



UNIVERSIDADE FEDERAL DA BAHIA  
ESCOLA POLITÉCNICA  
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA QUÍMICA

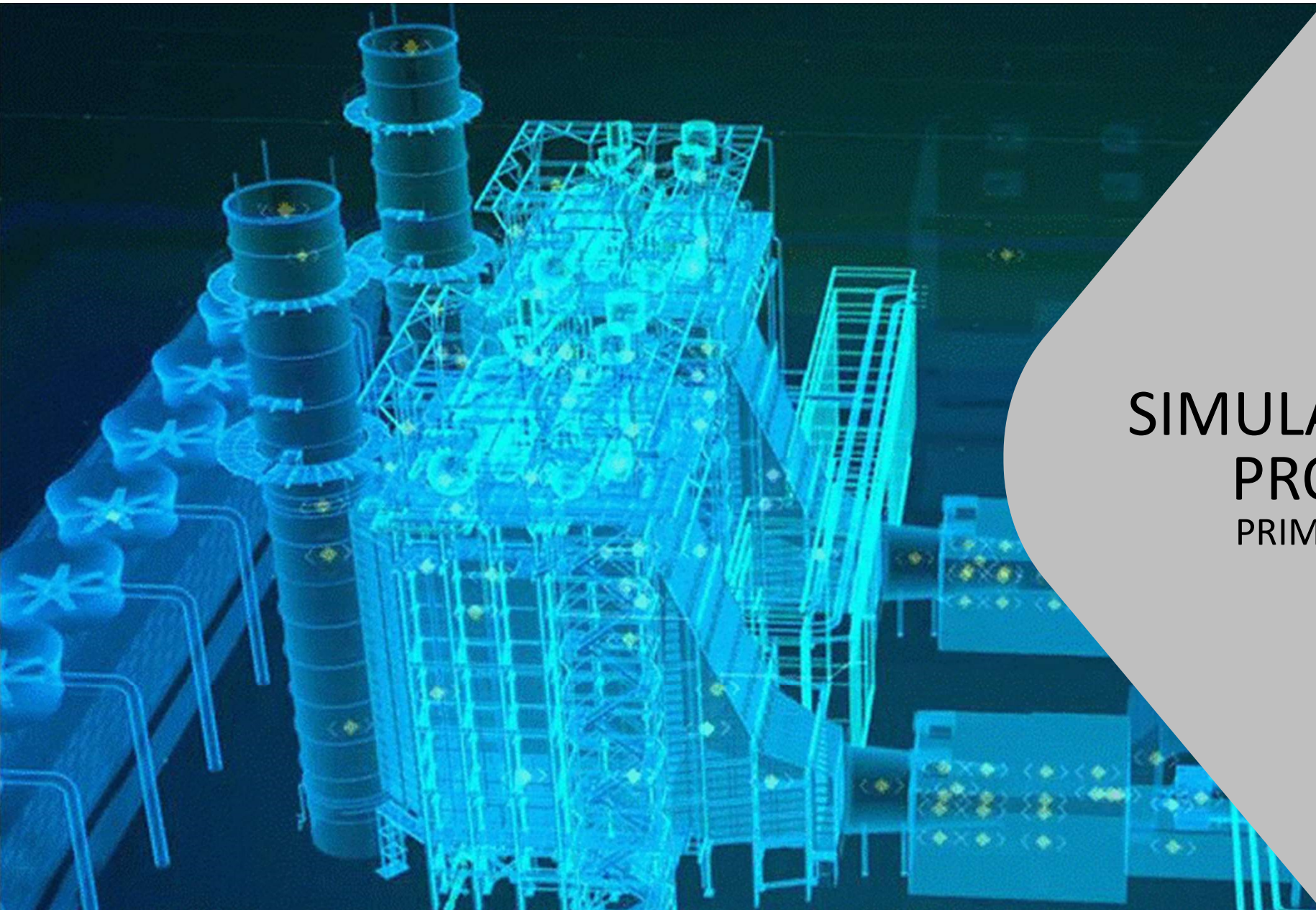


# ENG438 - Simulação

## Primeiros passos para simulação

Prof. Dr. Delano Mendes de Santana

Abril de 2020



# SIMULAÇÃO DE PROCESSOS

PRIMEIROS PASSOS

INSTALAÇÃO

## Simuladores de processos - comerciais

Simuladores de processo - comerciais

**Aspen Plus** – Simulador Linear e mais preciso, principalmente em simulações de coluna de destilação com separações mais complexas, envolvendo iterações binárias com compostos menos conhecidos ou modelados.

**Hysys** – simulação matricial e mais fácil de convergir e modelar, principalmente quando se trata de simulações com reciclos e especificações que não correntes de entrada.

Utilizados largamente nas indústrias, porém possuem taxa de utilização e necessidade de licenças....

## Simuladores de processos – código aberto

### Simuladores de processo – *Open Source*

**CAPE-OPEN** – *Computer Aided Process Engineering* em código aberto. Consiste em especificações com objetivo de expandir a gama de aplicações das tecnologias de Simulação de Processo. Este código é gerenciado por uma instituição não governamental, sem fins lucrativos chamada CO-LaN (*CAPE-OPEN Laboratories Network*).

Estas especificações definem um conjunto de interfaces de softwares que permitem a representação de um Componente (*Process Modelling Component - PMC*) em um Ambiente de Simulação (*Process Modeling Environment – PME*). Este processo de modelagem é também conhecido como *Digital Twins*.

Os softwares mais conhecidos são o DWSIM (<http://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=DWSIM>) e o COCO (<https://www.cocosimulator.org/index.html>).

No nosso curso utilizaremos o DWSIM, por possuir uma interface mais amigável e atualizações recentes (13/04/2020).

Criador e desenvolvedor do software: Daniel Medeiros – Engenheiro de Processos Especialista da PETROBRAS  
<https://www.linkedin.com/in/daniel-medeiros-6a3b9124/pt>

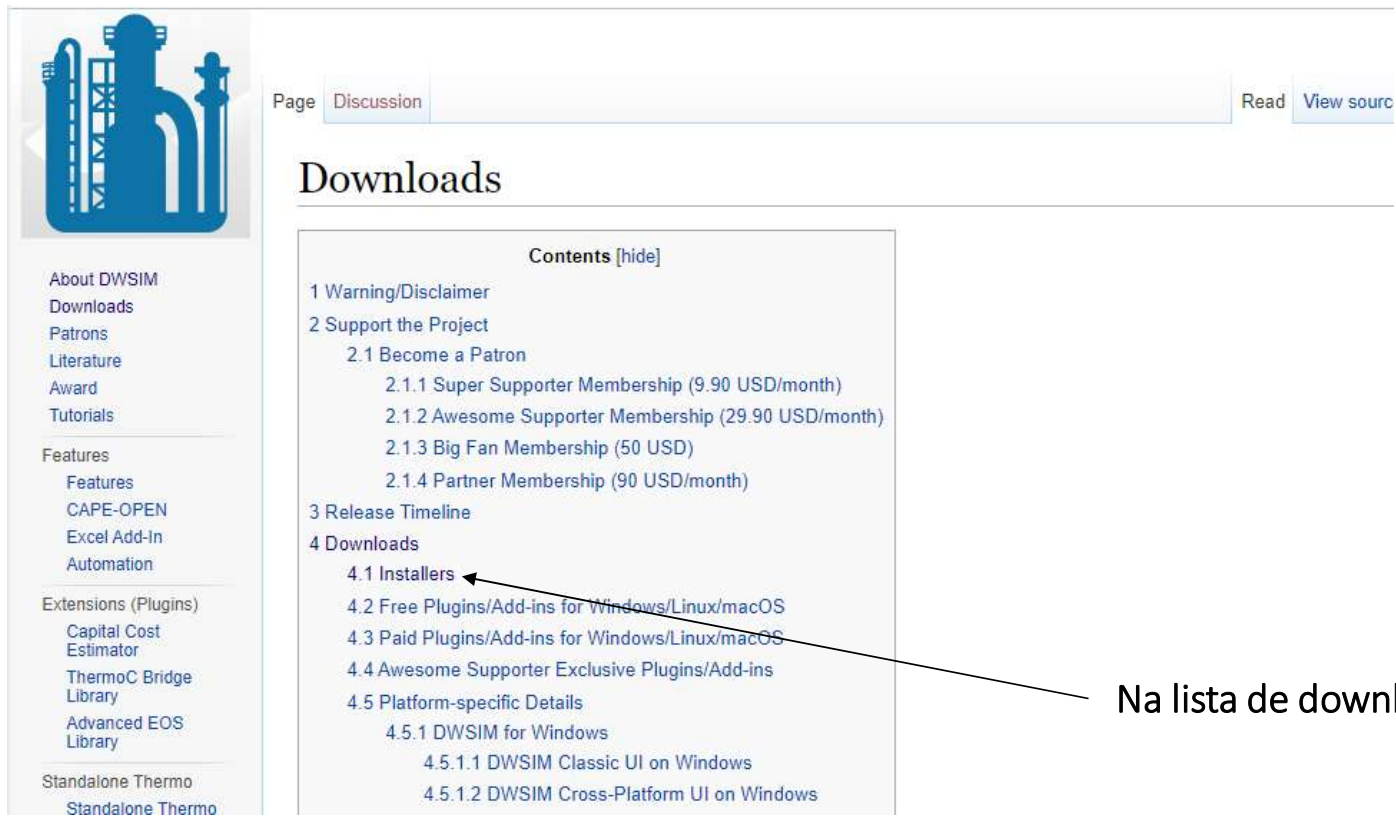
## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM

Acesse o site: <http://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=DWSIM>

The image shows a browser window displaying the DWSIM website. The browser's address bar contains the URL <http://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=DWSIM>. The website features a navigation menu on the left with items such as 'About DWSIM', 'Downloads', 'Patrons', 'Literature', 'Award', and 'Tutorials'. The main content area includes a 'Main page' tab, the 'DWSIM' title, and a banner for 'FOSSEE DWSIM Custom Modeling Project'. Below the banner is a screenshot of the DWSIM software interface, which shows a 'Methanol Column (1 atm) (Distillation Column)' window with various parameters and a process flow diagram.

Canto inferior esquerdo, downloads.

## Simulação de processos – Baixando o DWSIM



Page [Discussion](#) [Read](#) [View source](#)

### Downloads

**Contents** [hide]

- 1 Warning/Disclaimer
- 2 Support the Project
  - 2.1 Become a Patron
    - 2.1.1 Super Supporter Membership (9.90 USD/month)
    - 2.1.2 Awesome Supporter Membership (29.90 USD/month)
    - 2.1.3 Big Fan Membership (50 USD)
    - 2.1.4 Partner Membership (90 USD/month)
- 3 Release Timeline
- 4 Downloads
  - 4.1 [Installers](#)
  - 4.2 Free Plugins/Add-ins for Windows/Linux/macOS
  - 4.3 Paid Plugins/Add-ins for Windows/Linux/macOS
  - 4.4 Awesome Supporter Exclusive Plugins/Add-ins
  - 4.5 Platform-specific Details
    - 4.5.1 DWSIM for Windows
      - 4.5.1.1 DWSIM Classic UI on Windows
      - 4.5.1.2 DWSIM Cross-Platform UI on Windows

Na lista de downloads, clicar em Installers.

## Simulação de processos – Baixando o DWSIM

### Installers

- **DWSIM Simulator Plus v5.8 Update 10 Build 7368 for 32/64-bit Windows 7/8/10** (release date: March 04, 2020)
  - (Awesome Supporter exclusive download) [↗](#)
  - (readme/changelog) [↗](#)

The **Plus** package is a convenience installer containing DWSIM v5.8 Update 10 for 64-bit Windows plus all plugins and add-ins for Awesome Supporters. It also contains a portable Python 3.6.8 installation automatically referenced by DWSIM to run python scripts when using the Python.NET interpreter.

- **DWSIM Simulator v5.8 Update 10 for 32/64-bit Windows 7/8/10** (release date: February 21, 2020)
  - (free download) [↗](#)
  - (readme/changelog) [↗](#)
- **DWSIM Simulator v5.8 Update 10 for 64-bit Linux** (release date: February 21, 2020)
  - (free download) [↗](#)
  - (readme/changelog) [↗](#)
- **DWSIM Simulator v5.8 Update 10 (Cross-Platform UI) for 64-bit macOS** (release date: February 21, 2020)
  - (free download) [↗](#)
  - (readme/changelog) [↗](#)
- **DWSIM Simulator v5.8 Update 3 (Classic UI) VirtualBox VDI Image** (release date: October 24, 2019)
  - (All Patrons download) [↗](#)
  - (readme/changelog) [↗](#)
- **DWSIM Simulator v5.7 Update 13 (Classic UI) for 64-bit macOS** (release date: July 18, 2019)
  - **This version doesn't run on macOS Catalina.**
  - (All Patrons download) [↗](#)

Clicar para baixar a última versão *free* disponível.

## Simulação de processos – Baixando o DWSIM

The screenshot shows the SourceForge project page for DWSIM. The top navigation bar includes 'Open Source Software', 'Business Software', 'Services', and 'Resources'. Below this is a banner for Dell and Intel. The main content area features the project title 'DWSIM - Open Source Process Simula...' and a description: 'Simulate chemical processes using advanced thermodynamic models'. A navigation menu includes 'Summary', 'Files', 'Reviews', 'Support', 'Mailing Lists', 'Discussion', 'Donate', 'Tickets', and 'Code (GitHub)'. A green button labeled 'Download Latest Version' is highlighted with an arrow, with the text 'DWSIM\_bin\_v58u10\_setup\_win7win8win10\_64bit.exe (138.8 MB)' below it. A 'Get Updates' button is also visible. The page footer shows a table with columns for 'Name', 'Modified', 'Size', and 'Downloads / Week', and a 'Parent folder' link.

Clicar na caixa verde para download da última versão.

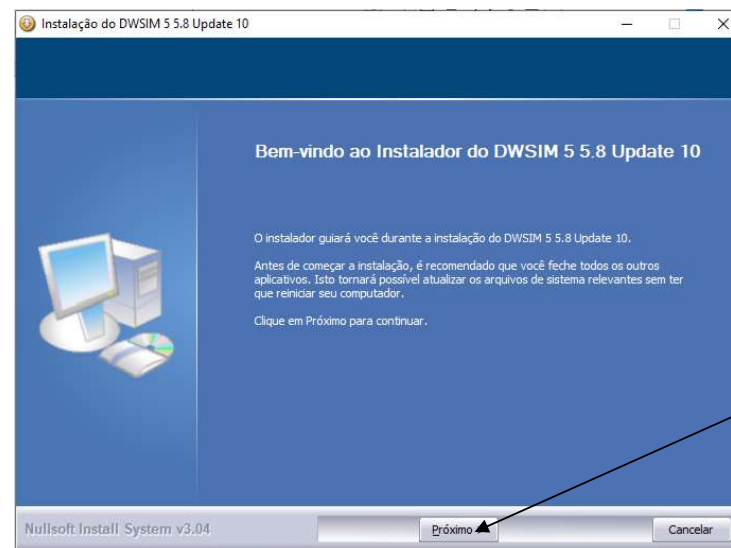
Salvar o arquivo na pasta de downloads da sua máquina.



## Simulação de processos – Instalando o DWSIM

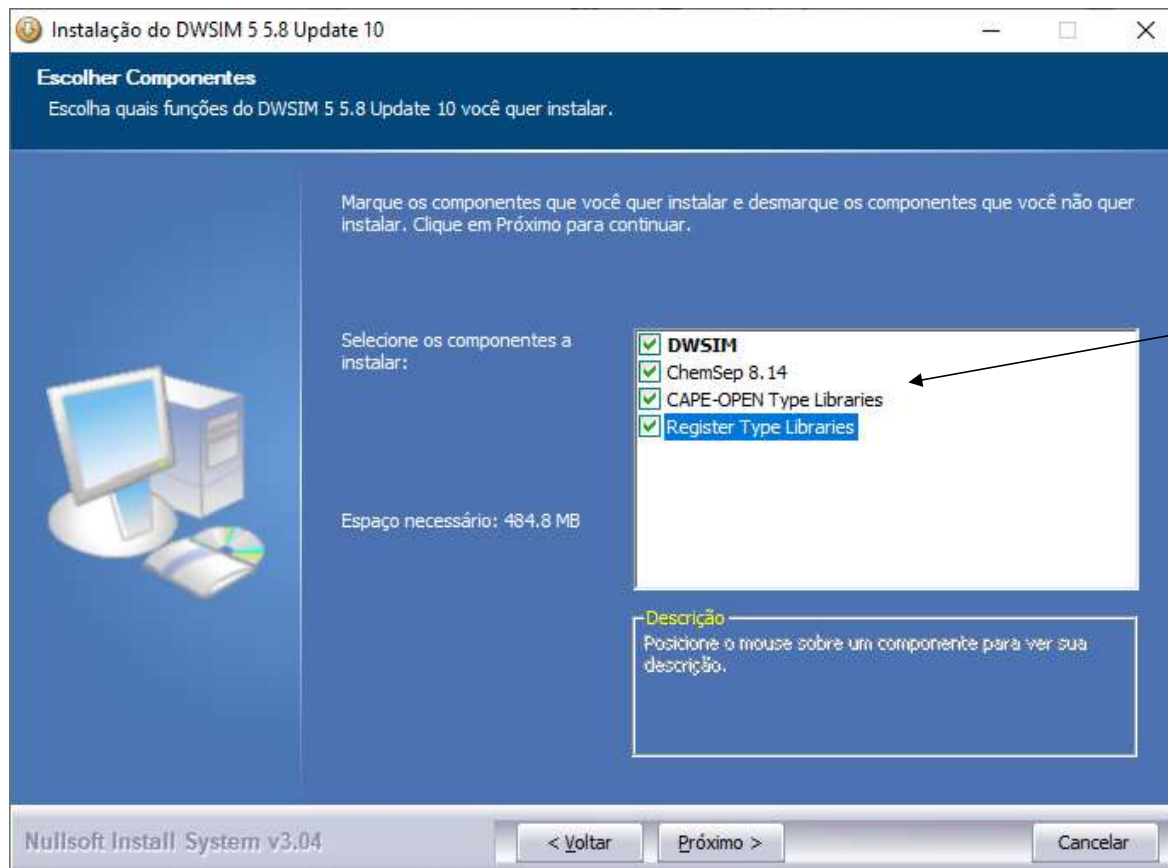
Nome	Status	Data de modificação	tipo	tamanho
DWSIM_bin_v58u10_setup_win7win8win10_64bit	✓	03/04/2020 12:45	Aplicativo	135.570 KB

Clicar no arquivo executável baixado e seguir as orientações de instalação.



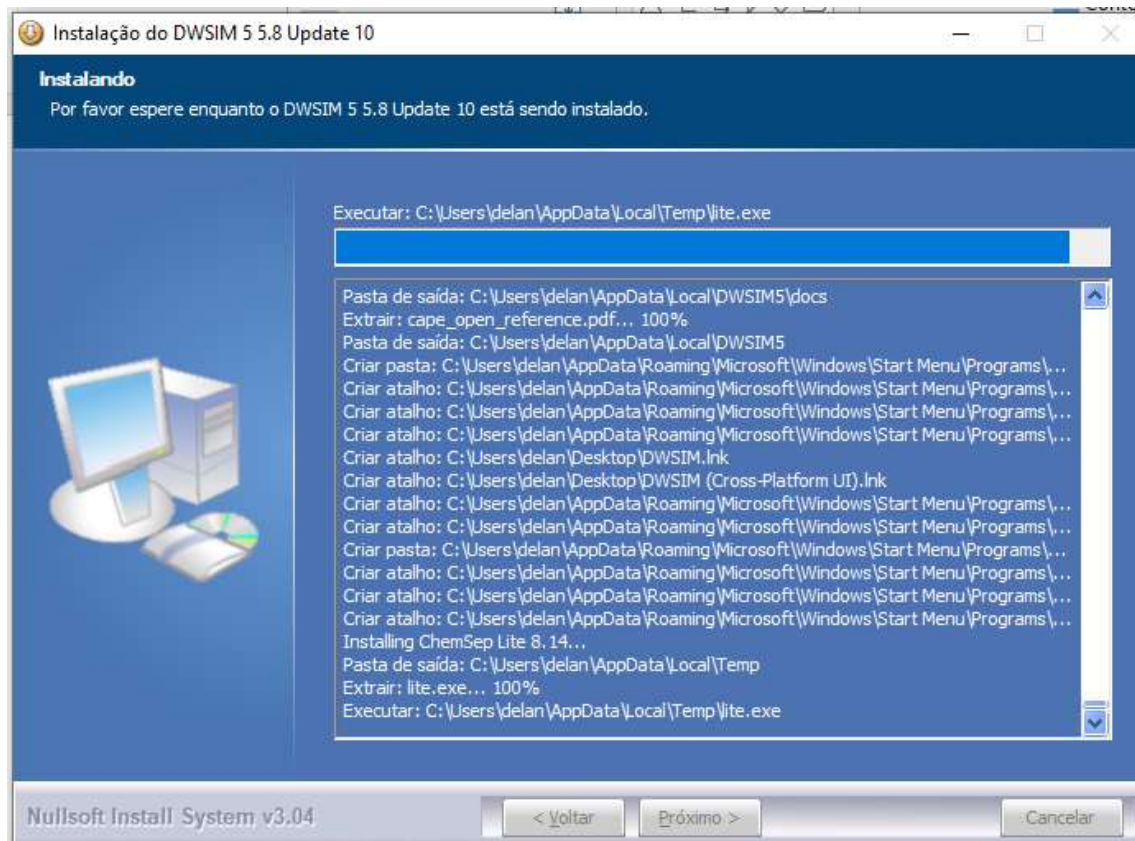
Seguir com os passos da Instalação.

## Simulação de processos – Instalando o DWSIM



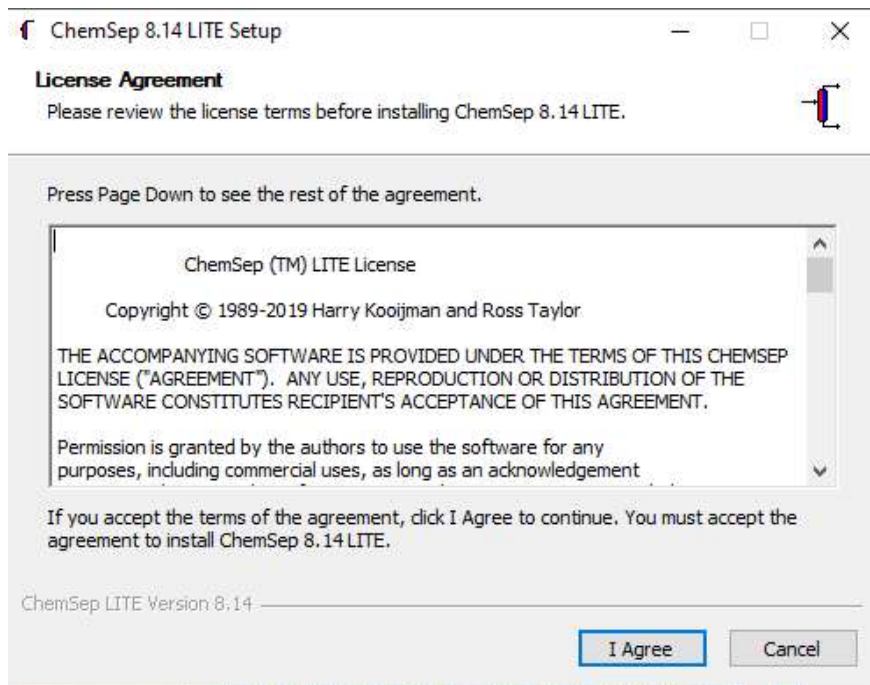
Selecionar todos os componentes para instalar.

## Simulação de processos – Instalando o DWSIM



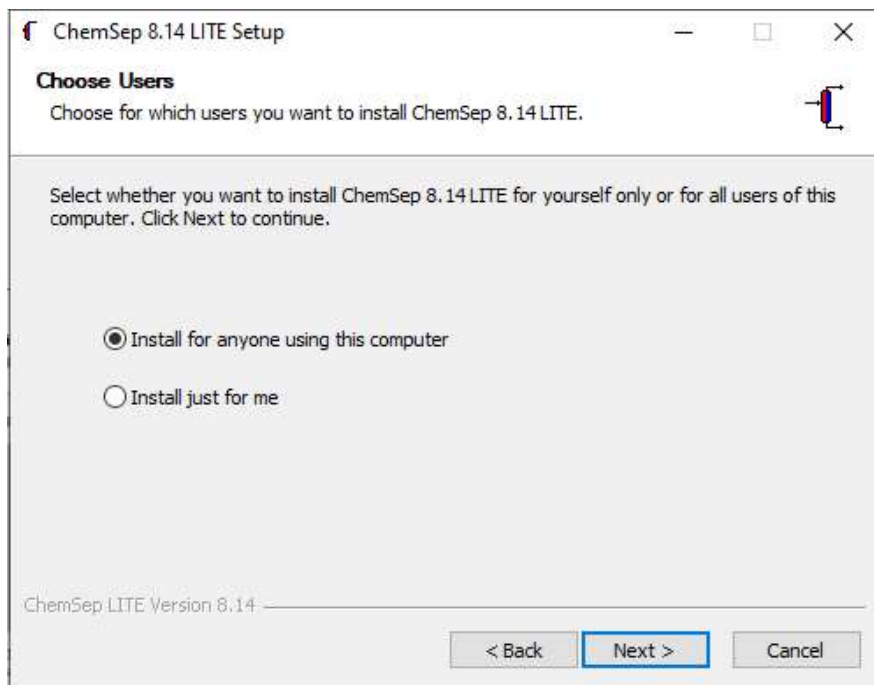
Seguir com os passos da Instalação.

## Simulação de processos – Instalando o DWSIM



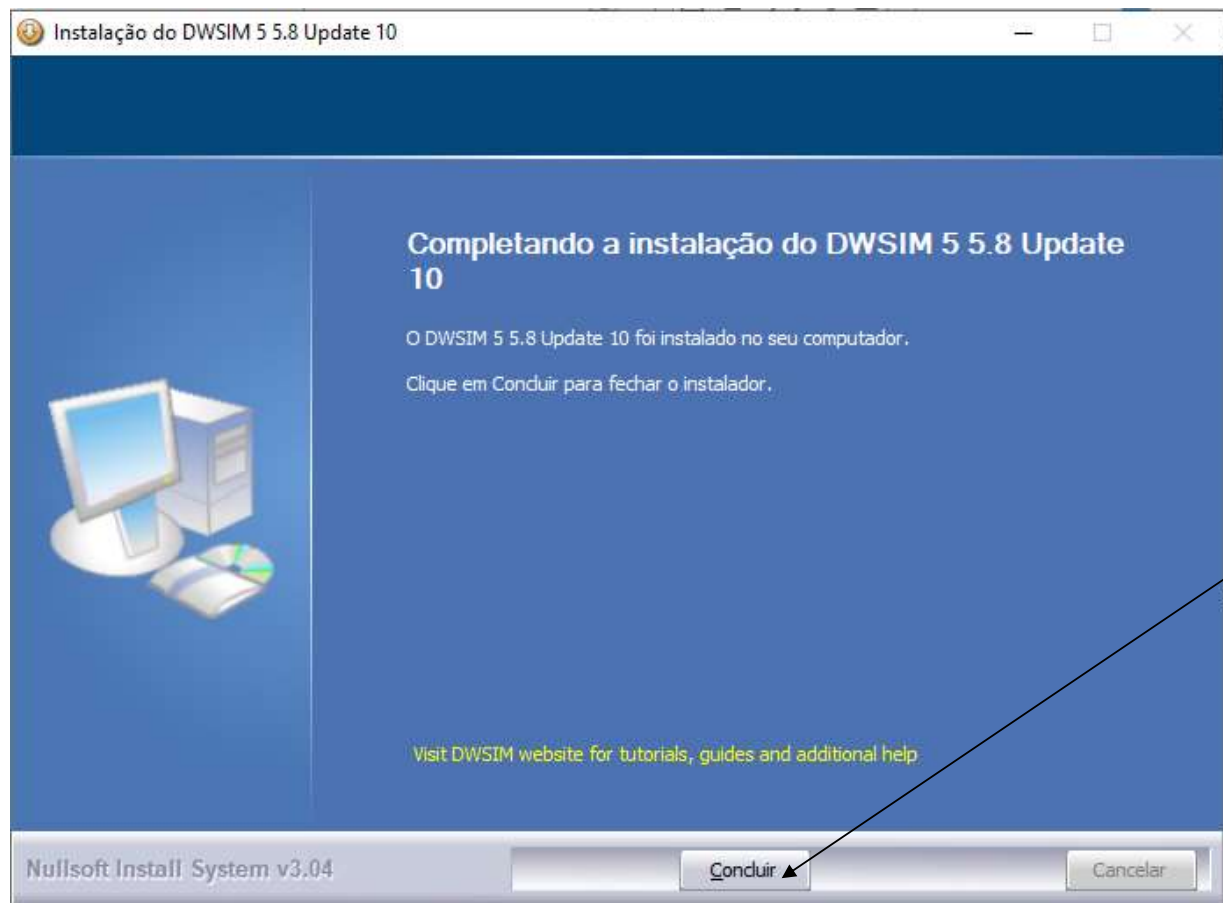
Aceitar alguns passos...

## Simulação de processos – Instalando o DWSIM

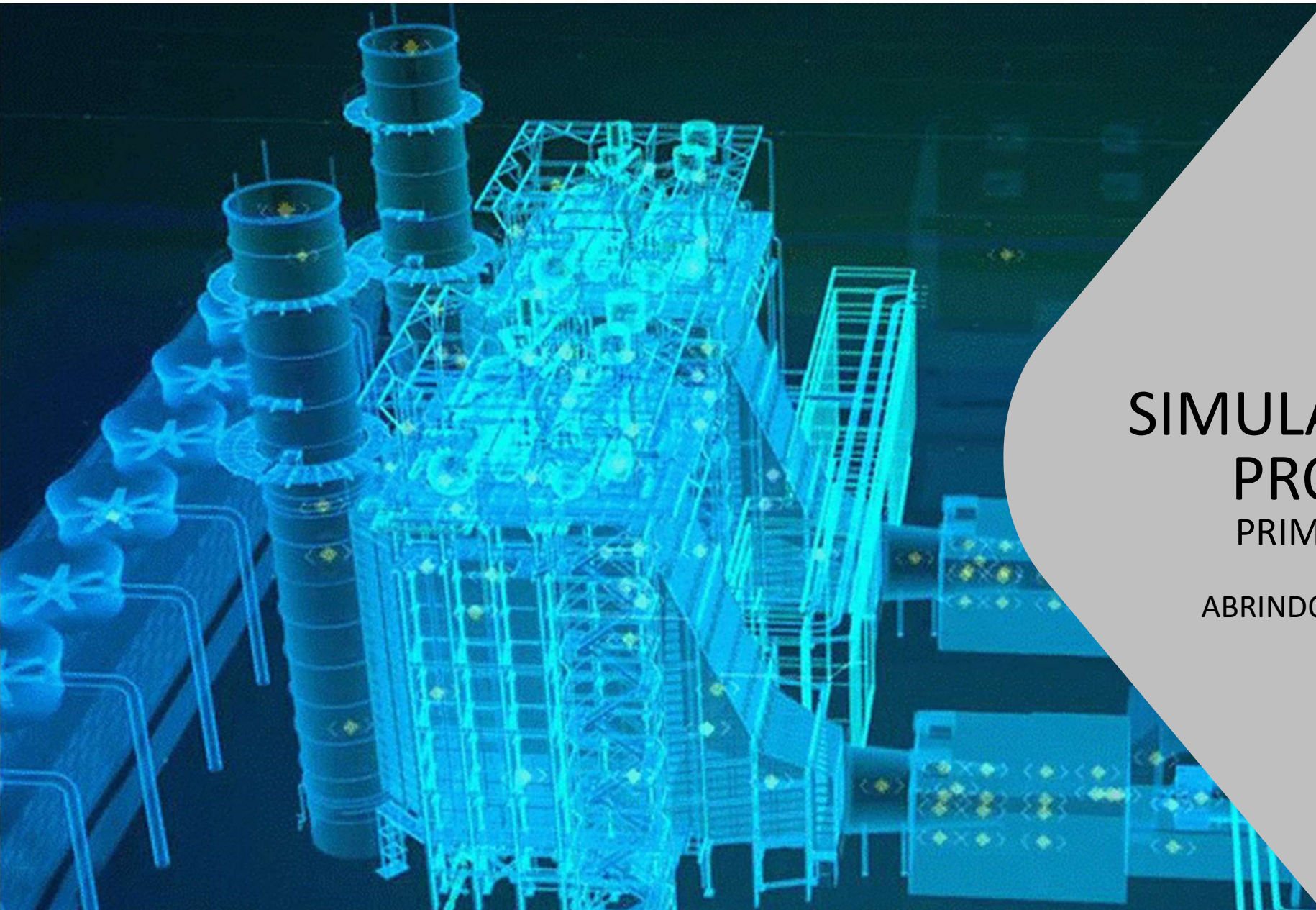


Seguir com os passos da Instalação.

## Simulação de processos – Instalando o DWSIM



Concluir.



# SIMULAÇÃO DE PROCESSOS

## PRIMEIROS PASSOS

ABRINDO E EXPLORANDO

## Simulação de processos – Iniciando o DWSIM

O software DWSIM possui duas interfaces distintas:

1. The Classic UI (User Interface);
2. Cross-Platform UI

A interface clássica é baseada em Windows Forms graphical class library ([link](#)), que foi utilizada desde as primeiras versões do DWSIM. A estrutura Windows Forms graphical library foi criada especificamente para aplicações em Windows, por isso essa interface pode ser um pouco mais estável nestes tipo de Sistema Operacional, quando comparador com Linux ou MacOS.

A interface Cross-Platform UI é baseada na biblioteca chamada de Eto.Forms ([link](#)), que é uma cross-platform graphical class library, que suporta Windows, Linux, macOS e alguns outros sistemas operacionais de celular.

Essa interface foi criada usando a linguagem C#. No Windows, essa UI roda sob Windows Presentation Foundation, por isso pode ser um pouco mais instável em alguns momentos.

Devido a maior facilidade de utilização e presença de muitos guias fundamentais para simulações iniciais, iremos utilizar a interface Cross-Platform UI. Porém, caso haja alguma instabilidade, pode ser utilizada a interface clássica. Os termos e campos são bastante semelhantes, as diferenças são basicamente em estética e diagramação, não em conceito.



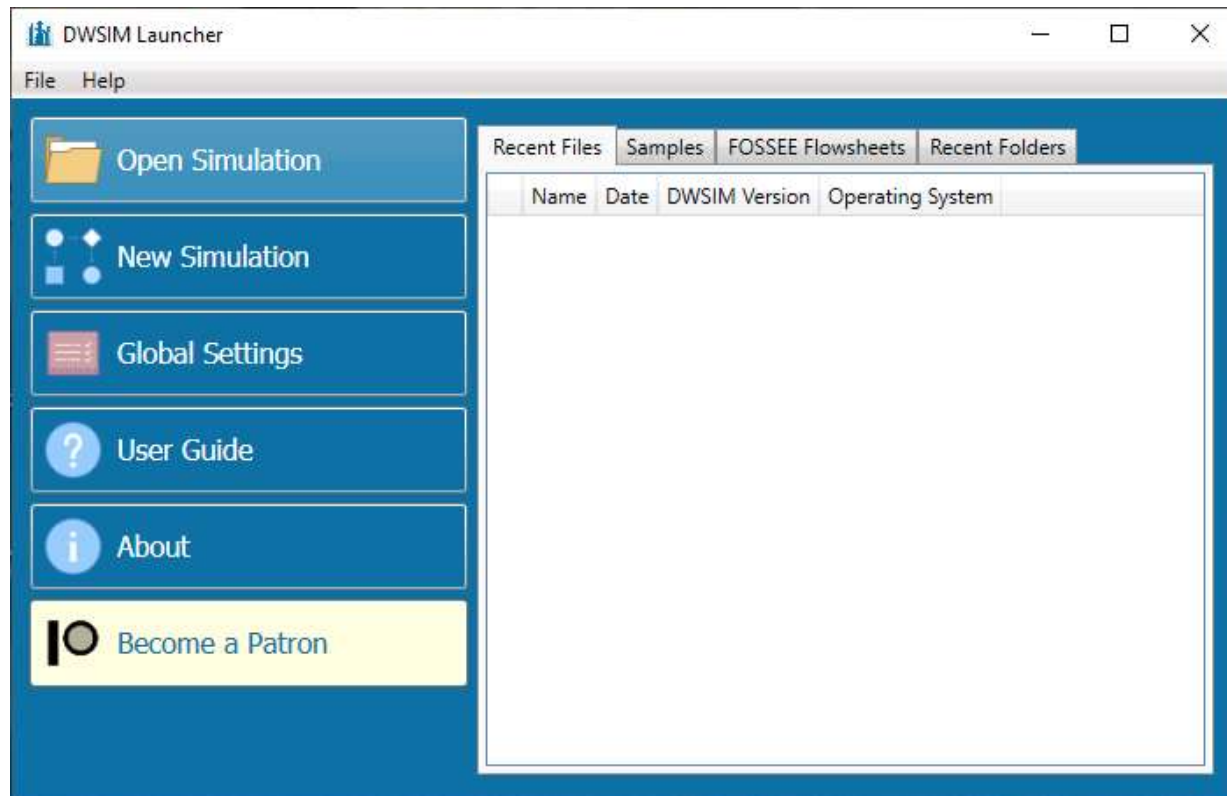
## Simulação de processos – Iniciando o DWSIM



Clicar no ícone adicionado a área de trabalho.

Caso não tenha sido criado o item, pesquisar DWSIM no menu de pesquisa do Windows e abrir DWSIM (cross-platform UI). Essa interface é mais intuitiva e indica para primeiras simulações.

## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM



Esta é a interface inicial da Cross-Platform UI do DWSIM.

Como vamos iniciar uma nova simulação, clicar em New Simulation.

Caso não seja a primeira vez, basta abrir um simulação existente em Open Simulation.

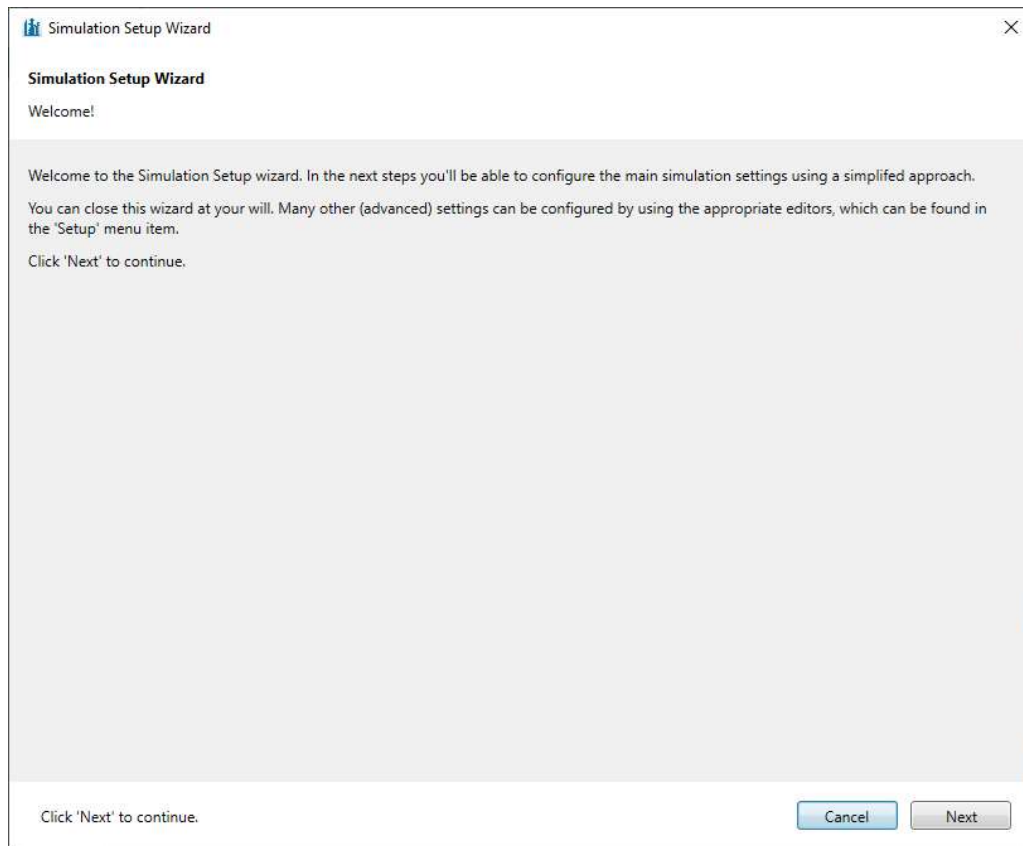
Há também uma interface chamada de Classic User Interface. As funcionalidades são as mesmas, mas os ícones e diagramação são um pouco diferentes.

## Simulação de processos

Etapas da construção de uma simulação:

- 1) Definição dos componentes.
- 2) Seleção do modelo termodinâmico.
- 3) Verificação das unidades de medida utilizadas.
- 4) Fornecimento dos dados das correntes de entrada.
- 5) Construção do esboço do fluxograma de processo.
- 6) Informação das condições de processo de cada Operação Unitária.
- 7) Verificação dos resultados.

## Simulação de processos - Iniciando uma simulação no DWSIM



Esta é a tela de início para as configurações básicas da simulação.

Este software oferece um passo a passo muito didático para primeira simulação.

## Simulação de processos - Iniciando uma simulação no DWSIM

Simulation Setup Wizard

### Step 1 - Add Compounds

Select the compounds to add to the simulation. If your compound is not on the list, you can create and add a new one using the Compound Creator Wizard ('Setup' > 'Compounds' > 'Compound Tools' > 'Compound Creator Wizard').

#### Simulation Compounds

Check compounds to add them to the simulation, uncheck to remove.  
To commit the changes, select another table cell or press ENTER after checking/unchecking the compound. You may have to double-click on the checkbox in order to change its state (checked/unchecked).  
Number of compounds available: 1346

Search:

Click to view properties of the selected compound

Load and add compounds to the simulation from JSON files

Order Compounds By:

Added	Compound	Tag	Formula	CAS Number	Database
<input type="checkbox"/>	(1Z,3Z)-Cycloocta-1,3-Diene		C8H12	1700-10-3	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(3E)-Penta-1,3-Diene		C5H8	2004-70-8	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-1,2-Dichloroethene		C2H2Cl2	156-60-5	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-1-Bromanylprop-1-Ene		C3H5Br	590-15-8	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-3-Methylpent-2-Ene		C6H12	616-12-6	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-But-2-Enal		C4H6O	123-73-9	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-But-2-Enenitrile		C4H5N	627-26-9	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-But-2-Enoic Acid		C4H6O2	107-93-7	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(Z)-1,2-Dichloroethene		C2H2Cl2	156-59-2	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(Z)-3-Methylpent-2-Ene		C6H12	922-62-3	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(Z)-But-2-Enenitrile		C4H5N	1100-76-7	ChEDL Thermo

Click 'Next' to continue.

Nesta tela é possível adicionar os componentes que desejamos para as simulações.

Neste primeiro momento, vamos adicionar apenas Água (Water).

Escrever Water no campo "Search" e apertar enter.

São necessários dois cliques, um para realçar o componente e o segundo para realmente selecioná-lo. A seleção é confirmada pelo "check" ao lado do componente.

## Simulação de processos - Iniciando uma simulação no DWSIM

Search

Click to view properties of the selected compound

Load and add compounds to the simulation from JSON files

Order Compounds By

Added	Compound	Tag	Formula	CAS Number	Database
<input checked="" type="checkbox"/>	Water		HOH	7732-18-5	ChemSep
<input type="checkbox"/>	HeavyWater		D2O1	7789-20-0	CoolProp

Selecionar "Water" e avançar em "Next".

## Simulação de processos

Escolha do modelo termodinâmico:

**CUIDADO !**

A escolha do modelo termodinâmico é determinante para uma simulação bem sucedida.

Dicas:

- Avalie o conjunto de componentes de simulação: eletrólitos, polares, apolares, condições críticas de P e T, etc.
- Compare resultados de propriedades físicas do simulador com referências bibliográficas.
- Caso existam dados de plantas e unidades produtivas existentes, faça uma comparação dos resultados reais com os resultados simulados.

Leitura recomendada: CARLSON, E. C., **“Don’t gamble with physical properties for simulations”**, Chemical Engineering Progress, out/1996.

## Atenção

- The program is making assumptions of which the user may not be aware. This is particularly true of the choice of thermodynamic property correlations, for which the program's default values are most often used.
- Different property correlations may give drastically different computational results; it is not always easy to determine which result is the best.
- The best computer-aided result may be inferior to the result of a classical graphical method that utilizes a more accurate representation of the thermodynamic properties.

Nevers, N.; Seader, J.D. (1992)

### Three major findings

This survey revealed three major issues that require attention in using simulations:

1. correctly predicting vapor/liquid equilibrium (VLE)
2. having the simulation match plant data
3. applying graphical techniques to troubleshoot simulations.

Kister, H. Z. (2002)

*Finding good values for inadequate or missing physical property parameters is the key to a successful simulation. And this depends upon choosing the right estimation methods.*

---

Eric C. Carlson,  
Aspen Technology, Inc.

Carlson, E. C. (1996)



## Simulação de processos - Iniciando uma simulação no DWSIM

Simulation Setup Wizard ×

**Step 2 - Process Model details**  
Configure process model details.

---

**Process Details**

Check/uncheck boxes according to your process characteristics and DWSIM will choose the best thermodynamic model setup for your simulation.  
Please check the minimum amount of boxes as possible, avoiding redundancy and/or incompatible items.  
If you prefer to setup the Property Packages manually, close this wizard and go to 'Setup' > 'Basis'.

---

**General Information**

- My process can be modeled using the Ideal Gas law for vapor phase and Ideal Solution Theory for liquid phase
- My process deals with hydrocarbons only
- My process has hydrocarbons and Water at higher pressures
- My process has polar chemicals
- My process deals with a refrigeration cycle
- This is a single Water/Steam simulation
- I'm simulating a process which involves aqueous electrolytes

O desenvolvedor do Software entende que a etapa de definição do modelo termodinâmico é de suma importância para o resultado da simulação e já solicita algumas informações acerca da simulação que iremos realizar.

No nosso caso, será uma simples simulação com água e vapor. Então marcaremos apenas este item.

Em outras simulações, utilizaremos as demais opções.

## Simulação de processos - Iniciando uma simulação no DWSIM

The screenshot shows the 'Simulation Setup Wizard' dialog box, specifically 'Step 3 - Other Settings'. The window title is 'Simulation Setup Wizard' with a close button (X) in the top right corner. Below the title bar, the text reads 'Step 3 - Other Settings' and 'Configure miscellaneous simulation settings.' The dialog is divided into several sections:

- General**: This section contains a text input field for 'Simulation Name' with the value 'IG438 - Primeiros passos'. Below it, a note states: 'The simulation name will be used for report identification and file name during saving.'
- System of Units**: This section has a label 'System of Units' and a dropdown menu currently set to 'SI'. A note above it says: 'Select the System of Units to be used on this simulation.'
- Number Formats**: This section is further divided into two sub-sections:
  - General**: A dropdown menu set to 'G6'. A note below it says: 'Select the formatting scheme for general numbers.'
  - Compound Amounts**: A dropdown menu set to 'G8'. A note below it says: 'Select the formatting scheme for compound amounts in Material Stream reports.'

At the bottom of the dialog, there is a message: 'Click 'Finish' to close this window and start building your process model.' and three buttons: 'Cancel', 'Previous', and 'Finish'.

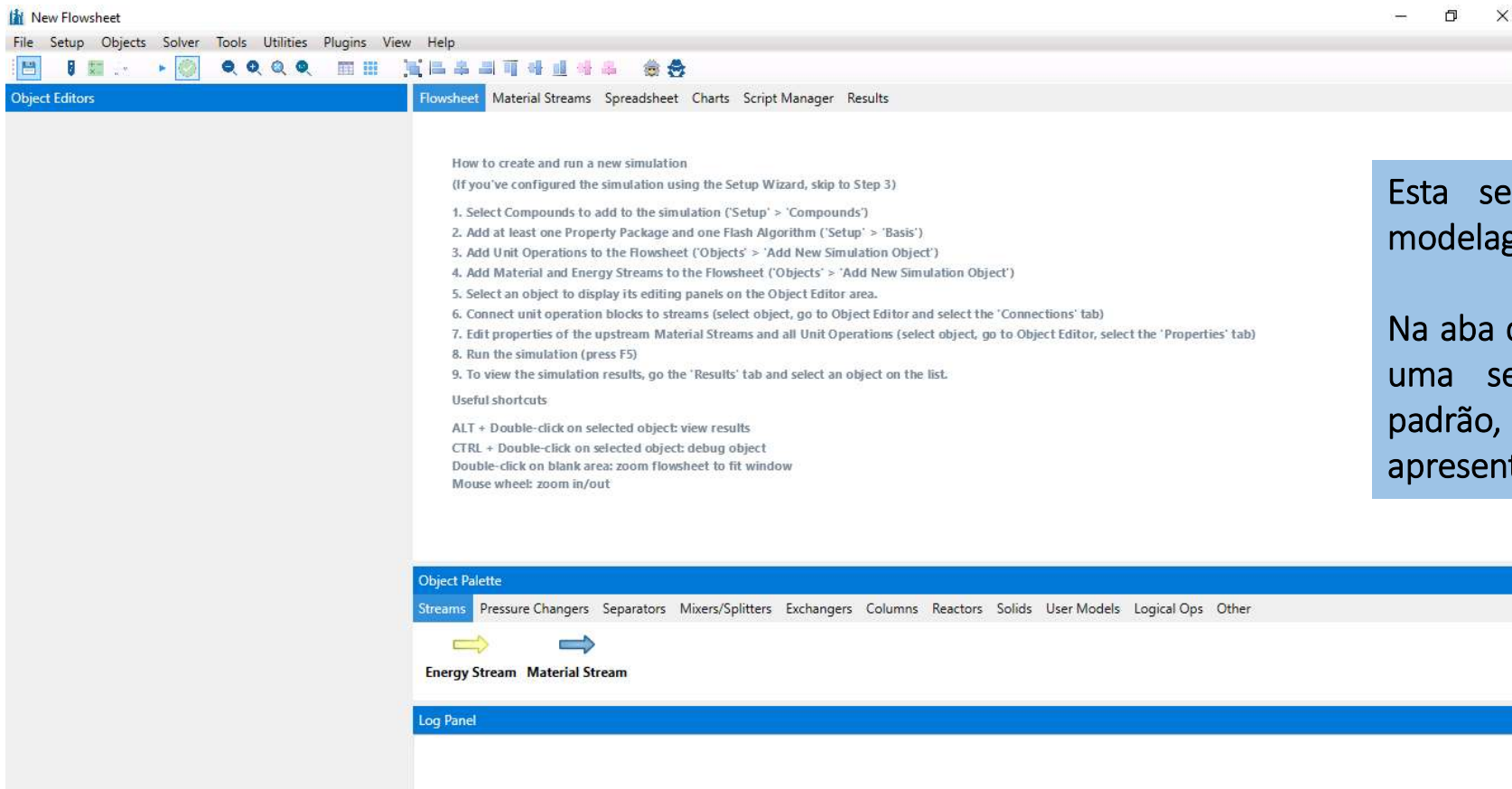
Incluir informações básicas da simulação como Nome, Sistema de Unidades e formato dos números.

Vamos nomear a nossa simulação como queiram e escolher o padrão SI de unidades.

Esses últimos formatos de deixaremos como default.

Daí então: "Finish".

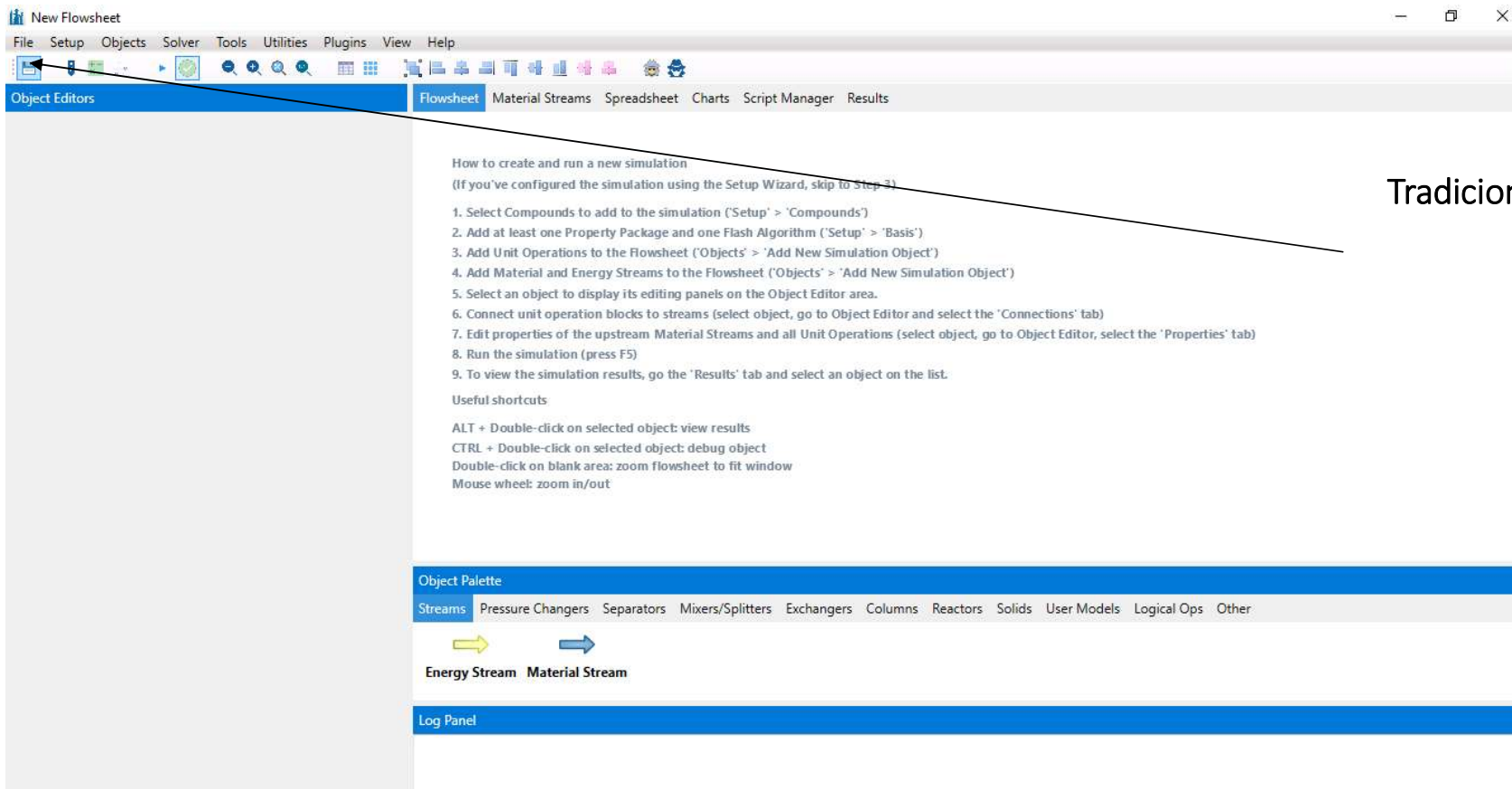
## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM



Esta será a nossa interface de modelagem e simulação.

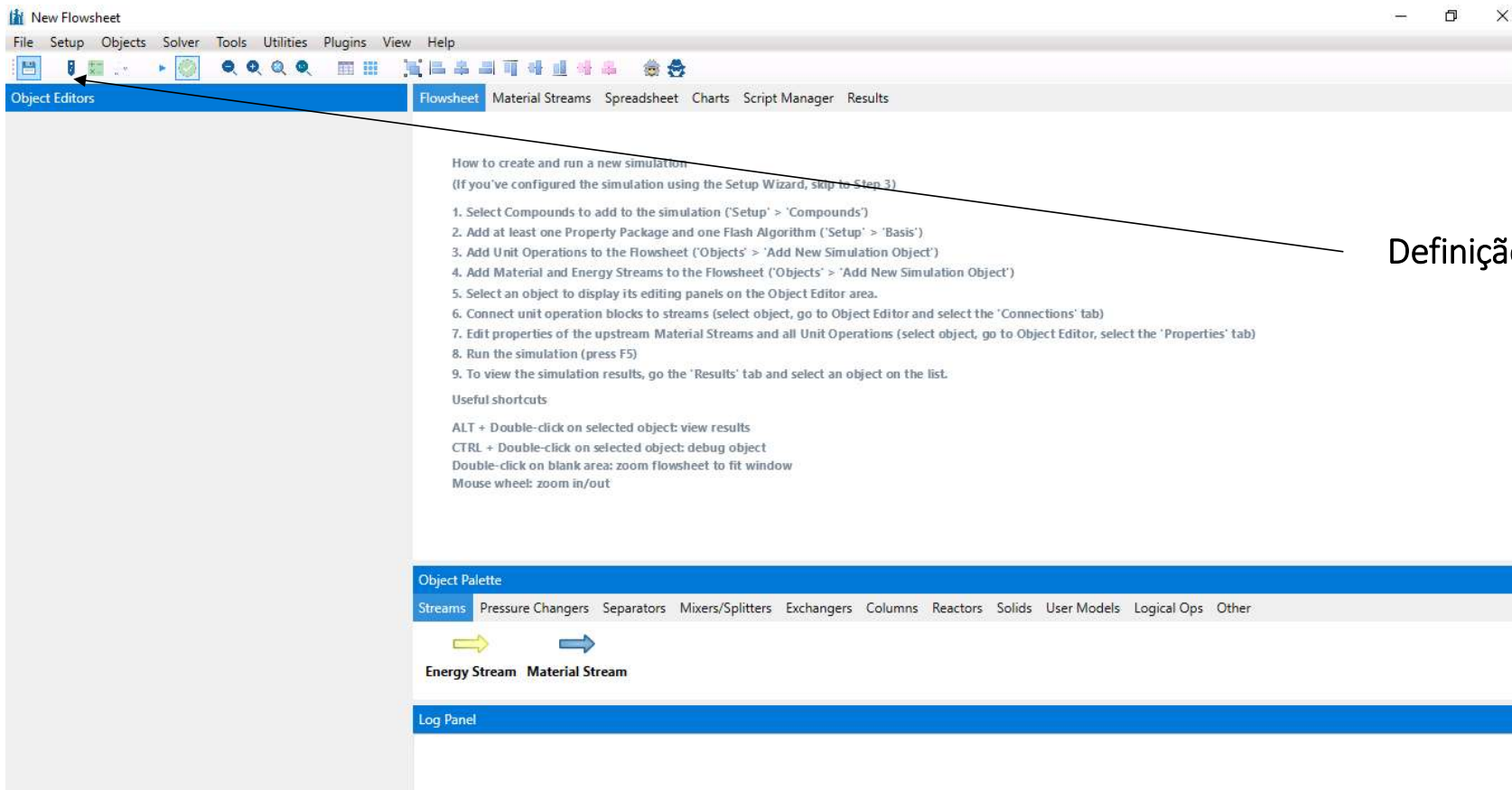
Na aba de Flowsheet é apresentada uma sequência de configuração padrão, semelhante a que já apresentada em slide anterior.

## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM



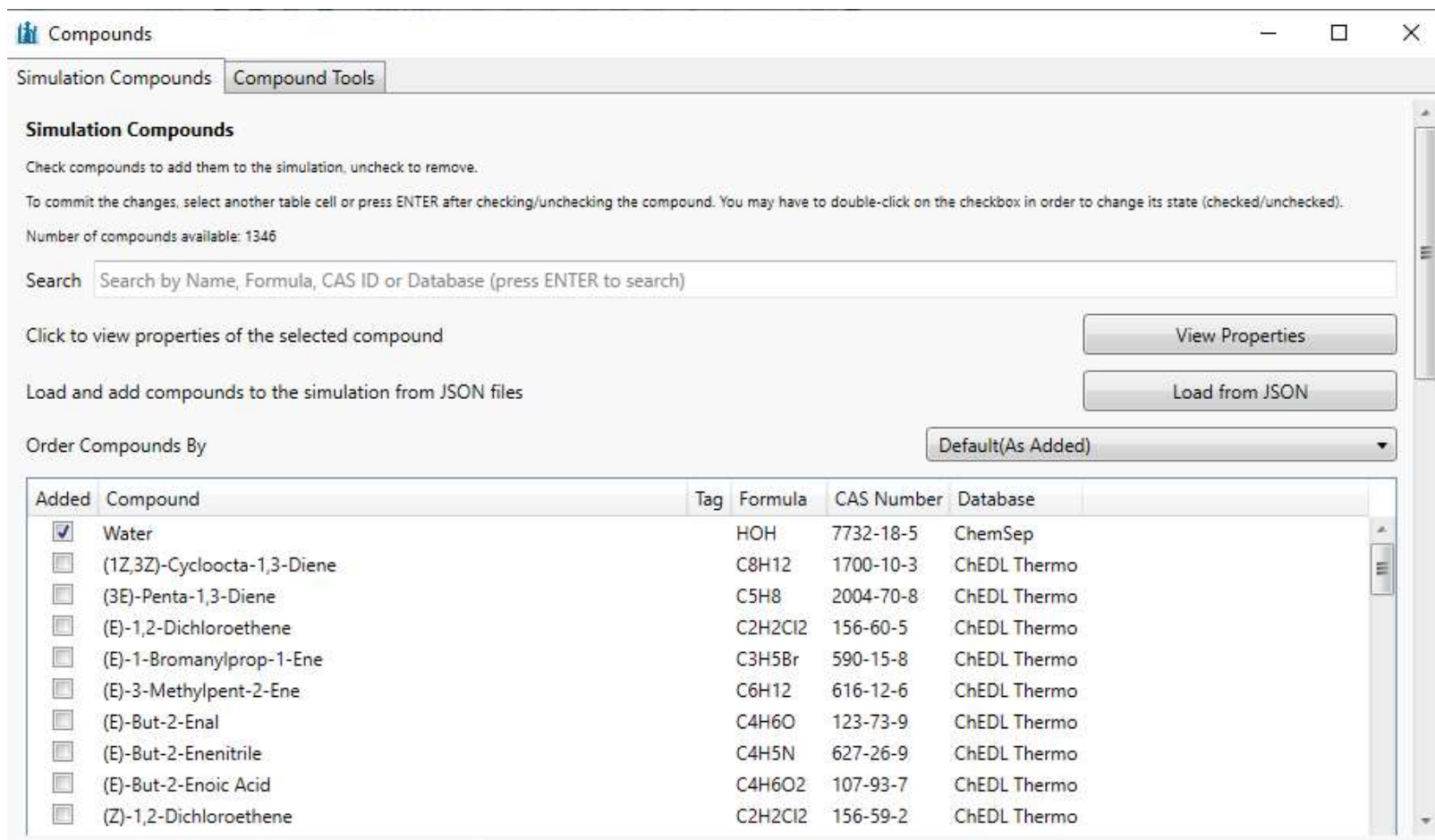
Tradicional botão de “Salvar”

## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM



Definição de componentes

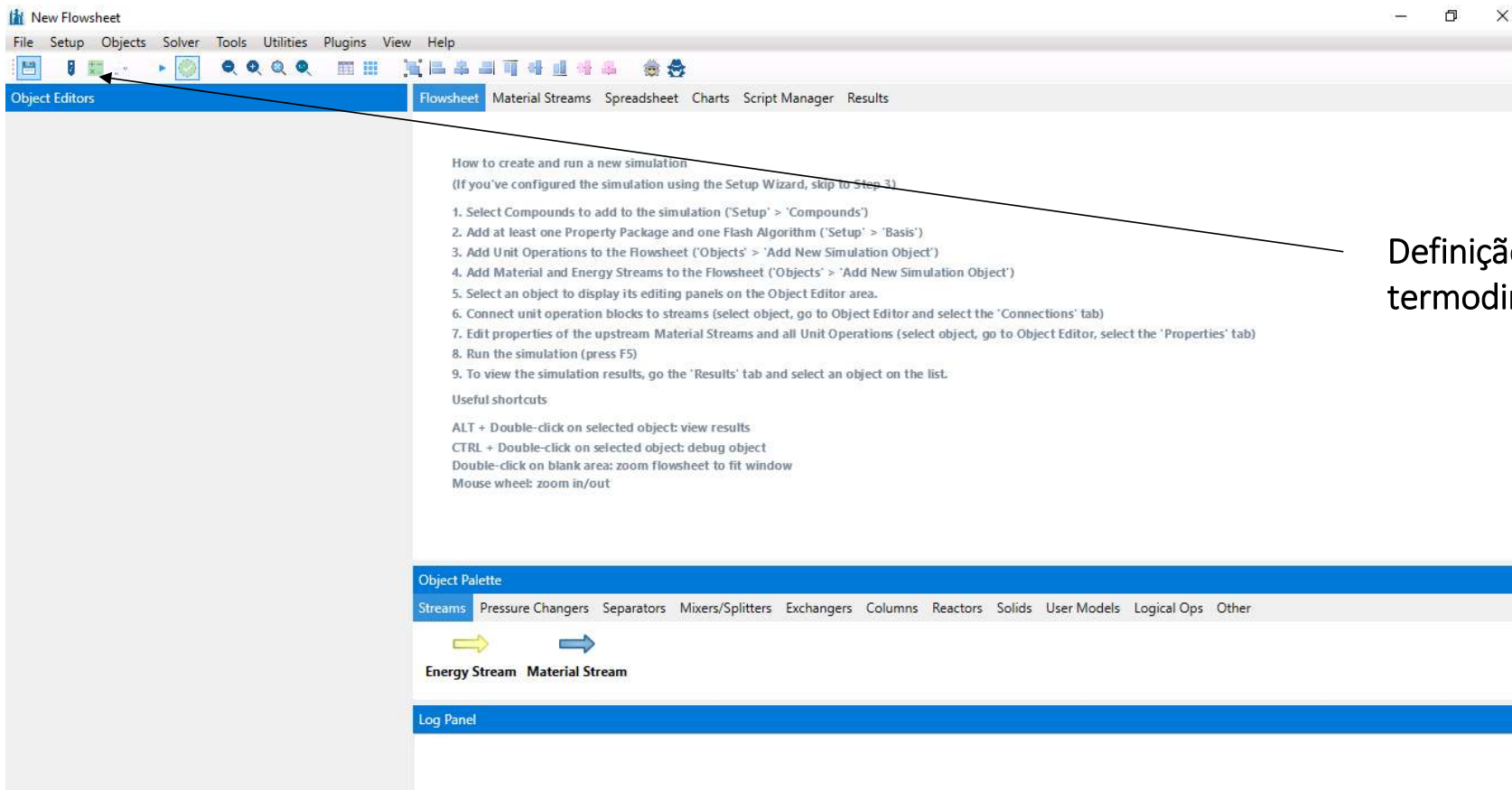
## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM



The screenshot shows the 'Compounds' window in DWSIM. The window has two tabs: 'Simulation Compounds' and 'Compound Tools'. The 'Simulation Compounds' tab is active. Below the tabs, there is a section titled 'Simulation Compounds' with instructions: 'Check compounds to add them to the simulation, uncheck to remove.' and 'To commit the changes, select another table cell or press ENTER after checking/unchecking the compound. You may have to double-click on the checkbox in order to change its state (checked/unchecked).' Below this, it says 'Number of compounds available: 1346'. There is a search bar with the placeholder text 'Search by Name, Formula, CAS ID or Database (press ENTER to search)'. Below the search bar, there are two buttons: 'View Properties' and 'Load from JSON'. Below the buttons, there is a dropdown menu labeled 'Order Compounds By' with the value 'Default(As Added)'. Below the dropdown menu is a table with the following columns: 'Added', 'Compound', 'Tag', 'Formula', 'CAS Number', and 'Database'. The table contains 11 rows of data.

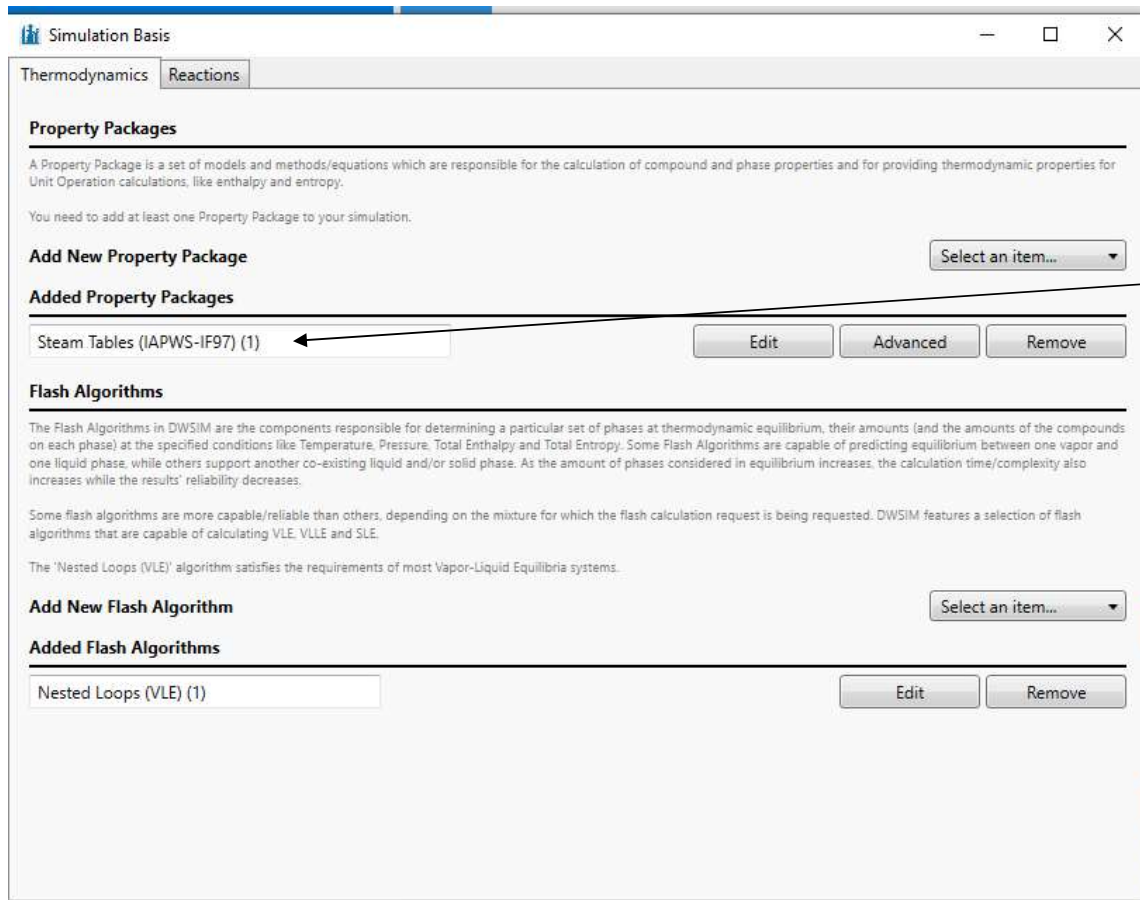
Added	Compound	Tag	Formula	CAS Number	Database
<input checked="" type="checkbox"/>	Water		HOH	7732-18-5	ChemSep
<input type="checkbox"/>	(1Z,3Z)-Cycloocta-1,3-Diene		C8H12	1700-10-3	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(3E)-Penta-1,3-Diene		C5H8	2004-70-8	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-1,2-Dichloroethene		C2H2Cl2	156-60-5	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-1-Bromanylprop-1-Ene		C3H5Br	590-15-8	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-3-Methylpent-2-Ene		C6H12	616-12-6	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-But-2-Enal		C4H6O	123-73-9	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-But-2-Enenitrile		C4H5N	627-26-9	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-But-2-Enoic Acid		C4H6O2	107-93-7	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(Z)-1,2-Dichloroethene		C2H2Cl2	156-59-2	ChEDL Thermo

## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM



Definição do modelo termodinâmico.

## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM



Como já informamos que será apenas uma simulação com água e vapor, já foi preenchido com o IAPWS-IF97.

The International Association for the Properties of Water and Steam. Mais detalhes: <http://www.iapws.org>



## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM

Interaction Parameters | General Settings

**Liquid Phase Density**

Calculation Method: Rackett\_and\_ExpData

Correct Experimental Data for Pressure

Use Peneloux Volume Translation Coefficient (PR/SRK EOS only)

**Liquid Phase Viscosity**

Calculation Method: ExpData

Mixing Rule: MoleAverage

Correct Experimental Data for Pressure

**Fugacity Calculation**

Vapor Phase Fugacity: Ideal

Solid Phase Fugacity: FromLiquidFugacity

Solid Phase: Use Ideal Liquid Phase Fugacities

Liquid Phase: Use Poynting Correction Factor

**Enthalpy, Entropy, Cp and Cv**

Calculation Method: LeeKesler

**Other**

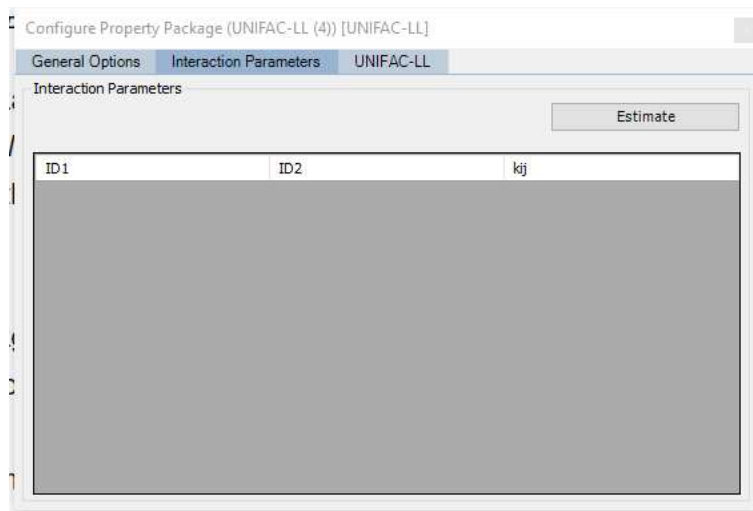
Ignore Missing UNIQUAC/NRTL Interaction Parameters

Ignore Maximum Salinity Limit (Seawater Model only)

Ignore Vapor Fraction Bounds (Sour Water Model only)

Alguns pacotes termodinâmicos possuem configurações extras para possibilitar um maior controle pelo usuário para tornar os cálculos mais precisos ou validar com valores reais.

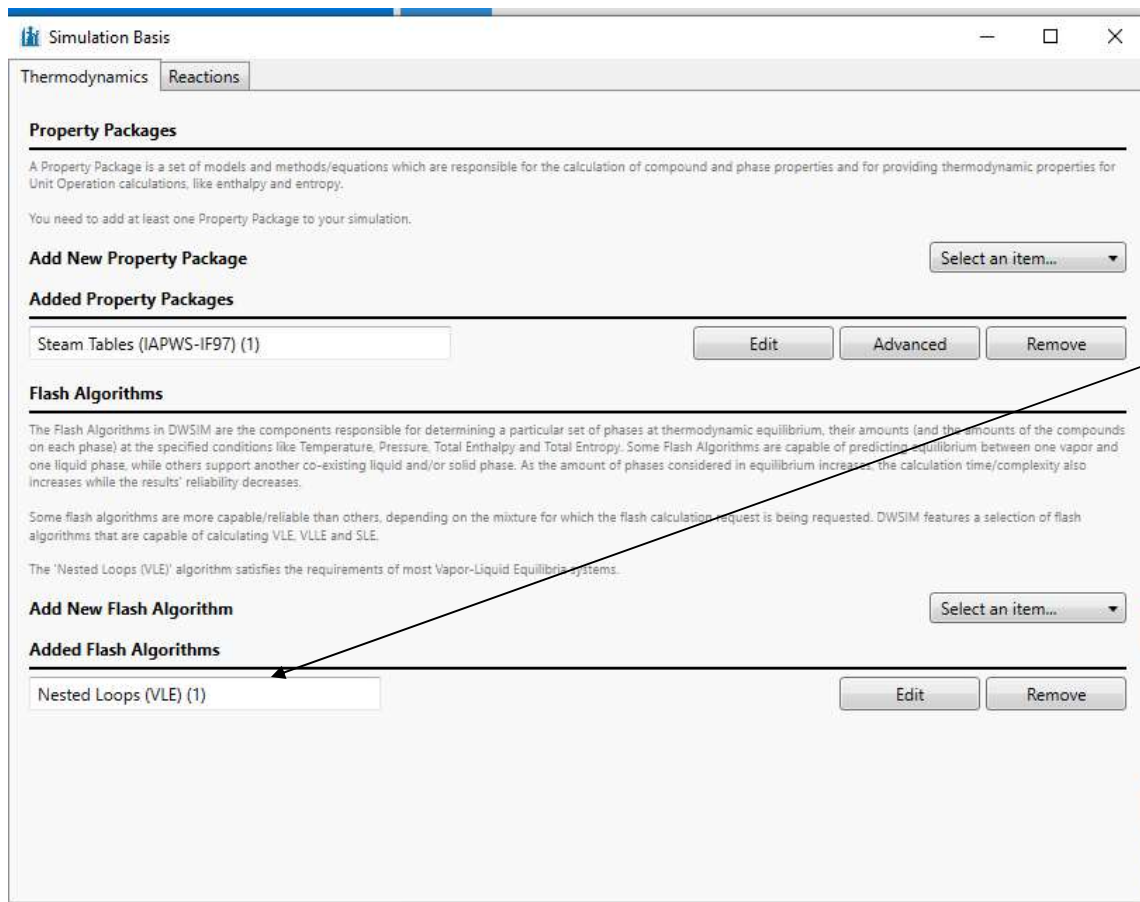
## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM



Alguns pacotes termodinâmicos possuem configurações extras para possibilitar um maior controle pelo usuário para tornar os cálculos mais precisos ou validar com valores reais.



## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM



Também já foi definido o algoritmo de cálculo de Flash.

Deixaremos o default Nested Loops, maiores detalhes podem ser obtidos no Smith and Van Ness:

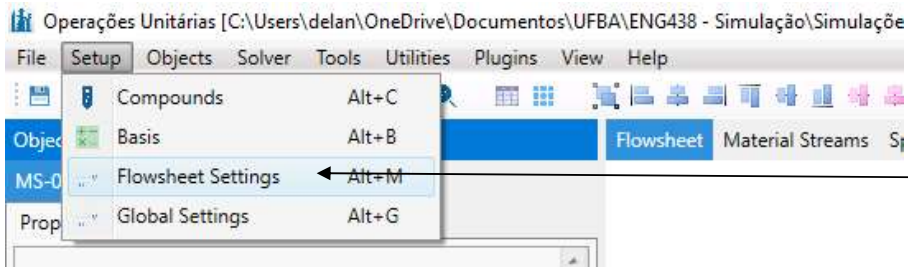
SMITH, J. M.; VAN NESS, H.; ABBOTT, M. Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics. 7<sup>th</sup> ed. Mcgraw-Hill, 2005.

As orientações em relação ao uso destes algoritmos está apresentada no slide a seguir.

## Notas sobre os algoritmos de flash

- Os algoritmos de flash são responsáveis por determinar as condições de equilíbrio termodinâmico de misturas a determinadas pressões, temperaturas e composição.
  - Alguns algoritmos tem maior precisão para equilíbrio líquido-vapor em duas fases, outros para equilíbrio líquido-sólido. Enquanto a quantidade de fases aumenta, o tempo e a capacidade de processamento do cálculo aumentam e a confiabilidade dos resultados tendem a diminuir. Por isso existem algoritmos para diferentes situações, como descrito a seguir.
1. Nested Loops (VLE – Vapor-Liquid Equilibrium): recomendado para a grande maioria dos equilíbrios líquido vapor.
  2. Nested Loops (VLLE – Vapor-Liquid-Liquid Equilibrium): recomendado quando a fase líquida pode ser imiscível, formando duas fases líquidas distintas em equilíbrio com vapor.
  3. Inside-out (VLE/VLLE): recomendado para simulações de Petróleo com muitos pseudocomponentes. A opção de 3 fases pode ser utilizada quando se esperara a formação de água livre.
  4. Gibbs Minimization (VLE/VLLE): recomendado para sistemas químicos mais complexos e pouco conhecidos.
  5. Nested Loops for Eutectic Solid Systems (SLE-E): recomendado para sistemas Eutéticos (onde há equilíbrio entre duas fases sólidas, como ligas metálicas ou soldas metálicas, por exemplo).
  6. Nested Loops for Solid Solutions Systems (SLE-SS): recomendado para sistemas de solução sólida. A diferenças do sistema eutético está na estabilidade e homogeneidade da estrutura metálica.
  7. Nested Loops (3-phase immiscible VLLE): recomendado para sistemas com uma fase imiscível em qualquer condição, como por exemplo água e óleo. O primeiro componente selecionado na lista de componentes chave será o imiscível.
- O DWSIM permite que sejam utilizados múltiplos algoritmos de flash para uma mesma simulação.

## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM

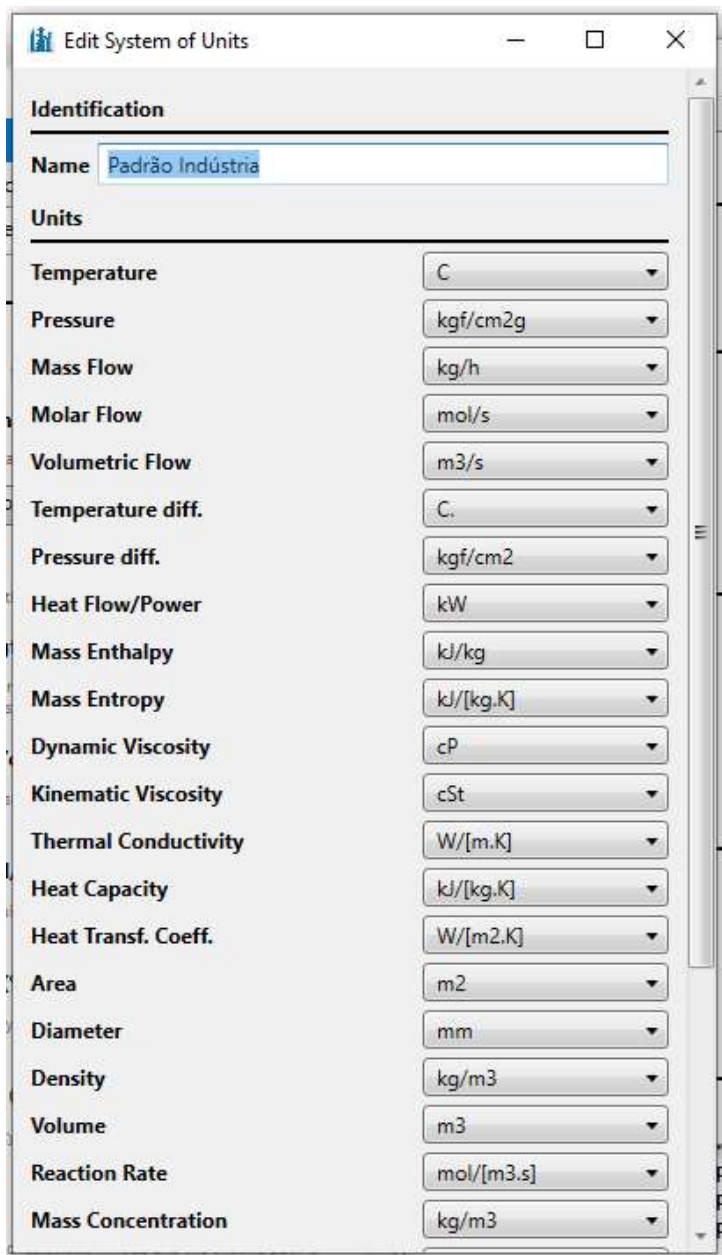


Vamos definir um padrão de unidades que comumente são utilizadas na indústria.

Clicar em setup>Flowsheet Settings.



Criar um novo set de unidades.

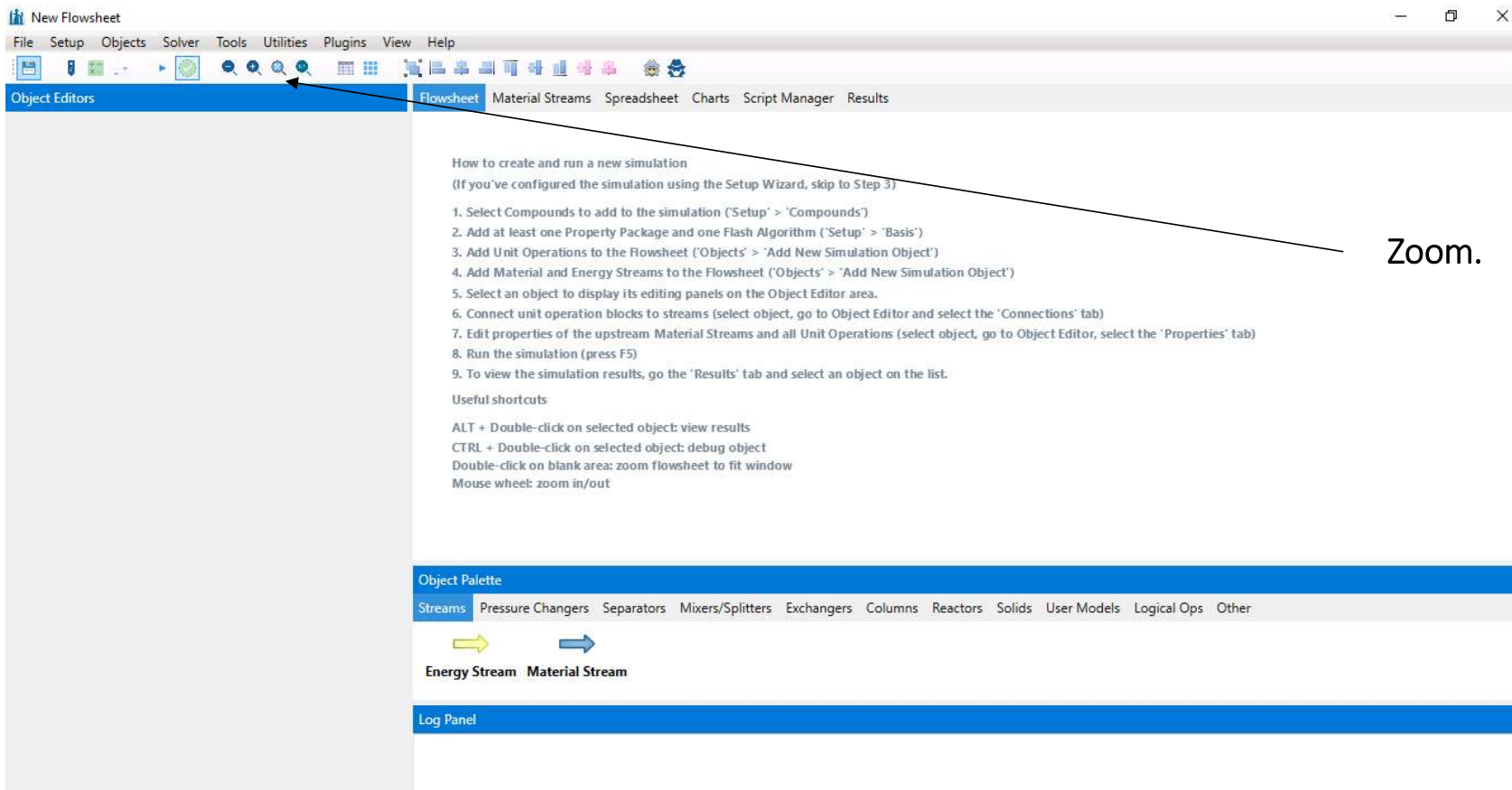


O nome deverá ser: “Padrão Indústria” e as seguintes unidades devem ser alteradas:

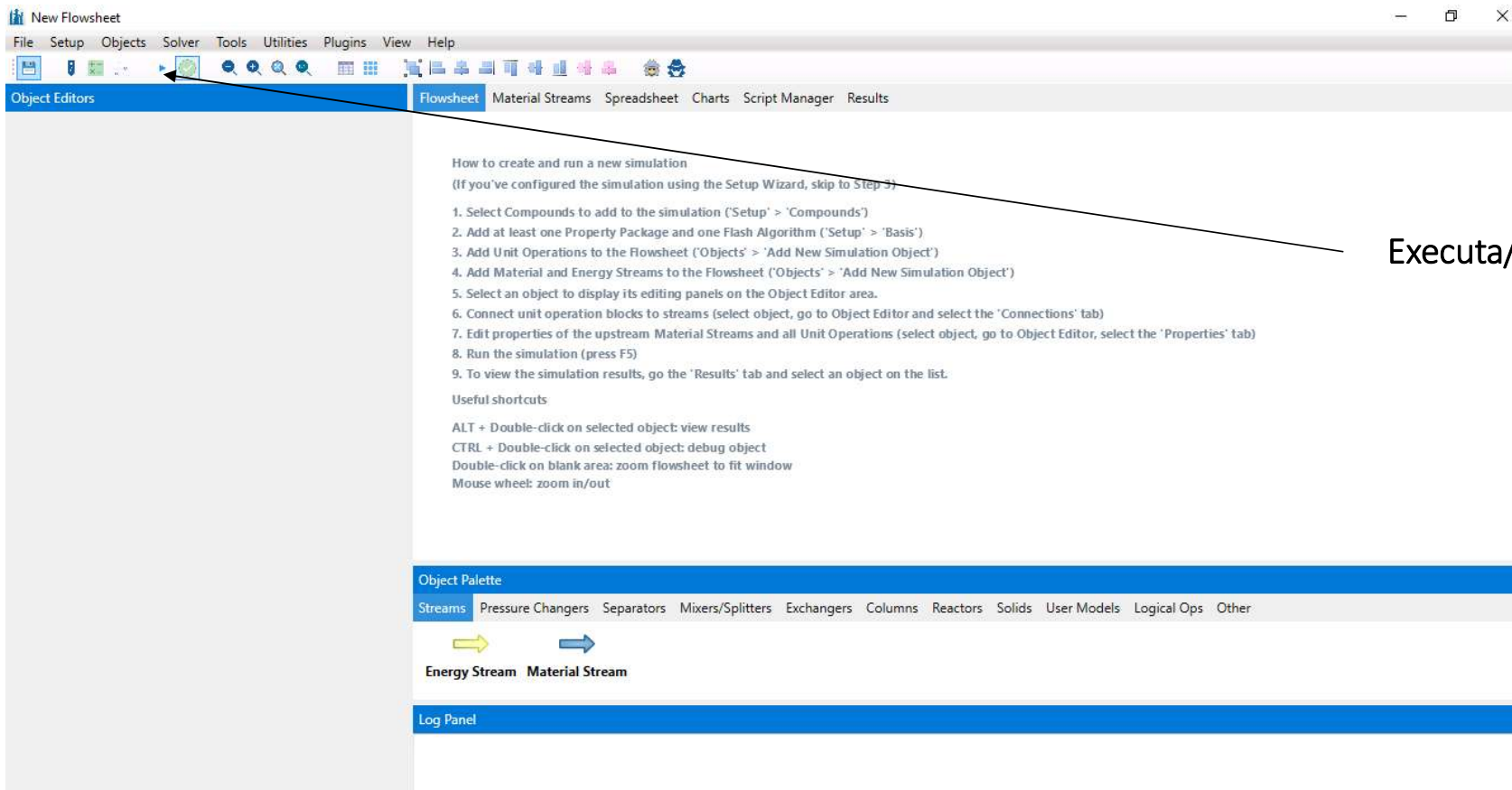
- Temperatura: C;
- Pressão: kgf/cm<sup>2</sup>g;
- Vazão: kg/h;
- $\Delta T$ : C;
- $\Delta P$ : kgf/cm<sup>2</sup>;
- Heat/Power: kW;
- Viscosidade dinâmica: cP;
- Viscosidade cinemática: cSt;
- Diâmetro: in.

Pronto basta fechar as janelas e voltar para o ambiente de simulação.

## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM



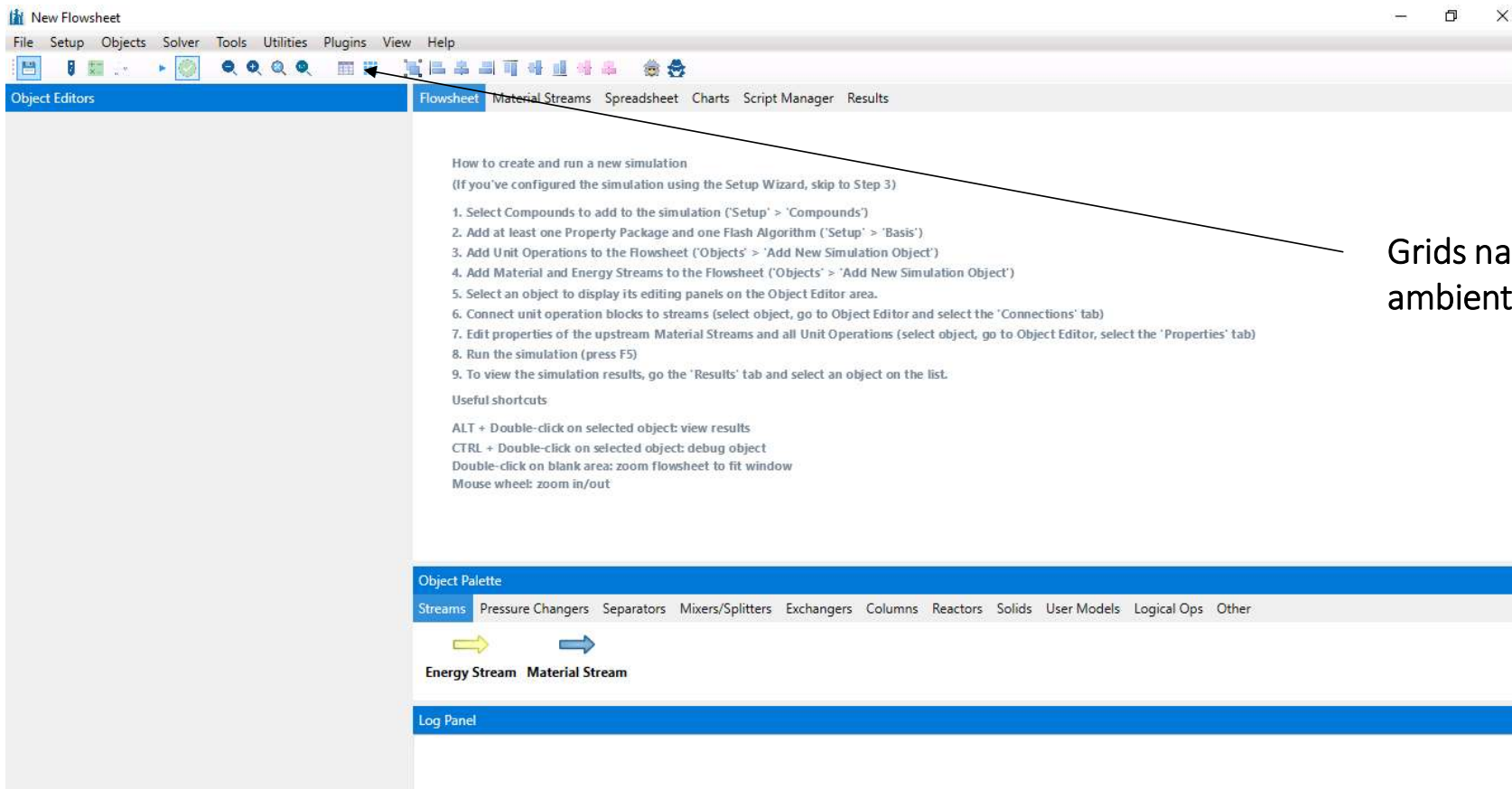
## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM



Executa/"Roda" a simulação.

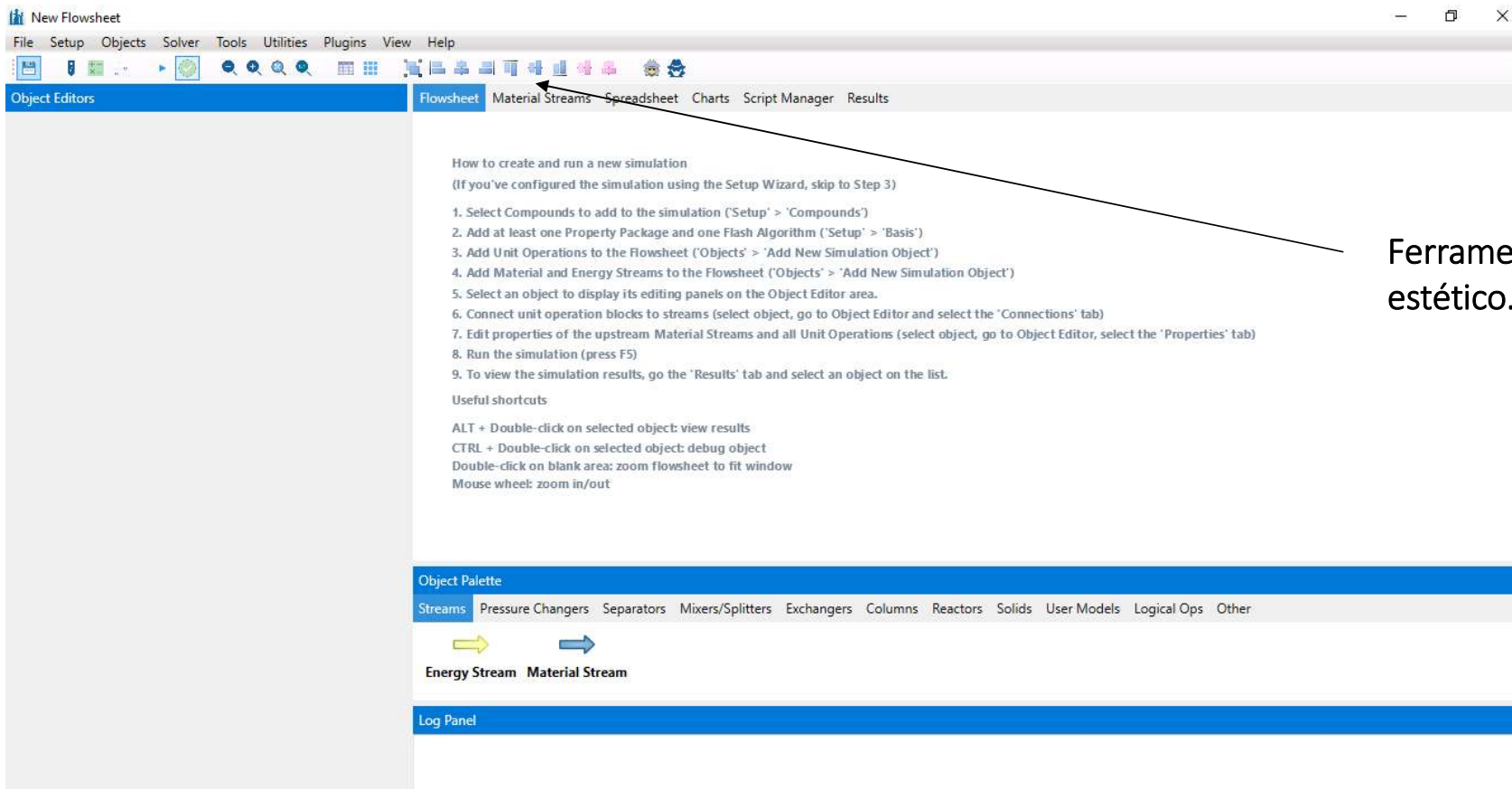


## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM



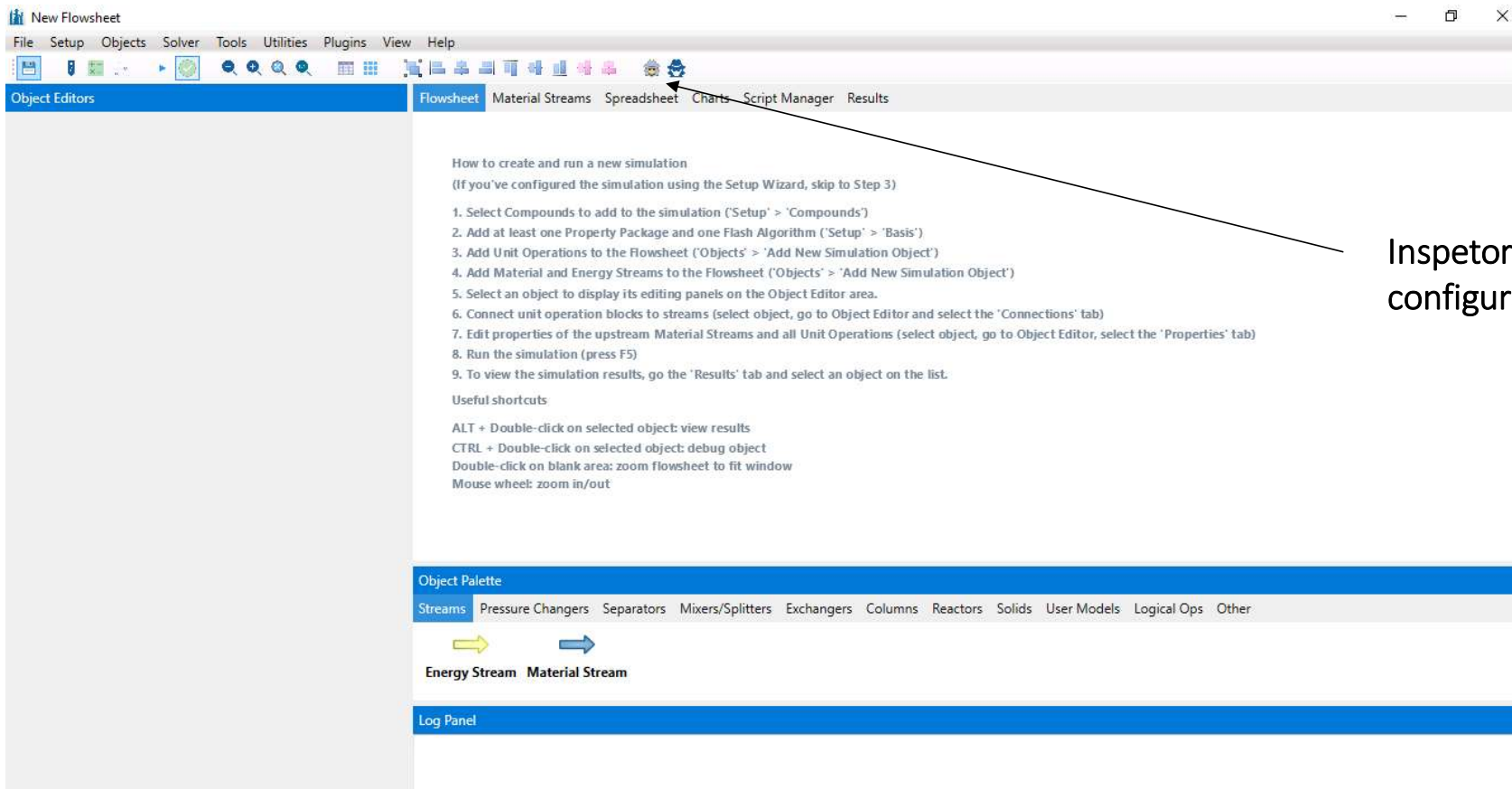
Grids na parte de trás do ambiente de simulação.

## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM

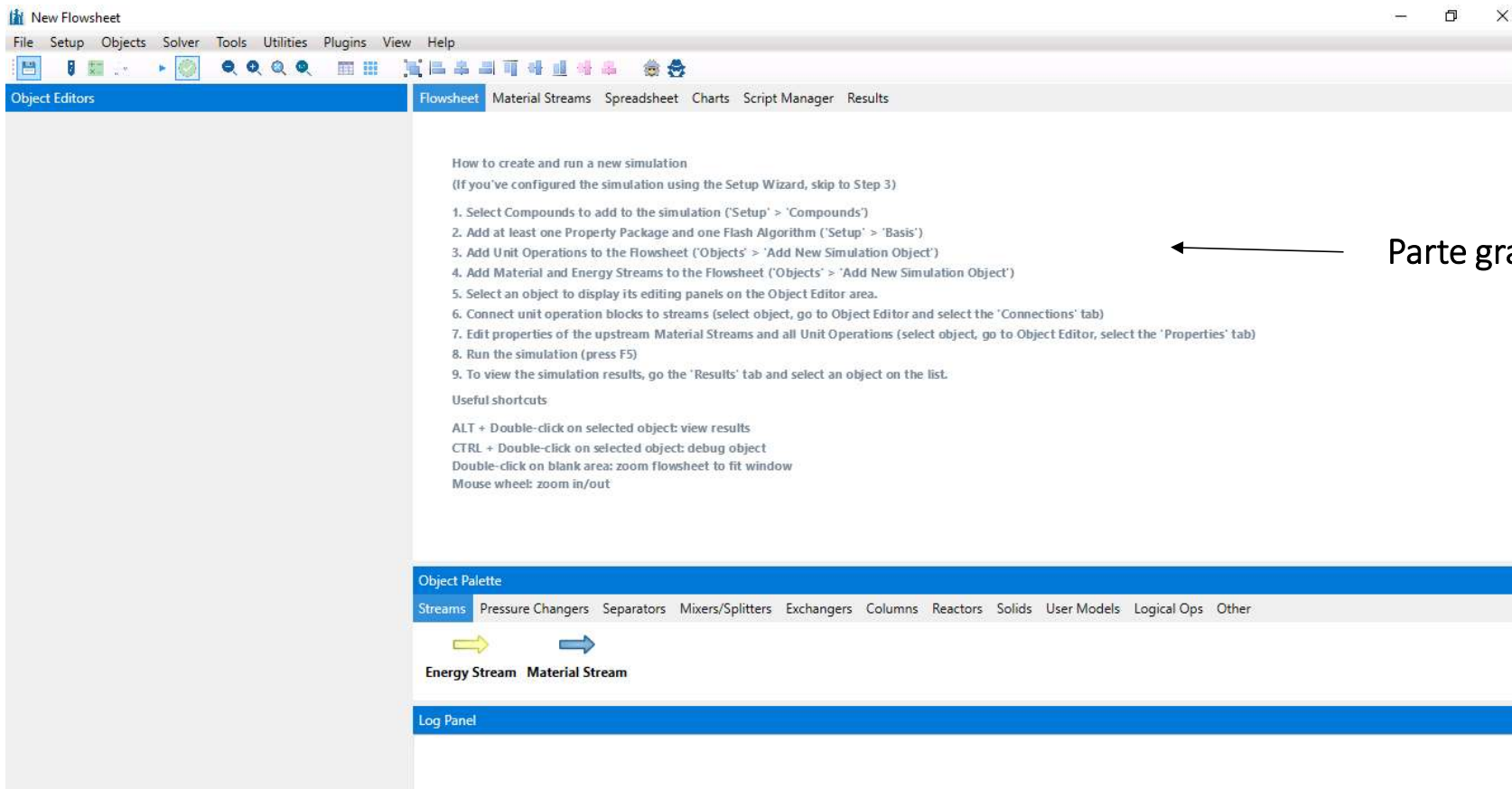


Ferramentas de ajuste estético.

## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM

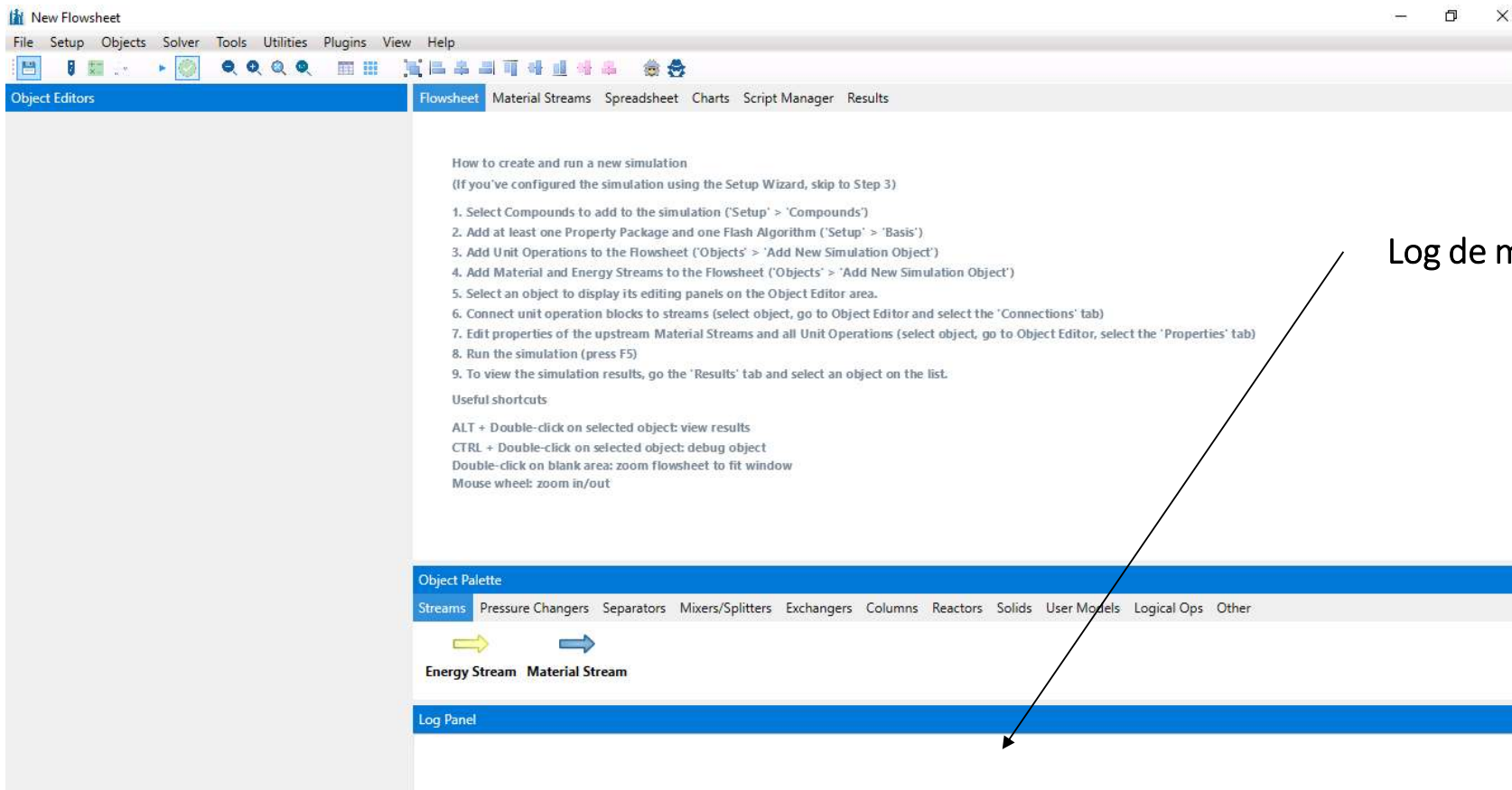


## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM



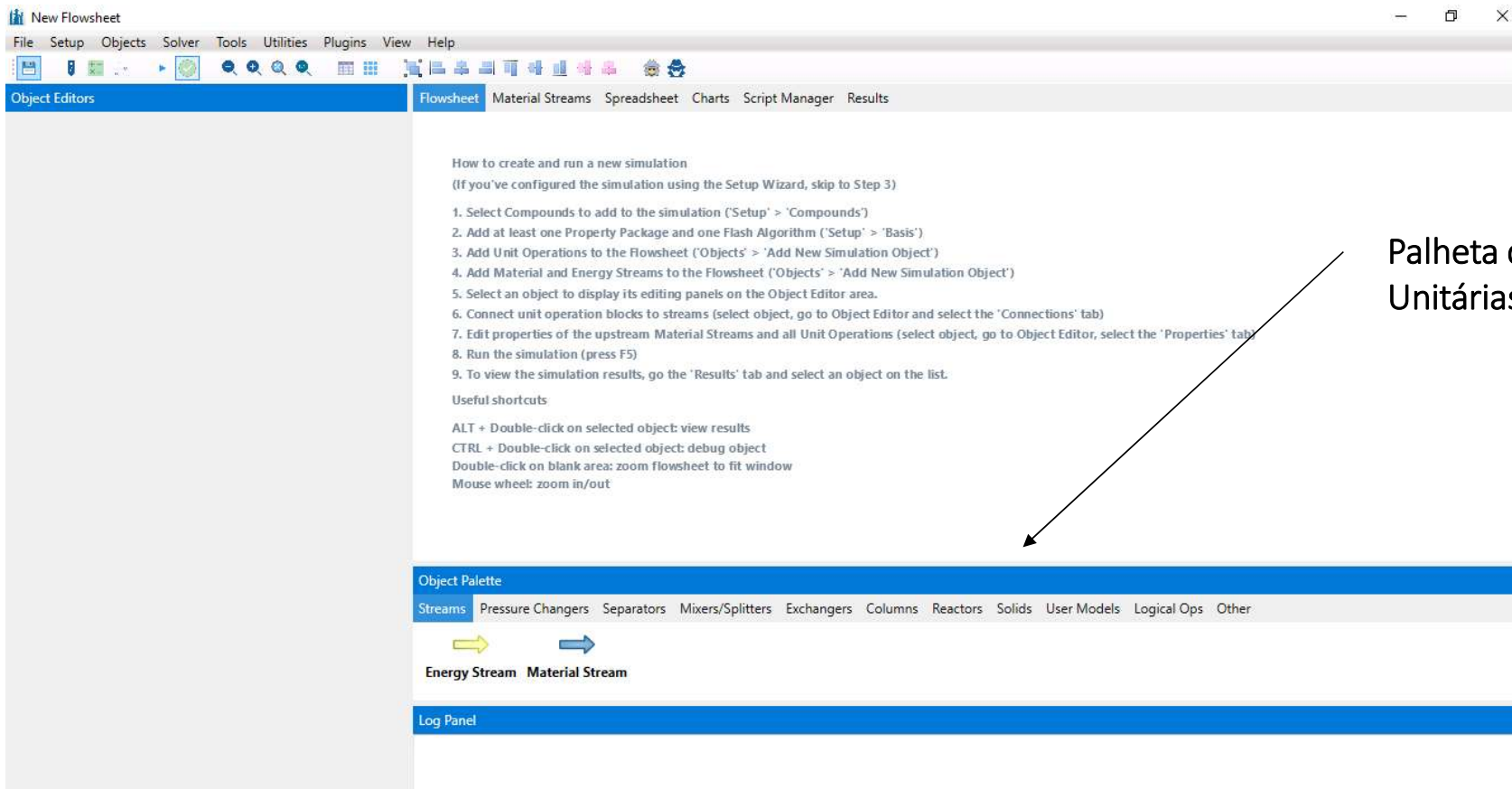
Parte gráfica principal.

## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM



Log de mensagens.

## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM



Palheta de Operações Unitárias.

## Simulação de processos - Iniciando o uso do DWSIM

The screenshot displays the DWSIM software interface. The main window shows a process flow diagram on a grid. The diagram includes several components: an inlet labeled 'Entrada', a pump 'PUMP-002', a compressor 'C-011', a separator 'SEP-006', a valve 'VALVE-001', a reactor 'R-001', a tank 'TANK-008', and a splitter 'SPLT-010'. A red line connects the inlet to the pump. The 'Object Editors' panel on the left is active, showing the 'Object Connections Editor' for the selected object 'X-013'. The 'Inlet' is set to 'Entrada'. The 'Object Palette' at the bottom lists various components: Centrifugal Pump, Compressor, Expander (Turbine), Orifice Plate, Piping Segment, and Valve. The 'Log Panel' at the bottom right shows a log of events, including backup files and connection status.

ENG438 Primeiros passos [C:\Users\delan\OneDrive\Documents\UFBA\ENG438 - Simulação\Simulações\Primeiros passos.dwxmz]

File Setup Objects Solver Tools Utilities Plugins View Help

Object Editors

Flowsheet Material Streams Spreadsheet Charts Script Manager Results

Connections Properties Results Appearance

**Object Connections Editor**

Setup inlet and outlet port connections for the selected object. Select a blank item from the list to disconnect the port from the currently connected object.

Inlet: Entrada

Outlet:

Energy Stream:

**Object Palette**

Streams Pressure Changers Separators Mixers/Splitters Exchangers Columns Reactors Solids User Models Logical Ops Other

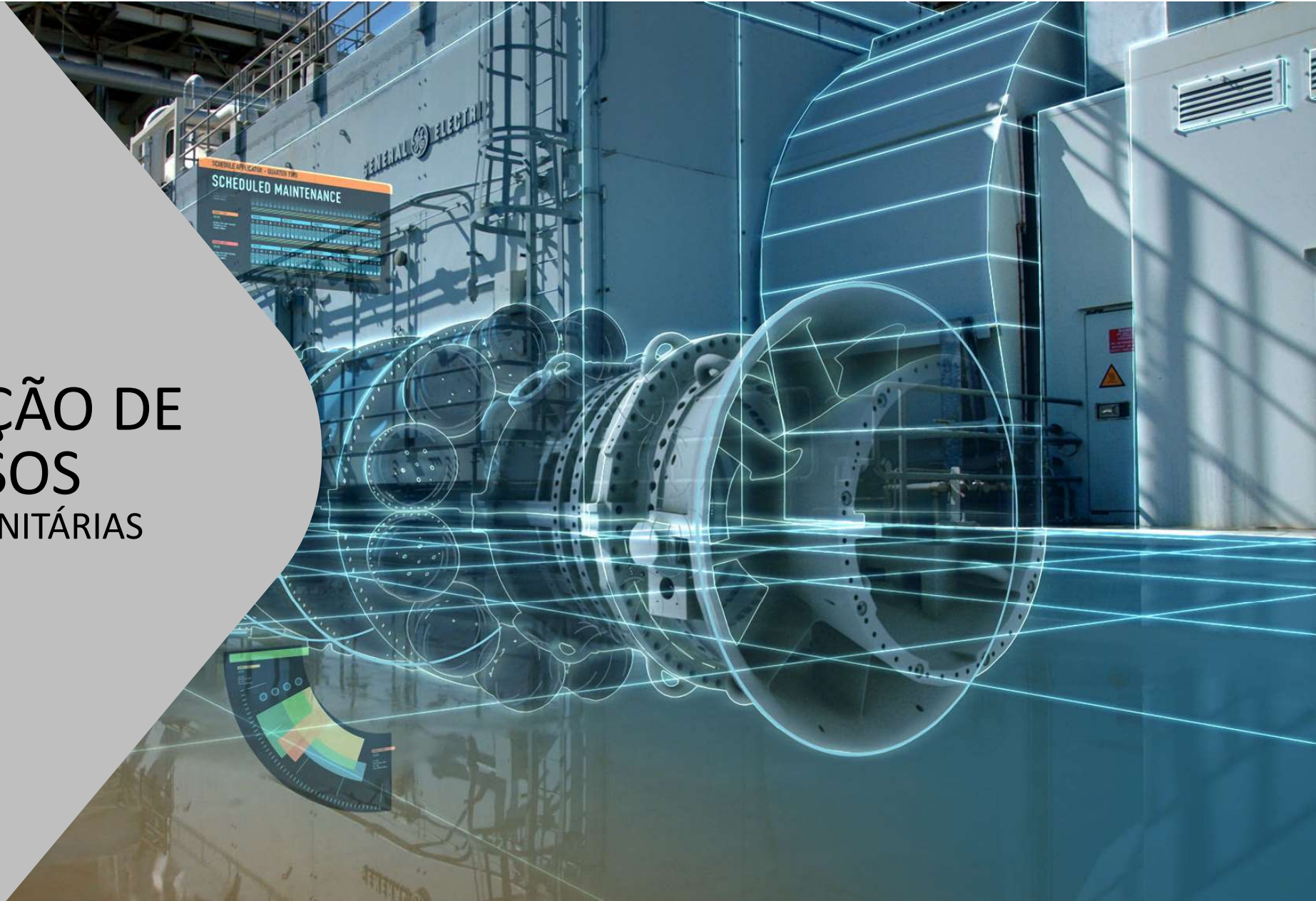
Centrifugal Pump Compressor Expander (Turbine) Orifice Plate Piping Segment Valve

**Log Panel**

[06/04/2020 15:30:47] Backup file successfully saved to 'C:\Users\delan\Documents\DWSIM Application Data\Backup\Primeiros passos.dwxmz'.  
[06/04/2020 15:30:47] Backup file successfully saved to 'C:\Users\delan\Documents\DWSIM Application Data\Backup\Primeiros passos.dwxmz'.  
[06/04/2020 15:33:47] Backup file successfully saved to 'C:\Users\delan\Documents\DWSIM Application Data\Backup\Primeiros passos.dwxmz'.  
[06/04/2020 15:35:35] Connected Entrada to X-013.

Basta clicar, arrastar e começar a brincadeira...

# SIMULAÇÃO DE PROCESSOS OPERAÇÕES UNITÁRIAS



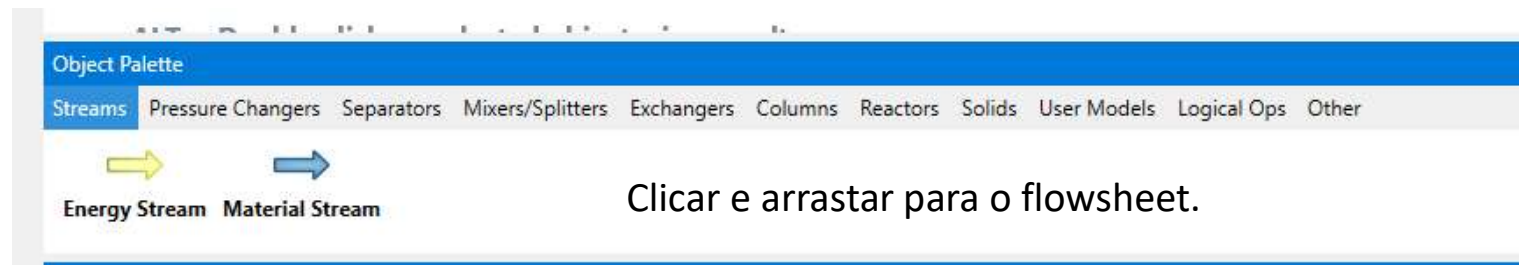


## Simulação de processos – Correntes de processo



O que é e para que sevem?

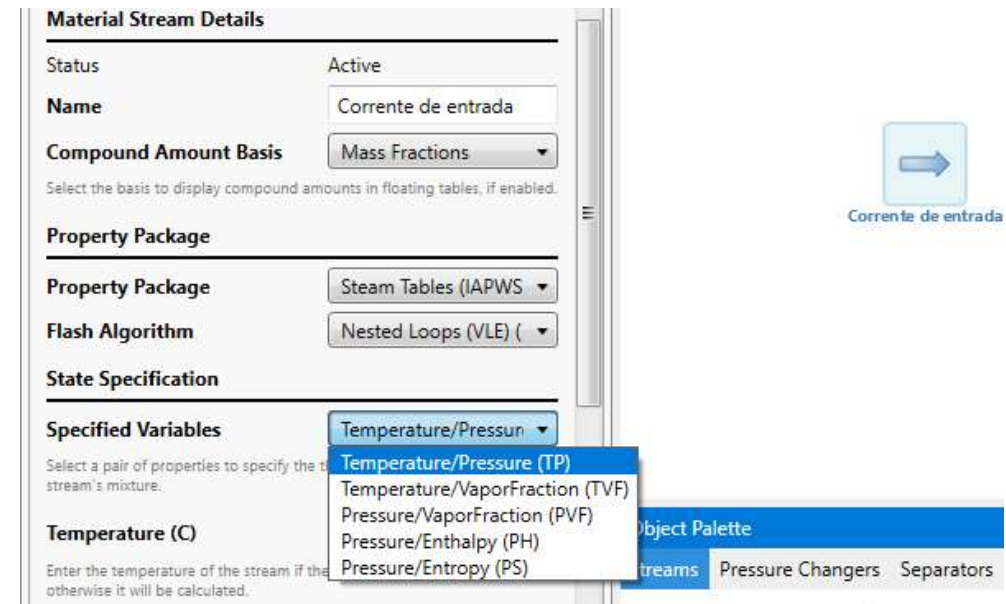
## Simulação de processos – Correntes de processo



Fornecimento dos dados das correntes de entrada:

- Temperatura
- Pressão
- Vazão
- Composição

$$G = V - (N + E)$$

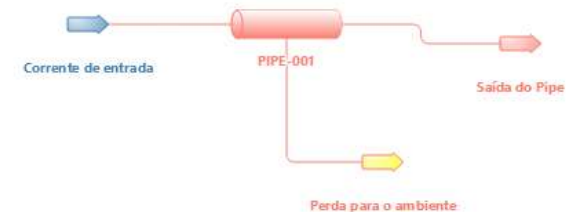
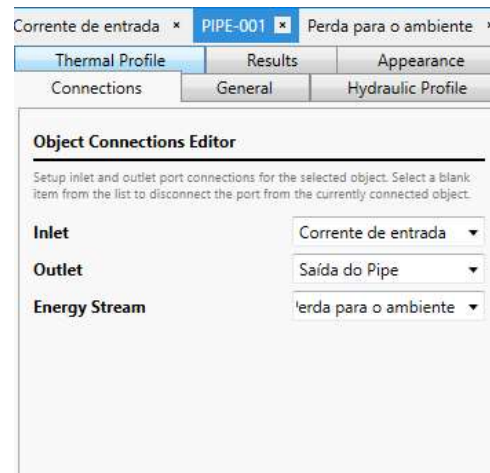


## Simulação de processos – tubulações com perda de carga

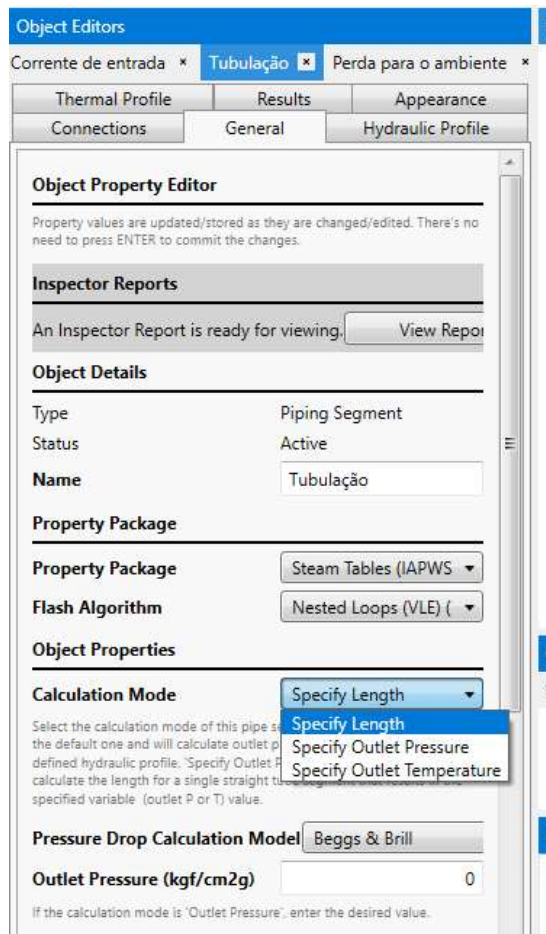


Clicar e arrastar para o flowsheet.

- Fornecimento dos dados:
- Incluir correntes de entrada e saída
- Incluir uma corrente de energia

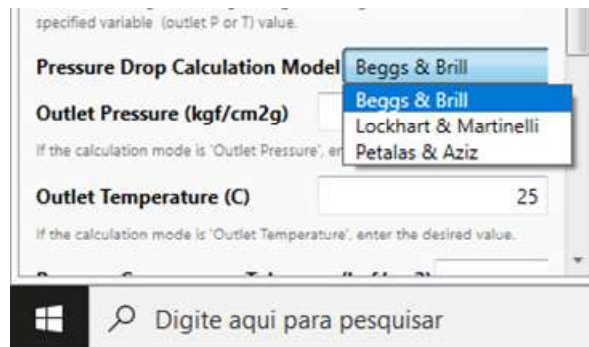


## Simulação de processos – tubulações com perda de carga



### Definição do método de cálculo do pipe:

- Definir o comprimento e acessórios e calcular a condição de saída.
- Definir a pressão de saída e calcular o comprimento equivalente.
- Definir a temperatura de saída e calcular a perda de energia.



### Definição do método de cálculo do $\Delta P$ :

- Beggs & Brill
- Lockhart & Martinelli
- Petalas & Aziz

Beggs, H. D. & Brill, J. P. (1973) A study of two-phase flow in inclined pipes, *J. Petroleum Technol.* **25**, 607–617.

Lockhart, R. & Martinelli, R. (1949) Proposed correlation of data for isothermal two-phase, two-component flow in pipes, *Chem. Eng. Prog.* **45**(1), 39–48.

Petalas, N. & Aziz, K. (2000) A mechanistic model for multiphase flow in pipes, *J. Canadian Petroleum Technol.* **39**(6).

Add Segment

Remove All Segments

Segment 1

Type Straight Tube Section

Material Carbon Steel

Rugosity (m) \* 0

Thermal Conductivity (W/[m.K]) \*

Increments 10

Quantity 1

Length (m) 500

Elevation (m) 1

External Diameter (mm) 168

Internal Diameter (mm) 154

\* Fields required/used only for User-Defined materials

Remove Segment

### Adicionar seguimentos:

- Tipo:

- Tubo
- Curva
- Válvulas
- Check
- Tê
- Etc....

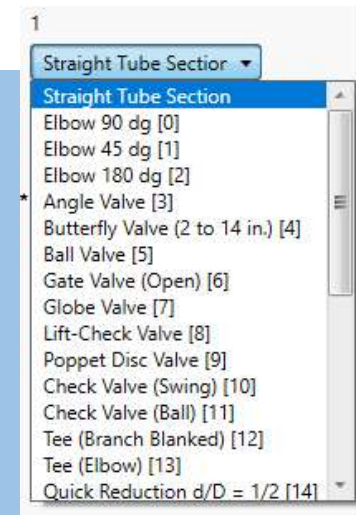
- Material.

- Incrementos (como deve ser dividido o cálculo para aumentar a precisão. Porém quanto maior, mais capacidade de processamento é necessária. Depende da aplicação.

- Comprimento.

- Elevação (se há ganho de altura manométrica).

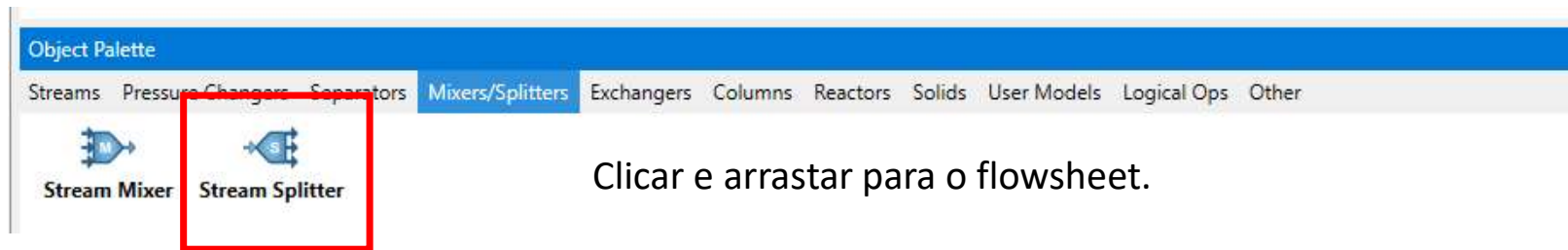
- Diâmetro externo e interno (sugestão de utilização do Process Utilities (<https://www.processutilities.com>)).



### Example

1	Pipe size	1" Sch 40
	Outer diameter	=PipeSize(SD\$4,C5,E5) in
	Inner diameter	1.049 in
	Area	5.576 cm2
	Wall thickness	3.378 mm

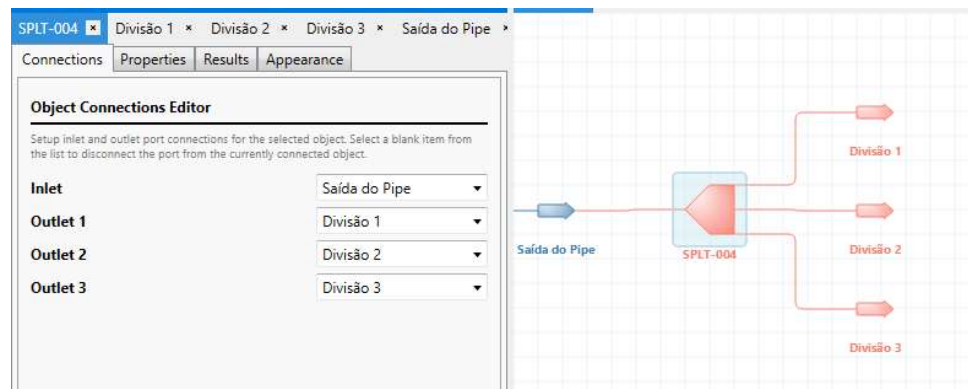
## Simulação de processos – Divisores e coletores de fluxo



Fornecimento dos dados:

- Incluir correntes de entrada e saída na aba connections
- Realizar balanço de massa e energia na aba properties

$$G = V - (N + E)$$



**Object Properties**

**Specification** Define how you will specify this splitter block.

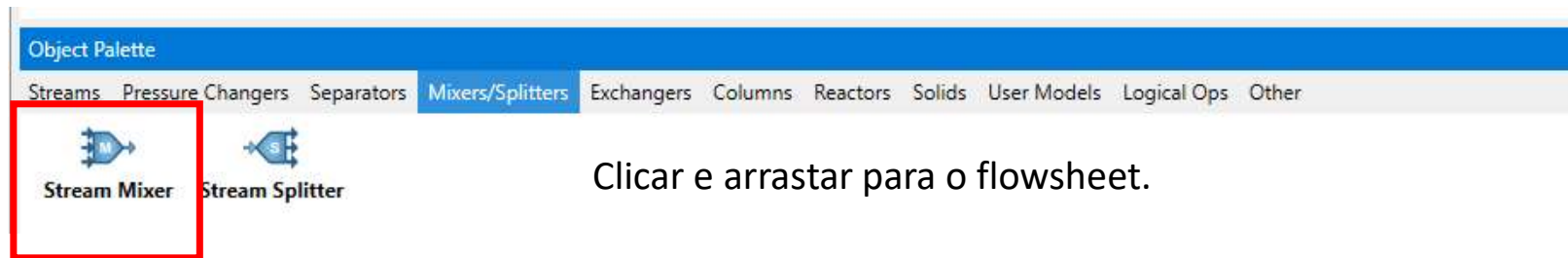
Split Ratios

Split Ratio Stream 1

Split Ratio Stream 2

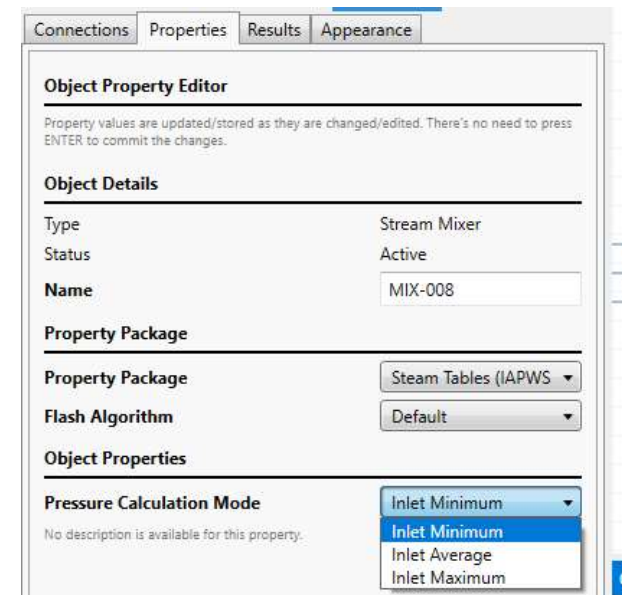
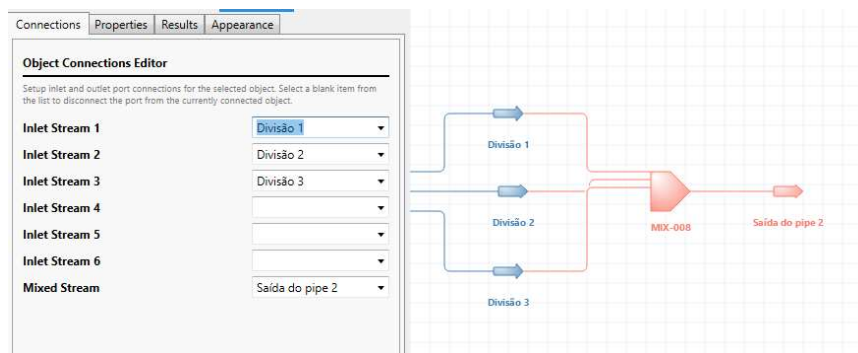
Split Ratio Stream 3

## Simulação de processos – Divisores e coletores de fluxo



Fornecimento dos dados:

- Incluir correntes de entrada e saída na aba connections
- Definir o equilíbrio de pressão, se será a mínima, a média ou a máxima na aba properties.



## Simulação de processos – Vasos de flash



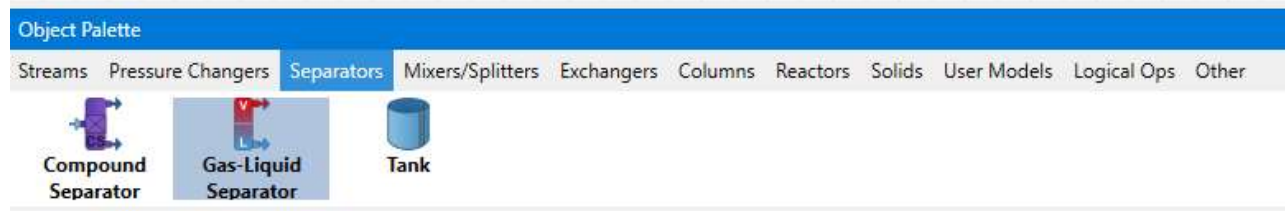
O que é e para que sevem?



## Simulação de processos – Vasos de flash



Clicar e arrastar para o flowsheet.



## Simulação de processos – Vasos de flash

The screenshot displays the 'State Specification' panel for a flash drum simulation. The 'Specified Variables' dropdown menu is open, showing options: Temperature/Pressure (TP), Temperature/VaporFraction (TVF), Pressure/VaporFraction (PVF) (selected), Pressure/Enthalpy (PH), and Pressure/Entropy (PS). The 'Pressure (kgf/cm2g)' field is set to 10, and the 'Vapor Phase Mole Fraction (spec)' field is set to 0,5. The background shows a process flow diagram with an inlet stream labeled 'Entrada do vaso' and a flash drum labeled 'V-010'.

Para a corrente de entrada, precisamos ter duas fases, para separação no vaso.

- Para isso, iremos definir a opção de Pressão e Vapor fraction (PVF);
- Incluir a pressão de 10 kgf/cm<sup>2</sup>g. Sempre apertando “enter”.
- Incluir a fração de vapor de 0,5.
- Defina a vazão total para 10.000 kg/h.

## Simulação de processos – Vasos de flash

Object Editors

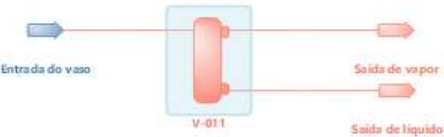
V-011 x Saída de líquido x Saída de vapor x Entrada do v

Connections Properties Results Appearance

**Object Connections Editor**

Setup inlet and outlet port connections for the selected object. Select a blank item from the list to disconnect the port from the currently connected object.

Inlet Stream #0	Entrada do vaso
Inlet Stream #1	
Inlet Stream #2	
Inlet Stream #3	
Inlet Stream #4	
Inlet Stream #5	
Vapor Outlet	Saída de vapor
Light Liquid Outlet	Saída de líquido
Heavy Liquid Outlet	
Energy Stream	



Para definir o vaso, basta incluir as correntes:

- De entrada, que havia sido criada.
- Corrente de saída de líquido
- Corrente de saída de vapor.
- Para incluir, pode escrever no campo de Vapor outlet e apertar enter ou criar uma stream e escolhê-la no campo de vapor outlet.
- Agora basta rodar a simulação.

## Simulação de processos – Vasos de flash

**Object Editors** | **Flowsheet** | Material Streams | Spreadsheet | Charts | Script Manager | Results

V-011 | Saída de líquido | Saída de vapor | Entrada do vaso

**Connections** | **Properties** | **Results** | **Appearance**

**Properties**

PROPERTY PACKAGE: STEAM-TAN15 (IAPWS-15?)

**Inlet conditions**

Temperature: 183.348 C  
 Pressure: 10 kgf/cm2g  
 Total mass flow: 10000 kg/h  
 Total volumetric flow: 0.251884 m3/s  
 Vapor fraction: 0.5  
 Vapor mass flow: 5000 kg/h  
 Vapor volumetric flow: 0.0015722 m3/s  
 Liquid mass flow: 5000 kg/h  
 Liquid volumetric flow: 0.250312 m3/s  
 Compounds: Water  
 Molar composition: 1

**Sizing parameters**

L/D ratio: 3  
 Liquid residence time: 300 s  
 Surge factor: 1.2

**Sizing results - vertical separator**

Inlet nozzle diameter: 0.126394 mm  
 Outlet gas nozzle diameter: 0.106118 mm  
 Outlet liquid nozzle diameter: 0.0346565 mm  
 Separator diameter: 0.69872 mm  
 Separator height: 2.09616 mm

**Object Palette**

Streams | Pressure Changers | Separators | Mixers/Splitters | Exchangers | Columns | Reactors | Solids | User Models | Logical Ops | O

**Saída de vapor**  
 Compound Amounts - Basis: Molar Fraction

Compounds / Phases	Overall	Vapor	Liquid 1	Liquid 2	Solid
Water	1	1	1	0	0
Fraction		2,22045E-16	0	0	0
Total					

**Saída de vapor**  
 Material Stream

Temperature	183,348 C
Pressure	10 kgf/cm2g
Mass Flow	5000 kg/h
Molar Flow	77,095 mol/s
Volumetric Flow	0,250312 m3/s
Mixture Molar Enthalpy	50083,8 kJ/kmol
Mixture Molar Entropy	118,138 kJ/[kmol.K]

Na aba de resultados do vaso, pode-se observar:

- Os dados de entrada do vaso.
- Os parâmetros de dimensionamento padrão utilizados.
- Os resultado de dimensionamento padrão obtidos.
- O balanço de massa e energia é realizado automaticamente, considerando as condições de líquido/vapor de entrada.
- Na corrente de saída, passando o mouse por cima, pode-se perceber que foi separado metade da corrente de vapor por cima e a outra metade de líquido para baixo, conforme fração de vapor de 0,5 definida.

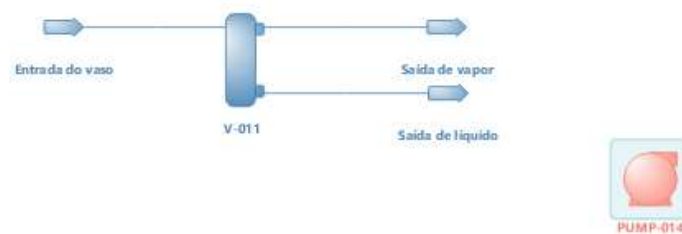
## Simulação de processos - Bombas

### Bombas Industriais



O que é e para que sevem?

## Simulação de processos - Bombas



Clicar e arrastar para o flowsheet.

Object Palette

Streams Pressure Changers Separators Mixers/Splitters Exchangers Columns Reactors Solids User Models Logical Ops Other

Centrifugal Pump Compressor Expander (Turbine) Orifice Plate Piping Segment Valve

## Simulação de processos - Bombas

Object Editors

PUMP-016 x Wbomba x

Connections Properties Results Appearance

**Object Connections Editor**

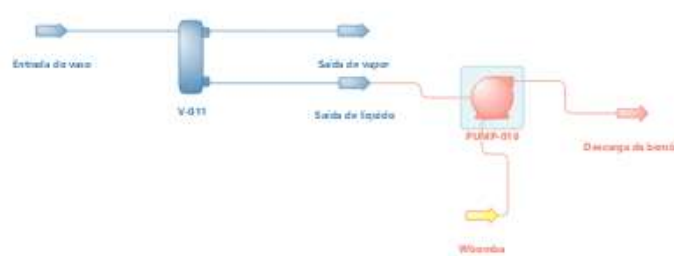
Setup inlet and outlet port connections for the selected object. Select a blank item from the list to disconnect the port from the currently connected object.

**Inlet** Saída de líquido

**Outlet** Descarga da bomba

**Energy Stream** Wbomba

Flowsheet Material Streams Spreadsheet Charts Script Manager Results



Vamos modelar a bomba como a bomba de sucção do líquido do vaso. Para isso:

- Selecionar a linha de entrada da bomba como a linha de saída de líquido do vaso.
- Incluir uma corrente de saída da bomba, basta escrever o nome e apertar “enter”.
- O mesmo para a corrente de energia. Eu chamei de Wbomba, de trabalho da bomba.

## Simulação de processos - Bombas

The screenshot displays the 'Object Editors' window for a pump named 'PUMP-016'. The 'Properties' tab is active, showing the following configuration:

- Status: Active
- Name: PUMP-016
- Property Package: Steam Tables (IAPWS)
- Flash Algorithm: Default
- Calculation Mode: Outlet Pressure (selected from a dropdown menu)
- Pressure Increase (kgf/cm<sup>2</sup>): 10
- Outlet Pressure (kgf/cm<sup>2</sup>): 20 (circled in red)
- Efficiency (%): 75 (circled in red)
- Power (kcal/h): 1768,01

The 'Object Palette' at the bottom shows 'Energy Stream' and 'Material Stream' options. The 'Log Panel' at the bottom right contains the following text:

```
[08/04/2020 10:53:48] Last run calculation time: 0:00:00,178053  
[08/04/2020 10:53:48] The flowsheet is being calculated, please wait...  
[08/04/2020 10:53:48] The flowsheet was calculated successfully.  
[08/04/2020 10:53:48] Last run execution time: 0:00:00,178053
```

The background shows a flowsheet diagram with a vessel 'V-011' and a pump 'PUMP-016'. The pump is connected to a stream labeled 'Wbomba'.

Para configurar a bomba, iremos utilizar:

- O modo de especificar a pressão de descarga.
- Definir a pressão de descarga em 20kgf/cm<sup>2</sup>g.
- Definir a Eficiência de 75%.

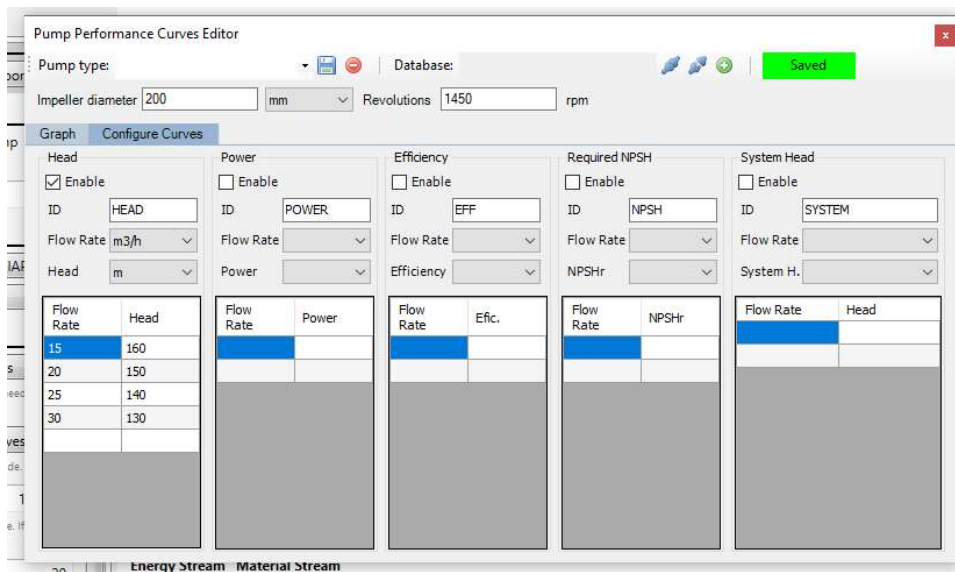
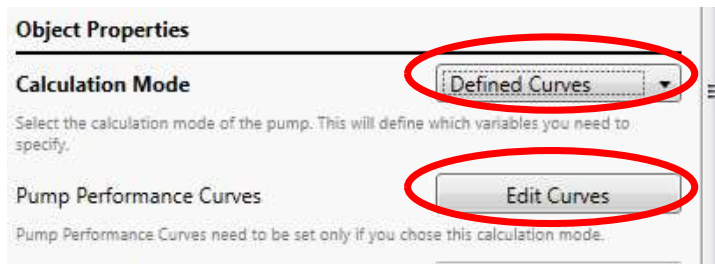
Com isso a bomba é calculada quando rodamos a simulação. Para a definição da corrente de saída o simulador utiliza:

- Vazão da linha de líquido do vaso;
- Pressão especificada;
- Temperatura calculada com base na eficiência definida.

Passando-se o mouse pela corrente de energia, observa-se uma bomba de 3,25 kW.



## Simulação de processos - Bombas



É possível também configurar a bomba utilizando-se uma curva existente.

- Alterar o modo de especificar a pressão de descarga para “Defined curves”.
- No item abaixo, clicar em “Edit Curves”.

Na aba de “Configure curves”:

- Habilitar a curva de HEAD.
- Incluir os dados da curva, conforme figura ao lado.
- Rodar a simulação.

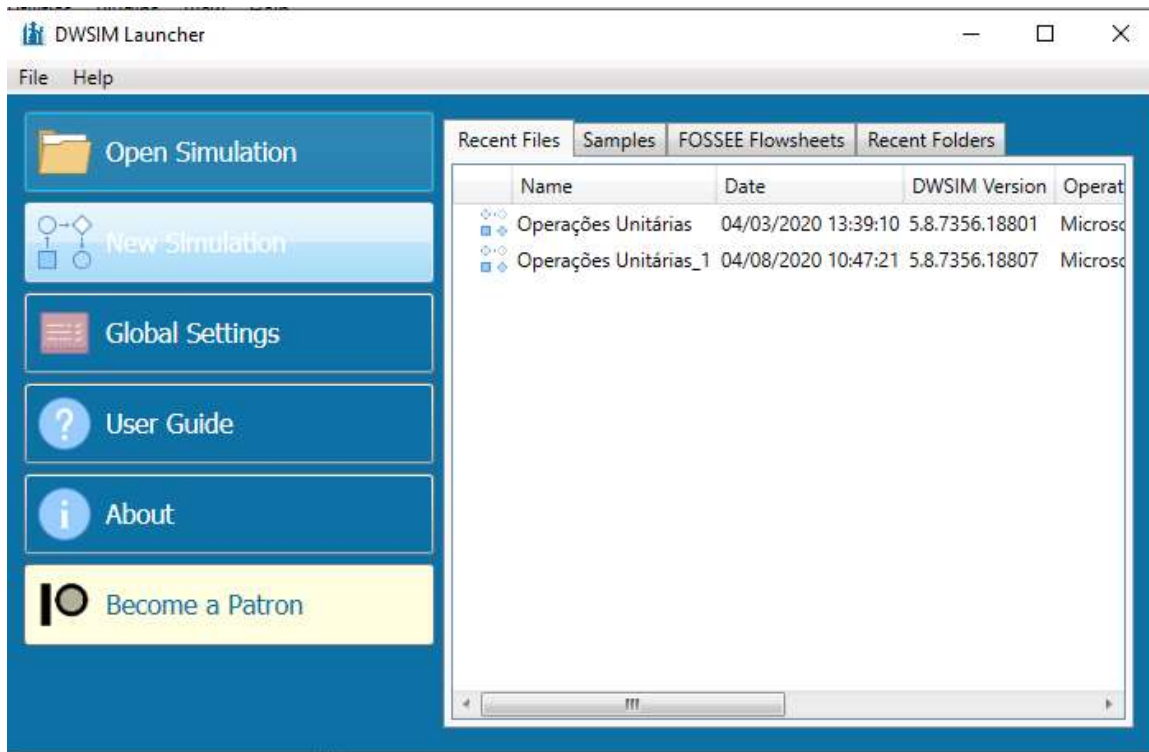
Observar que a pressão de descarga mudou, de acordo com a curva, passou a ser 25,8kgf/cm<sup>2</sup>g.

## Simulação de processos - Compressores



O que é e para que sevem?

## Simulação de processos - Compressores



Para a modelagem do compressor, vamos abrir uma nova simulação, para revisar o processo.

- No Launcher, clicar em New Simulation.

## Simulação de processos - Compressores

### Step 1 - Add Compounds

Select the compounds to add to the simulation. If your compound is not on the list, you can create and add a new one using the Compound Creator Wizard ('Setup' > 'Compounds' > 'Compound Tools' > 'Compound Creator Wizard').

#### Simulation Compounds

Check compounds to add them to the simulation, uncheck to remove.

To commit the changes, select another table cell or press ENTER after checking/unchecking the compound. You may have to double-click on the checkbox in order to change its state (checked/unchecked).

Number of compounds available: 1346

Search

Click to view properties of the selected compound

View Properties

Load and add compounds to the simulation from JSON files

Load from JSON

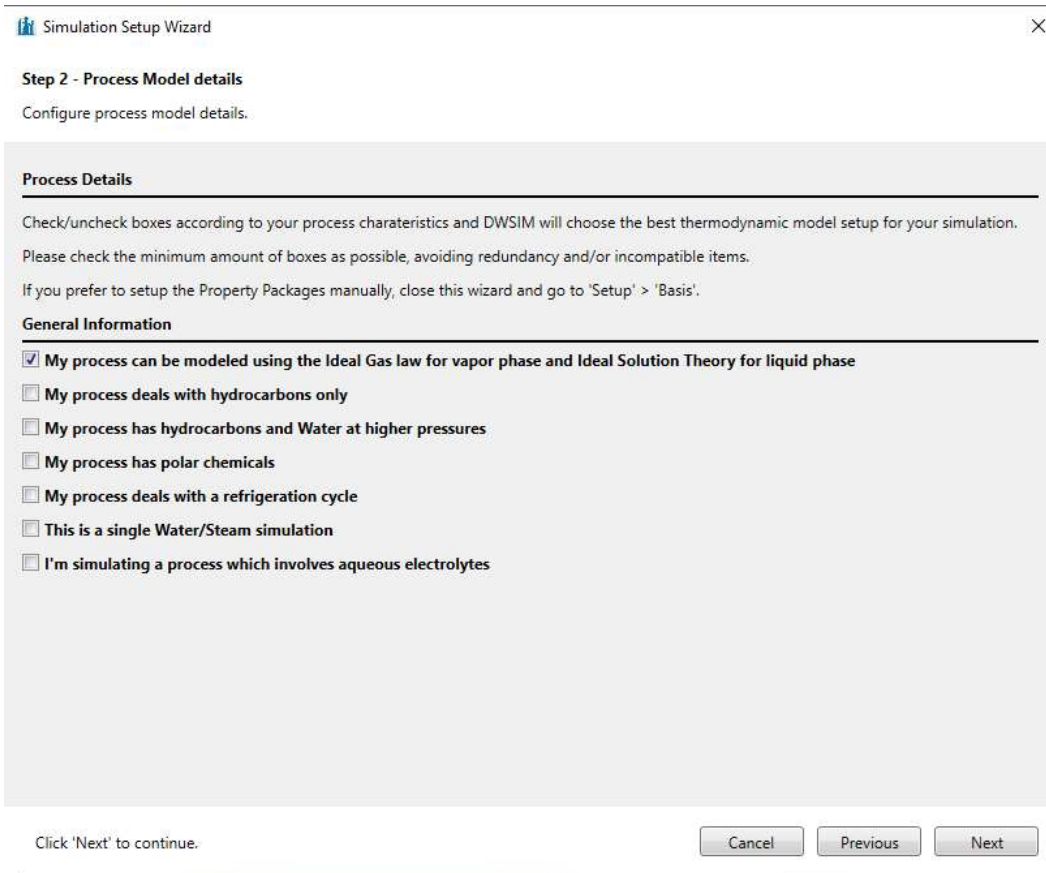
Order Compounds By

Default(As Added)

Added	Compound	Tag	Formula	CAS Number	Database
<input checked="" type="checkbox"/>	Air		(N2)0.781 (O2)0.209 (Ar)0.01	132259-10-0	ChemSep

- Definir o componente como air.
- Next.

## Simulação de processos - Compressores



Simulation Setup Wizard

**Step 2 - Process Model details**  
Configure process model details.

**Process Details**

Check/uncheck boxes according to your process characteristics and DWSIM will choose the best thermodynamic model setup for your simulation.  
Please check the minimum amount of boxes as possible, avoiding redundancy and/or incompatible items.  
If you prefer to setup the Property Packages manually, close this wizard and go to 'Setup' > 'Basis'.

**General Information**

- My process can be modeled using the Ideal Gas law for vapor phase and Ideal Solution Theory for liquid phase
- My process deals with hydrocarbons only
- My process has hydrocarbons and Water at higher pressures
- My process has polar chemicals
- My process deals with a refrigeration cycle
- This is a single Water/Steam simulation
- I'm simulating a process which involves aqueous electrolytes

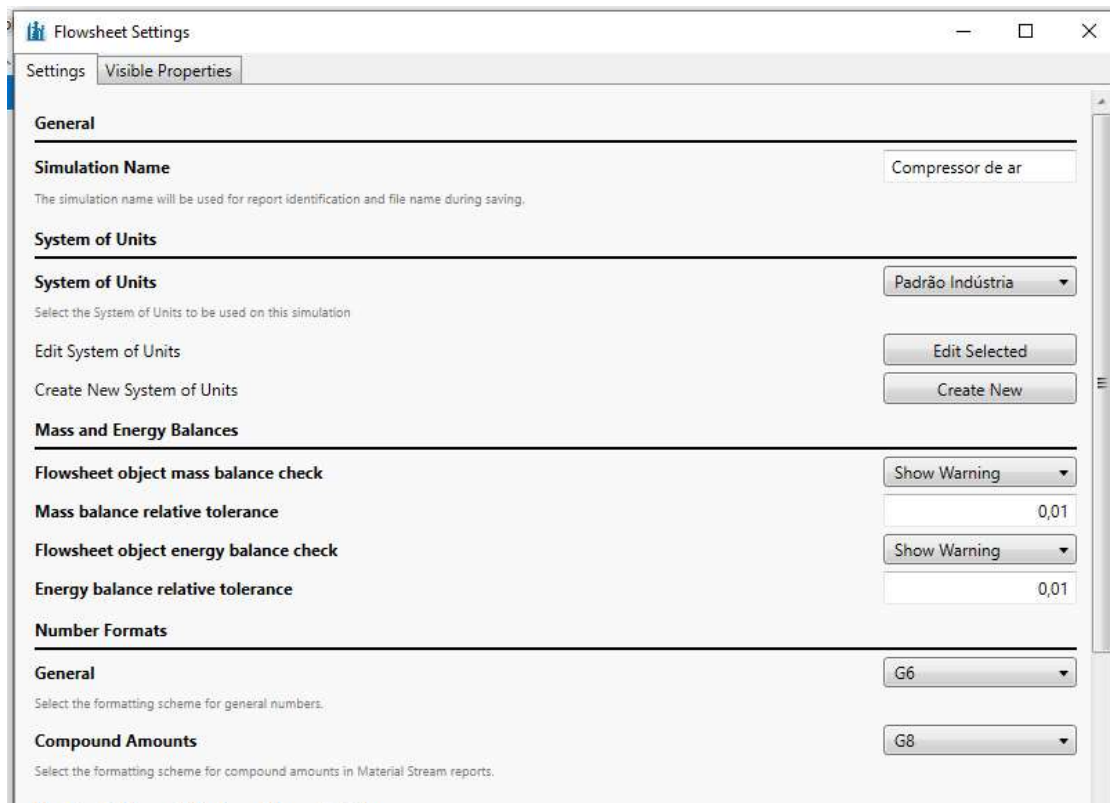
Click 'Next' to continue.

Cancel Previous Next

Apenas como didática, estamos dispostos a simular as condições do compressor como gás ideal.

- Então, clicar na primeira opção.
- Next.

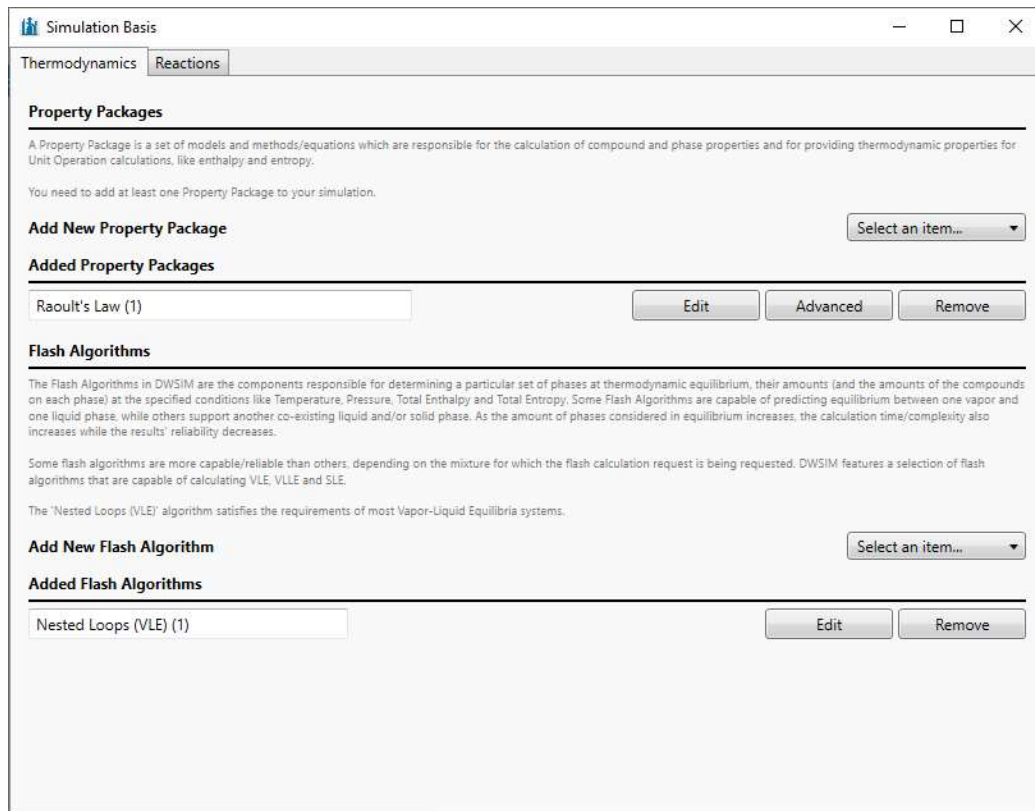
## Simulação de processos - Compressores



Seguindo.

- “Dar um nome para a simulação. Eu escolhi Compressor de ar”.
- Definir o set de unidades como “Padrão Indústria”, já configurado anteriormente.
- Next.

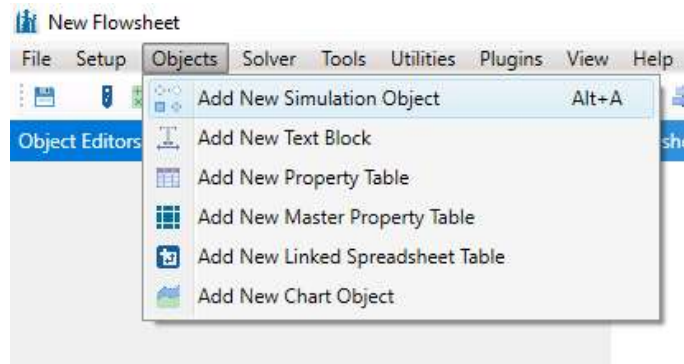
## Simulação de processos - Compressores



Clicando em Basis na página inicial:

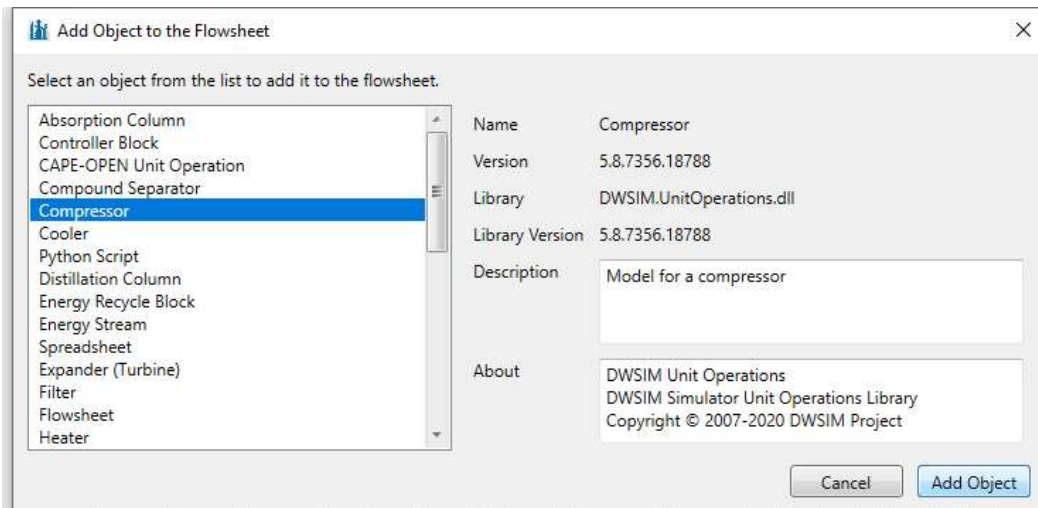
- pode-se perceber que o simulador sugeriu a lei de Raul como modelo.
- Manteve a opção de Neste Loops como algoritmo de cálculo do flash de equilíbrio líquido vapor.

## Simulação de processos - Compressores



Para adicionar o compressor, vamos utilizar uma outra estratégia, diferente do arrastar e soltar.

- Então no menu superior esquerdo, clicar Objects> Add New Simulation Object.
- Na caixa que abre, selecionar compressor e clicar em add object.





## Simulação de processos - Compressores

Object Editors

C-000 x Sucção do compressor x Wcompressor x Descarga

Flowsheet Material Streams Spreadsheet Charts Script Manager Results

Connections Properties Results Appearance

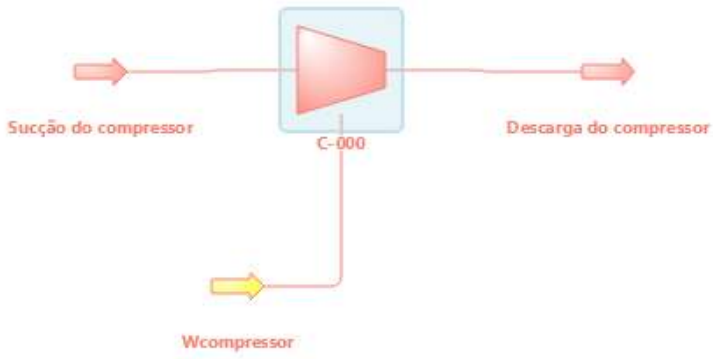
**Object Connections Editor**

Setup inlet and outlet port connections for the selected object. Select a blank item from the list to disconnect the port from the currently connected object.

Inlet: sucção do compressor

Outlet: descarga do compressor

Energy Stream: Wcompressor



Na aba connections:

- Incluir as correntes de entrada e de saída.
- Incluir a corrente de energia.
- Basta escrever o nome de apertar “enter”.

## Simulação de processos - Compressores

The screenshot displays the 'Object Editors' window for a process simulation. The 'Properties' tab is active for the compressor object 'C-000'. The 'Specified Variables' section shows 'Temperature/Pressun' selected. The 'Temperature (C)' is set to 25, and the 'Pressure (kgf/cm2g)' is set to 0. The 'Mass Flow (kg/h)' is set to 3600. The 'Object Palette' at the bottom shows various process units, including 'Compressor', 'Expander (Turbine)', and 'Piping Segment'.

**Specified Variables** Temperature/Pressun

Select a pair of properties to specify the thermodynamic state of the stream's mixture.

**Temperature (C)**

Enter the temperature of the stream if the Flash Spec is T/P or T/VF, otherwise it will be calculated.

**Pressure (kgf/cm2g)**

Enter the pressure of the stream if the Flash Spec is T/P, P/H, P/S or P/VF, otherwise it will be calculated.

**Specific Enthalpy (kJ/kg)**

Enter the enthalpy of the stream if the Flash Spec is P/H, otherwise it will be calculated.

**Specific Entropy (kJ/[kg.K])**

Enter the entropy of the stream if the Flash Spec is P/S, otherwise it will be calculated.

**Vapor Phase Mole Fraction (spec)**

If the Flash Spec is T/VF or P/VF, enter the vapor phase mole fraction (quality) of the stream, otherwise it will be calculated.

**Flow Specification**

**Mass Flow (kg/h)**

Enter the Mass flow of the stream. Molar and Volumetric ones will be calculated to match this value.

**Object Palette**

Streams **Pressure Changers** Separators Mixers/Splitters Exchangers Columns Reac

Centrifugal Pump Compressor Expander (Turbine) Orifice Plate Piping Segment

- Para a definição da corrente de entrada, vamos manter as condições padrão já incluída pelo simulador:
- Especificar Temperatura e pressão.
  - Pressão em 0 kgf/cm<sup>2</sup>g (pressão atmosférica).
  - Temperatura em 25°C (ambiente).
  - Vazão de 3600 kg/h.
  - Rodar a simulação.

## Simulação de processos - Compressores

The screenshot displays the 'Object Editors' window for a compressor (C-000) in a process simulation software. The 'Object Properties' panel is active, showing the following settings:

- Calculation Mode:** Outlet Pressure
- Thermodynamic Path:** Adiabatic
- Rotation Speed:** 1500 rpm
- Pressure Increase (kgf/cm<sup>2</sup>):** 10
- Outlet Pressure (kgf/cm<sup>2</sup>g):** 10
- Power Required (kcal/h):** 331378
- Adiabatic Efficiency (%):** 75

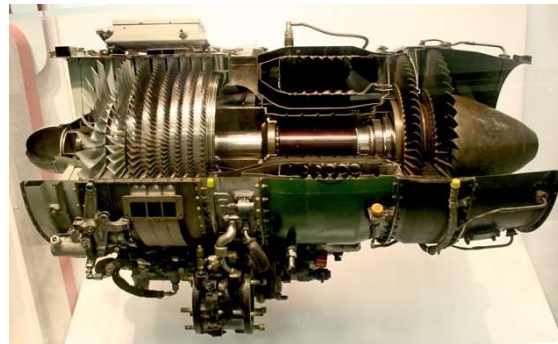
The process flow diagram shows a compressor (C-000) with an inlet stream labeled 'Sucção do compressor' and an outlet stream labeled 'Descarga do compressor'. A yellow arrow labeled 'Wcompressor' indicates the energy input to the compressor. The 'Object Palette' at the bottom shows various process units, including 'Pressure Changers'.

Para a definição do compressor:

- Especificar pressão de saída.
- Pressão em 10 kgf/cm<sup>2</sup>g. Necessária para vencer a perda de carga dos filtros e atender o coletor de ar de Instrumento em +- 7 kgf/cm<sup>2</sup>g.
- Eficiência adiabática em 75% (comum para este tipo de equipamento).
- Rodar a simulação.

Passando-se o mouse pela corrente de energia, observa-se um compressor de 385,39 kW.

## Simulação de processos – Turbinas



O que é e para que sevem?

## Simulação de processos - Turbinas

Object Editors

X-017 Entrada turbina Exausto turbina Wturbina

Connections Properties Results Appearance

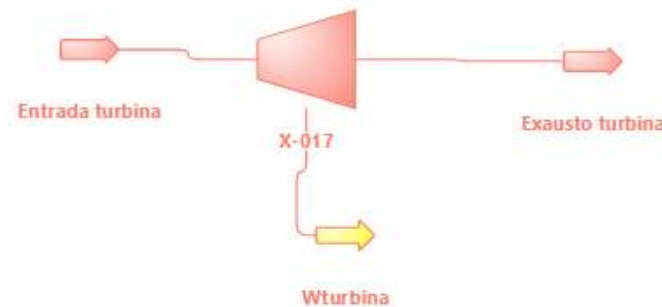
**Object Connections Editor**

Setup inlet and outlet port connections for the selected object. Select a blank item from the list to disconnect the port from the currently connected object.

**Inlet** Entrada turbina

**Outlet** Exausto turbina

**Energy Stream** Wturbina



Para a definição do turbina, iremos utilizar a simulação do vaso, que já está configurada para vapor.

Para incluir a turbina, utilize a mesma estratégia:

- Clicar Objects> Add New Simulation Object.
- Na caixa que abre, selecionar Expander (turbine) e clicar em add object.

Modelagem:

- Novas corrente de topo, fundo e de energia

## Simulação de processos - Turbinas

Object Editors

Flowsheet Material Streams Spreadsheet Charts Script Manager Results

X-017 x Entrada turbina x Exausto turbina x Wturbina x

Properties Results Appearance

State Specification

Specified Variables Temperature/Pressure

Select a pair of properties to specify the thermodynamic state of the stream's mixture.

Temperature (C) 510

Enter the temperature of the stream if the Flash Spec is T/P or T/VF, otherwise it will be calculated.

Pressure (kgf/cm2g) 120

Enter the pressure of the stream if the Flash Spec is T/P, P/H, P/S or P/VF, otherwise it will be calculated.

Specific Enthalpy (kJ/kg) 3378,37

Enter the enthalpy of the stream if the Flash Spec is P/H, otherwise it will be calculated.

Specific Entropy (kJ/[kg.K]) 6,53118

Enter the entropy of the stream if the Flash Spec is P/S, otherwise it will be calculated.

Vapor Phase Mole Fraction (spec)

If the Flash Spec is T/VF or P/VF, enter the vapor phase mole fraction (quality) of the stream, otherwise it will be calculated.

Flow Specification

Mass Flow (kg/h) 300000

Entrada turbina

Exausto turbina

X-017

Wturbina

WTURBINA  
Energy Stream  
Energy Flow 63124,8 kW

Object Palette

Streams Pressure Changers Separators Mixers/Splitters Exchangers Column

Centrifugal Compressor Expander Orifice Plate Piping Sec

Para configurar a corrente de entrada:

- Especificação de Temperatura e Pressão.
- Temperatura: 510°C.
- Pressão: 120 kgf/cm<sup>2</sup>g.
- Condições típicas em Termoelétricas.
- Vazão de 300.000 kg/h.

Para configurar a turbina:

- Especificar pressão de saída.
- Pressão de exausto: 0kgf/cm<sup>2</sup>g.
- Eficiência politrópica: 75%.
- Rodar a simulação.

Passando-se o mouse pela corrente de energia, observa-se uma turbina com capacidade de geração de 63,1 MW.

## Simulação de processos - Turbinas

Operações Unitárias [C:\Users\delan\OneDrive\Documents\UFBA\ENG438 - Simulação\Simulações\Operações Unitárias\_2.dwxmz]

File Setup Objects Solver Tools Utilities Plugins View Help

Object Editors X-017 Entrada turbina Exausto turbina Wturbina

Connections Properties Results Appearance

Property Package

Property Package Steam Tables (IAPWS)

Flash Algorithm Default

Object Properties

Calculation Mode Outlet Pressure

Select the variable to specify for the calculation. Expand.

Outlet Pressure

Pressure Variation

Power Generated

Known Head

Performance Curves

Edit Performance

Thermodynamic Path

Select the Thermodynamic Path according to the available data.

Entrada turbina X-017 Exausto turbina Wturbina

Assim como mostrado para as bombas, as turbinas apresentam diferentes maneiras de especificação:

- Definir pressão de saída.
- Definir variação de pressão.
- Definir trabalho gerado.
- Definido o HEAD.
- Definição das curvas.

Para utilização destas opções, deve-se ter muito cuidado, pois os campos de inclusão do dados se mantém disponíveis, então pode haver confusão no momento do input.

Atenção redobrada onde está sendo colocado dado de especificação, ok?

## Simulação de processos – Válvulas



O que é e para que sevem?



## Simulação de processos - Válvulas

Object Editors

VALVE-000 x Saída x Entrada x

Connections Properties Results Appearance

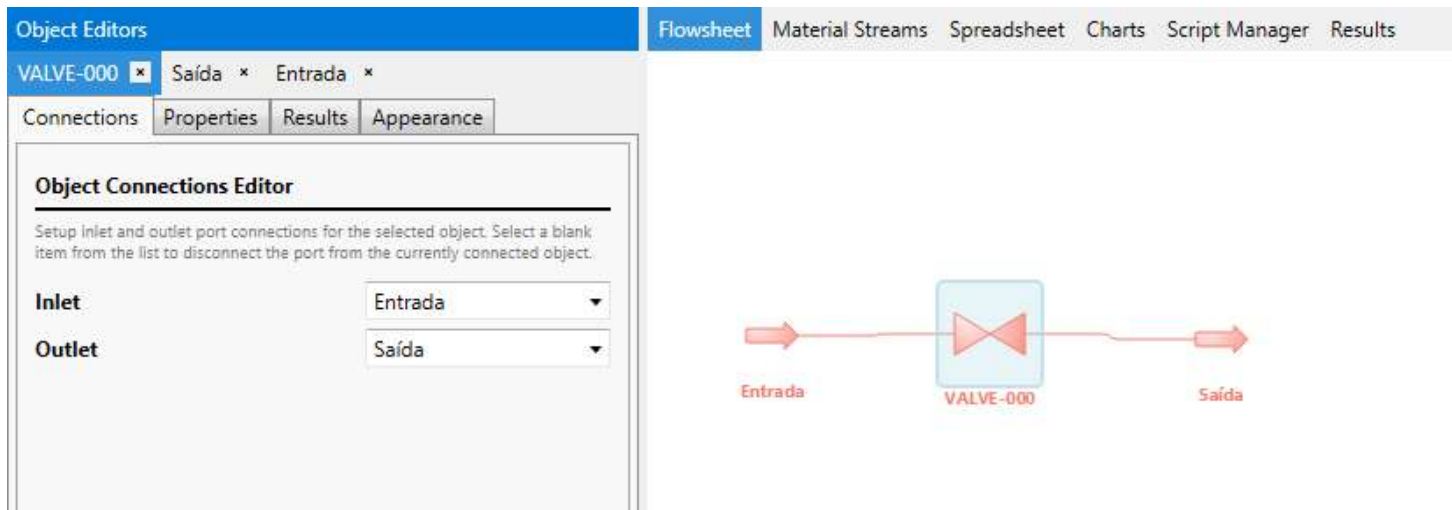
**Object Connections Editor**

Setup Inlet and outlet port connections for the selected object. Select a blank item from the list to disconnect the port from the currently connected object.

Inlet

Outlet

Flowsheet Material Streams Spreadsheet Charts Script Manager Results



Para a definição da válvula, basta selecionar pressure changers: valve.

Modelagem:

- Novas corrente de entrada e saída

## Simulação de processos - Válvulas

**Property Package**

Property Package: Steam Tables (IAPWS) ▾

Flash Algorithm: Default ▾

**State Specification**

Specified Variables: Temperature/VaporFr ▾

Select a pair of properties to specify the thermodynamic state of the stream's mixture.

Temperature (C): 200  
Enter the temperature of the stream if the Flash Spec is T/P or T/VF, otherwise it will be calculated.

Pressure (kgf/cm2g): 14,8168  
Enter the pressure of the stream if the Flash Spec is T/P, P/H, P/S or P/VF, otherwise it will be calculated.

Specific Enthalpy (kJ/kg): 852,333  
Enter the enthalpy of the stream if the Flash Spec is P/H, otherwise it will be calculated.

Specific Entropy (kJ/[kg.K]): 2,33058  
Enter the entropy of the stream if the Flash Spec is P/S, otherwise it will be calculated.

Vapor Phase Mole Fraction (spec): 0  
If the Flash Spec is T/VF or P/VF, enter the vapor phase mole fraction (quality) of the stream, otherwise it will be calculated.

**Flow Specification**



Para a corrente de entrada, iremos utilizar:

- Opção de Temperatura/Vapor Fraction (TVF).
- Temperatura 200°C.
- Vapor fraction: 0. (líquido saturado).
- Observem que a pressão de saturação é de 14,8 kgf/cm<sup>2</sup>g.

## Simulação de processos - Válvulas

**Object Property Editor**

Property values are updated/stored as they are changed/edited. There's no need to press ENTER to commit the changes.

**Inspector Reports**

An Inspector Report is ready for viewing. [View Report](#)

**Object Details**

Type: Valve  
Status: Active  
Name: VALVE-000

**Property Package**

Property Package: Steam Tables (IAPWS)  
Flash Algorithm: Default

**Object Properties**

**Calculation Mode**  
Select the calculation mode of this valve.  
Calculation Mode: Pressure Drop

**Outlet Pressure (kgf/cm2g)**  
If you chose 'Outlet Pressure' as the calculation mode, enter the desired value. If you chose a different calculation mode, this parameter will be calculated.  
Value: 0

**Pressure Drop (kgf/cm2)**  
If you chose 'Pressure Drop' as the calculation mode, enter the desired value. If you chose a different calculation mode, this parameter will be calculated.  
Value: 5

**Kv(max)**  
Value: 100

Use Opening (%) versus Kv/Kvmax (%) relationship

**Kv/Kvmax (%) = f(OP(%))**  
Value: 1.0\*OP

**Opening (%)**  
Value: 50

**Saída Compound Amounts - Basis: Molar Fraction**

Compounds / Phases	Overall	Vapor	Liquid 1	Liquid 2	Solid
Water	1	1	1	0	0
Fraction	0,0387126	0,961287	0	0	0
Total					

**Saída Material Stream**

Temperature	182,609 C
Pressure	9,81675 kgf/cm2g
Mass Flow	3600 kg/h
Molar Flow	55,5084 mol/s
Volumetric Flow	0,00817673 m3/s
Mixture Molar Enthalpy	15355 kJ/kmol
Mixture Molar Entropy	42,0667 kJ/[kmol.K]
Vapor Phase Molar Fraction	0,0387126
Phases	Mixed
Energy Flow	852,383 kW

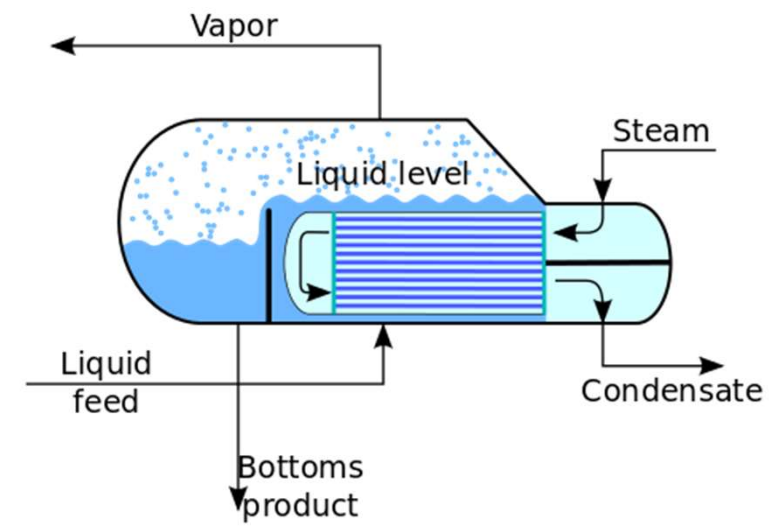
Nas propriedades da válvula, iremos utilizar:

- Opção de pressure drop.
- Pressure drop: 5 kgf/cm<sup>2</sup>.
- Rodar.

Observem, passando o mouse pela corrente de saída que a pressão da linha de saída foi para 9,8 kgf/cm<sup>2</sup>g e houve formação de vapor, após a válvula. Esse comportamento é muito importante em sistemas de condensado.

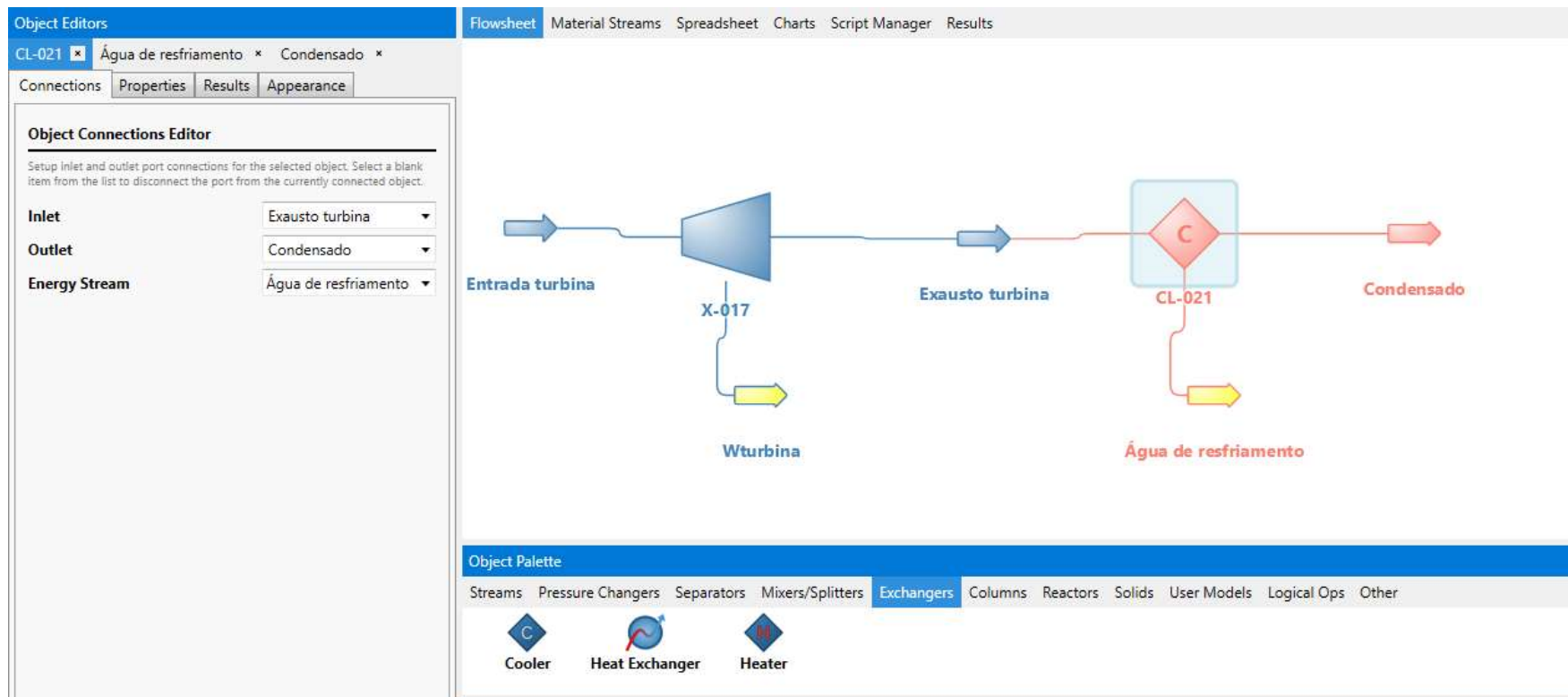
Há a opção de configuração de informações disponíveis de características da válvula Kv/Kv max como um % da abertura. Esta modelagem pode ser utilizada, caso estejam disponíveis as informações da válvula

## Simulação de processos – Trocadores de calor



O que é e para que sevem?

## Simulação de processos – Trocadores de calor



Utilizaremos o cooler, sendo modelado na saída da turbina para representar o condensador de superfície, que condensa o exausto da turbina e retorna o condensado para o sistema (ciclo Rankine)

## Simulação de processos – Trocadores de calor

The screenshot displays the 'Object Editors' window for a cooler unit (CL-021) in a process simulation software. The 'Results' tab is active, showing the following properties:

- Property Package:** Steam Tables (IAPWS)
- Flash Algorithm:** Nested Loops (VLE)
- Calculation Mode:** Outlet Quality
- Pressure Drop (kgf/cm2):** 0
- Outlet Temperature (C):** 99,9743
- Heat Removed (kW):** 183490
- Efficiency (%):** 100
- Outlet Vapor Fraction:** 0

The main window shows a flowsheet with a cooler unit (CL-021) receiving 'vasto turbina' and outputting 'Condensado'. A cooling water stream, 'Água de resfriamento', is shown with a tooltip indicating an energy flow of 183490 kW.

**Object Palette:** Streams, Pressure Changers, Separators, Mixers/Splitters, Exchangers, Columns, R

**Log Panel:**

```
[08/04/2020 13:26:37] The flowsheet is being calculated, please wait.  
[08/04/2020 13:26:37] The flowsheet was calculated successfully.  
[08/04/2020 13:26:37] Last run execution time: 0:00:00,6106518
```

Para esta modelagem iremos utilizar:

- Calculation mode: Outlet Quality. Esta opção permite definir se a corrente de saída vai sair em estado líquido saturado.
- Outlet vapor fraction: 0. Definido como líquido saturado.

Passando-se o mouse pela corrente de energia da água de resfriamento, observa-se um trocador com capacidade de troca térmica de 183,5 MW.

Ou seja, da energia total do balanço ( $63,1 + 183,5 = 246,6$  MW) foi utilizada apenas 63,1 MW, ressaltando o baixo aproveitamento de energia deste tipo de sistema.

## Simulação de processos – Trocadores de calor

Object Editors

Flowsheet Material Streams Spreadsheet Charts Script Manager Results

Descarga do compressor x HT-004 x Pre-aquecimento x

Connections Properties Results Appearance

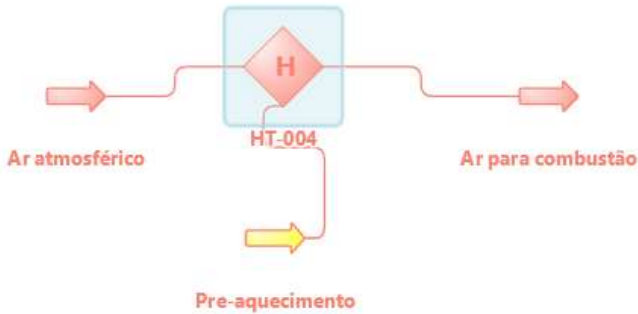
**Object Connections Editor**

Setup inlet and outlet port connections for the selected object. Select a blank item from the list to disconnect the port from the currently connected object.

**Inlet** Ar atmosférico

**Outlet** Ar para combustão

**Energy Stream** Pre-aquecimento



The diagram shows a central heater unit labeled 'H' and 'HT-004'. It has three ports: an inlet on the left, an outlet on the right, and a bottom port. A red arrow labeled 'Ar atmosférico' points into the left inlet. A red arrow labeled 'Ar para combustão' points out of the right outlet. A yellow arrow labeled 'Pre-aquecimento' points into the bottom port.

Um outro tipo, muito semelhante é o heater, utilizado para aquecimento, como o próprio nome já diz. Vamos utilizar a simulação do compressor de ar para modelar um pré-aquecedor de ar de combustão de caldeira, conforme figura ao lado.

## Simulação de processos – Trocadores de calor

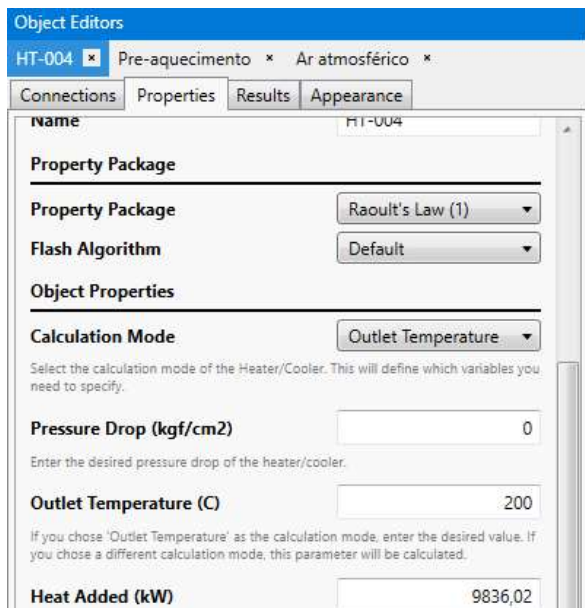
The screenshot displays the Aspen Plus software interface. The top navigation bar includes 'Object Editors', 'Flowsheet', and 'Material Streams'. The current object is 'HT-004' with sub-objects 'Pre-aquecimento' and 'Ar atmosférico'. The 'Properties' tab is active, showing the 'State Specification' panel. The 'Specified Variables' dropdown is set to 'Temperature/Pressun'. The 'Temperature (C)' is set to 25, and the 'Pressure (kgf/cm2g)' is set to 0. The 'Specific Enthalpy (kJ/kg)', 'Specific Entropy (kJ/[kg.K])', and 'Vapor Phase Mole Fraction (spec)' are all set to 0. The 'Mass Flow (kg/h)' is set to 200000. Below the State Specification panel, the 'Object Palette' is visible, showing 'Streams' and 'Pressure Changers' categories, with icons for 'Cooler' and 'Heat Excha'.

Para isso, vamos definir a corrente de entrada do trocador como ar atmosférico:

- Especificar temperatura e pressão.
- Temperatura 25°C (ambiente).
- Pressão 0kgf/cm<sup>2</sup>g (atmosférica).
- Vazão 200.000 kg/h.



## Simulação de processos – Trocadores de calor



Object Editors

Flowsheet | Material Streams | Spreadsheet | Charts | Script Manager | Results

HT-004 | Pre-aquecimento | Ar atmosférico

Connections | Properties | Results | Appearance

Name: HT-004

Property Package: Raoult's Law (1)

Flash Algorithm: Default

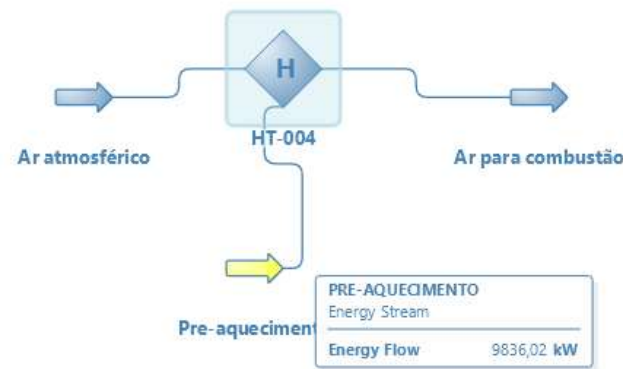
Object Properties

Calculation Mode: Outlet Temperature

Pressure Drop (kgf/cm<sup>2</sup>): 0

Outlet Temperature (C): 200

Heat Added (kW): 9836,02



Para o trocador, vamos utilizar as seguintes informações na aba de propriedades:

- Especificar temperatura de saída.
- Temperatura 200°C.
- Rodar a simulação.

Passando-se o mouse pela corrente de energia de pré-aquecimento, observa-se um trocador com capacidade de troca térmica de 9,8 MW.

## Simulação de processos – Trocadores de calor

The image shows a software interface for configuring a heat exchanger. On the left, the 'Object Connections Editor' is open, showing the following connections:

Stream Type	Stream Name
Inlet Stream 1	BFW fria
Inlet Stream 2	Vapor de media
Outlet Stream 1	BFW quente
Outlet Stream 2	Condensado

On the right, a process flow diagram shows a central heat exchanger unit labeled 'HX-008'. It has four ports: 'BFW fria' (cold water) entering from the left, 'Vapor de media' (medium steam) entering from the top, 'BFW quente' (hot water) exiting to the right, and 'Condensado' (condensate) exiting from the bottom. Above the unit, a yellow arrow labeled 'Pre-aquecimento' (preheating) points towards the unit.

Uma terceira opção de trocador é o heat exchanger (HX). Neste tipo de modelo, podem ser incluídas das informações do lado frio e do lado quente do trocador.

Para esta modelagem, vamos utilizar a simulação de água e vapor. Iremos modelar um pré-aquecedor de água de caldeira (BFW) com vapor de média do ciclo Rankine.

## Simulação de processos – Trocadores de calor

Object Editors

Flowsheet Material Streams

HX-024 x BFW fria x Vapor de média x Conden x

Properties Results Appearance

**Specified Variables** Temperature/Pressun

Select a pair of properties to specify the thermodynamic state of the stream's mixture.

**Temperature (C)** 150

Enter the temperature of the stream if the Flash Spec is T/P or T/VF, otherwise it will be calculated.

**Pressure (kgf/cm2g)** 120

Enter the pressure of the stream if the Flash Spec is T/P, P/H, P/S or P/VF, otherwise it will be calculated.

**Specific Enthalpy (kJ/kg)** 639,362

Enter the enthalpy of the stream if the Flash Spec is P/H, otherwise it will be calculated.

**Specific Entropy (kJ/[kg.K])** 1,82949

Enter the entropy of the stream if the Flash Spec is P/S, otherwise it will be calculated.

**Vapor Phase Mole Fraction (spec)**

If the Flash Spec is T/VF or P/VF, enter the vapor phase mole fraction (quality) of the stream, otherwise it will be calculated.

**Flow Specification**

**Mass Flow (kg/h)** 300000

Enter the Mass flow of the stream. Molar and Volumetric ones will be calculated to match this value.

Object Palette

Streams Pressure Changers

Cooler Heat Exchanger

Para a BFW fria, vamos utilizar as seguintes informações na aba de propriedades:

- Especificar temperatura e pressão.
- Temperatura 150°C. (temperatura de saturação da água desaerada).
- Pressão de 120 kgf/cm<sup>2</sup>g (pressão da entrada da turbina).
- Vazão de 300.000 kg/h. (Vazão da turbina)

## Simulação de processos – Trocadores de calor

**State Specification**

**Specified Variables** Temperature/Pressur

Select a pair of properties to specify the thermodynamic state of the stream's mixture.

**Temperature (C)**   
Enter the temperature of the stream if the Flash Spec is T/P or T/VF, otherwise it will be calculated.

**Pressure (kgf/cm2g)**   
Enter the pressure of the stream if the Flash Spec is T/P, P/H, P/S or P/VF, otherwise it will be calculated.

**Specific Enthalpy (kJ/kg)**   
Enter the enthalpy of the stream if the Flash Spec is P/H, otherwise it will be calculated.

**Specific Entropy (kJ/[kg.K])**   
Enter the entropy of the stream if the Flash Spec is P/S, otherwise it will be calculated.

**Vapor Phase Mole Fraction (spec)**   
If the Flash Spec is T/VF or P/VF, enter the vapor phase mole fraction (quality) of the stream, otherwise it will be calculated.

**Flow Specification**

**Mass Flow (kg/h)**   
Enter the Mass flow of the stream. Molar and Volumetric ones will be calculated to match this value.



Para o vapor de média, vamos utilizar as seguintes informações na aba de propriedades:

- Especificar temperatura e pressão.
- Temperatura 280°C.
- Pressão de 15 kgf/cm<sup>2</sup>g.
- Vazão de 30.000 kg/h.

## Simulação de processos – Trocadores de calor

The screenshot displays the 'Object Editors' window for a heat exchanger (HX-028) and a process flowsheet diagram.

**Object Properties:**

- Calculation Mode:** Calculate Area
- Flow Direction:** Counter Flow
- Defined Temperature (for Calc Area Mode):** Hot Fluid
- Pressure Drop (Hot Fluid) (kgf/cm2):** 0
- Pressure Drop (Cold Fluid) (kgf/cm2):** 0
- Outlet Temperature (Cold Fluid) (C):** 200,218
- Outlet Temperature (Hot Fluid) (C):** 190

**Flowsheet Diagram:**

The diagram shows a central heat exchanger (HX-028) with four streams: 'Vapor de média' (top), 'BFW fria' (left), 'BFW quente' (right), and 'Conden' (bottom). A 'Wturbina' is located above the heat exchanger.

**Object Palette:**

- Streams
- Pressure Changers
- Separators
- Mixers/Splitters
- Exchangers**
- Columns
- Reactors

**Log Panel:**

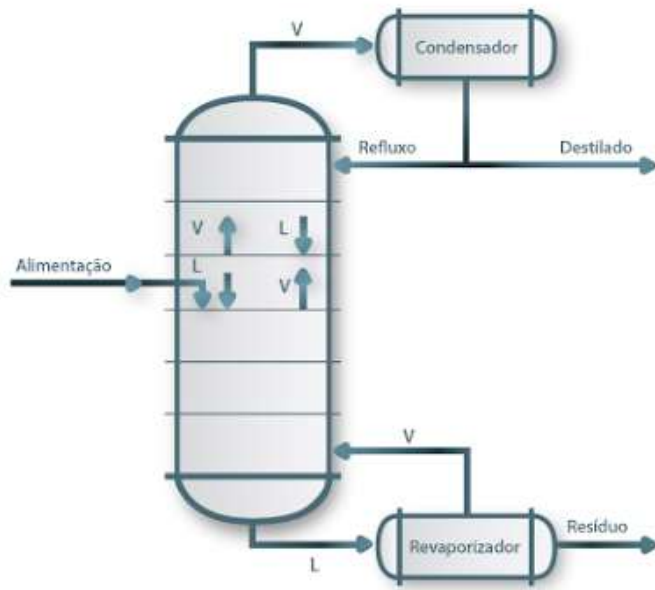
```
[08/04/2020 14:04:41] The flowsheet is being calculated, please wait...
[08/04/2020 14:04:41] The flowsheet was calculated successfully.
[08/04/2020 14:04:41] Last run execution time: 0:00:00,2158947
```

Para o trocador, vamos as seguintes informações na aba de propriedades:

- Calculation mode: Calculate área.
- Defined temperature (forc calc área mode): hot fluid.
- Outlet temperature (hot fluid): 190°C. (garantir que houve condensação).
- Rodar a simulação.

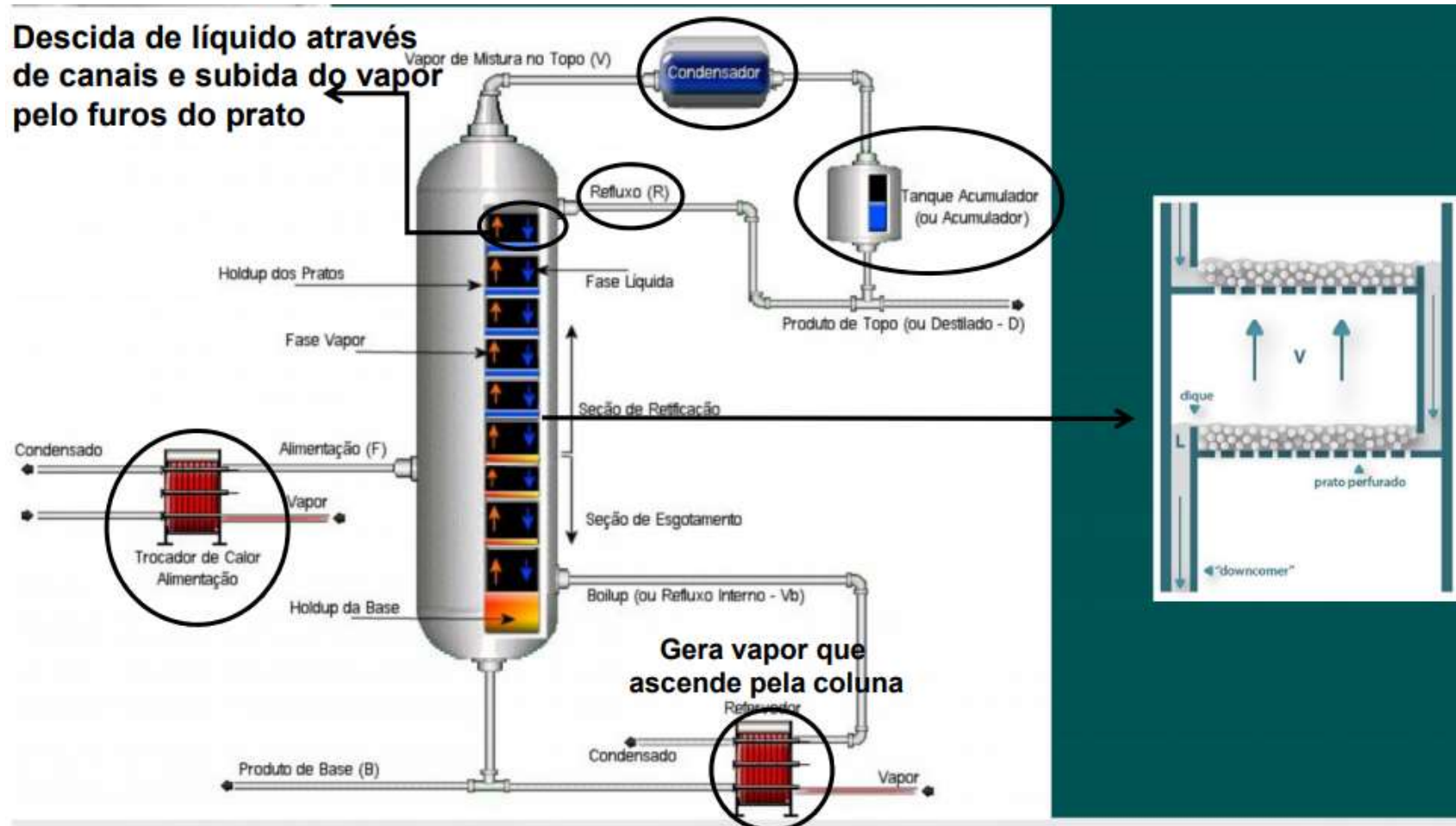
Passando-se o mouse pelo trocador, observa-se uma capacidade de troca térmica de 18,2MW.

## Simulação de processos – Colunas de destilação



O que é e para que sevem?

## Simulação de processos – Colunas de destilação



## Simulação de processos – Coluna de destilação

**Step 1 - Add Compounds**

Select the compounds to add to the simulation. If your compound is not on the list, you can create and add a new one using the Compound Creator Wizard ('Setup' > 'Compounds' > 'Compound Tools' > 'Compound Creator Wizard').

**Simulation Compounds**

Check compounds to add them to the simulation, uncheck to remove.

To commit the changes, select another table cell or press ENTER after checking/unchecking the compound. You may have to double-click on the checkbox in order to change its state (checked/unchecked).

Number of compounds available: 1346

Search

Click to view properties of the selected compound

Load and add compounds to the simulation from JSON files

Order Compounds By

Added	Compound	Tag	Formula	CAS Number	Database
<input checked="" type="checkbox"/>	Benzene		-CHCHCHCHCHCH-	71-43-2	ChemSep
<input checked="" type="checkbox"/>	Toluene		(C6H5)CH3	108-88-3	ChemSep
<input type="checkbox"/>	(1Z,3Z)-Cycloocta-1,3-Diene		C8H12	1700-10-3	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(3E)-Penta-1,3-Diene		C5H8	2004-70-8	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-1,2-Dichloroethene		C2H2Cl2	156-60-5	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-1-Bromanylprop-1-Ene		C3H5Br	590-15-8	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-3-Methylpent-2-Ene		C6H12	616-12-6	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-But-2-Enal		C4H6O	123-73-9	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-But-2-Enenitrile		C4H5N	627-26-9	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(E)-But-2-Enoic Acid		C4H6O2	107-93-7	ChEDL Thermo
<input type="checkbox"/>	(Z)-1,2-Dichloroethene		C2H2Cl2	156-50-2	ChEDL Thermo

Click 'Next' to continue.

Para a modelagem da coluna de destilação, vamos iniciar uma nova simulação, incluindo apenas Benzeno e Tolueno como componentes.

Next.



## Simulação de processos – Coluna de destilação

Simulation Setup Wizard

**Step 2 - Process Model details**  
Configure process model details.

**Process Details**

Check/uncheck boxes according to your process characteristics and DWSIM will choose the best thermodynamic model setup for your simulation.  
Please check the minimum amount of boxes as possible, avoiding redundancy and/or incompatible items.  
If you prefer to setup the Property Packages manually, close this wizard and go to 'Setup' > 'Basis'.

**General Information**

- My process can be modeled using the Ideal Gas law for vapor phase and Ideal Solution Theory for liquid phase
- My process deals with hydrocarbons only
- My process has hydrocarbons and Water at higher pressures
- My process has polar chemicals
- My process deals with a refrigeration cycle
- This is a single Water/Steam simulation
- I'm simulating a process which involves aqueous electrolytes

Click 'Next' to continue.

Cancel Previous Next

Criando uma nova simulação, facilita a definição do modelo termodinâmico, que desta vez será selecionado pois iremos marcar a opção de lidar apenas com Hidrocarbonetos.

Next.

## Simulação de processos – Coluna de destilação

Simulation Setup Wizard

**Step 3 - Other Settings**  
Configure miscellaneous simulation settings.

**General**

**Simulation Name** Destilação  
The simulation name will be used for report identification and file name during saving.

**System of Units**  
Select the System of Units to be used on this simulation.

**System of Units** Padrão Indústria

**Number Formats**

**General** G6  
Select the formatting scheme for general numbers.

**Compound Amounts** G8  
Select the formatting scheme for compound amounts in Material Stream reports.

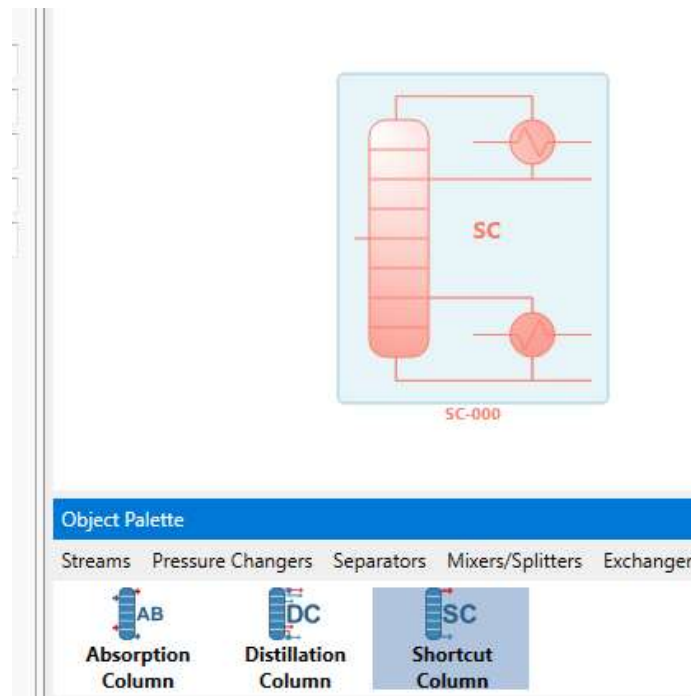
Click 'Finish' to close this window and start building your process model.

Cancel Previous Finish

- Nomear
- Selecionar o set de unidades: “Padrão da Indústria”.

Finish.

## Simulação de processos – Coluna de destilação



Clicar na Short Cut Column e arrastar.

Objetivo desta coluna:

- Calcular o refluxo mínimo.
- Distribuição dos produtos na destilação.
- Balanço de massa e energia.
- Número mínimo de estágios e estágio de entrada ótimo.

## Simulação de processos – Coluna de destilação

Object Editors SC-000 x Entrada da coluna x Benzeno x Tolueno x Ca

Flowsheet Material Streams Spreadsheet Charts Script Manager Results

Connections Properties Results Appearance

**Object Connections Editor**

Setup inlet and outlet port connections for the selected object. Select a blank item from the list to disconnect the port from the currently connected object.

<b>Inlet</b>	Entrada da coluna
<b>Distillate</b>	Benzeno
<b>Bottoms</b>	Tolueno
<b>Reboiler Duty</b>	Calor do reboiler
<b>Condenser Duty</b>	Calor do condensador

The diagram shows a distillation column (SC) with the following streams:

- Entrada da coluna**: Inlet stream entering the column.
- Benzeno**: Distillate stream exiting the top of the column.
- Tolueno**: Bottoms stream exiting the bottom of the column.
- Calor do reboiler**: Reboiler duty stream entering the reboiler.
- Calor do condensador**: Condenser duty stream entering the condenser.

Para modelagem da coluna, iremos utilizar as seguintes correntes:

- Inlet– entrada da coluna.
- Distillate – Benzeno.
- Bottoms – Tolueno.
- Reboiler Duty – Calor do reboiler.
- Condenser Duty – Calor do condensador.

Object Editors

SC-000 x Entrada da coluna x Benzeno x Tolueno x Calor do rebo

Properties Results Appearance

**Property Package**

Property Package Peng-Robinson (PR) (v)

Flash Algorithm Nested Loops (VLE) (v)

**State Specification**

Specified Variables Temperature/Pressur (v)

Select a pair of properties to specify the thermodynamic state of the stream's mixture.

Temperature (C) 85

Enter the temperature of the stream if the Flash Spec is T/P or T/VF, otherwise it will be calculated.

Pressure (kgf/cm2g) 0,2

Enter the pressure of the stream if the Flash Spec is T/P, P/H, P/S or P/VF, otherwise it will be calculated.

Specific Enthalpy (kJ/kg) -308,62

Enter the enthalpy of the stream if the Flash Spec is P/H, otherwise it will be calculated.

Specific Entropy (kJ/[kg.K]) -0,742229

Enter the entropy of the stream if the Flash Spec is P/S, otherwise it will be calculated.

Vapor Phase Mole Fraction (spec) 0

If the Flash Spec is T/VF or P/VF, enter the vapor phase mole fraction (quality) of the stream, otherwise it will be calculated.

**Flow Specification**

Mass Flow (kg/h) 2000

Enter the Mass flow of the stream. Molar and Volumetric ones will be calculated to match this value.

Molar Flow (mol/s) 6,52634

Enter the Molar flow of the stream. Mass and Volumetric ones will be calculated to match this value.

Volumetric Flow (m3/s) 0,000687444

Enter the Volumetric flow of the stream. Molar and Mass ones will be calculated to match this value.

**Mixture Composition**

Composition changes will only be committed after clicking on the 'Accept' button.

Amount Basis Molar Fractions (v)

Benzene 0,5

Toluene 0,5

## Simulação de processos – Coluna de destilação

Para a corrente de entrada, iremos utilizar as seguintes informações:

- Definir pressão e temperatura.
- Pressão 0,2 kgf/cm<sup>2</sup>g.
- Temperatura 85°C.
- Vazão de 2000 kg/h.
- Composição molar:
  - 0,5 Benzeno
  - 0,5 Tolueno.

## Simulação de processos – Coluna de destilação

Object Editors

SC-000 | Entrada da coluna \* Benzeno \* Tolueno \* Calor do rebc

Connections | Properties | Results | Appearance

Name: SC-000

Property Package: Peng-Robinson (PR) (v)

Flash Algorithm: Nested Loops (VLE) (v)

Object Properties

Light Key Compound: Benzene (v)

Heavy Key Compound: Toluene (v)

LK Mole Fraction in Bottoms: 0,01

HK Mole Fraction in Distillate: 0,01

Reflux Ratio: 6

Condenser Pressure (kgf/cm2g): 0,125

Reboiler Pressure (kgf/cm2g): 0,3

Condenser Type: Total (v)

Flowsheet | Material Streams | Spreadsheet | Charts | Script Manager | Results

Object Palette

Streams | Pressure Changers | Separators | Mixers/Splitters | Exchangers | Columns | Reactors

AB Absorption Column | DC Distillation Column | SC Shortcut Column

Log Panel

[13/04/2020 09:33:25] The flowsheet is being calculated, please wait...

[13/04/2020 09:33:25] The flowsheet was calculated successfully.

[13/04/2020 09:33:25] Last run execution time: 0:00:00,0449741

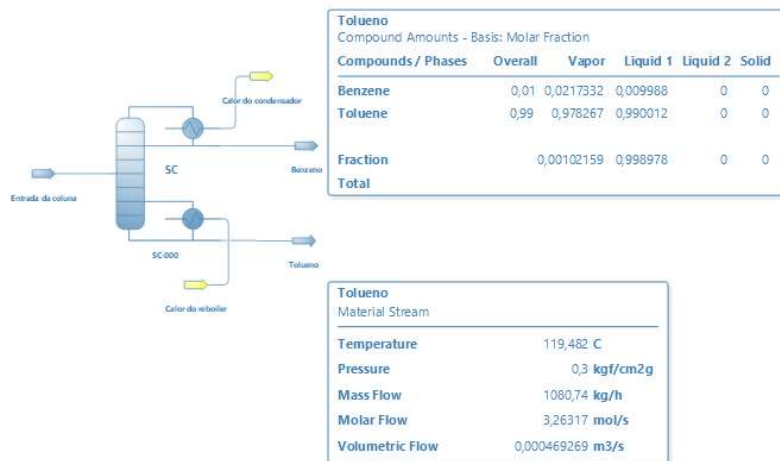
Para modelar a coluna, iremos utilizar as seguintes informações:

- Confirmar o pacote termodinâmico como Peng-Robinson.
- Flash Algorithm como Nested Loops.
- Light Key Compound: Benzeno.
- Heavy Key Compound: Tolueno.
- LK mole fraction in bottoms: 0,01
- HK mole fraction in distillate: 0,01
- Reflux Ratio: 6
- Condenser Pressure: 0,125 kgf/cm<sup>2</sup>g.
- Reboiler Pressure: 0,3 kgf/cm<sup>2</sup>g.
- Condenser type: total.
- Pronto, basta rodar a simulação.

## Simulação de processos – Coluna de destilação

### Results

Minimum reflux ratio: 1.2944  
 Minimum number of stages: 10.0687  
 Actual number of stages: 12.0401  
 Optimum feed stage: 6.02003  
 Condenser heat duty: 689.859 kW  
 Reboiler heat duty: 708.979 kW  
 Stripping liquid mole flow: 26.1054 mol/s  
 Rectifying liquid mole flow: 19.579 mol/s  
 Stripping vapor mole flow: 22.8422 mol/s  
 Rectifying liquid mole flow: 22.8422 mol/s



Como resultados podemos verificar:

- Refluxo mínimo.
- Número de estágios teóricos mínimo.
- Estágio de entrada otimizado.
- Balanço de energia.
- Balanço de massa interno.

Na corrente de topo e de fundo podemos observar:

- As frações molares de acordo com a especificação.
- As vazões de cada componente.
- As condições de pressão e temperatura dos produtos separados.

## Simulação de processos – Coluna de destilação

Pronto, simulação concluída.

**Porém muito cuidado com a verificação dos dados simulados com os dados reais e muito critério na decisão em relação às especificações da coluna, que nem sempre estão disponíveis...**

Para realizar simulações mais detalhadas e rigorosas, pode-se utilizar as funções Absorption Column e Distillations column.



Com estas opções é possível ter mais opções de modelagem da sua coluna e um maior número de métodos de solução. Para maiores detalhes, ver manual do DWSIM.



## Simulação de processos – Reatores

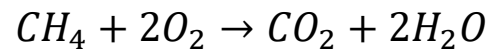


O que é e para que sevem?

## Simulação de processos – Reator de conversão

- Vamos então utiliza-lo para simulação de combustão.
- Vamos começar uma nova simulação para simplificar a entrada de dados.

Consideremos a combustão total do Metano:



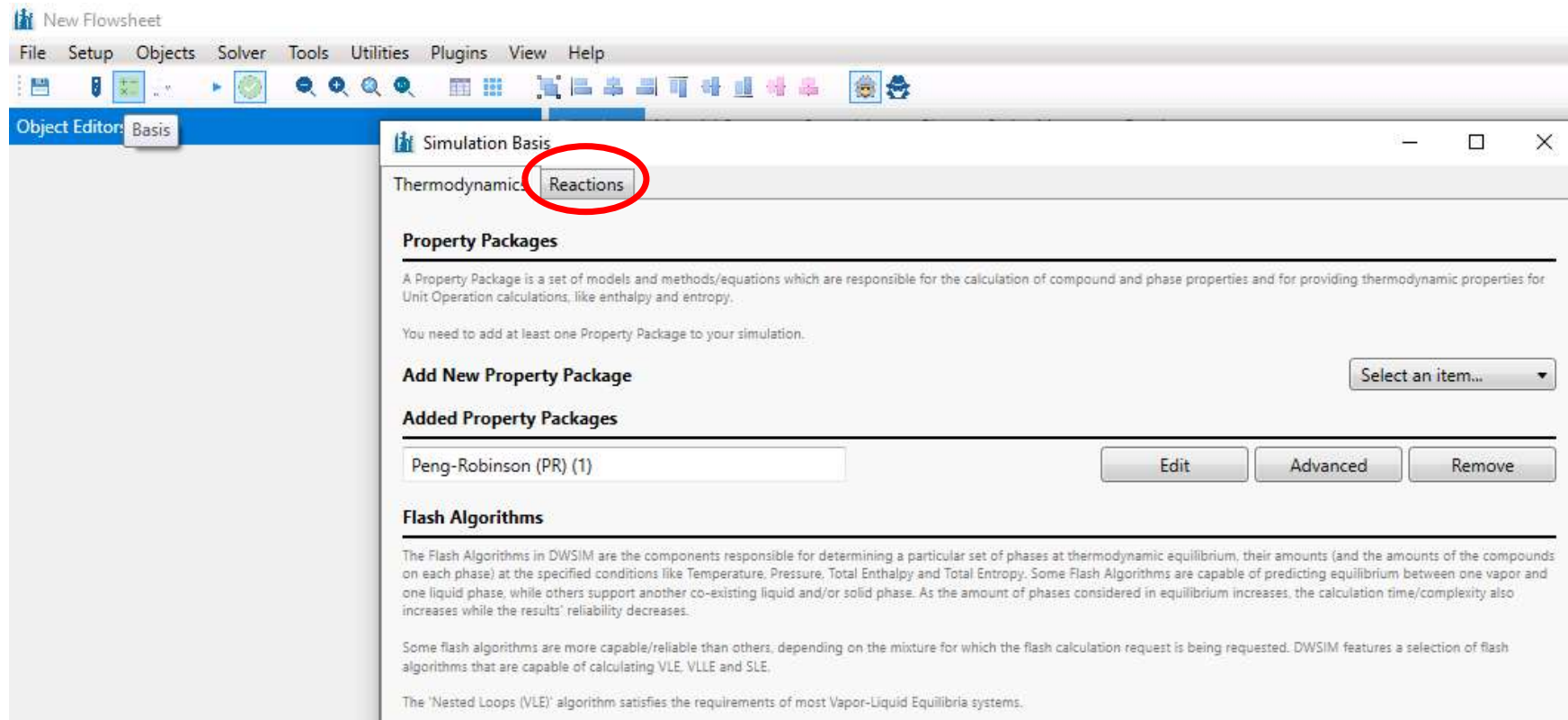
Vamos incluir o nitrogênio, por conta do ar para combustão.

Order Compounds By

Added	Compound	Tag	Formula	CAS Number	Database
<input checked="" type="checkbox"/>	Carbon dioxide		CO2	124-38-9	ChemSep
<input checked="" type="checkbox"/>	Methane		CH4	74-82-8	ChemSep
<input checked="" type="checkbox"/>	Nitrogen		N2	7727-37-9	ChemSep
<input checked="" type="checkbox"/>	Oxygen		O2	7782-44-7	ChemSep
<input checked="" type="checkbox"/>	Water		HOH	7732-18-5	ChemSep

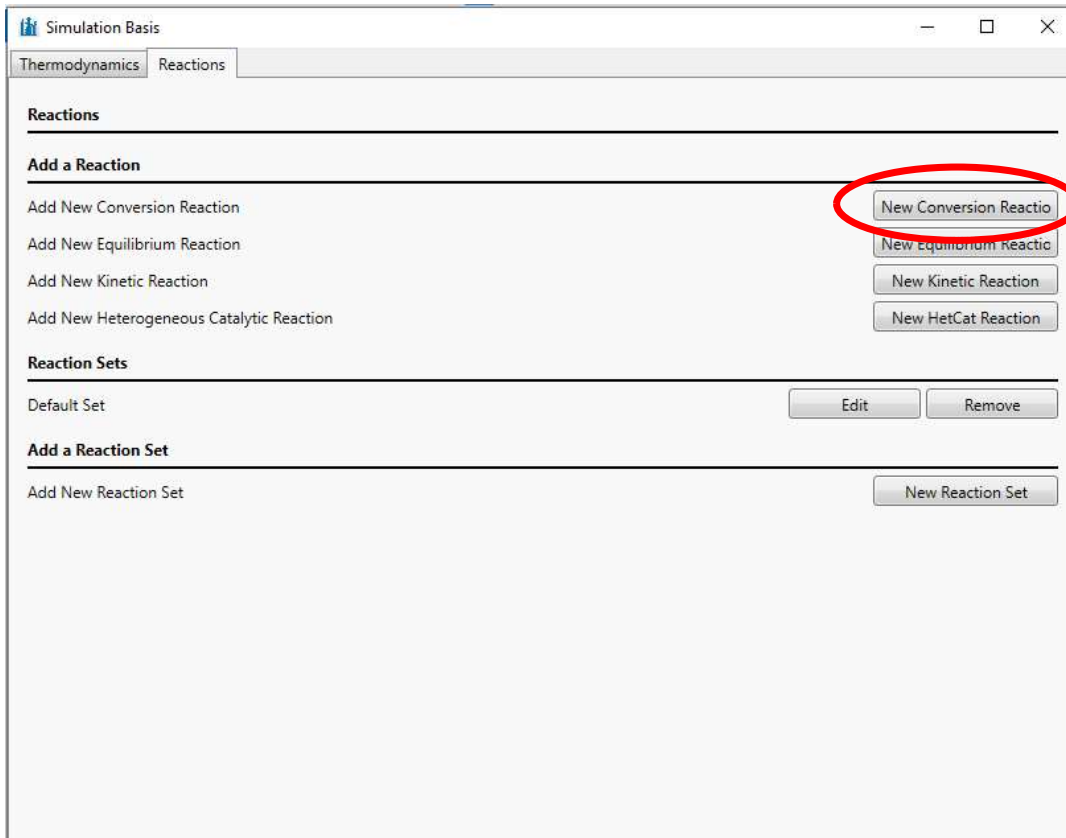
My process has hydrocarbons and Water at higher pressures

## Simulação de processos – Reator de conversão



Clicando no ícone de simulation basis, irá abrir a janela de configurações do modelo, já preenchido com o Peng-Robinson, porém desta vez iremos clicar em Reactions, nas abas superiores.

## Simulação de processos – Reator de conversão



Na aba de Reactions, clicar em New Conversion Reaction.

## Simulação de processos – Reator de conversão

Add Conversion Reaction

Reaction ID

Name Combustão do Metano

Compounds and Stoichiometry (Include / Name / Heat of Formation (kJ/kg) / Stoich. Coeff.)

Include	Name	Heat of Formation (kJ/kg)	Stoich. Coeff.
<input checked="" type="checkbox"/>	Methane	-4.645,17	-1
<input checked="" type="checkbox"/>	Oxygen	0,00	-2
<input type="checkbox"/>	Nitrogen	0,00	0
<input checked="" type="checkbox"/>	Carbon dioxide	-8.941,48	1
<input checked="" type="checkbox"/>	Water	-13.422,72	2

Base Compound

Base Compound Methane

Reaction Balance

Stoichiometry: CH4 + 2O2 --> CO2 + 2H2O [OK, Heat of Reaction = 0,00 kJ/kmol Base Compound]

Temperature Limits

Minimum Temperature (C) -273,15

Maximum Temperature (C) 1726,85

Reaction Phase

Reaction Phase Vapor

Conversion Expression

Conversion Expression, % conv = f(T), T in K

100

Cancel Add



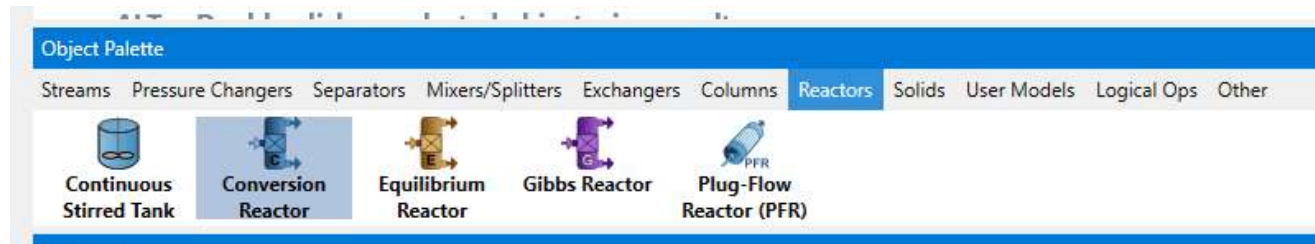
Agora iremos configurar a reação desejada:

- Definir um nome. Exemplo: Combustão do Metano.
- Selecionar os componentes da reação, Metano, Oxigênio, Dióxido de Carbono e água.
- Definir os coeficientes estequiométricos da reação, onde o negativo indica que é um reagente e o positivo indica que é um produto.
- Definir o componente base: Metano.
- Definir que a fase da reação se dá na condição de Vapor.
- Adicionar a expressão de conversão com base na temperatura. Neste caso, queremos 100% de conversão.

## Simulação de processos – Reator de conversão

Para simulação da combustão, utilizaremos o Conversion Reactor, onde é possível definir qual a reação que se quer modelar para a simulação, com base na configuração apresentada anteriormente.

Basta clicar e arrastar para o flowsheet.



## Simulação de processos – Reator de conversão

**Property Package**

Property Package: Peng-Robinson (PR) (▼)

Flash Algorithm: Default (▼)

**State Specification**

Specified Variables: Temperature/Pressun (▼)

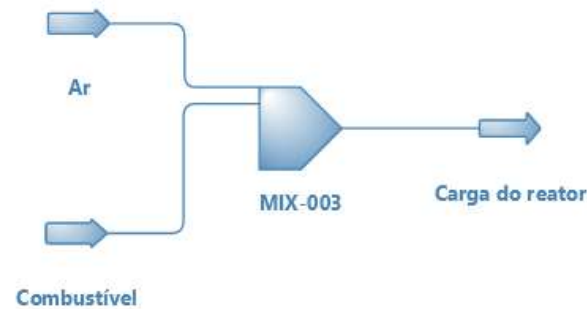
Select a pair of properties to specify the thermodynamic state of the stream's mixture.

Temperature (C): 30

Enter the temperature of the stream if the Flash Spec is T/P or T/VF, otherwise it will be calculated.

Pressure (kgf/cm2g): 0,5

Enter the pressure of the stream if the Flash Spec is T/P, P/H, P/S or P/VF, otherwise it will be calculated.



Para a carga do reator, iremos utilizar duas correntes, de ar e combustível:

- Corrente de ar:
  - Temperatura 30°C.
  - Pressão 0,5 kgf/cm<sup>2</sup>g.
  - Vazão 400.000 kg/h.
  - Composição molar: 20% O<sub>2</sub> e 80% N<sub>2</sub>
- Corrente de combustível:
  - Temperatura 30°C.
  - Pressão 0,5 kgf/cm<sup>2</sup>g.
  - Vazão 20.000 kg/h.
  - Composição molar: 100% CH<sub>4</sub>

## Simulação de processos – Reator de conversão

Para o reator, iremos utilizar as seguintes conexões:

- Carga do reator proveniente do Mixer.
- Corrente de gases de combustão no vapor.
- Corrente de líquido, apenas porque é obrigatório.
- Corrente de energia.

Object Editors

CR-000 x Energia x Líquido x Gases de combustão x

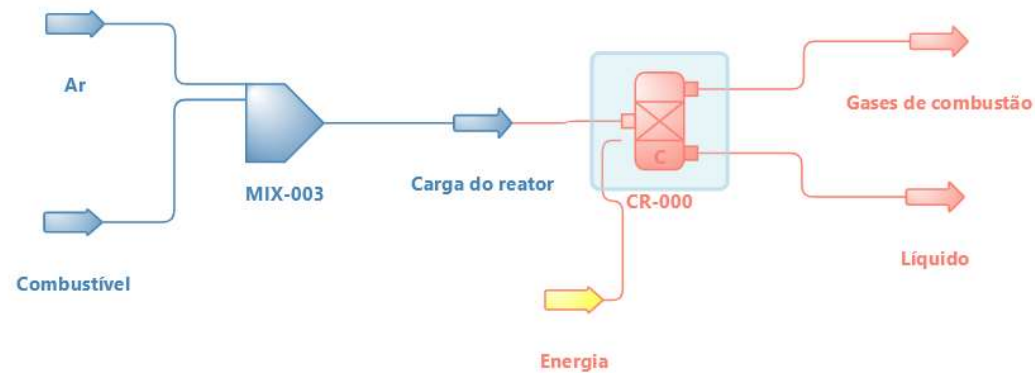
Connections Properties Results Appearance

**Object Connections Editor**

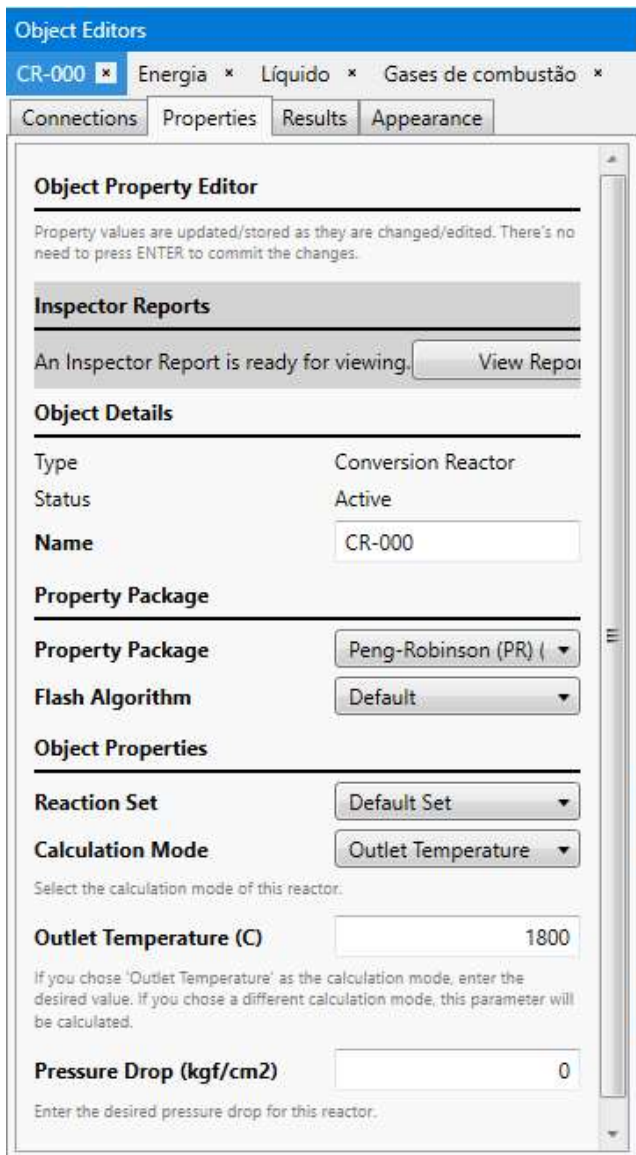
Setup inlet and outlet port connections for the selected object. Select a blank item from the list to disconnect the port from the currently connected object.

Inlet	Carga do reator
Vapor Outlet	Gases de combustão
Liquid Outlet	Líquido
Energy Stream	Energia

Flowsheet Material Streams Spreadsheet Charts Script Manager Results







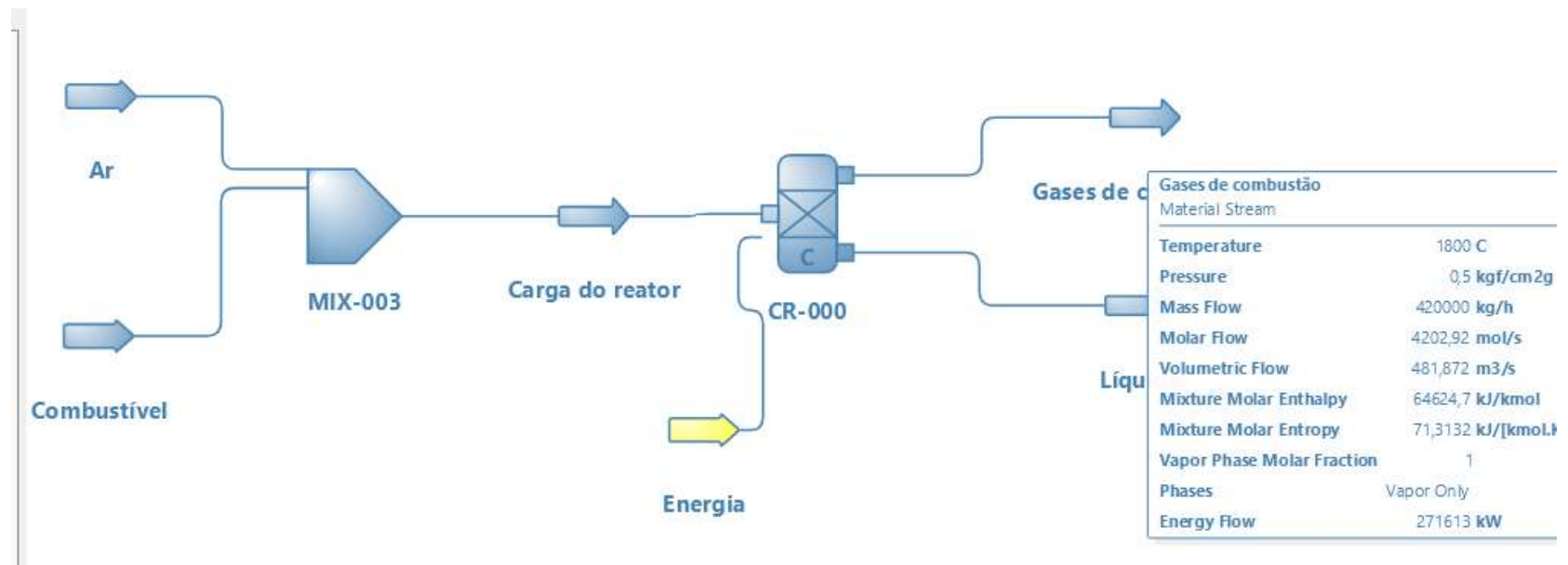
## Simulação de processos – Reator de conversão

Para modelar o reator, iremos utilizar as seguintes configurações:

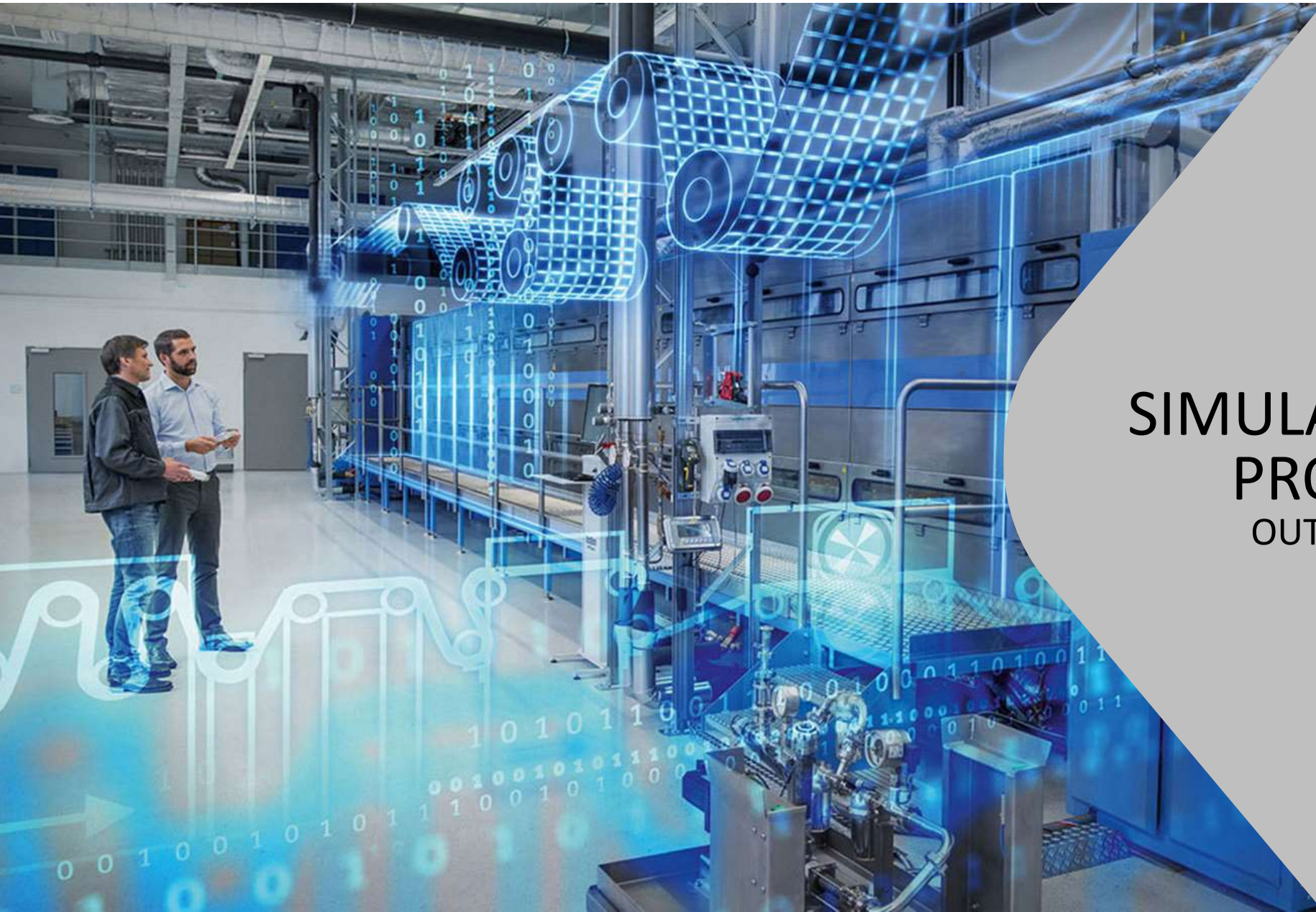
- Calculation mode: outlet temperature.
- Outlet Temperatura 1800°C (próximo a temperatura adiabática de chama, nessas condições).
- Sem perda de carga.

Pronto, basta rodar a simulação.

## Simulação de processos – Reator de conversão



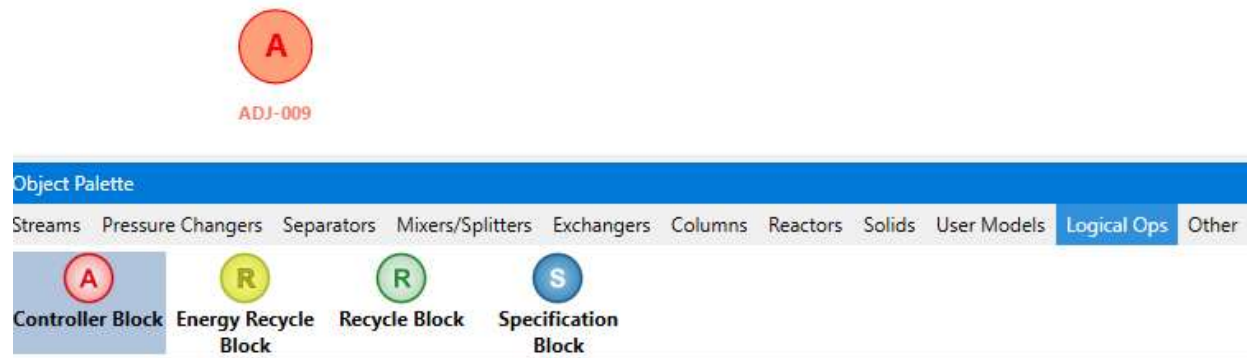
Com esta simulação, pode-se observar que os gases de combustão possuem uma energia de 271,6 MW. Esta energia é a energia que os gases exaustos carregam e que pode ser trocada com as zonas de radiação e convecção de fornos e caldeiras.



# SIMULAÇÃO DE PROCESSOS

OUTRAS FUNÇÕES

## Simulação de processos – Controller/adjust



Na seção de Logical Ops, está disponível a opção de Controller Block. Essa função é responsável por manipular uma variável de entrada, fazendo que um resultado alcance um resultado desejado.

Basta clicar e arrastar.

## Simulação de processos – Controller/adjust

The screenshot displays the 'Object Editors' window for a controller named 'ADJ-008'. The 'Properties' tab is active, showing the following configuration:

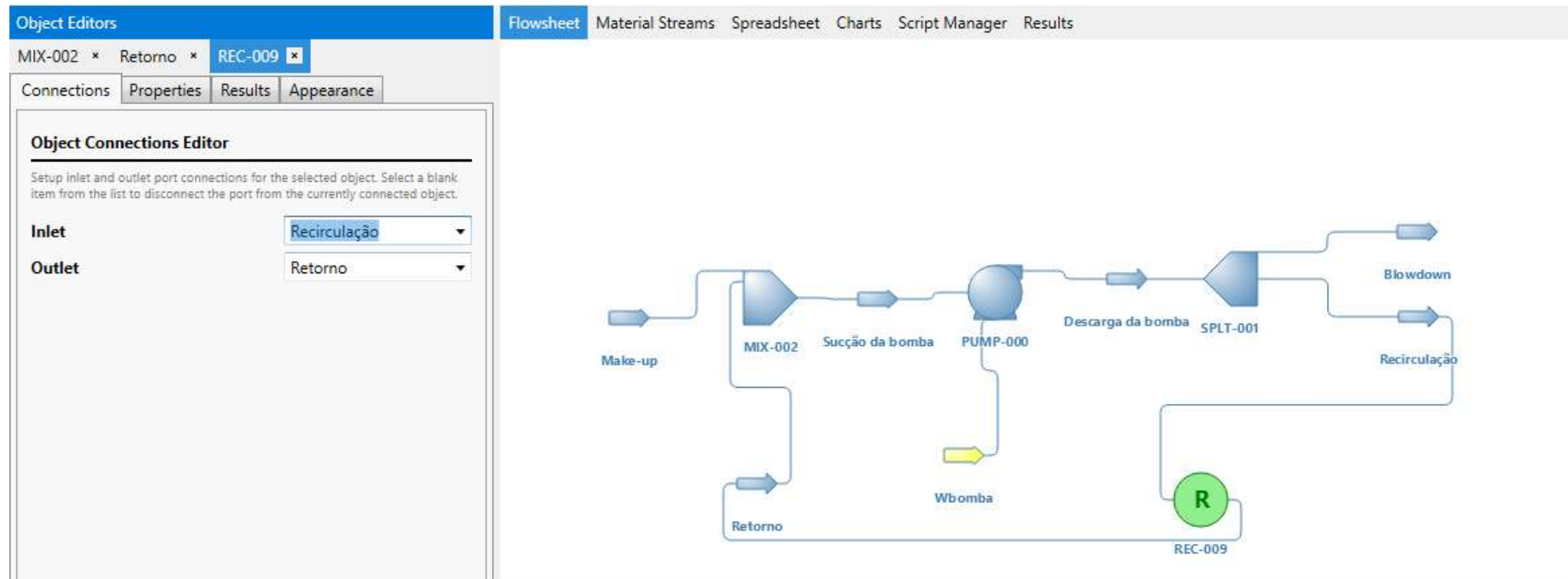
- Object Details:** Status: Active; Name: ADJ-008.
- Manipulated Object:** Ar (Air); Manipulated Property: Mass Flow. Current Value: 391033 kg/h.
- Controlled Object:** Gases de combustão (Combustion Gases); Controlled Property: Molar Fraction (Mixture)/Oxygen. Current Value: 0,014922.
- Referenced Object:** Use Referenced Object is checked. When a Reference Object is used, the Adjust/Controller block will change the Manipulated Variable so the Controlled Variable matches the Referenced value plus/minus the defined Set-Point/Offset.
- Referenced Object:** (Empty dropdown).
- Referenced Property:** (Empty dropdown).
- Controller Parameters:** Set-Point/Offset: 0,015.  Run with the Simultaneous Adjust Solver.

The background shows a process flow diagram with a mixer (MIX-003) receiving 'Ar' and 'Combustível' (Fuel). The output is 'Carga do reator' (Reactor Load), which goes to a reactor (CR-000). The reactor also receives 'Energia' (Energy). The reactor outputs 'Gases de combustão' (Combustion Gases) and 'Líquido' (Liquid). A controller block (A) labeled 'ADJ-008' is connected to the 'Ar' stream, indicating it controls the air flow rate.

Para configurar, por exemplo, a vazão mínima de ar para alcançar um excesso de oxigênio de 1,5% na saída dos gases (caso de otimização):

- Manipulated object: corrente de ar.
- Manipulated Property: Mass Flow.
- Controlled Object: Corrente de gases de combustão.
- Controlled property: Molar fraction (mixture)/Oxygen.
- Set-point: 0,015.
- Clicar em Run with The Simultaneous Adjust Solver.
- Feito. A vazão mínima é de 391 t/h.

## Simulação de processos – Recycle



O recycle é utilizado como estratégia de convergência, quando há necessidade de circulação de determinada corrente a jusante do processo para uma operação unitária a montante. Por exemplo, na simulação de uma vazão de circulação de bomba, como mostra a figura a seguir. A lógica do bloco apenas converge primeiro a simulação de maneira linear e depois calcula a circulação.

## Simulação de processos – Specification



Na seção de Logical Ops, está disponível a opção de Specification Block. O objetivo é de definir um resultado de uma determinada variável com base em uma expressão conhecida. Ao longo do curso, iremos identificar exemplos para esta função.

Basta clicar e arrastar.

# Bibliografia

1. Beggs, H.D; Brill, J.P. A study of two-phase flow in inclined pipes, **Journal of Petroleum Technologies**. V.25, p.607-617, 1973.
2. CARLSON, E. C., “Don’t gamble with physical properties for simulations”, **Chemical Engineering Progress**, out/1996.
3. **DWSIM** - Open Source Chemical Process Simulator. User Guide. Version 5.8, update 7, 2020.
4. **IAPWS** - The International Association for the Properties of Water and Steam. Disponível em: <http://www.iapws.org>. Acessado em abril de 2020.
5. Lockhart, R.; Martinelli, R. Proposed correlation of data for isothermal two-phase, two-component flow in pipe, **Chemical Engineering Programming**, v.45, p.39-48, 1949.
6. Kister, H. Z. Can We Believe the Simulation Results? CEP Magazine, AIChE 2002.
7. Nevers, N.; Seader, J.D. Helping students develop as critical attitude towards chemical process calculations, **Chemical Engineering Education**, 1992.
8. Petalas, N.; Aziz, K. A mechanistic model for multiphase flow in pipes, **Journal of Canadian Petroleum Technologies**, v.39, 2000.



# Bibliografia

9. **Process Utilities.** The Excel Add-in for Chemical Engineers. Developed by Burk Engineering LLC. Disponível em <https://www.processutilities.com>. Acessado em abril de 2020.
10. SMITH, J. M.; VAN NESS, H.; ABBOTT, M. **Introduction to Chemical Engineering Thermodynamics.** 7<sup>th</sup> ed. Mcgraw-Hill, 2005.

**BOM TRABALHO!**

