

Simulação de Processos da Indústria Química

Aula 0 - Introdução

Prof. Galo A.C. Le Roux

Objetivo do Curso

- Utilizar um **simulador** comercial de processos químicos;
- selecionar uma metodologia de **cálculo termodinâmico**;
- avaliar adequadamente os resultados de um **cálculo de equilíbrio**;
- **especificar** corretamente equipamentos e processos para a simulação em um simulador comercial
- usar especificações de processo e **reciclos** na especificação de um processo químico;
- utilizar **diferentes** simuladores comerciais de processo;
- Desenvolver simulações de processos químicos **complexos** completos

Programação do Curso

| | Data G1 / G2 | Docentes | Atividade |
|----|-------------------------|-----------------|---|
| 1 | 31/08 e 03/09 | GACLR | Introdução, instruções para instalação e Tutorial |
| 2 | 14 e 17/09 | GACLR | Seleção e validação de modelos termodinâmicos |
| 3 | 21 e 24/09 | GACLR | Equipamentos Simples – trocadores - Flash |
| 4 | 28/09 e 01/10 | GACLR | Reatores |
| 5 | 05 e 08/10 | GACLR | Trabalho longo Reatores |
| 6 | 19 e 22/10 | GACLR | Colunas de destilação |
| 7 | 26 e 29/10 | GACLR | Especificações em colunas |
| 8 | 09 e 12/11 | GACLR | Convergência e reciclo |
| 9 | 16 e 19/11 | GACLR | Construção de Fluxogramas Complexos |
| 10 | 23 e 26/11 | GACLR | Aplicações em Projetos – trabalho longo |
| 11 | 30/11 e 03/12 | ASVJ | IISE |
| 12 | 07 e 10/12 | ASVJ | IISE |
| 13 | 14/12 | GACLR | Avaliação Final |

Outline

- Introdução - Motivação
- Processo Químico
- Panorama
- Graus de Liberdade: conceito fundamental
- Construção de um fluxograma

Introdução - Motivação

Desenvolver Processos

Modificar Processos

Melhorar a operação de processos existentes

Mais seguro, mais eficiente, mais produtivo, mais econômico, menos poluente

SEM TER QUE FAZER MUITOS
EXPERIMENTOS

SEM PERTURBAR A PLANTA

Introdução - Motivação

COMO?

reproduzindo as relações entre as variáveis em um processo real ou hipotético através de um programa de computador

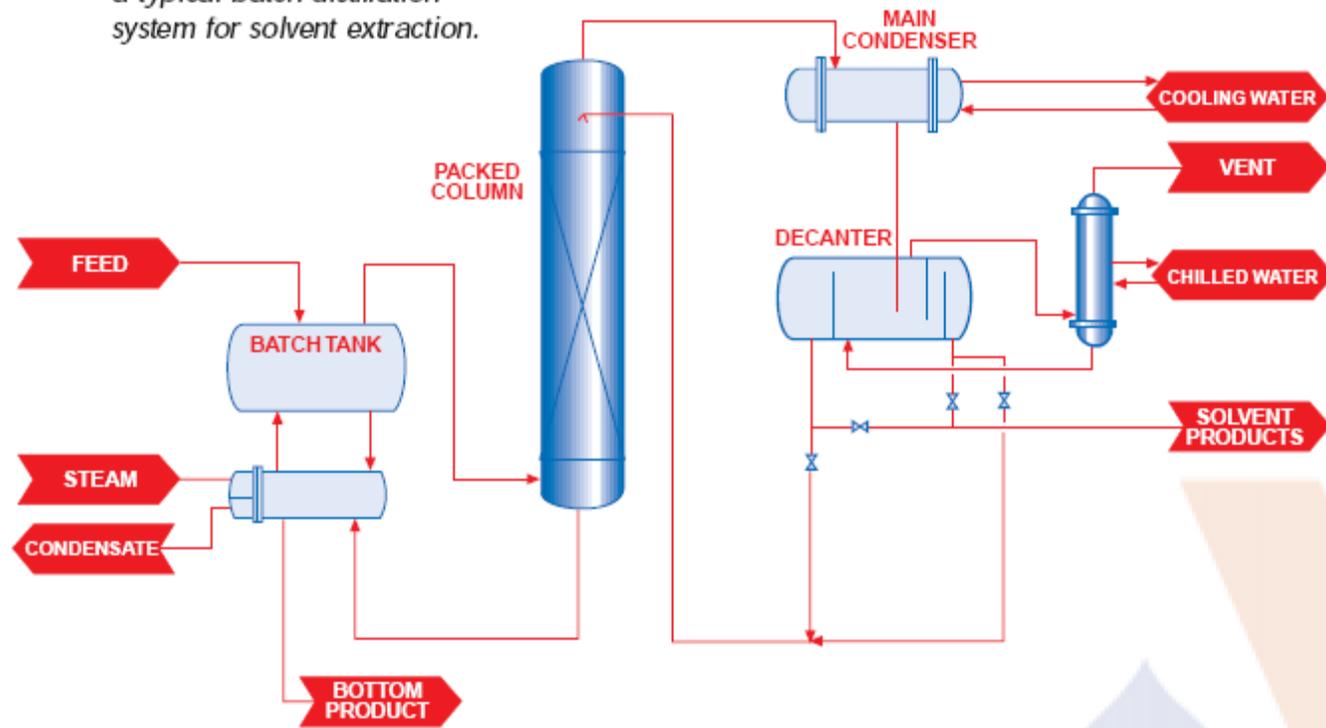
Processo Químico



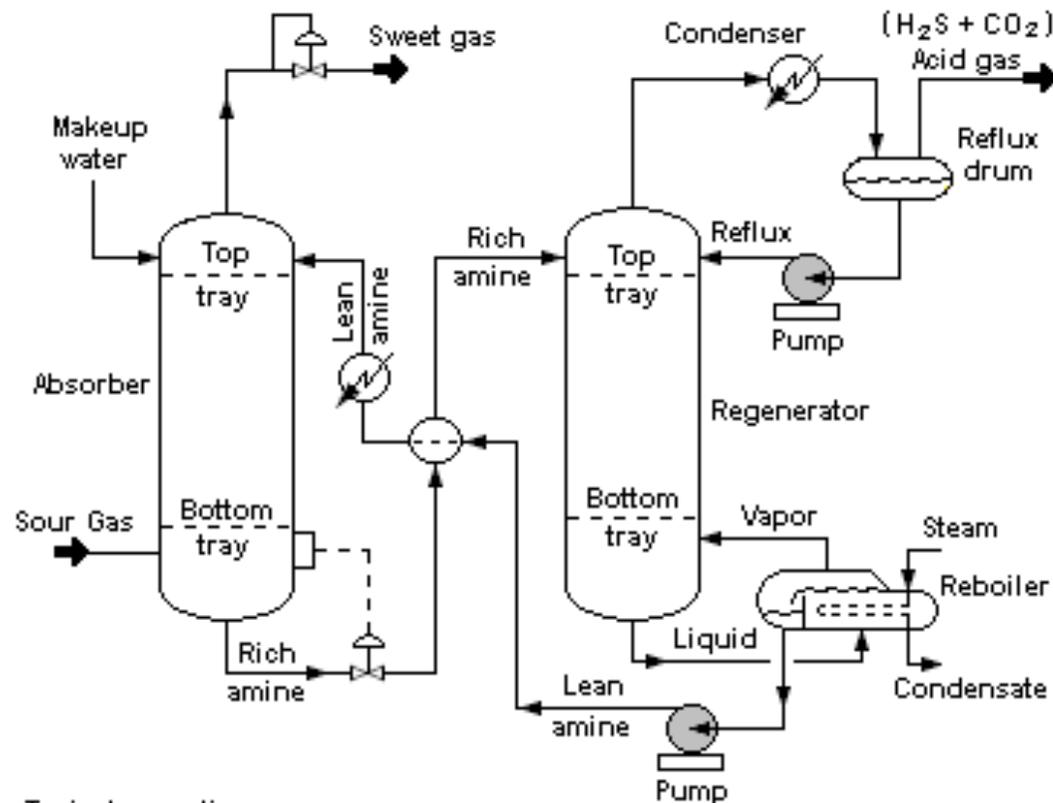
Figure 13. Batch distillation system.

Processo Químico

Figure 14. Flow schematic of a typical batch distillation system for solvent extraction.



Processo Químico



Typical operating ranges

Absorber : 35 to 50 °C and 5 to 205 atm of absolute pressure

Regenerator : 115 to 126 °C and 1.4 to 1.7 atm of absolute pressure
at tower bottom

Processo Químico - PFD

| | | | | | | | | | | | | | |
|--------------------|----------------------------|-------------------|-----------------------------|----------------------|---------------------------|-------------------|-------------------|-------------------------|----------------|-----------------|-----------------|-----------------|----------------|
| E-101 | H-101 | R-101 | E-102 | V-101 | C-101/102 | E-103 | E-104 | E-105 | E-106 | E-107 | E-108 | E-109 | E-110 |
| SMR Preheater | SMR Preheater | SMR Micro-reactor | SMR Effluent Cooler | Pressure Separator | Staged Syngas Compressors | Interstage Cooler | Reactor Preheater | Reactor Effluent Cooler | Recycle Heater | Tower Preheater | Tower Preheater | Tower Condenser | Tower Reboiler |
| C-103 | R-102 | V-102 | T-101 | V-103 | | | | | | | | | |
| Recycle Compressor | Syngas to Methanol Reactor | Syngas Separator | Methanol Purification Tower | Methanol Reflux Drum | | | | | | | | | |

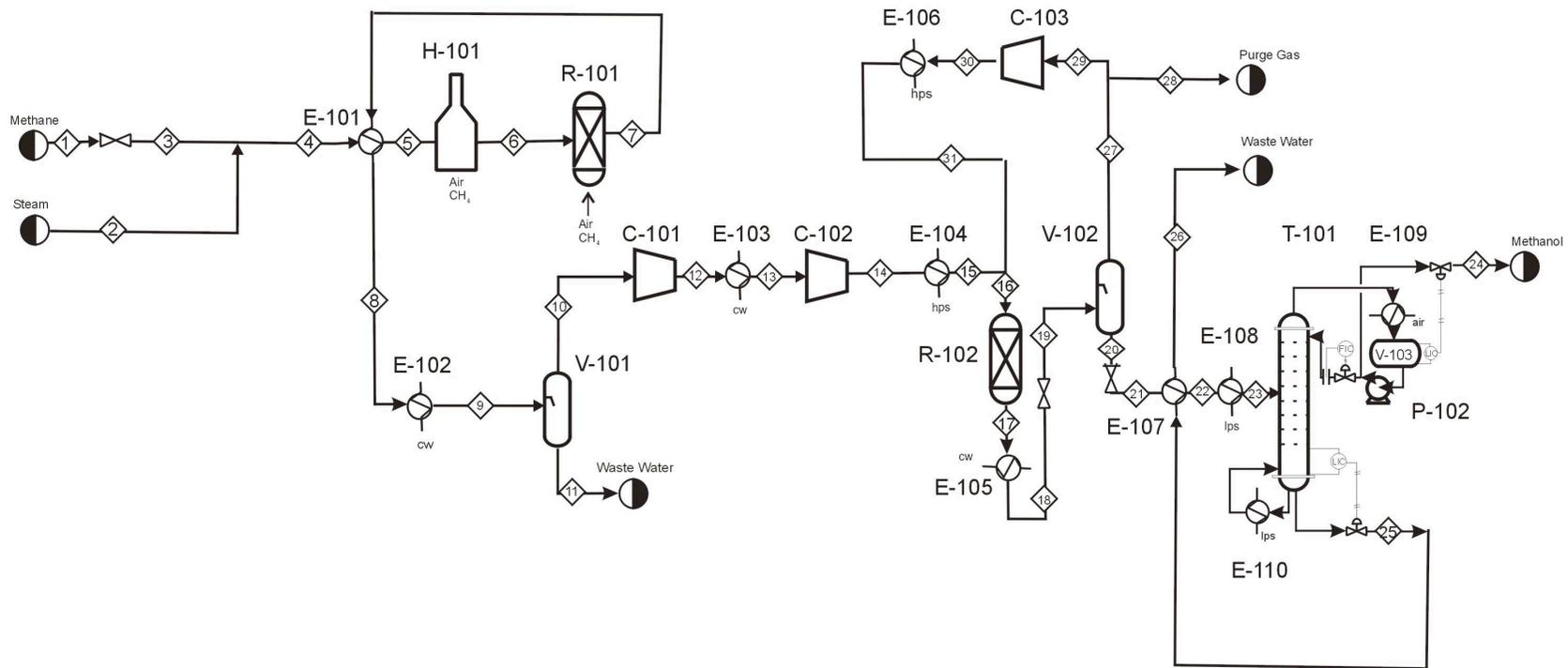
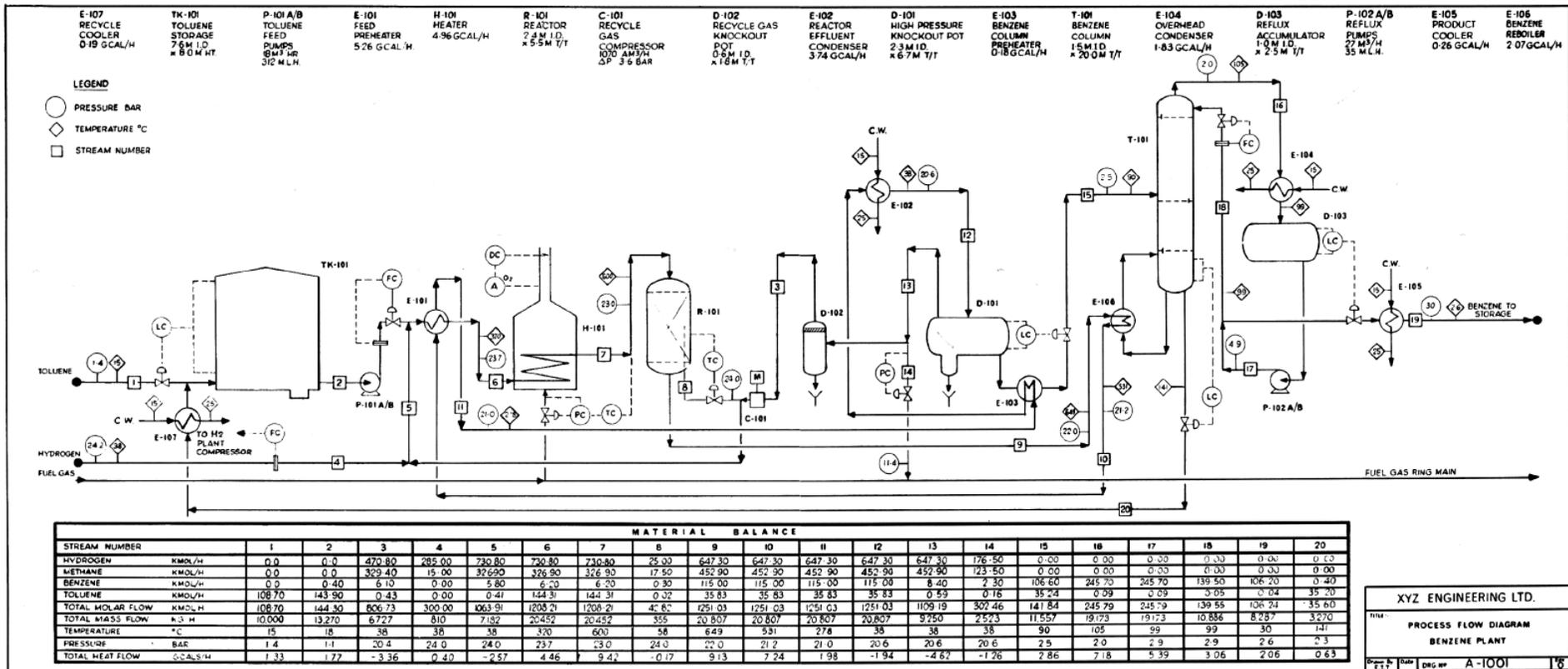


Figure 5: Process Flow Diagram for Unit 100 - Methane Reforming to Methanol



Process Flow Diagram



Fluxograma de Engenharia - P&I

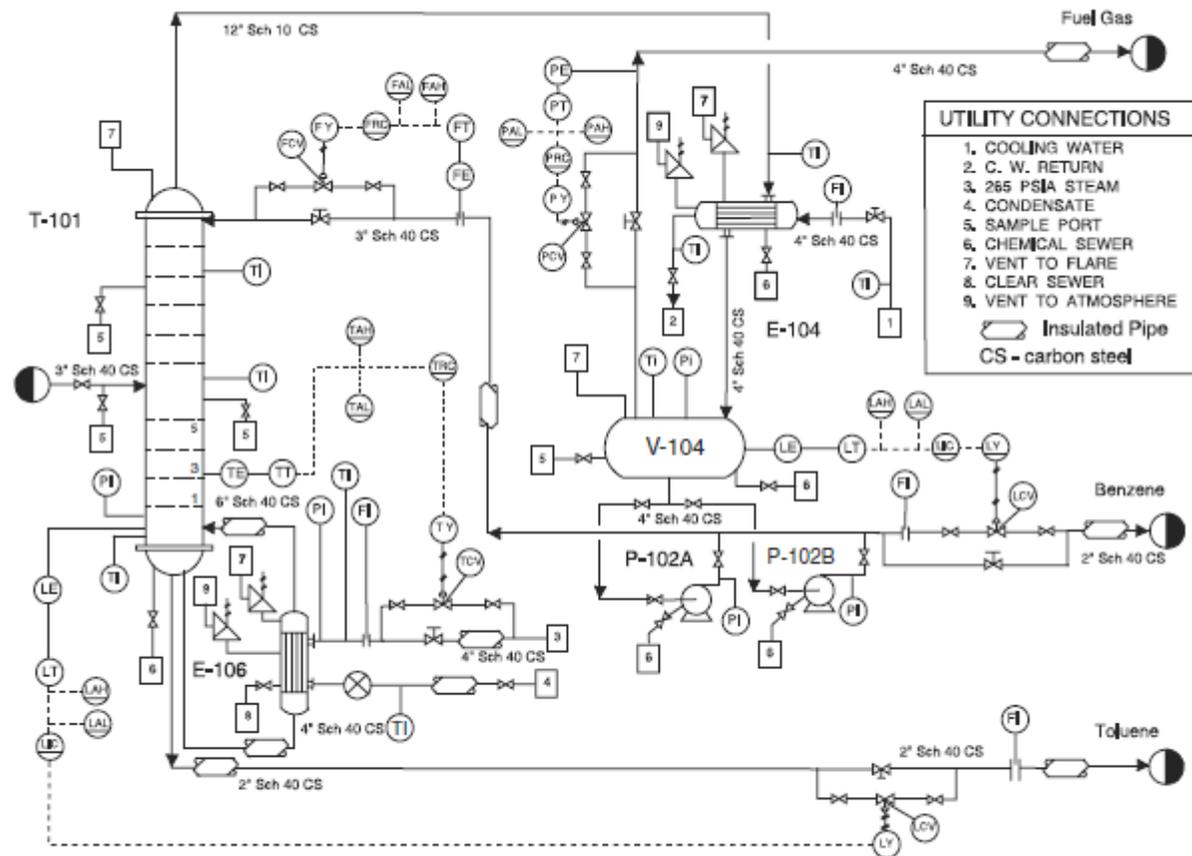
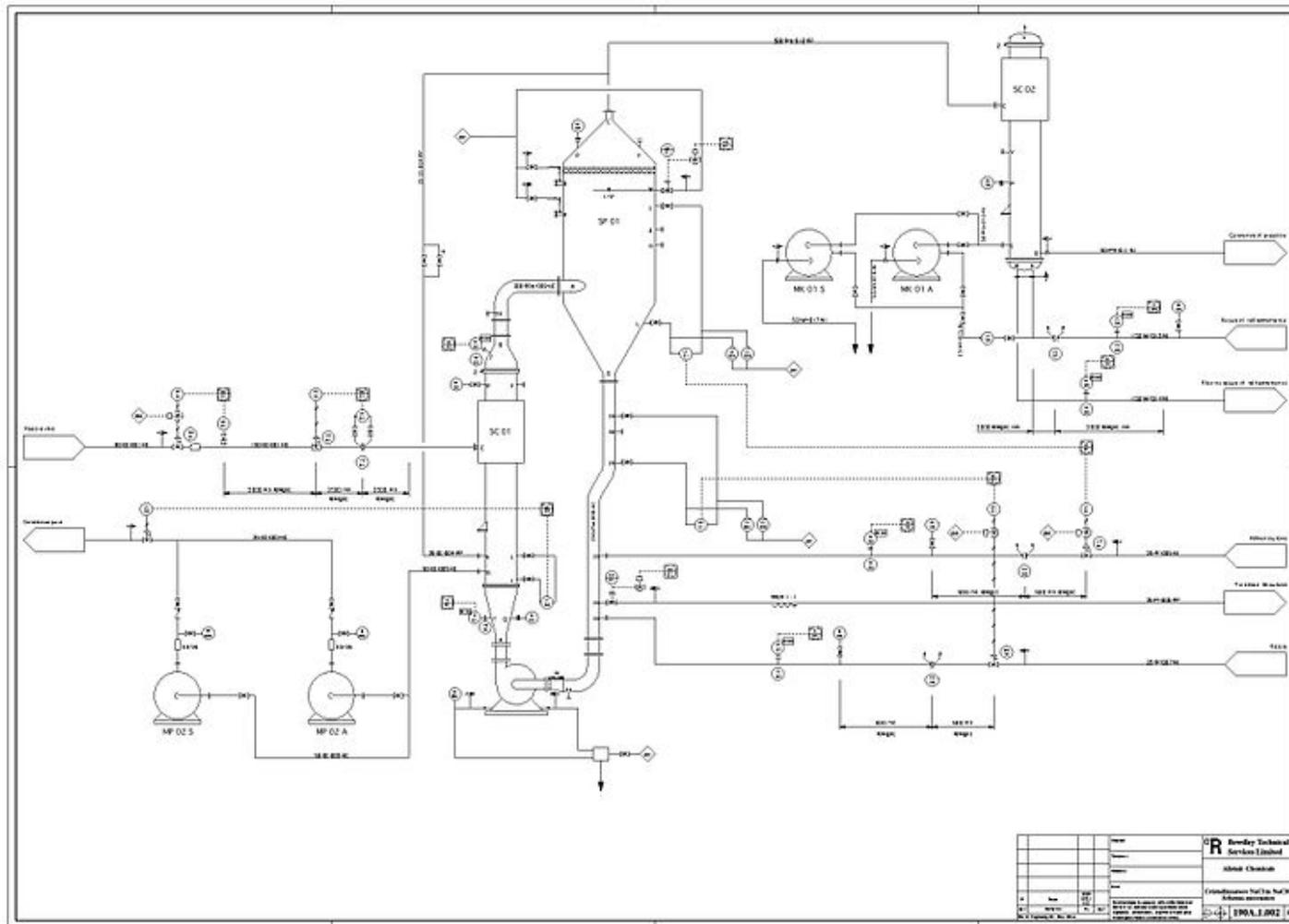
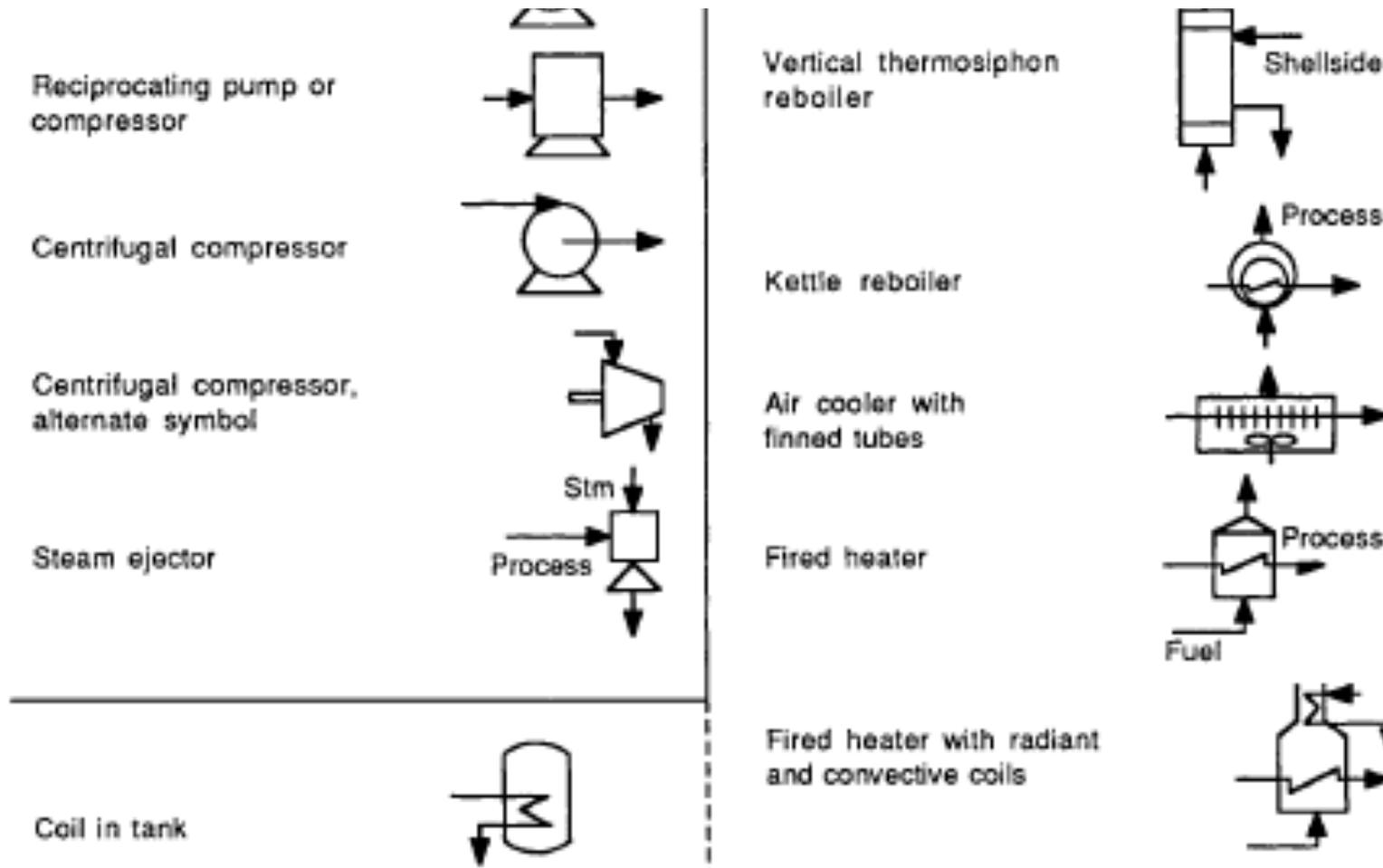


Figure 1.7 Piping and Instrumentation Diagram for Benzene Distillation (adapted from Kauffman, D., *Flow Sheets and Diagrams*, AIChE Modular Instruction, Series G: Design of Equipment, series editor J. Beckman, AIChE, New York, 1986, vol. 1, Chapter G.1.5, AIChE copyright © 1986 AIChE, all rights reserved)

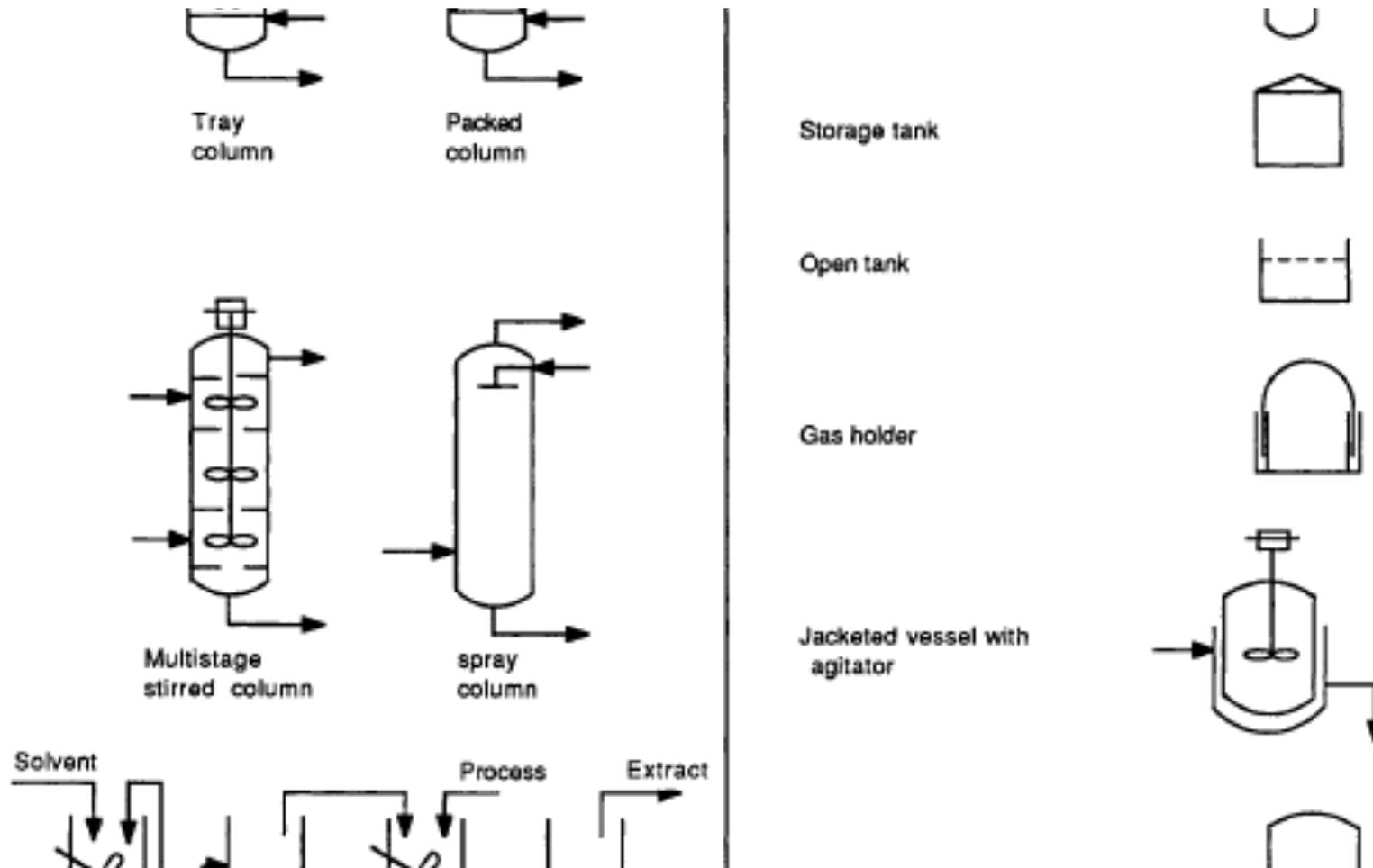
P&ID – *piping and instrumentation diagram*



Componentes dos fluxogramas



Componentes dos fluxogramas



Processo Químico

- Estado estacionário
- Operações Unitárias
- Correntes materiais
- Correntes de informação (controle)
- Correntes de energia (?)
- Pressões: descrição simplificada.
 - Menos realista
 - Menos detalhista

Panorama

- Duas arquiteturas principais:
 - Modular sequencial
 - Orientada a Equações

Panorama

- Modular sequencial
 - Resolve módulo por módulo
 - A informação flui no mesmo sentido que a massa
 - Gera vários níveis de convergência
- Orientado a Equações
 - Resolve globalmente
 - O problema converge todo ao mesmo tempo
 - Problemas com o chute inicial

Panorama – Principais Programas

- Modular sequencial
 - Aspen (Aspentech)
 - Hysys (Aspentech) – Unisim (Honeywell)
 - Pro II (AVEVA - Schneider)
 - ProSimPlus (Prosim S.A.)
 - Coco (Cape-open cape-open)
 - ChemCad
 - DWSIM

Panorama

- Orientada a Equações
 - SpeedUp (morreu)
 - gPROMS (PSE Enterprise)
 - EMSO (VRTech)
 - ACM (Aspentech)
 - IISE (VRTech)

Fundamentos

- Variáveis:
 - De processo
 - De projeto
- Equações:
 - Fundamentais
 - Constitutivas

Fundamentos

- $GL = 0$, sistema especificado
- $GL > 0$ variáveis devem ser especificadas
- $GL < 0$ sistema superespecificado

Fundamentos

- $GL = 0$, sistema especificado - simulação
- $GL > 0$ variáveis devem ser especificadas – projeto, otimização
- $GL < 0$ sistema superespecificado – ajuste de modelos, validação

Fundamentos

- Regra das fases de Gibbs

$$F = NC - NP + 2$$

- Estabelece graus de liberdade para variáveis intensivas, em sistemas em equilíbrios

Fundamentos

- Corrente material
 - G.L. = NC + 2

| | | | | | | | | | | | | | |
|--------------------|----------------------------|-------------------|-----------------------------|----------------------|---------------------------|-------------------|-------------------|-------------------------|----------------|-----------------|-----------------|-----------------|----------------|
| E-101 | H-101 | R-101 | E-102 | V-101 | C-101/102 | E-103 | E-104 | E-105 | E-106 | E-107 | E-108 | E-109 | E-110 |
| SMR Preheater | SMR Preheater | SMR Micro-reactor | SMR Effluent Cooler | Pressure Separator | Staged Syngas Compressors | Interstage Cooler | Reactor Preheater | Reactor Effluent Cooler | Recycle Heater | Tower Preheater | Tower Preheater | Tower Condenser | Tower Reboiler |
| C-103 | R-102 | V-102 | T-101 | V-103 | | | | | | | | | |
| Recycle Compressor | Syngas to Methanol Reactor | Syngas Separator | Methanol Purification Tower | Methanol Reflux Drum | | | | | | | | | |

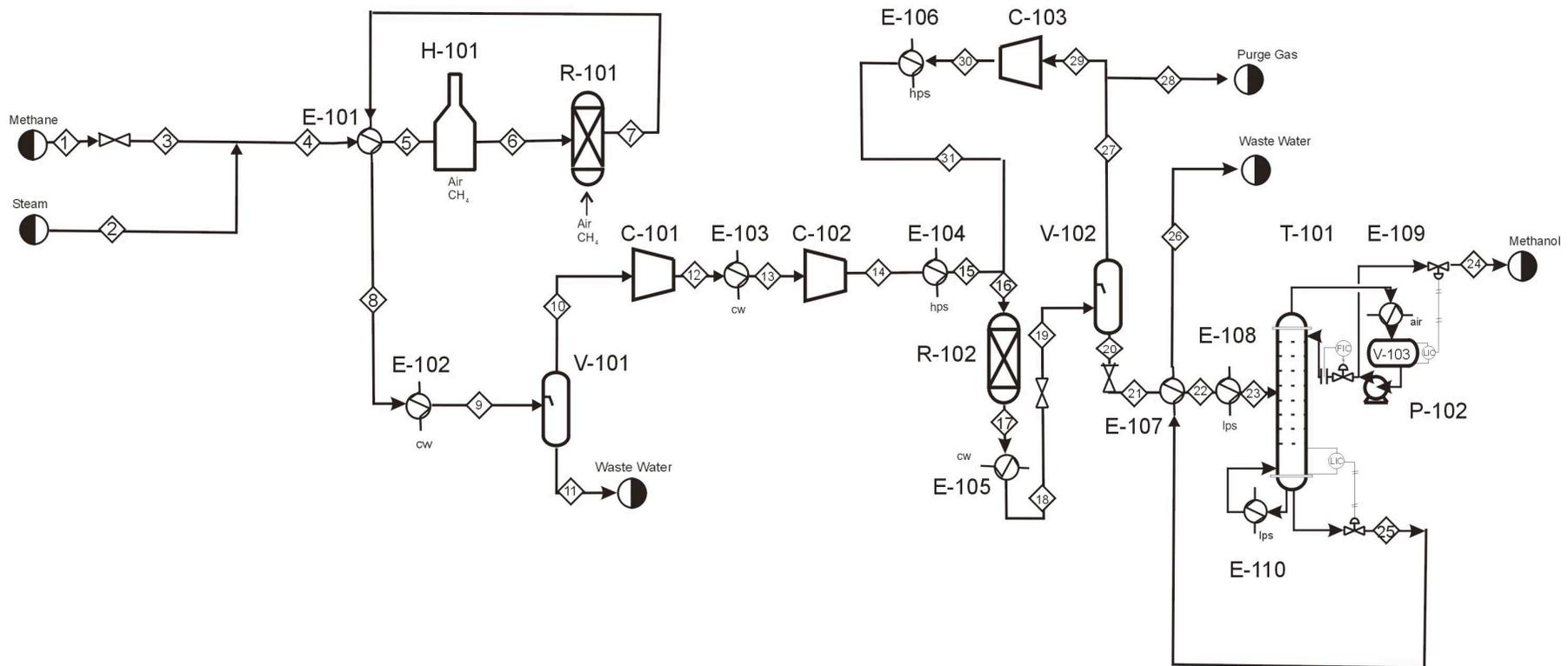
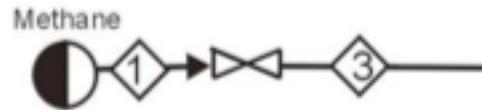


Figure 5: Process Flow Diagram for Unit 100 - Methane Reforming to Methanol

Equipamentos

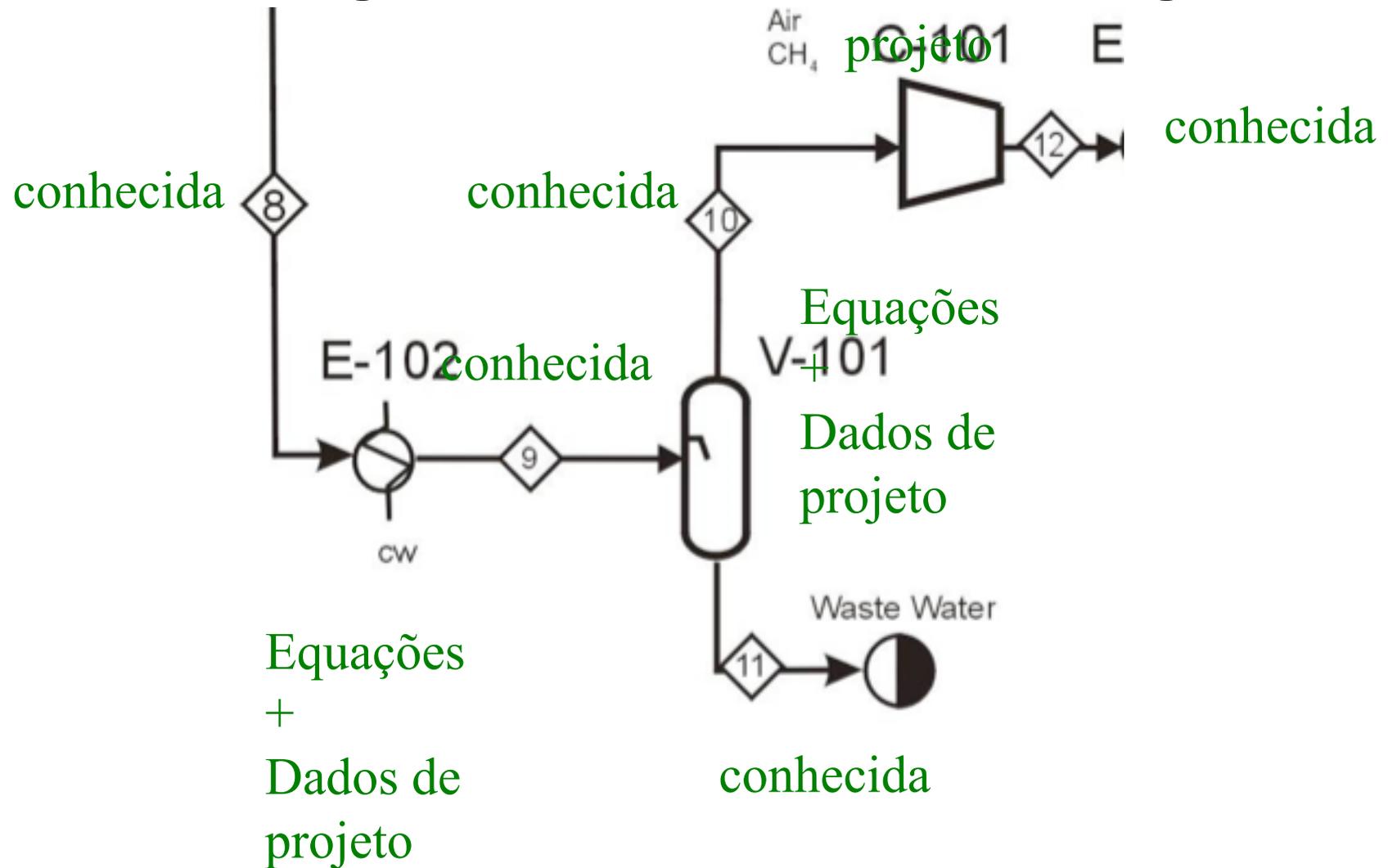
- Sabe-se resolver um flash, um reator CSTR, um trocador de calor
- Melhor que “um”, sabe-se resolver equipamentos de diferentes tipos
- Com diferentes graus de complexidade

Uma parte



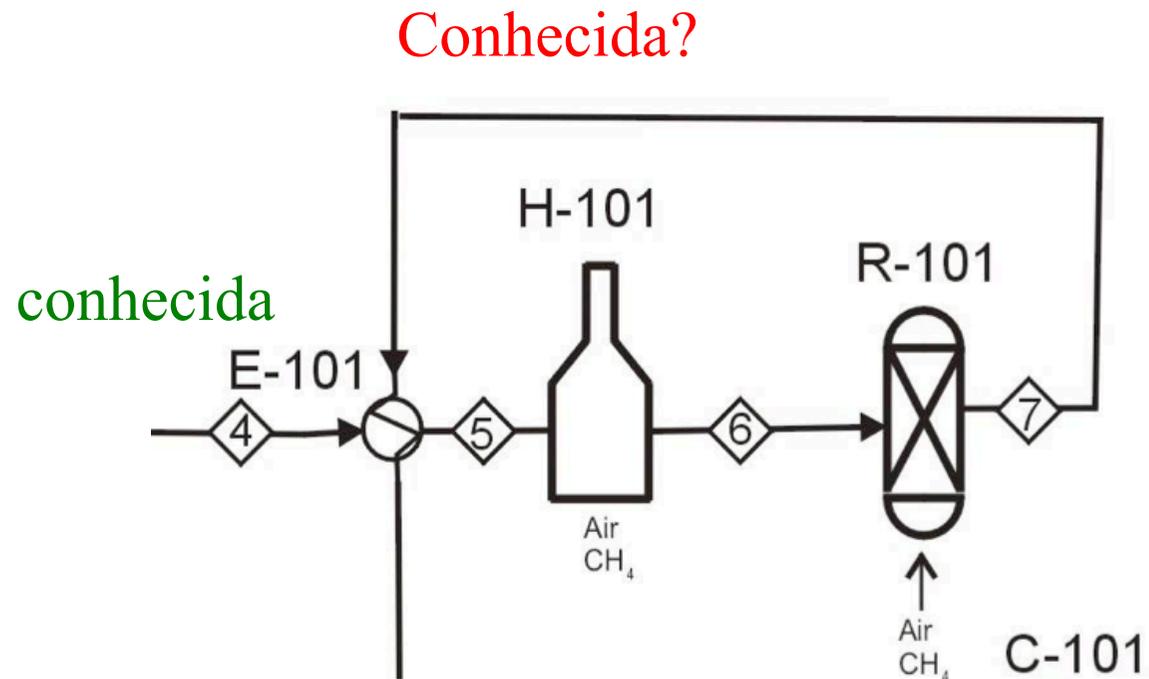
- Variáveis:
 - Conhecidas
 - Desconhecidas
- Variáveis:
 - De processo
 - De projeto
- Equações:
 - Fundamentais
 - Constitutivas

Construção de uma simulação



Construção de uma simulação

- Graus de Liberdade são fundamentais
- Sentido da informação



Sequencial modular

- Sem ciclo: cálculo se move de uma unidade a outra
- Com ciclo: processo de tentativa e erro (convergência)

A arquitetura Orientada a Equações

- Na arquitetura Orientada a Equações:
- A descrição pode ser modular
- A resolução é simultânea
 - Não tem entra ou sai ...
- A convergência é menos robusta

Porque é importante saber o que são os diferentes módulos?

- Complexidade dos modelos
 - quanto mais complexos mais dados de projeto.
Mais informações
- Nem todos os equipamentos estão previstos em um simulador
- Nem toda complexidade é possível
- Em um simulador sequencial, a heurística de resolução está embutida nos módulos

Resumo

- Um processo químico é naturalmente descrito através de módulos
- Existem duas arquiteturas principais de simuladores:
 - Modular sequencial
 - Orientada a Equações

Resumo

- A noção de graus de liberdade é extremamente importante
- A complexidade da descrição das unidades em um simulador comercial é limitada

Etapas importantes

- Preencher o termo de compromisso em:
 - <https://forms.gle/EygTxLD1tCwEN6x3A>
- Instalar o software Aspen Plus. O link será enviado àqueles que assinarem o termo de compromisso