR

Figura 250 - Especificação dos componentes do exercício 4.3.

Escolha do método termodinâmico. Para esta resolução, utilizamos o método que descreve a fase gasosa pela equação de estado de Redlich-Kwong e a fase líquida pelo modelo NRTL, o método NRTL-RK.

Property methods & options

Method filter: **ALL**

Base method: **NRTL-RK**

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method: **STEAM-TA**

Water solubility: **3**

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Figura 251 - Escolha do método termodinâmico no exercício 4.3.

Especificação da corrente de ar que passará pelo processo de purificação.

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: **20** **C**

Pressure: **1,5** **atm**

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mole**

Total flow rate: **100** **kmol/hr**

Solvent:

Composition

Mole-Frac

Component	Value
AMMONIA	0,3
WATER	
AIR	0,7

Total: **1**

Figura 252 - Especificação da corrente de ar contaminado no exercício 4.3.

Especificação da corrente de solvente. Mesmo que o valor da vazão seja variado durante a análise de sensibilidade, devemos colocar um valor. Usaremos o valor pedido pelo enunciado no item A.

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: **60** **C**

Pressure: **2** **atm**

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mole**

Total flow rate:

Solvent:

Composition

Mole-Flow **kmol/hr**

Component	Value
AMMONIA	
WATER	90
AIR	

Total: **90**

Figura 253 - Especificação da corrente de água no exercício 4.3.

Especificação do bloco *RadFrac*:

Setup options

Calculation type: **Equilibrium**

Number of stages: **10** **Stage Wizard**

Condenser: **None**

Reboiler: **None**

Valid phases: **Vapor-Liquid**

Convergence: **Standard**

Figura 254 - Configuração da coluna de absorção no exercício 4.3.

Especificação da variável que será manipulada na análise de sensibilidade: a vazão de água alimentada.

Figura 255 - Escolha da variável manipulada na análise de sensibilidade no exercício 4.3.

Definição da variável estudada, no caso, a fração molar de amônia na corrente gasosa de saída.

Figura 256 - Escolha da variável estudada na análise de sensibilidade no exercício 4.3.

Escolha da expressão que será analisada. No caso, somente a variável XNH3 criada anteriormente.

Column No.	Tabulated variable or expression
1	XNH3

Figura 257 - Expressão avaliada na análise de sensibilidade do exercício 4.3.

Exercício 4.4. Otimização de uma coluna de destilação

Concluída a simulação, devem ter sido calculados o número teórico de estágios, a carga térmica do condensador e do refeedor e, claro, o preço estimado pela função objetivo para instalar e operar por 10 anos a coluna de destilação. Indo aos resultados, dentro da pasta *Results* na pasta do estudo de otimização, serão encontrados os resultados para NP, CQ e RQ.

	Variable	Initial value	Final value	Units
▶	NP	6	19,5185	
▶	CQ	136694	101986	CAL/SEC
▶	RQ	127555	92846,8	CAL/SEC

Figura 258 - Resultados ao final da convergência dos cálculos de otimização do exercício 4.4.

Para o custo da coluna, procure *Convergence > Convergence > \$OLVER01 > Results*. Lá estará o resultado da função objetivo e informações sobre o cálculo iterativo.

Objective function value:

136776478

Iteration count

Number of iterations on last outer loop:

2

Total number of flowsheet passes:

10

Number of flowsheet passes on last outer loop:

10

Figura 259 - Resultado da função objetivo da otimização no exercício 4.4.

Fluxograma sugerido:

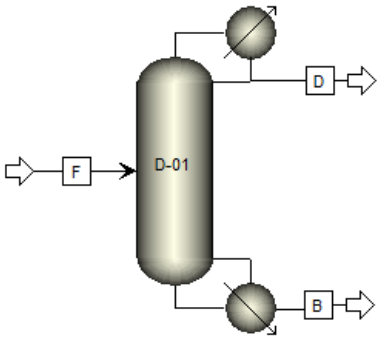


Figura 260 - Fluxograma sugerido para o exercício 4.4.

Especificando os componentes, tem-se:

	Component ID	Type	Component name	Alias
►	MCV	Conventional	VINYL-CHLORIDE	C2H3CL
►	DCE	Conventional	1,2-DICHLOROETHANE	C2H4CL2-2
►	HCL	Conventional	HYDROGEN-CHLORIDE	HCL
►	C2H2	Conventional	ACETYLENE	C2H2
►				

Figura 261 - Especificação dos componentes do exercício 4.4.

Escolha do método termodinâmico. Escolhemos o método de Soave-Redlich-Kwong (SRK), devido à presença do ácido clorídrico, que possui baixa temperatura crítica e esse método é capaz de descrever satisfatoriamente sistemas próximos da região crítica, bem como em condições supercríticas.

Property methods & options

Method filter:

COMMON

Base method:

SRK

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method:

STEAM-TA

Water solubility:

3

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Figura 262 - Escolha do modelo termodinâmico do exercício 4.4.

Especificação da corrente de alimentação:

Flash Type: **Pressure** **Vapor Fraction**

State variables

Temperature: C

Pressure: atm

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mole**

Total flow rate: kmol/hr

Solvent:

Composition

Mole-Frac

Component	Value
MCV	0,432
DCE	0,086
HCL	0,478
C2H2	0,004

Total: 1

Figura 263 - Especificação da corrente de alimentação do exercício 4.4.

Especificação do bloco *DSTWU*:

Column specifications

☒ Number of stages:

☐ Reflux ratio:

Key component recoveries

Light key:

Comp: **MCV**

Recov:

Heavy key:

Comp: **DCE**

Recov:

Pressure

Condenser: bar

Reboiler: bar

Condenser specifications

☒ Total condenser

☐ Partial condenser with all vapor distillate

☐ Partial condenser with vapor and liquid distillate

Distillate vapor fraction:

Figura 264 - Configuração da destiladora do exercício 4.4.

Definição da variável NP:

Type: **Block-Var**

Block: **D-01**

Variable: **NSTAGE**

Sentence: PARAM

Figura 265 - Parâmetros da variável número de pratos (NP) no exercício 4.4.

Definição da variável CQ:

Type: **Block-Var**

Block: **D-01**

Variable: **COND-DUTY**

Sentence: RESULTS

Units: cal/sec

Figura 266 - Parâmetros da variável carga térmica do condensador (CQ) no exercício 4.4.

Definição da variável RQ:

Type: Block-Var
 Block: D-01
 Variable: REB-DUTY
 Sentence: RESULTS
 Units: cal/sec

Figura 267 - Parâmetros da variável carga térmica do refeedor (RQ) no exercício 4.4.

Lista com as variáveis definidas para o cálculo da função objetivo:

	Flowsheet variable	Definition
►	NP	Block-Var Block=D-01 Variable=NSTAGE Sentence=PARAM
►	CQ	Block-Var Block=D-01 Variable=COND-DUTY Sentence=RESULTS Units=cal/sec
►	RQ	Block-Var Block=D-01 Variable=REB-DUTY Sentence=RESULTS Units=cal/sec
►		

Figura 268 - Lista com as variáveis definidas para a função objetivo do exercício 4.4.

Não foram especificadas restrições de projeto, então nossa função objetivo está irrestrita. Escreva apenas o nome dela (*PHI*) e, na aba *Fortran*, escreva as sentenças fornecidas. Tome cuidado com as unidades usadas na sua simulação e também com a posição dos caracteres. As linhas com comentários devem começar com “C” e as sentenças propriamente ditas devem começar no 7º caractere. No rodapé você pode ver em que linha e coluna está para te auxiliar.

Objective function
☐ Maximize
☒ Minimize
 PHI

Figura 269 - Definição da função objetivo do exercício 4.4.

Definição da variável a ser manipulada para a otimização e seu intervalo numérico.

Variable number: 1 ☐ Disable variable

Manipulated variable
 Type: Block-Var
 Block: D-01
 Variable: NSTAGE
 Sentence: PARAM

Manipulated variable limits
 Lower: 6
 Upper: 100

Report labels
 Line 1: Line 2:
 Line 3: Line 4:

Step size parameters
 Step size:
 Maximum step size:

Figura 270 - Escolha do intervalo numérico para a variável manipulada na otimização no exercício 4.4.

CAPÍTULO 5

Exercício 5.1. Aromatização de n-heptano

O uso do reciclo do n-heptano não reagido traz grandes vantagens, pois, com a simulação, é possível observar que o rendimento do processo é de quase 100%, isto é, pra os 20 lbmol/h da alimentação virgem, são produzidos, aproximadamente, 20 lbmol/h de tolueno.

Fluxograma sugerido:

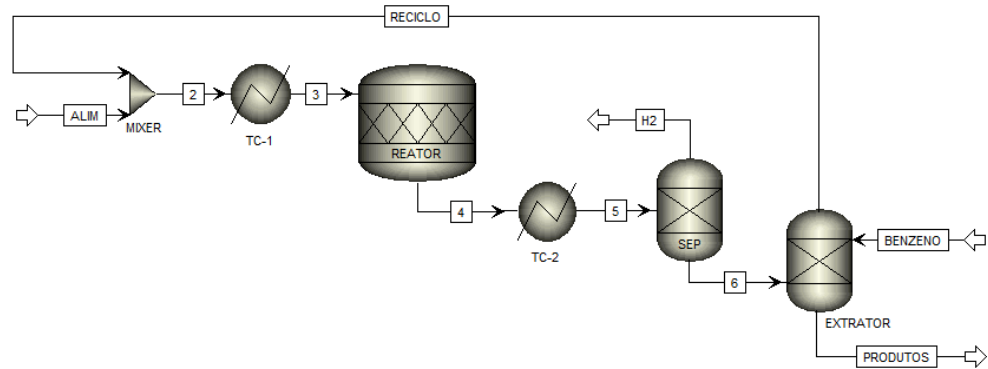


Figura 271 - Fluxograma sugerido para o exercício 5.1.

Comece especificando todos os componentes existentes no processo.

Component ID	Type	Component name	Alias
▶ HEPTANE	Conventional	N-HEPTANE	C7H16-1
▶ BENZENE	Conventional	BENZENE	C6H6
▶ HYDROGEN	Conventional	HYDROGEN	H2
▶ TOLUENE	Conventional	TOLUENE	C7H8

Figura 272 - Especificação dos componentes para o exercício 5.1.

Em seguida, escolha o método termodinâmico. O enunciado deste exercício pede que seja usado o método CHAO-SEADER, o qual utilizaremos na resolução a seguir:

Property methods & options

Method filter: COMMON

Base method: CHAO-SEA

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method: STEAM-TA

Water solubility: 3

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Figura 273 - Escolha do método termodinâmico para o exercício 5.1.

Passando para o ambiente de simulação, começaremos a especificar as correntes do processo. Primeiro, a corrente de alimentação virgem e, depois, a corrente de benzeno usado na coluna de extração.

Flash Type: Temperature Pressure

State variables

Temperature: 77 F

Pressure: 1 atm

Vapor fraction:

Total flow basis: Mole

Total flow rate: kmol/hr

Solvent:

Composition

Mole-Flow lbmol/hr

Component	Value
▶ HEPTANE	20
▶ BENZENE	
▶ HYDROGEN	
▶ TOLUENE	

Total: 20

Figura 274 - Especificação da corrente de alimentação virgem do processo no exercício 5.1.

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: **180** **F**

Pressure: **1** **atm**

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mole**

Total flow rate: **kmol/hr**

Solvent:

Composition

Mole-Flow **lbmol/hr**

Component	Value
HEPTANE	
BENZENE	100
HYDROGEN	
TOLUENE	

Total: **100**

Figura 275 - Especificação da corrente de benzeno no exercício 5.1.

Configuradas as correntes, prosseguiremos para a definição das condições de operação do reator estequiométrico e da estequiometria da reação.

Operating conditions

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

Temperature: **425** **F**

Pressure: **0** **bar**

Duty: **cal/sec**

Vapor fraction:

Valid phases

Vapor-Liquid

Figura 276 - Escolha das condições de operação do reator do exercício 5.1.

Reaction No.: **1**

Reactants

Component	Coefficient
HEPTANE	-1

Products

Component	Coefficient
TOLUENE	1
HYDROGEN	4

Products generation

☐ Molar extent: **kmol/hr**

☒ Fractional conversion: **0,15** of component **HEPTANE**

Figura 277 - Estequiometria da reação de aromatização de n-heptano no exercício 5.1.

Depois de configurado o reator, especificaremos as operações de separação no processo. Os blocos *Sep* utilizados necessitam apenas que sejam informadas as frações dos componentes que estarão presentes em uma determinada corrente de saída em relação à sua alimentação. Como a coluna de extração obtém benzeno e tolueno no fundo, colocaremos fração 1 para eles e 0 para os outros componentes. Já o separador que retira o gás hidrogênio do processo terá fração 1 para o hidrogênio e 0 para os outros componentes. Deve-se prestar atenção a qual corrente você está usando como referência para essas frações de partição.

Outlet stream conditions

Outlet stream: **PRODUTOS**

Substream: **MIXED**

Component ID	Specification	Basis	Value	Units
HEPTANE	Split fraction		0	
BENZENE	Split fraction		1	
HYDROGEN	Split fraction		0	
TOLUENE	Split fraction		1	

Figura 278 - Especificação do extrator (bloco Sep) do exercício 5.1.

Outlet stream conditions

Outlet stream: **H2**

Substream: **MIXED**

	Component ID	Specification	Basis	Value	Units
▶	HEPTANE	Split fraction		0	
▶	BENZENE	Split fraction		0	
▶	HYDROGEN	Split fraction		1	
▶	TOLUENE	Split fraction		0	

Figura 279 - Especificação do extrator (bloco Sep) do exercício 5.1.

Por fim, nos resta configurar os dois blocos Heater. Basta informar para cada um a temperatura na qual a saída se encontra e, não havendo informações sobre perda de carga, colocamos o valor 0 para o campo Pressure.

Flash specifications

Flash Type: **Temperature**

Pressure

Temperature: **425** **F**

Temperature change: C

Degrees of superheating: C

Degrees of subcooling: C

Pressure: **0** **bar**

Duty: Gcal/hr

Vapor fraction:

Pressure drop correlation parameter:

☐ Always calculate pressure drop correlation parameter

Figura 280 - Especificação do aquecedor (TC-1) do exercício 5.1.

Flash specifications

Flash Type: **Temperature**

Pressure

Temperature: **180** **C**

Temperature change: C

Degrees of superheating: C

Degrees of subcooling: C

Pressure: **0** **bar**

Duty: Gcal/hr

Vapor fraction:

Pressure drop correlation parameter:

☐ Always calculate pressure drop correlation parameter

Figura 281 - Especificação do aquecedor (TC-2) do exercício 5.1.

Feito isso, execute a simulação e verifique na pasta de resultados a planilha em *Streams Summary*.

Exercício 5.2. Produção de acetato de etila

Após a simulação, encontramos na pasta de resultados que a produção de acetato de etila é de, aproximadamente, 120 kmol/h.

Fluxograma sugerido:

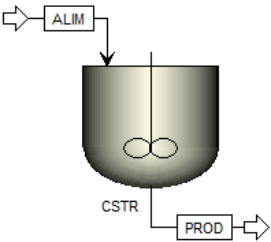


Figura 282 - Fluxograma sugerido para o exercício 5.2.

Comece especificando os componentes existentes no processo.

	Component ID	Type	Component name	Alias
▶	WATER	Conventional	WATER	H2O
▶	ETHANOL	Conventional	ETHANOL	C2H6O-2
▶	ACETATO	Conventional	ETHYL-ACETATE	C4H8O2-3
▶	ACIDO	Conventional	ACETIC-ACID	C2H4O2-1

Figura 283 - Especificação dos componentes para o exercício 5.2.

Para a resolução deste exercício, utilizamos o modelo NRTL, acreditando que ele descreva bem o sistema.

Figura 284 - Escolha do método termodinâmico no exercício 5.2.

Em seguida, passamos para a especificação da corrente de entrada do reator.

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: **70** **C**

Pressure: **1** **atm**

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mole**

Total flow rate: **kmol/hr**

Solvent:

Composition

Mole-Flow **kmol/hr**

Component	Value
WATER	9
ETHANOL	187
ACETATO	
ACIDO	194

Total: 390

Figura 285 - Especificação da corrente de alimentação do CSTR do exercício 5.2.

E então, para a configuração do CSTR. No box *Holdup*, devemos, mudar para *Liquid only*, pois consta no enunciado que a reação ocorre em estado líquido.

Specifications Streams Reactions PSD Component Attr. Utility Catalyst Information

Operating conditions

Pressure: **0** **bar**

☒ Temperature: **70** **C**

☐ Duty: **cal/sec**

☐ Vapor fraction:

Holdup

Valid phases: **Liquid-Only** **2nd Liquid**

Specification type: **Reactor volume**

Reactor

Volume: **140** **l**

Resi. time: **hr**

Phase

Phase: **l**

Volume: **l**

Volume frac:

Residence time: **hr**

Figura 286 - Especificação do CSTR (aba Specifications) do exercício 5.2.

Vá à pasta *Reactions* e crie um novo conjunto de reações expressadas por uma lei de potência. Defina a estequiometria da reação. Preste atenção ao enunciado: a reação é reversível e de primeira ordem com relação a cada componente. Com as informações disponíveis, devemos colocar a estequiometria e, depois, a cinética para a reação direta e para a reação inversa de produção de acetato de etila.

Reaction No.: **1** **Kinetic**

Reactants

Component	Coefficient	Exponent
ETHANOL	-1	1
ACIDO	-1	1

Products

Component	Coefficient	Exponent
WATER	1	
ACETATO	1	

Figura 287 - Estequiometria da reação direta de produção de acetato de etila no exercício 5.2.

Reaction No.: **2** **Kinetic**

Reactants

Component	Coefficient	Exponent
ACETATO	-1	1
WATER	-1	1

Products

Component	Coefficient	Exponent
ETHANOL	1	
ACIDO	1	

Figura 288 - Estequiometria da reação inversa de produção de acetato de etila no exercício 5.2.

1) ETHANOL(MIXED) + ACIDO(MIXED) --> WATER(MIXED) + ACETA

Reacting phase: *Liquid* Rate basis: *Reac (vol)*

Power Law kinetic expression
 If To is specified: Kinetic factor= $k(T/T_o)^n e^{-(E/R)[1/T-1/T_o]}$
 If To is not specified: Kinetic factor= $kT^n e^{-E/RT}$

k: *1,9e+08*
 n: *0*
 E: *5,95e+07* J/kmol
 To: *C*
 [Ci] basis: *Molarity*

Edit Reactions
 Solids

Figura 289 - Cinética da reação direta de produção de acetato de etila no exercício 5.2.

2) ACETATO(MIXED) + WATER(MIXED) --> ETHANOL(MIXED) + ACI

Reacting phase: *Liquid* Rate basis: *Reac (vol)*

Power Law kinetic expression
 If To is specified: Kinetic factor= $k(T/T_o)^n e^{-(E/R)[1/T-1/T_o]}$
 If To is not specified: Kinetic factor= $kT^n e^{-E/RT}$

k: *5e+07*
 n: *0*
 E: *5,95e+07* J/kmol
 To: *C*
 [Ci] basis: *Molarity*

Edit Reactions
 Solids

Figura 290 - Cinética da reação inversa de produção de acetato de etila no exercício 5.2.

Com isso, a simulação estará preparada para ser executada. Corra a simulação e verifique os resultados pedidos no enunciado.

Exercício 5.3. Produção de propilenoglicol pela hidratação de óxido de propileno

Com este reator batelada, ao concluir a simulação, observaremos uma produção de cerca de 4,8kmol/h.

Perfil de temperatura em relação ao tempo no reator:

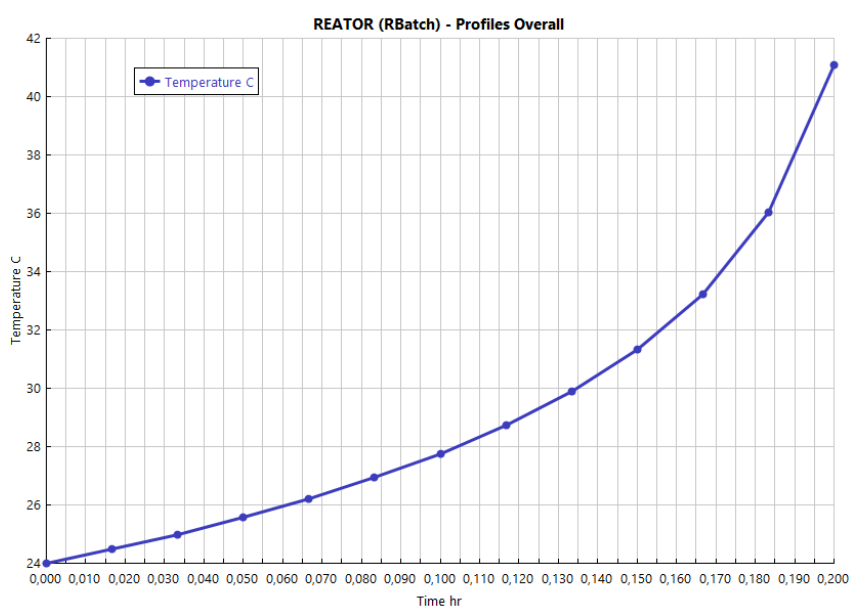


Figura 291 - Temperatura do reator ao longo do tempo no exercício 5.3.

Comece especificando todos os componentes existentes no processo.

Component ID	Type	Component name	Alias
▶ PROPOX	Conventional	PROPYLENE-OXIDE	C3H6O-4
▶ WATER	Conventional	WATER	H2O
▶ PROPDIOL	Conventional	PROPANEDIOL-1,2	C3H8O2-2

Figura 292 - Especificação dos componentes do exercício 5.3.

Em seguida, escolha o modelo termodinâmico. Na resolução deste exercício utilizamos o modelo NRTL.

Figura 293 - Escolha do método termodinâmico no exercício 5.3.

Depois, especificamos o carregamento do reator tabelado, a sua corrente de entrada.

Figura 294 - Especificação da carga do reator batelada no exercício 5.3.

E então vamos para as configurações do reator. Na aba *Specifications*, em *Reactor operating specification*, colocamos 0 para *Constant heat duty*, pois o reator opera adiabaticamente.

Figura 295 - Configuração do reator batelada (aba Specifications) do exercício 5.3.

Em seguida, definimos na aba *Stop Criteria* as condições de parada da batelada.

Stop criteria		
Criterion no.	1	
Location	Reactor	
Variable type	Time	
Stop value	0,2	
Unit	hr	
Component		
Substream		
Property set ID		
Approach from		

Figura 296 - Configuração do reator batelada (aba Stop Criteria) do exercício 5.3.

Na aba *Operation Times*, escolhemos as condições dos ciclos de batelada.

Batch cycle time		
<input checked="" type="radio"/> Total cycle time:	12	min
<input type="radio"/> Batch feed time:	1	min
Down time:	0	hr

Profile result time		
Maximum calculation time:	0,2	hr
Time interval between profile points:	1	min
Maximum number of profile points:	14	

Figura 297 - Configuração do reator batelada (aba Operation Times) do exercício 5.3.

Em seguida, seguimos o procedimento para especificar as reações que ocorrem após criar um conjunto de reações expressadas por lei de potência na pasta *Reactions*. Primeiro, a estequiometria da reação e, depois, sua cinética.

Reaction No.: 1				Reaction type: Kinetic			
Reactants				Products			
Component	Coefficient	Exponent		Component	Coefficient	Exponent	
PROPOX	-1	2		PROPDOL	1		
WATER	-1						

Figura 298 - Estequiometria da reação de hidratação do óxido de propileno no exercício 5.3.

1) PROPOX(MIXED) + WATER(MIXED) --> PROPDOL(MIXED)			
Reacting phase: Liquid		Rate basis: Reac (vol)	
Power Law kinetic expression			
If To is specified: Kinetic factor = $k(T/T_o)^n e^{-(E/R)[1/T-1/T_o]}$			
If To is not specified: Kinetic factor = $kT^n e^{-E/RT}$			
k:	9,15e+22		
n:	0		
E:	1,556e+08	J/kmol	
To:		C	
[Ci] basis:	Molarity		

Figura 299 - Cinética da reação de hidratação do óxido de propileno no exercício 5.3.

Depois voltar ao bloco do reator e colocar a reação na aba *Reactions*. Por fim, executar a simulação e verificar a planilha com os resultados do balanço mássico do processo.

Exercício 5.4. Produção de fenilbenzeno pela desidrogenação de benzeno

Item a)

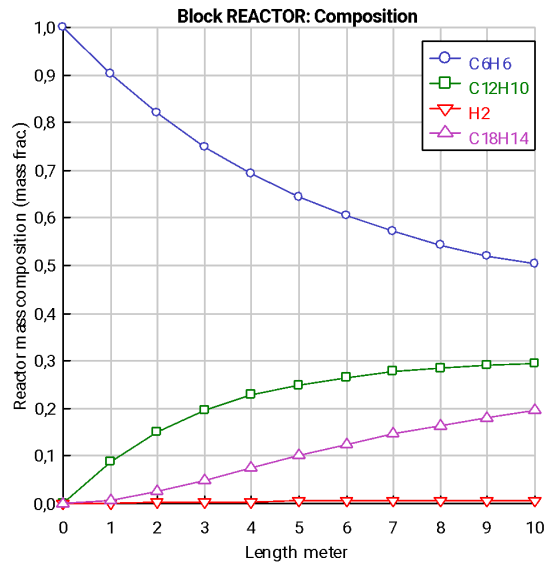


Figura 300 - Perfil de concentrações no PFR do exercício 5.4.

Item b)

A pressão da corrente de alimentação deve ser aproximadamente 4,5 bar.

Fluxograma sugerido:

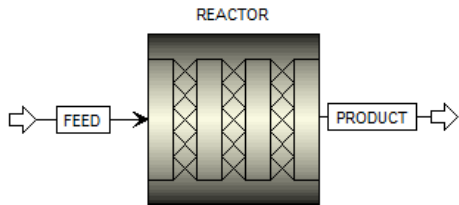


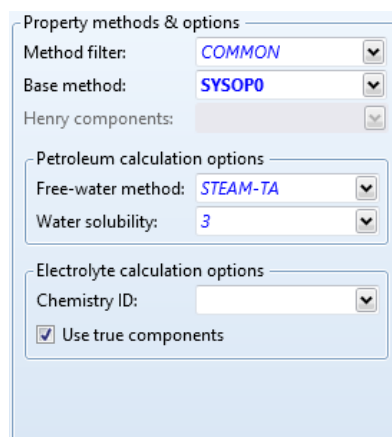
Figura 301 - Fluxograma sugerido para o exercício 5.4.

Comece especificando todos os componentes existentes no processo.

Component ID	Type	Component name	Alias
► C6H6	Conventional	BENZENE	C6H6
► C12H10	Conventional	DIPHENYL	C12H10
► H2	Conventional	HYDROGEN	H2
► C18H14	Conventional	M-TERPHENYL	C18H14-2
►			

Figura 302 - Especificação dos componentes do exercício 5.4.

Em seguida, escolha o método termodinâmico. Para a resolução deste exercício, usamos o método SYSOP0, para sistemas ideais. Como a temperatura da reação é elevada e a pressão é relativamente baixa, esperamos que essa hipótese seja próxima do que aconteceria na realidade.



Property methods & options

Method filter: **COMMON**

Base method: **SYSOP0**

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method: **STEAM-TA**

Water solubility: **3**

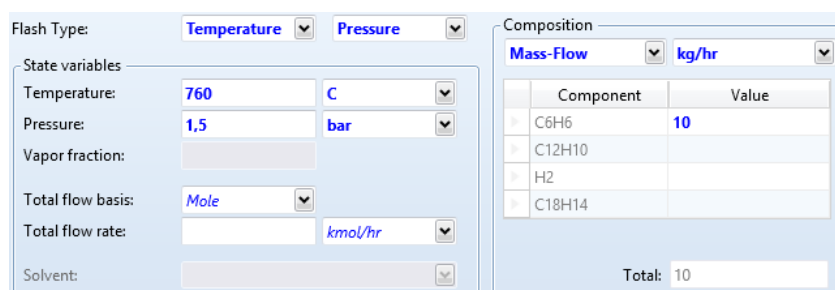
Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Figura 303 - Escolha do método termodinâmico para o exercício 5.4.

Em seguida, especifique a corrente de alimentação do reator.



Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: **760** **C**

Pressure: **1,5** **bar**

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mole**

Total flow rate: **kmol/hr**

Solvent:

Composition

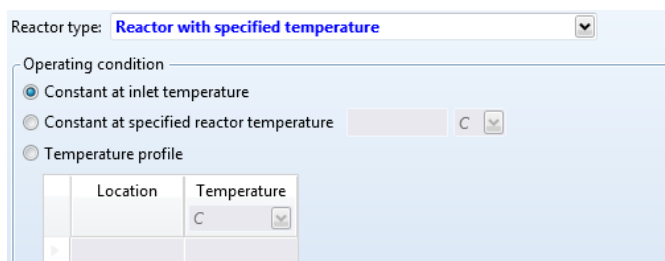
Mass-Flow **kg/hr**

Component	Value
C6H6	10
C12H10	
H2	
C18H14	

Total: **10**

Figura 304 - Especificação da corrente de alimentação do PFR no exercício 5.4.

No bloco do PFR, na aba *Specifications*, escolhemos a opção de operação a uma temperatura especificada, a qual será a temperatura de entrada do reator.



Reactor type: **Reactor with specified temperature**

Operating condition

☒ Constant at inlet temperature

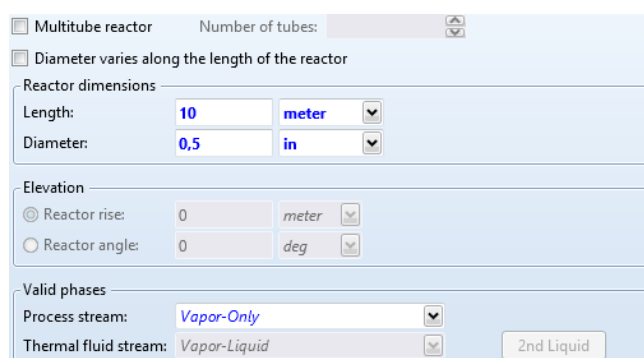
☐ Constant at specified reactor temperature **C**

☐ Temperature profile

Location	Temperature
	C

Figura 305 - Configuração do PFR (aba Specifications) do exercício 5.4.

Na aba *Configuration*, inserimos os principais dados geométricos do PFR, no caso, os que foram fornecidos no enunciado.



☐ Multitube reactor Number of tubes:

☐ Diameter varies along the length of the reactor

Reactor dimensions

Length: **10** **meter**

Diameter: **0,5** **in**

Elevation

☒ Reactor rise: **0** **meter**

☐ Reactor angle: **0** **deg**

Valid phases

Process stream: **Vapor-Only**

Thermal fluid stream: **Vapor-Liquid** **2nd Liquid**

Figura 306 - Configuração do PFR (aba Configuration) do exercício 5.4.

Agora, passamos para a configuração das reações. Na pasta *Reactions* do painel de navegação, crie um conjunto de reações com lei de potência. Lembre-se que são duas reações reversíveis ocorrendo, então precisamos especificar 4 estequiometrias e 4 cinéticas. Outro ponto importante para lembrar é que os coeficientes estequiométricos devem ser escritos de tal forma que o coeficiente do reagente limitante seja 1. Os expoentes a serem usados devem seguir o que foi dito no enunciado, de que as reações podem todas ser consideradas elementares, então os expoentes serão iguais aos coeficientes estequiométricos das reações como foram dadas.

Reaction No. 1 Reaction type Kinetic

Reactants			Products				
	Component	Coefficient	Exponent		Component	Coefficient	Exponent
	C6H6	-1	2		C12H10	0,5	
					H2	0,5	

Next Close

Figura 307 - Estequiometria da reação principal direta do exercício 5.4.

1) C6H6 --> 0,5 C12H10(MIXED) + 0,5 H2(MIXED)

Reacting phase Vapor Rate basis Reac (vol)

Power Law kinetic expression

If To is specified Kinetic factor $= k(T/T_o)^n e^{-(E/R)[1/T-1/T_o]}$

If To is not specified Kinetic factor $= kT^n e^{-E/RT}$

k 3,235e-06

n 0

E 30190 cal/mol

To C

[Ci] basis Partial pressure

Edit Reactions

Solids

Figura 308 - Cinética da reação principal direta do exercício 5.4.

Reaction No. ☒ 2 Reaction type *Kinetic*

Reactants

	Component	Coefficient	Exponent
▶	H2	-0,5	0,5
▶	C12H10	-0,5	0,5
▶			

Products

	Component	Coefficient	Exponent
▶	C6H6	1	
▶			




Figura 309 - Estequiometria da reação principal inversa do exercício 5.4.

2) 0,5 H2 + 0,5 C12H10 --> C6H6(MIXED)

Reacting phase *Vapor* Rate basis *Reac (vol)*

Power Law kinetic expression

If To is specified Kinetic factor $= k(T/T_o)^n e^{-(E/R)[1/T-1/T_o]}$

If To is not specified Kinetic factor $= kT^n e^{-E/RT}$

k

n

E *cal/mol*

To

[Ci] basis *Partial pressure*

Figura 310 - Cinética da reação principal inversa do exercício 5.4.

Reaction No. ☒ 3 Reaction type *Kinetic*

Reactants

	Component	Coefficient	Exponent
▶	C6H6	-1	1
▶	C12H10	-1	1
▶			

Products

	Component	Coefficient	Exponent
▶	C18H14	1	
▶	H2	1	
▶			




Figura 311 - Estequiometria da reação secundária direta do exercício 5.4.

3) C6H6 + C12H10 --> C18H14(MIXED) + H2(MIXED)

Reacting phase: **Vapor** Rate basis: **Reac (vol)**

Power Law kinetic expression

If To is specified Kinetic factor = $k(T/T_o)^n e^{-(E/R)[1/T-1/T_o]}$

If To is not specified Kinetic factor = $kT^n e^{-E/RT}$

k: **3,7545e-06**

n: **0**

E: **30190** **cal/mol**

To: **C**

[Ci] basis: **Partial pressure**

Edit Reactions

Solids

Figura 312 - Cinética da reação secundária direta do exercício 5.4.

Reaction No. **4** Reaction type: **Kinetic**

Reactants				Products			
	Component	Coefficient	Exponent		Component	Coefficient	Exponent
	H2	-1	1		C6H6	1	
	C18H14	-1	1		C12H10	1	

Close

Figura 313 - Estequiometria da reação secundária inversa do exercício 5.4.

4) H2 + C18H14 --> C6H6(MIXED) + C12H10(MIXED)

Reacting phase: **Vapor** Rate basis: **Reac (vol)**

Power Law kinetic expression

If To is specified Kinetic factor = $k(T/T_o)^n e^{-(E/R)[1/T-1/T_o]}$

If To is not specified Kinetic factor = $kT^n e^{-E/RT}$

k: **7,9544e-06**

n: **0**

E: **30190** **cal/mol**

To: **C**

[Ci] basis: **Partial pressure**

Edit Reactions

Solids

Figura 314 - Cinética da reação secundária inversa do exercício 5.4.

Após configurar as reações, adicionar o conjunto delas ao bloco do PFR na aba *Reactions*. Para desenhar os perfis, vá ao bloco do PFR e, na pasta *Profiles*, observe a tabela. Você pode mudar a opção em *View* para ver outras tabelas de resultados. Use o *Plot Wizard* para desenhar os perfis.

Process stream profiles

View: Mass composition Substream: MIXED

Length meter	C6H6	C12H10	H2	C18H14
0	1	0	0	0
1	0,902049	0,088714	0,00129865	0,00793843
2	0,817787	0,152963	0,00246839	0,0267813
3	0,745273	0,200267	0,00350986	0,0509504
4	0,682776	0,235895	0,00442985	0,0768994
5	0,628802	0,263495	0,00523819	0,102465
6	0,582069	0,2856	0,00594589	0,126385

Figura 315 - Tabela com os resultados dos perfis de composição no PFR do exercício 5.4.

Para resolver o item B, mude os valores na corrente de alimentação e na configuração do reator conforme pede o enunciado. Em seguida, em *Flowsheeting Options*, crie uma nova especificação de projeto e dê um nome a ela. Começaremos criando a variável que receberá a vazão produzida de fenilbenzeno ($C_{12}H_{10}$) no processo.

Select a variable category and reference

Variable name: **PC12H10**

Category:

- ☐ All
- ☐ Blocks
- ☒ Streams
- ☐ Model Utility
- ☐ Physical Property Parameters
- ☐ Reactions

Reference:

Type: **Mass-Flow**

Stream: **PRODUCT**

Substream: **MIXED**

Component: **C12H10**

Units: **kg/hr**

EO input

Open variable:

Description:

Figura 316 - Escolha da variável da especificação de projeto no exercício 5.4.

Em seguida, na aba *Spec*, escrevemos o nome da variável criada e o valor desejado para ela, no caso, 25kg/h.

Design specification expressions

Spec	PC12H10
Target	25
Tolerance	0,001

Figura 317 - Especificação de projeto para o exercício 5.4.

Por fim, colocamos na aba *Vary*, um intervalo numérico em que será mudada a pressão da corrente de alimentação do reator. Nesta resolução, fizemos para o intervalo de 1,5 a 10 bar, em que a solução estava presente. É importante observar que, quando não é possível a convergência dos resultados, deve-se verificar se a resposta encontra-se no intervalo informado. Neste exercício, avaliamos o efeito da pressão sobre a conversão da reação porque sua taxa se dá em função das pressões parciais.

Manipulated variable		Manipulated variable limits	
Type:	Stream-Var	Lower:	1,5
Stream:	FEED	Upper:	10
Substream:	MIXED	Step size:	0,1
Variable:	PRES	Maximum step size:	0,5
Units:	bar		
Report labels			
Line 1:	Line 2:	Line 3:	Line 4:
FEED	PRESSUF		
EO input			
Open variable:			
Description:			

Figura 318 - Intervalo numérico para a manipulação da pressão nos cálculos do exercício 5.4.

Ao final da simulação, volte à pasta da especificação de projeto e veja em *Results* a pressão calculada e o valor atingido para a produção de fenilbenzeno.

CAPÍTULO 6

Exercício 6.1. Bombas 1

- $H = 198,2 \text{ m}$
- $NPSH_d = 0,84 \text{ m}$.
- $\eta = 0,296$
- Para 70°C \square $NPSH_d = 9,92 \text{ m}$, $H = 192,7 \text{ m}$ e $\eta = 0,296$.
- Quanto menor for a temperatura, menor será a pressão de vapor, portanto terá um maior NPSH disponível. Para o primeiro caso, com temperatura igual a 90°C será difícil encontrar uma bomba que requira menos que $1,6 \text{ m}$ e, portanto, será necessário trocar alguma das condições do processo.

Fluxograma sugerido:

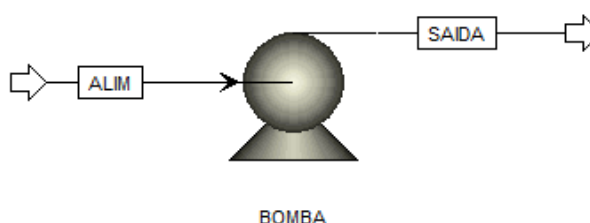


Figura 319 - Fluxograma sugerido para o exercício 6.1.

Após montar o fluxograma pode-se agora começar a completar os dados referentes ao processo. Após clicar no botão Setup irá aparecer uma tela onde terá lacunas para a identificação da simulação e a escolha do sistema de medidas. Podemos completá-los e em seguida clicar no botão Next, ou utilizar o atalho "F4" e deve-se escolher os compostos que serão trabalhados, cloreto de vinila (vinyl chloride) e dicloro etano (1,2-Dichloroethane).

Component ID	Type	Component name	Alias
1:2-D-01	Conventional	1,2-DICHLOROETHANE	C2H4CL2-2
VINYL-01	Conventional	VINYL-CHLORIDE	C2H3CL

Figura 320 - Componentes exercício 6.1.

Clicando novamente no botão Next será solicitada a escolha dos métodos e modelos para o cálculo das propriedades usadas no processo. Adotamos UNIF-LL (UNIFAC para sistemas líquido-líquido com a equação de Redlich-Kwong) como modelo termodinâmico. Após a escolha dos métodos obtemos a seguinte interface.

Property methods & options

Method filter: COMMON

Base method: UNIF-LL

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method: STEAM-TA

Water solubility: 3

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Method name: UNIF-LL

Methods assistant...

☐ Modify

Vapor EOS: ESRK

Data set: 1

Liquid gamma: GMUFAC

Data set: 2

Liquid molar enthalpy: HLMX102

Liquid molar volume: VLMX01

☒ Heat of mixing

☒ Poynting correction

☐ Use liquid reference state enthalpy

Figura 321 - Modelo Termodinâmico exercício 6.1.

No próximo passo, é necessário especificar sobre a linha a linha de alimentação, como temperatura, pressão, vazão e composição da corrente. Completando todas as lacunas pode-se obter a seguinte interface.

Flash Type: Temperature Pressure

State variables

Temperature: 90 C

Pressure: 3 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Mole

Total flow rate: 28 kmol/hr

Solvent:

Composition

Mole-Frac

Component	Value
1:2-D-01	0,95
VINYL-01	0,05

Total: 1

Figura 322 - Composição de Entrada exercício 6.1.

O próximo passo são as especificações das bombas, as quais serão como mostra a Figura 323.

The screenshot shows a software window with tabs: Specifications, Calculation Options, Flash Options, Utility, and Information. The 'Specifications' tab is selected. It contains a 'Model' section with 'Pump' selected and 'Turbine' unselected. Below is the 'Pump outlet specification' section with five radio buttons: 'Discharge pressure' (selected), 'Pressure increase', 'Pressure ratio', 'Power required', and 'Use performance curve to determine discharge conditions'. The 'Discharge pressure' option has a text input '25' and a dropdown menu showing 'bar'. The 'Pressure increase' option has a text input and a dropdown menu showing 'bar'. The 'Power required' option has a text input and a dropdown menu showing 'kW'. At the bottom is the 'Efficiencies' section with labels 'Pump:' and 'Driver:' followed by empty text input fields.

Figura 323 - Especificações da bomba exercício 6.1.

Depois que todos os dados referentes ao processo já foram especificados, no lado esquerdo da interface todos os tópicos irão ficar azuis, sinal esse que nos indica que podemos realizar a simulação. Em seguida pode-se consultar os resultados.

Exercício 6.2. Bombas 2

- a) $H = 24,6\text{m}$.
- b) $\text{NPSH}_d = 11,6\text{m}$.
- c) $\eta = 0,296$.

O primeiro passo para a resolução do problema proposto é a construção do fluxograma. Uma forma de fluxograma pode ser como a da Figura 324.

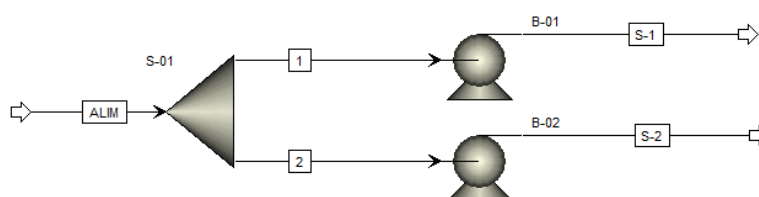


Figura 324 - Fluxograma sugerido para o exercício 6.2.

Após montar o fluxograma pode-se agora começar a completar os dados referentes ao processo. Após clicar no botão Setup irá aparecer uma tela onde terá lacunas para a identificação da simulação e a escolha do sistema de medidas. Podemos completá-los e obter a seguinte configuração.

Main Flowsheet **Setup** +

Global Description Accounting Diagnostics Information

Title: **Exercício 2**

Global unit set: **METCBAR**

Global settings

Input mode: **Steady-State**

Stream class: **CONVEN**

Flow basis: **Mole**

Ambient pressure: **1,01325 bar**

Ambient temp.: **10 C**

Valid phases:

Free water: **No**

Operational year: **8766 hr**

Figura 325 - Configuração exercício 6.2.

Clicando no botão Next é necessário a escolha dos compostos que iremos trabalhar. Deverão ser escolhidos a água e etanol.

Components - Specifications +

Selection Petroleum Nonconventional Enterprise Database Information

Select components:

Component ID	Type	Component name	Alias
WATER	Conventional	WATER	H2O
ETHANOL	Conventional	ETHANOL	C2H6O-2

Find Elec Wizard User Defined Reorder Review

Figura 326 - Componentes exercício 6.2.

Clicando novamente no botão Next serão solicitados a escolha dos métodos e modelos para o cálculo das propriedades usadas no processo. Devido as não idealidades da fase líquida, foi escolhida a equação UNIQUAC. Após a escolha dos métodos obteremos a seguinte interface.

Methods - Specifications +

Global Flowsheet Sections Referenced Information

Property methods & options

Method filter: **COMMON**

Base method: **UNIQUAC**

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method: **STEAM-TA**

Water solubility: **3**

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Method name: **UNIQUAC** Methods Assistant...

☐ Modify

Vapor EOS: **ESIG**

Data set: **1**

Liquid gamma: **GMUQUAC**

Data set: **1**

Liquid molar enthalpy: **HLMX88**

Liquid molar volume: **VLMX01**

☒ Heat of mixing

☐ Poynting correction

☐ Use liquid reference state enthalpy

Figura 327 - Modelo Termodinâmico exercício 6.2.

No próximo passo, são necessárias as especificações sobre a linha de alimentação, como temperatura, pressão, vazão e composição da corrente. Completando todas as lacunas pode-se obter a seguinte interface.

The screenshot shows the 'ALIM (MATERIAL) - Input' window. It has tabs for 'Mixed', 'CI Solid', 'NC Solid', 'Flash Options', 'EO Options', 'Costing', and 'Information'. The 'Specifications' section is active, showing 'Flash Type' as 'Temperature' and 'Pressure'. Under 'State variables', 'Temperature' is set to 25 C and 'Pressure' to 1 atm. 'Vapor fraction' is empty. 'Total flow basis' is 'Volume' and 'Total flow rate' is 3 cum/hr. 'Solvent' is empty. On the right, the 'Composition' section shows 'Mole-Frac' with a table:

Component	Value
WATER	0,3
ETHANOL	0,7

The 'Total' is 1. Below the table are expandable sections for 'Reference Temperature', 'Component Attributes', and 'Particle Size Distribution'.

Figura 328 - Composição da alimentação exercício 6.2.

O próximo passo são as especificações das bombas, as quais serão:

The screenshot shows the 'B-01 (Pump) - Setup' window. It has tabs for 'Specifications', 'Calculation Options', 'Flash Options', 'Utility', and 'Information'. The 'Specifications' section is active, showing 'Model' as 'Pump' (selected over 'Turbine'). Under 'Pump outlet specification', 'Discharge pressure' is set to 3 bar. Other options like 'Pressure increase', 'Pressure ratio', 'Power required', and 'Use performance curve to determine discharge conditions' are not selected. At the bottom, 'Efficiencies' are shown with 'Pump' and 'Driver' fields.

Figura 329 - Especificações das Bombas do exercício 6.2.

Agora especificaremos o divisor das correntes, lembrando que a vazão inicial será igualmente dividida igualmente para as duas bombas.

Main Flowsheet x S-01 (FSplit) x +							
Specifications Flash Options Key Components Information							
Flow split specification for outlet streams							
	Stream	Specification	Basis	Value	Units	Key Comp No	Stream order
▶	1	Split fraction		0,5			1
▶	2						2

Figura 330 - Especificação do Separador exercício 6.2.

Depois que todos os dados referentes ao processo já foram especificados, no lado esquerdo da interface todos os tópicos irão ficar azuis, sinal esse que nos indica que podemos realizar a simulação.

Exercício 6.3. Tubulações

- Não, pois para o compressor está aparecendo um erro de que as fases não são válidas. Para resolver este problema, podemos colocar um trocador de calor após o segundo misturador. Essa adição é realizada, pois através da aba Results Summary >> Vapor é visto que a fração de vapor não é 1 na entrada do compressor. E como sabemos, o compressor apenas opera com a fase gasosa. Portanto, aumentando a temperatura, estaremos forçando que a corrente seja vaporizada.
- Na primeira tubulação: $P = 37,5$ bar e $T = 10,8^{\circ}\text{C}$
- Na segunda tubulação: $P = 39,386$ bar e $T = 92,4^{\circ}\text{C}$
- Pois não consideramos as perdas de calor para o ambiente na simulação.
- 154,2 kW.
- 990,2 kW.

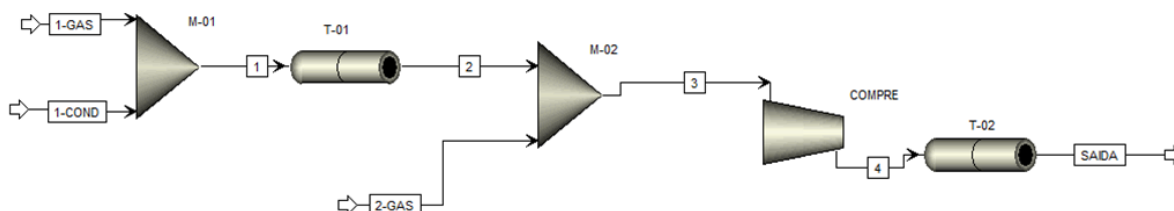


Figura 331 - Fluxograma do exercício 6.3.

Title	Exercício 3	
Global unit set	METCBAR	Global settings
		Valid phases
		Free water

Figura 332 - Configurações globais exercício 6.3.

Selection Petroleum Nonconventional Enterprise Database Comments				
Select components				
Component ID	Type	Component name	Alias	
CARBO-01	Conventional	CARBON-DIOXIDE	CO2	
NITRO-02	Conventional	NITROGEN	N2	
METHA-01	Conventional	METHANE	CH4	
ETHAN-02	Conventional	ETHANE	C2H6	
PROPA-01	Conventional	PROPANE	C3H8	
ISOBU-01	Conventional	ISOBUTANE	C4H10-2	
N-BUT-01	Conventional	N-BUTANE	C4H10-1	
N-HEP-01	Conventional	N-HEPTANE	C7H16-1	
N-HEX-01	Conventional	N-HEXANE	C6H14-1	
2-MET-01	Conventional	2-METHYL-BUTANE	C5H12-2	
N-PEN-01	Conventional	N-PENTANE	C5H12-1	

Figura 333 - Componentes presentes exercício 6.3.

Methods x +

Global Flowsheet Sections Referenced Information

Property methods & options

Method filter: COMMON

Base method: PRWS

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method: STEAM-TA

Water solubility: 3

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Method name: PRWS Methods Assistant...

☐ Modify

EOS: ESPRWS

Data set: 1

Liquid gamma:

Data set:

Liquid molar enthalpy: HLMX94

Liquid molar volume: VLMX41

☐ Heat of mixing

☐ Poynting correction

☐ Use liquid reference state enthalpy

Figura 334 - Método termodinâmico do exercício 6.3.

Main Flowsheet x 1-GAS (MATERIAL) x +

Mixed CI Solid NC Solid Flash Options EO Options Costing Information

Specifications

Flash Type: Temperature Pressure

State variables

Temperature: 38 C

Pressure: 42 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Mole

Total flow rate: 410 kmol/hr

Solvent:

Composition

Mole-Frac

Component	Value
DI-CARBO	0,002
NITROGEN	0,005
METANO	0,843
ETANO	0,05
PROPANO	0,05
I-BUTANO	0,015
N-BUTANO	0,015
HEPTANO	0,005
HEXANO	0,005
ME-BUTAN	0,007
PENTANO	0,003
Total:	1

Figura 335 - Composição da Corrente de Entrada Gasosa exercício 6.3.

Main Flowsheet x 1-COND (MATERIAL) x +

Mixed CI Solid NC Solid Flash Options EO Options Costing Information

Specifications

Flash Type: Temperature Pressure

State variables

Temperature: 24 C

Pressure: 42 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Volume

Total flow rate: 121 l/min

Solvent:

Composition

Mole-Frac

Component	Value
DI-CARBO	0
NITROGEN	0
METANO	0,035
ETANO	0,035
PROPANO	0,15
I-BUTANO	0,15
N-BUTANO	0,14
HEPTANO	0,04
HEXANO	0,23
ME-BUTAN	0,11
PENTANO	0,11
Total:	1

Figura 336 - Composição da Corrente de Entrada de Condensado exercício 6.3.

Main Flowsheet x 2-GAS (MATERIAL) x +

Mixed CI Solid NC Solid Flash Options EO Options Costing Comments

Specifications

Flash Type: Temperature Pressure

State variables

Temperature: 80 C

Pressure: 35 bar

Vapor fraction:

Total flow basis: Volume

Total flow rate: 9440 cum/day

Solvent:

Reference Temperature

Volume flow reference temperature: C

Component concentration reference temperature: C

Composition: Mole-Frac

Component	Value
CARBO-01	0,001
NITRO-02	0,058
METHA-01	0,8
ETHAN-02	0,065
PROPA-01	0,037
ISOBU-01	0,01
N-BUT-01	0,01
N-HEP-01	0,005
N-HEX-01	0,004
2-MET-01	0,006
N-PEN-01	0,004
Total	1

Figura 337 - Composição da Segunda Corrente Gasosa exercício 6.3.

Main Flowsheet x COMPRE (Compr) - Setup x +

Specifications Calculation Options Power Loss Convergence Integration Parameters Utility Information

Model and type

Model: ☒ Compressor ☐ Turbine

Type: Polytropic using GPSA method

Outlet specification

☒ Discharge pressure: 40 bar

☐ Pressure increase: bar

☐ Pressure ratio:

☐ Power required: kW

☐ Use performance curves to determine discharge conditions

Efficiencies

Isentropic: Polytronic: 0,65 Mechanical:

Figura 338 - Especificações para o Compressor exercício 6.3.

Main Flowsheet x T-01 (Pipeline) x +

Configuration Connectivity Methods Property Grid Flash Options Solids Conveying Information

☒ Fluid flow ☐ Solids conveying

Calculation direction

☒ Calculate outlet pressure
☐ Calculate inlet pressure

Segment geometry

☒ Enter node coordinates
☐ Enter segment length and angle

Thermal options

☒ Do energy balance with surroundings
☐ Specify temperature profile:
Constant temperature

Property calculations

☒ Do flash at each step
☐ Interpolate from property grid

Pipeline flow basis

☒ Use inlet stream flow
☐ Reference outlet stream flow

Inlet conditions

Pressure: bar
Temperature: C

Figura 339 - Especificações para a primeira Tubulação exercício 6.3.

Segment Data

Segment No. ☒ 1 Inlet node A Outlet node B

Node parameters

	Inlet node		Outlet node	
X coordinate	0	meter	5	km
Y coordinate	0	meter	0	meter
Elevation	0	meter	0	meter
Ambient temp	20	C	20	C
C-Erosion	100		100	

Segment parameters

Diameter	8	in	Annular OD		meter
U-Value	10	Watt/sqm	Heat flux		cal/sec-m
Roughness	4,572e-05	meter	Efficiency	1	

Close

Figura 340 - Especificações para primeira tubulação, primeiro segmento exercício 6.3.

Segment Data

Segment No. ☒ 2 Inlet node Outlet node

Node parameters

	Inlet node		Outlet node	
X coordinate	<input type="text" value="5"/>	<input type="text" value="km"/>	<input type="text" value="10"/>	<input type="text" value="km"/>
Y coordinate	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="meter"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="meter"/>
Elevation	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="meter"/>	<input type="text" value="152"/>	<input type="text" value="meter"/>
Ambient temp	<input type="text" value="20"/>	<input type="text" value="C"/>	<input type="text" value="15"/>	<input type="text" value="C"/>
C-Erosion	<input type="text" value="100"/>	<input type="text"/>	<input type="text" value="100"/>	<input type="text"/>

Segment parameters

Diameter	<input type="text" value="8"/>	<input type="text" value="in"/>	Annular OD	<input type="text"/>	<input type="text" value="meter"/>
U-Value	<input type="text" value="10"/>	<input type="text" value="Watt/sqm"/>	Heat flux	<input type="text"/>	<input type="text" value="cal/sec-m"/>
Roughness	<input type="text" value="4,572e-05"/>	<input type="text" value="meter"/>	Efficiency	<input type="text" value="1"/>	<input type="text"/>

Figura 341 - Especificações para primeira tubulação, segundo segmento exercício 6.3.

Segment Data

Segment No. ☒ 3 Inlet node Outlet node

Node parameters

	Inlet node		Outlet node	
X coordinate	<input type="text" value="10"/>	<input type="text" value="km"/>	<input type="text" value="15"/>	<input type="text" value="km"/>
Y coordinate	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="meter"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="meter"/>
Elevation	<input type="text" value="152"/>	<input type="text" value="meter"/>	<input type="text" value="152"/>	<input type="text" value="meter"/>
Ambient temp	<input type="text" value="15"/>	<input type="text" value="C"/>	<input type="text" value="10"/>	<input type="text" value="C"/>
C-Erosion	<input type="text" value="100"/>	<input type="text"/>	<input type="text" value="100"/>	<input type="text"/>

Segment parameters

Diameter	<input type="text" value="8"/>	<input type="text" value="in"/>	Annular OD	<input type="text"/>	<input type="text" value="meter"/>
U-Value	<input type="text" value="10"/>	<input type="text" value="Watt/sqm"/>	Heat flux	<input type="text"/>	<input type="text" value="cal/sec-m"/>
Roughness	<input type="text" value="4,572e-05"/>	<input type="text" value="meter"/>	Efficiency	<input type="text" value="1"/>	<input type="text"/>

Figura 342 - Especificações para primeira tubulação, terceiro segmento exercício 6.3.

Main Flowsheet × T-02 (Pipe) × +

☒ Pipe Parameters Thermal Specification Fittings1 Fittings2 Flash Options Solids Conveying Co

☒ Fluid flow
☐ Solids conveying

Length
 Pipe length 12 km

Diameter
☒ Inner diameter 12 in
☐ Use pipe schedules
☐ Compute using user subroutine

Pipe schedules
 Material
 Schedule
 Nom diameter

Elevation
☒ Pipe rise 0 meter
☐ Pipe angle deg

Options
 Roughness 4,572e-05 meter
 Erosional velocity coefficient 100

Figura 343 - Especificações para a segunda tubulação exercício 6.3.

Com o trocador de calor:

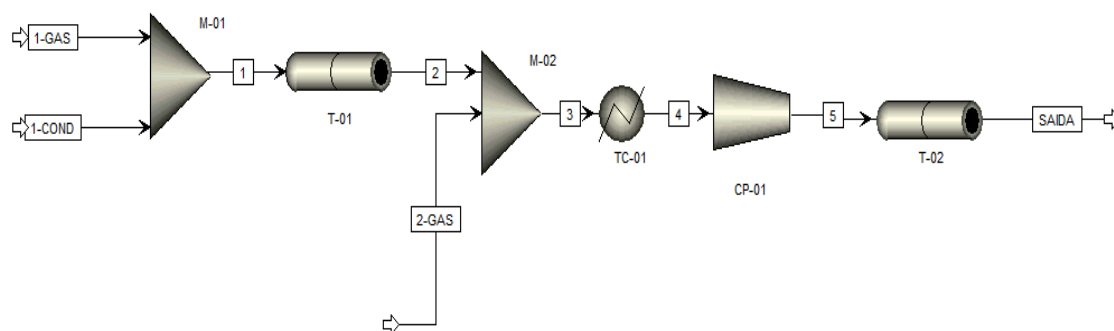


Figura 344 - Fluxograma sugerido para a resolução do item (b) exercício 6.3.

Main Flowsheet × TC-01 (Heater) - Input × +

Specifications Flash Options Utility Information

Flash specifications

Flash Type: Temperature

Pressure

Temperature: 80 C

Temperature change: C

Degrees of superheating: C

Degrees of subcooling: C

Pressure: 0 bar

Duty: cal/sec

Vapor fraction:

Pressure drop correlation parameter:

Valid phases

Vapor-Liquid

Figura 345 - Especificação para o Trocador de Calor do exercício 6.3.

Exercício 6.4. Compressores 1

- A temperatura de saída do primeiro compressor é $T = 186^{\circ}\text{C}$ e do segundo, $T = 383^{\circ}\text{C}$.
- A potência do primeiro compressor é de 318,3 kW e do segundo, 471,6 kW.

Como os demais exercícios, primeiro será montado o fluxograma. Uma das formas possíveis de fluxograma pode ser representada como na figura abaixo:

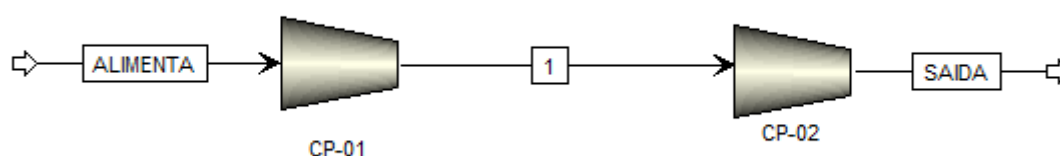


Figura 346 - Fluxograma exercício 6.4.

Para disponibilizar ao programa os dados referentes ao processo devemos clicar no botão Setup e iniciar o preenchimento de todas as informações necessárias para a simulação.

Cada passo está compreendido por uma das figuras representadas abaixo.

Global | Description | Accounting | Diagnostics | Information

Title: **Compressores em Série**

Global unit set: **METCBAR**

Global settings

Input mode: **Steady-State**

Stream class: **CONVEN**

Flow basis: **Mole**

Ambient pressure: **1,01325** **bar**

Ambient temp.: **10** **C**

Valid phases:

Free water: **No**

Operational year: **8766** **hr**

Figura 347 - Configurações exercício 6.4.

Seleção dos compostos:

Components - Specifications x +

Selection | Petroleum | Nonconventional | Enterprise Database | Information

Select components:

Component ID	Type	Component name	Alias
METHANE	<i>Conventional</i>	METHANE	CH4
NITROGEN	<i>Conventional</i>	NITROGEN	N2
DI-CARBO	<i>Conventional</i>	CARBON-DIOXIDE	CO2

Find | Elec Wizard | User Defined | Reorder | Review

Figura 348 - Componentes exercício 6.4.

Escolha as equações a serem utilizadas para o cálculo das propriedades termodinâmicas. Nesse exercício foi escolhido a equação de Peng-Robinson.

Figura 349 - Modelo Termodinâmico exercício 6.4.

Especificação das condições de alimentação:

Component	Value
METHANE	0,5
NITROGEN	0,3
DI-CARBO	0,2

Total: 1

Figura 350 - Modelo Termodinâmico exercício 6.4.

Dados necessários para os compressores, assim como os compressores possuem as mesmas características esta irá ser a interface para os dois compressores.

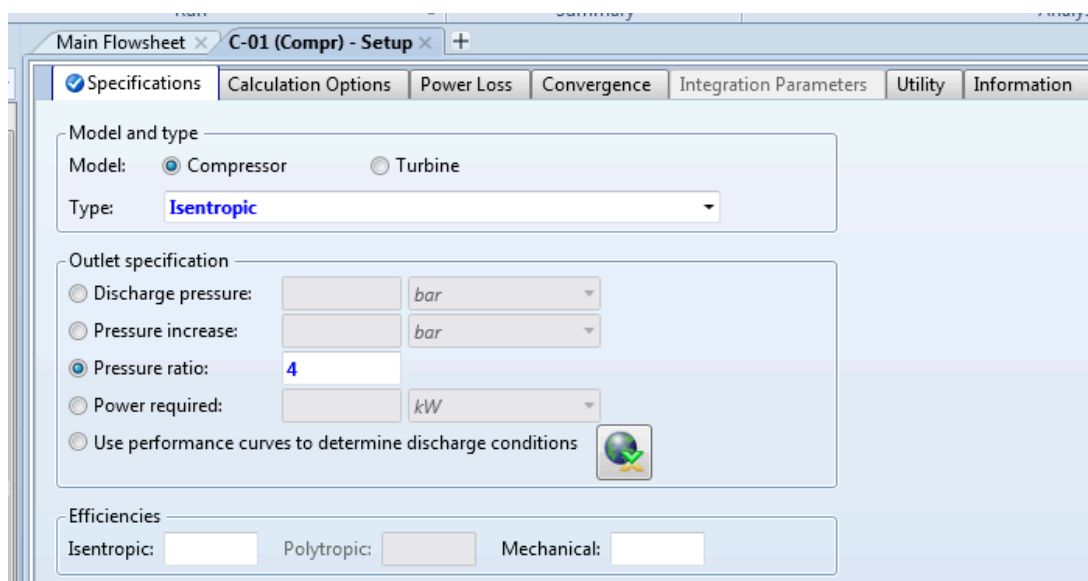


Figura 351 - Compressores exercício 6.4.

Exercício 6.5. Compressores 2

- As eficiências são de 72% nos dois compressores. A potência do compressor de ar é de 83,6 kW e a do compressor de etanol, 18,8 kW
- Na saída do reator, as vazões são: N_2 – 33,18 kmol/h, O_2 – 3,82 kmol/h, CH_3CHO e H_2O – 10,00 kmol/h.

Como os demais exercícios, primeiro será montado o fluxograma. Uma das formas possíveis de fluxograma pode ser representada como a figura abaixo:

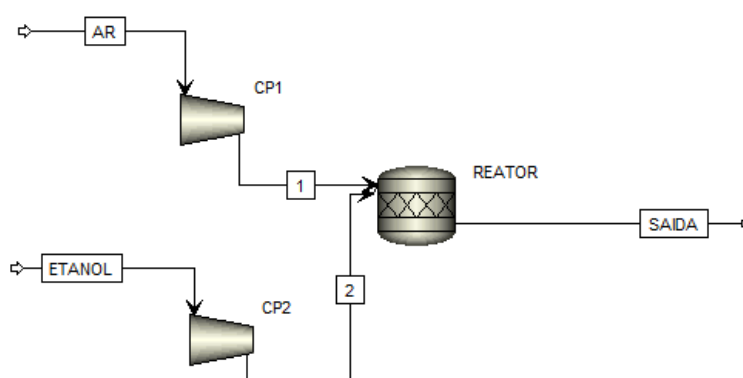


Figura 352 - Fluxograma exercício 6.5.

Análogo aos outros exercícios, cada passo está compreendido por uma das figuras representadas abaixo.

Global settings

Input mode: *Steady-State*

Stream class: *CONVEN*

Flow basis: *Mole*

Ambient pressure: 1.01325 bar

Ambient temp.: 10 C

Valid phases:

Free water: *No*

Operational year: 8766 hr

Figura 353 - Configurações do exercício 6.5.

Seleção dos compostos:

Component ID	Type	Component name	Alias
ETHAN-01	Conventional	ETHANOL	C2H6O-2
WATER	Conventional	WATER	H2O
NITRO-01	Conventional	NITROGEN	N2
OXYGE-01	Conventional	OXYGEN	O2
ACETA-01	Conventional	ACETALDEHYDE	C2H4O-1
1:2-D-01	Conventional	1,2-DICHLOROETHANE	C2H4CL2-2

Find Elec Wizard User Defined Reorder Review

Figura 354 - Componentes exercício 6.5.

Escolha das equações a serem utilizadas para o cálculo das propriedades termodinâmicas. Foi adotado Peng-Robinson como modelo termodinâmico.

Property methods & options

Method filter: *COMMON*

Base method: *PENG-ROB*

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method: *STEAM-TA*

Water solubility: 3

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Method name: *PENG-ROB* Methods assistant...

☐ Modify

EOS: *ESPRSTD*

Data set: 1

Liquid gamma:

Data set:

Liquid molar enthalpy: *HLMX106*

Liquid molar volume: *VLMX20*

☐ Heat of mixing

☐ Poynting correction

☐ Use liquid reference state enthalpy

Figura 355 - Modelo Termodinâmico exercício 6.5.

Especificação das condições de alimentação de ar e etanol, respectivamente:

☒ Mixed
 ☐ CI Solid
 ☐ NC Solid
 ☐ Flash Options
 ☐ EO Options
 ☐ Costing
 ☐ Information

Flash Type:

State variables

Temperature:

Pressure:

Vapor fraction:

Total flow basis:

Total flow rate:

Solvent:

☐ Reference Temperature
☐ Component Attributes
☐ Particle Size Distribution

Composition

Component	Value
ETHAN-01	
WATER	
NITRO-01	0.79
OXYGE-01	0.21
ACETA-01	
1:2-D-01	
Total:	1

Figura 356 - Composição da Corrente de entrada de ar no exercício 6.5.

☒ Mixed
 ☐ CI Solid
 ☐ NC Solid
 ☐ Flash Options
 ☐ EO Options
 ☐ Costing
 ☐ Information

Flash Type:

State variables

Temperature:

Pressure:

Vapor fraction:

Total flow basis:

Total flow rate:

Solvent:

☐ Reference Temperature
☐ Component Attributes
☐ Particle Size Distribution

Composition

Component	Value
ETHAN-01	1
WATER	
NITRO-01	
OXYGE-01	
ACETA-01	
1:2-D-01	
Total:	1

Figura 357 - Composição da corrente de entrada de etanol do exercício 6.5.

Especificação dos compressores serão as mesmas e iguais na Figura 358:

☒ Specifications
 ☐ Calculation Options
 ☐ Power Loss
 ☐ Convergence
 ☐ Integration Parameters
 ☐ Utility
 ☐ Information

Model and type

Model: ☒ Compressor ☐ Turbine

Type:

Outlet specification

☒ Discharge pressure:
☐ Pressure increase:
☐ Pressure ratio:
☐ Power required:
☐ Use performance curves to determine discharge conditions

Efficiencies

Isentropic: Polytropic: Mechanical:

Figura 358 - Configuração dos compressores do exercício 6.5.

Em seguida, será necessário configurar o reator, conforme ilustra a Figura 359:

Specifications Reactions Combustion Heat of Reaction Selectivity PSD Com

Operating conditions

Flash Type Temperature Pressure

Temperature 250 C

Pressure 3 bar

Duty cal/sec

Vapor fraction

Valid phases Vapor-Liquid

Figura 359 - Especificação do Reator do exercício 6.5.

Specifications Reactions Combustion Heat of Reaction Selectivity PSD Component Attr. Utility Information

Reactions

Rxn No. 1 Specification type Frac. conversion

New...

Reactions occur in series

Edit Stoichiometry

Reaction No.: 1

Component	Coefficient
ETHAN-01	-2
OXYGE-01	-1

Component	Coefficient
ACETA-01	2
WATER	2

Products generation

☐ Molar extent: kmol/hr

☒ Fractional conversion: 1 of component ETHAN-01

Close

Figura 360 - Reação do exercício 6.5.

Exercício 6.6. Ciclo combinado a gás e vapor

Turbina à gás – 544,4 kW;

Turbina à vapor – 61,5 kW;

Total – 605,9 kW.

Como os demais exercícios, primeiro será montado o fluxograma. Uma das formas possíveis de fluxograma pode ser representada como a figura abaixo:

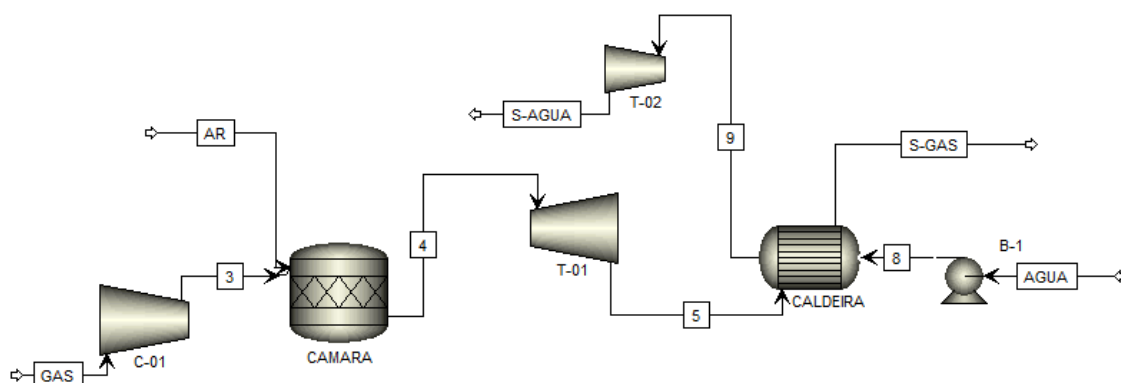


Figura 361 - Fluxograma exercício 6.6.

Análogo aos outros exercícios, cada passo está compreendido por uma das figuras representadas abaixo.

Global settings

Input mode:	Steady-State
Stream class:	CONVEN
Flow basis:	Mole
Ambient pressure:	1.01325 bar
Ambient temp.:	10 C
Valid phases:	
Free water:	No
Operational year:	8766 hr

Figura 362 - Configurações do exercício 6.6.

Seleção dos compostos:

Component ID	Type	Component name	Alias
METHA-01	Conventional	METHANE	CH4
NITRO-01	Conventional	NITROGEN	N2
OXYGE-01	Conventional	OXYGEN	O2
WATER	Conventional	WATER	H2O
CARBO-01	Conventional	CARBON-DIOXIDE	CO2

Figura 363 - Componentes exercício 6.6.

Escolha das equações a serem utilizadas para o cálculo das propriedades termodinâmicas. Para este exercício, escolhemos Peng-Robinson como modelo termodinâmico.

Property methods & options

Method filter: COMMON

Base method: PENG-ROB

Henry components:

Petroleum calculation options

Free-water method: STEAM-TA

Water solubility: 3

Electrolyte calculation options

Chemistry ID:

☒ Use true components

Method name: PENG-ROB

Method assistant...

☐ Modify

EOS: ESPRSTD

Data set: 1

Liquid gamma: HLMX106

Data set: VLMX20

Liquid molar enthalpy: HLMX106

Liquid molar volume: VLMX20

☐ Heat of mixing

☐ Poynting correction

☐ Use liquid reference state enthalpy

Figura 364 - Modelo Termodinâmico exercício 6.6.

Especificação das condições de alimentação de ar, água e metanol, respectivamente:

☒ Mixed CI Solid NC Solid Flash Options EO Options Costing Information

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: **25** **C**

Pressure: **1** **atm**

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mole**

Total flow rate: **120** **kmol/hr**

Solvent:

Composition

Mole-Flow **kmol/hr**

Component	Value
METHA-01	
NITRO-01	0.79
OXYGE-01	0.21
WATER	
CARBO-01	

Total: **1**

Figura 365 - Composição da Corrente de entrada de ar no exercício 6.6.

☒ Mixed CI Solid NC Solid Flash Options EO Options Costing Information

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: **25** **C**

Pressure: **1** **atm**

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mole**

Total flow rate: **25** **kmol/hr**

Solvent:

Composition

Mole-Flow **kmol/hr**

Component	Value
METHA-01	
NITRO-01	
OXYGE-01	
WATER	1
CARBO-01	

Total: **1**

Figura 366 - Composição da corrente de entrada de água do exercício 6.6.

☒ Mixed CI Solid NC Solid Flash Options EO Options Costing Information

Flash Type: **Temperature** **Pressure**

State variables

Temperature: **25** **C**

Pressure: **1** **atm**

Vapor fraction:

Total flow basis: **Mole**

Total flow rate: **10** **kmol/hr**

Solvent:

Composition

Mole-Flow **kmol/hr**

Component	Value
METHA-01	1
NITRO-01	
OXYGE-01	
WATER	
CARBO-01	

Total: **1**

Figura 367 - Composição da corrente de entrada de metanol do exercício 6.6.

Especificação do compressor serão as mesmas e igual a Figura 366:

The screenshot shows the 'Specifications' tab for a Compressor model. The 'Model and type' section has 'Compressor' selected. The 'Type' is set to 'Isentropic'. The 'Outlet specification' section has 'Discharge pressure' selected with a value of 20 and units of bar. The 'Efficiencies' section has empty input fields for Isentropic, Polytropic, and Mechanical efficiencies.

Figura 368 - Configuração dos compressores do exercício 6.6.

As turbinas e a bomba terão as seguintes configurações, respectivamente:

The screenshot shows the 'Specifications' tab for a Turbine model. The 'Model and type' section has 'Turbine' selected. The 'Type' is set to 'Isentropic'. The 'Outlet specification' section has 'Discharge pressure' selected with a value of 1 and units of atm. The 'Efficiencies' section has empty input fields for Isentropic, Polytropic, and Mechanical efficiencies.

Figura 369 - Configuração das turbinas do exercício 6.6.

The screenshot shows the 'Specifications' tab for a Pump model. The 'Model' section has 'Pump' selected. The 'Pump outlet specification' section has 'Discharge pressure' selected with a value of 20 and units of bar. The 'Efficiencies' section has empty input fields for Pump and Driver efficiencies.

Figura 370 - Configuração da Bomba do exercício 6.6.

Em seguida, será necessário configurar o reator, conforme ilustra a Figura 371:

Specifications Reactions Combustion Heat of Reaction Selectivity

Operating conditions

Pressure 20 bar

Temperature 900 C

Valid phases

Vapor-Liquid

Figura 371 - Especificação do Reator do exercício 6.6.

Specifications Reactions Combustion Heat of Reaction Selectivity PSD Component Attr. Utility Information

Reactions

Rxn No. Specification by

1 Frac. conversion

New...

Reactions occur in series

Edit Stoichiometry

Reaction No.: 1

Reactants

Component	Coefficient
METHA-01	-1
OXYGE-01	-2

Products

Component	Coefficient
CARBO-01	1
WATER	2

Products generation

Molar extent: kmol/hr

Fractional conversion: 1 of component METHA-01

Close

Figura 372 - Reação do exercício 6.6.

Por fim, será necessário especificar a caldeira, conforme indica a Figura 373:

Specifications Streams LMTD Pressure Drop U Methods File

Model fidelity

Shortcut

Detailed

Shell & Tube

Kettle Reboiler

Thermosyphon

Air Cooled

Plate

Hot fluid

Shell

Tube

Shortcut flow direction

Countercurrent

Cocurrent

Multipass, calculate number of shells

Multipass, shells in series 1

Calculation mode Design

Exchanger specification

Specification Hot stream outlet temperature

Value 120 C

Exchanger area sqm

Constant UA cal/sec-K

Minimum temperature approach 1 C

Reconcile

Size Exchanger Specify Geometry Results

Figura 373 - Especificação da Caldeira do exercício 6.6.

APÊNDICE A: MODELOS TERMODINÂMICOS

WILSON - Equação de coeficientes de atividade que utiliza o modelo da composição local para obter a expressão da energia livre de Gibbs em excesso. Oferece uma abordagem termodinâmica consistente na previsão do comportamento multicomponente baseando-se em parâmetros de equilíbrio binário. Contém apenas dois parâmetros ajustáveis sendo matematicamente mais simples que outros modelos, tal como UNIQUAC. A fase gás pode ser modelada utilizando a Lei de Henry. Indicados para misturas ligeiramente não ideais. É utilizado para misturas em que a miscibilidade é incompleta desde que com atenção para região de uma fase. Não é aplicável, no entanto, à mistura que exiba miscibilidade parcial, sendo inviável ao cálculo da fase intensa; *não empregar em sistemas em Equilíbrio Líquido-Líquido (ELL)*. Sendo então recomendável para compostos polares, moléculas que tenham tendência à associação em solventes não polares, e facilmente estendida a soluções multicomponentes. Já quando as espécies são parcialmente solúveis, formando duas fases líquidas, não pode ser utilizado, aplicando-se então NRTL ou UNIQUAC. *Exemplo: Misturas binárias fortemente não ideais, como alcoóis com hidrocarbonetos.*

NRTL (Non Random Two Liquids) - É uma extensão da equação de Wilson. Utiliza mecânica estatística e a teoria da célula líquida para representar a estrutura da fase líquida. Contém cinco parâmetros ajustáveis, alguns dos quais são dependentes da temperatura e outros independentes. Portanto, para sistemas LLV a dificuldade em se utilizar este modelo é encontrar os parâmetros do modelo para a verdadeira representação crítica. Indicado para misturas fortemente não ideais, aplicável a sistemas multicomponentes LV, LL, LLV. Utilizado quando há diferenças entre a polaridade e quando as espécies são parcialmente solúveis e formam duas fases líquidas. Nenhum componente deve estar próximo a sua temperatura crítica. *Exemplo: Pode ser aplicado a sistemas ternários ou de ordens superiores, sistemas diluídos, misturas de álcool-hidrocarboneto e sistemas contendo eletrólitos.*

Atenção: Para a resolução do conjunto de equações apresentado é necessária uma estimativa inicial dos parâmetros que serão calculados. Dependendo da estimativa inicial complica-se a obtenção dos resultados e a convergência para o resultado esperado.

UNIQUAC (Universal Quase-Chemical) - Modelo apresentado por Abrams e Prausnitz e utiliza dois parâmetros binários ajustáveis. Emprega a mecânica estatística e a teoria quase-química de Guggenheim para representar a estrutura líquida. No entanto, estendeu-se para misturas de moléculas de diferentes tamanhos e aspectos. Assim como no modelo NRTL utiliza-se de composições locais, porém, além de frações volumétricas ou molares locais, este modelo usa fração de área local como variável de concentração primária, no entanto, com equações matemáticas mais complexas. A fase é predita pela lei dos gases ideais. É indicado a sistemas *fortemente não ideais*. Pode ser utilizado para o cálculo de equilíbrio de misturas LL, LV e LLV. Os parâmetros, no entanto, frequentemente têm certa dependência da temperatura. Assim como NRTL, é utilizado quando há diferenças entre polaridade e quando as espécies são parcialmente solúveis e formam duas fases líquidas. Nenhum componente deve estar próximo à temperatura crítica. *Exemplo: A equação do modelo pode ser aplicada para misturas contendo água, álcool, nitrila, ésteres, cetonas, aldeídos, hidrocarbonetos halogenados e hidrocarbonetos.*

UNIQUAC-RK (UNIQUAC/Redlich-Kwong) - Este método emprega o modelo UNIQUAC para o cálculo do coeficiente de atividade da fase líquida e a equação de estado de Redlich-Kwong para a fase vapor

UNIFAC (UNIQUAC Functional Group Activing Coefficient) - Este modelo admite que o logaritmo do coeficiente de atividade do componente da solução é igual à soma dos logaritmos de suas contribuições. A primeira denominada combinatória é devido às diferenças no tamanho e na forma das moléculas na mistura e também é conhecida como entrópica. E a segunda, denominada residual, devido às energias de interação entre as moléculas, sendo que é acompanhada por liberação ou absorção de calor, também é conhecida como parte entálpica. É indicado a sistemas não ideais abaixo de 10 bar, e até temperaturas altas. Utilizado quando dados experimentais são escassos e/ou para representar desvios da fase líquida. As interações gás-solvente, no entanto, não podem ser modelados através deste método.

Vantagens: 1) É teoricamente baseado no método UNIQUAC. 2) Os parâmetros são, essencialmente, independentes da temperatura. 3) Tamanho e parâmetros de interação binária são avaliados para inúmeros tipos de grupos funcionais. 4) Apresenta bons resultados para sistemas com temperaturas na faixa de 275 a 425K e para baixas pressões. 5) Inúmeras comparações com dados experimentais são possíveis. Esse método

tem a vantagem de necessitar de um pequeno número de parâmetros ajustáveis a serem conhecidos, além de parâmetros estruturais que podem ser prontamente calculados ou retirados de tabelas da literatura.

Atenção: Para a obtenção de bons resultados com o método, todos os componentes da mistura avaliada, devem ser condensáveis.

POLYNRTL (Polymer-NRTL) – Modificação de NRTL para ser utilizada com polímeros.

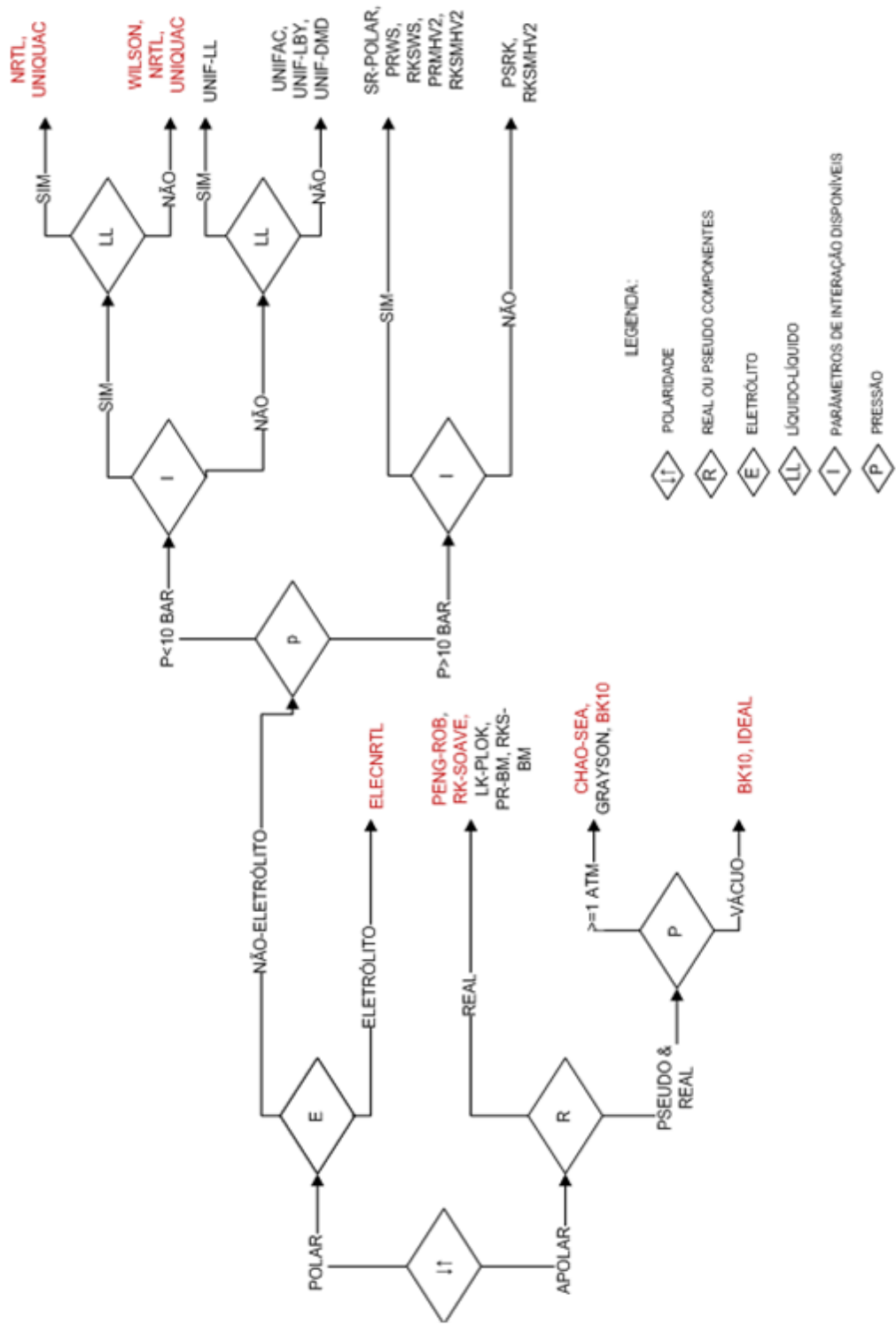
PENG-ROB (Equação de Estado Peng-Robinson) - Equação de estado ideal para cálculos líquido-vapor, assim como, estimativa de massas específicas de líquidos em sistemas de hidrocarbonetos. Em caso de sistemas altamente *não ideais*, *não* deve ser utilizado, recomendando-se modelos de atividade.

SRK (Redlich-Kwong-Soave) - A equação de estado de Redlich-Kwong aperfeiçoada por Soave tem aplicabilidade para sistemas próximos ao ideal, não confiável aos não ideais. No entanto, tem aplicação mais limitada quando comparado à equação anterior.

PSRK (Equação de Estado Preditiva Redlich-Kwong-Soave) – Extensão de SRK, porém usa as regras de mistura de Holderbaum-Gemehling (1991). Essas regras são capazes de prever as interações binárias entre os componentes em qualquer pressão. O método UNIFAC é usado para calcular o parâmetro de mistura. A vantagem desse método é que o equilíbrio líquido-vapor (ELV) pode ser calculado para um grande número de sistemas sem a necessidade de introduzir novos parâmetros que devem ser ajustados aos dados experimentais de equilíbrio. A equação PSRK é facilmente estendida a misturas contendo componentes supercríticos.

PC-SAFT (Copolymer Perturbed-Chain Statistical Associating Fluid Theory) – Esse modelo pode ser usado para modelagem termodinâmica de sistemas envolvendo substâncias complexas, como compostos altamente polares e macromoléculas. Porém, para utilizá-lo é necessário conhecer três parâmetros da substância pura: o número de segmentos por cadeia, o diâmetro de cada segmento por cadeia e a energia de interação entre os segmentos.

APÊNDICE B: FLUXOGRAMA DO ASSISTENTE DE SELEÇÃO DE MODELO TERMODINÂMICO



APÊNDICE C: INTRODUÇÃO AO FORTRAN NO ASPEN PLUS

Este apêndice tem por objetivo trazer as noções necessárias para a/o usuária/o do programa e participante deste curso utilizar a linguagem Fortran no Aspen Plus®. Para maior aprofundamento, existe uma vasta bibliografia sobre essa antiga, porém rica linguagem de programação. A Tabela 22 traz as principais operações em Fortran. Antes de executar qualquer sentença, todas as variáveis que apareçam no lado direito de um sinal de igual devem ser definidas, isto é, possuir valor numérico ou calculado com antes. Para as funções disponíveis, veja o tópico About the Interpreter na ajuda do Aspen.

Operador	Definição	Exemplo	Resultado
=	Definição/substituição	A = B	B
+	Adição	A = A + A	2 ^a
-	Subtração	A = A - A	0
/	Divisão	A = A / A	1
*	Multiplicação	A = A * A	A ²
**	Exponenciação	A = A ** B	A ^B
.LT.	Lógico “menor que”		
.GT.	Lógico “maior que”		
.EQ.	Lógico “igual a”		
..AND.	Lógico “e”		
	Chamada de função	A = Dlog(B)	Ln(B)
	Chamada de sub-rotina	CALL XYZ	Executa a sub-rotina “XYZ”

Tabela 22 - Principais operadores Fortran.

As seguintes regras se aplicam na interpretação de uma sentença Fortran:

- Sentenças podem ser organizadas em agrupamentos de operações com parênteses;
- O conteúdo de cada agrupamento é avaliado antes da avaliação da sentença inteira;
- Chamadas de função precedem avaliação de agrupamentos;
- Exponenciação precede avaliação de agrupamentos;
- Se for parte de um agrupamento, divisores são avaliados antes dos numeradores.

O interpretador do Aspen Plus® é implementado em Intel Fortran e possui as seguintes regras de formatação:

- A coluna 1 pode conter um “C”, que significa que a linha é um comentário;
- A coluna 2 deve ser deixada em branco;

- As colunas 3 a 5 são reservadas para rótulos (*labels*). Em certas condições lógicas, a execução de um programa pode ser transferida para uma sentença rotulada;
- Sentenças executáveis começam somente a partir da sétima coluna;
- Nenhuma variável pode começar com os caracteres IZ ou ZZ;
- Variáveis inteiras começam com as letras I até N;
- Variáveis reais começam com as letras A até H ou O até Z;
- Nomes de variáveis são limitados a até 7 caracteres;
- É permitido o uso de caracteres em caixa baixa.

Sentenças lógicas podem ter diversas formas. Por exemplo:

```
IF ((expression a). EQ. (expression b)) (expression c) expression d
```

A expressão c será executada se a equação lógica com as expressões a e b for verdadeira. Do contrário, a expressão d será executada. Em sentenças *Go To*, todas as seguintes são ignoradas até a referida sentença rotulada ser encontrada, a partir da qual a execução do programa procede normalmente. Sua sintaxe seria:

```
Go To statement label
```

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] ASPENTECH, Aspen V.8.0. Process Modeling, Remote Training. 2013.
- [2] CARDOSO, A. T. M. TQ085 - Operações Unitárias I. Curitiba: Universidade Federal do Paraná, 2012.
- [3] CERDA, E. E. V. Estudo do perfil de concentração em um precipitador eletrostático do tipo placa-fio. 84p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de São Carlos. São Carlos: UFSCar, 2004.
- [4] Compressores Ache. Disponível em: <<http://www.achecompressores.com.br/como-funciona-os-compressores.html>>. Acesso em 08/06/2013.
- [5] Compressores Sulzer. Disponível em: <<http://www.sulzer.com/pt/Products-and-Services/Pumps-and-Systems/Medium-Consistency-Pumps/Other-Medium-Consistency-Products/Degassing-Pump-BG>>. Acesso em 08/06/2013.
- [6] CRAWFORD, M. Air Pollution Control Theory. Ch. 8: Electrostatic Precipitation, p. 298-358. New York: McGraw-Hill, 1976.
- [7] DEUTSCH, W. Annalen der Physik, 68. p. 335-344. Leipzig: Verlag von Johann Ambrosius Barth, 1922.
- [8] Faculty of Engineering, Chemical Engineering, Jordan University <just.edu.jo>
- [9] HOLLAND, C. D. Fundamentals of Multicomponent Distillation. New York: McGraw-Hill, 1981.
- [10] INCROPERA, F.; Fundamentos de Transferência de Calor e de Massa, 2008.
- [11] KAKAÇ, S.; LIU, H. Heat Exchangers - Selection, Rating and Thermal Design. 2nd edition. Boca Raton: CRC Press, 2002.
- [12] LORA, E. S. Controle da poluição do ar na indústria açucareira. Itajubá: Sociedade de Técnicos Açucareiros do Brasil – STAB, 2000.
- [13] MACINTYRE, A. J. Ventilação industrial e controle da poluição. 2ª ed. 403p. Rio de Janeiro: Guanabara Koogan, 1990.
- [14] OZAWA, M. Determinação experimental da resistividade ôhmica de cinzas volantes para projetos de precipitadores eletrostáticos. 140p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Mecânica) – Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, Departamento de Engenharia Mecânica. São Paulo: USP, 2003.
- [15] PERRY, R. H. CHILTON, C. H. Manual de engenharia química. 5ª ed. Rio de Janeiro: Guanabara Dois, 1986.
- [16] POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J. M.; O'CONNELL, J. P. The Properties of Gases and Liquids. 5th ed. New York: McGraw-Hill, 2004.
- [17] PRICE, R. M. CHE 330 – Mass Transfer and Separations. Lecture Notes. Christian Brothers University, 2008.
- [18] SANDLER, S. I. Chemical, Biochemical, and Engineering Thermodynamics. 4th ed. Nova Jersey: John Wiley & Sons, 2006.
- [19] SCHEFFLAN, R. Teach Yourself the Basics of Aspen Plus. Hoboken: John Wiley & Sons, 2011.
- [20] SVAROVSKY, L. Handbook of powder technology Vol. 3; Solid-Gas Separation. Elsevier Scientific Publishing Company, 1981.
- [21] TREYBAL, R. E. Liquid Extraction. New York: McGraw-Hill, 1951.