

# Sistemas de Informação aplicados à Engenharia de Processos Químicos

# Comparação de simuladores de processo: Aspen vs. HYSYS

# Alexandre Duarte Cortes Júlio

# Dissertação para obtenção do Grau de Mestre em Engenharia Química

# Júri

Presidente:	João Carlos Moura Bordado
Orientadores:	Filipe José da Cunha Monteiro Gama Freire
	João Carlos Moura Bordado
Vogal:	Henrique Aníbal Santos de Matos

## Novembro 2008

#### Resumo

A Aspentech faculta desde 2007 às universidades, um único pacote de software fechado, reunindo dois simuladores de processos: Aspen Plus/Dynamics e HYSYS. Neste trabalho decidiu-se realizar uma comparação, verificando a integração entre estes e os restantes produtos do pacote.

Tomou-se como caso de estudo um processo de síntese de amoníaco, cuja simulação detalhada em Aspen/HYSYS consta no CD multimédia "Using Process Simulators in Chemical Engineering" de Seider, Seader & Lewin. As duas simulações, em estado estacionário, recorrem a diferentes modelos termodinâmicos e a diferentes bancos de dados. Tomando como referência um processo de síntese de NH<sub>3</sub> da "Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry", constatou-se que nenhum dos modelos termodinâmicos descreve adequadamente a condensação do amoníaco. Um novo modelo termodinâmico sobre Aspen Plus, publicado em Abril/2008 pela Aspentech, demonstrou boa concordância com a referência. Mas só a próxima versão (V7.0) permitirá implementar esse mesmo modelo termodinâmico no HYSYS.

Ao produzir uma simulação dinâmica, o *Dynamics Assistant* do HYSYS facilita a especificação inicial do modelo. O *Pressure Checker* do Aspen Plus só indica os problemas que têm de ser contornados pelo utilizador. Os factores (tempo simulação)/(tempo de cronómetro) das simulações dinâmicas são resumidos no quadro seguinte:

Frequência de	Tempo simulação/Tempo de cronómetro	
actualização	HYSYS	Aspen Dynamics
1 min⁻¹	6,0	93,9
1 s⁻¹	4,5	2,2

O HYSYS é inadequado para a simulação de processos envolvendo polímeros e mais limitado do que o Aspen Plus/Dynamics, para operações envolvendo sólidos ou destilação reactiva. Para outros casos, o HYSYS é o simulador mais adequado.

Palavras chave: ASPEN, HYSYS, DINÂMICA, SIMULADOR, SIMULAÇÃO, PROCESSOS QUÍMICOS

#### Abstract

Since 2007, Aspentech provides to universities, a single closed software package, joining two process simulators: Aspen Plus/Dynamics and HYSYS. This work provides a comparison, analysing the integration between them and other products included into the software package.

As a case study, it was selected "Ammonia Converter Design", with available tutorials for both Aspen Plus and HYSYS, from multimedia CD "Using Process Simulators in Chemical Engineering" by Seider, Seader & Lewin. Each of these steady-state simulations has its own thermodynamic model and specific database. Using, for reference, an ammonia synthesis process published on "Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry", it has been realized that none of the thermodynamic models simulate accurately the ammonia condensation. A new Aspen Plus thermodynamic model, published by AspenTech in April/2008, provided good agreement with the reference. But only the next version (V7.0) will allow the implementation of the same thermodynamic model over HYSYS.

To run a dynamic simulation, HYSYS *Dynamics Assistant* helps to make the initial spec of the model. Instead, Aspen Plus *Pressure Checker* only pin-points problems, that must be all resolved by the user. Time factors (simulation time)/(real-time) for the dynamic simulations are resumed in the following table:

Update frequency	Simulation time/Real-time	
	HYSYS	Aspen Dynamics
1 min <sup>-1</sup>	6,0	93,9
1 s <sup>-1</sup>	4,5	2,2

HYSYS does not simulate processes involving polymers and it is more limited than Aspen Plus/Dynamics, for solid operations or reactive distillation. For other cases, HYSYS is more adequate.

Keywords: ASPEN, HYSYS, DYNAMIC, SIMULATION, SIMULATOR, CHEMICAL PROCESSES

# Índice

Índice de figuras 1
Introdução 3
Trabalhar com software da AspenTech5
Migração de um caso de Aspen Plus para HYSYS11
Modelos de Propriedades16
Simulação em estado estacionário21
Simulação Dinâmica no HYSYS26
Simulação Dinâmica no Aspen Plus/Dynamics34
Análise dos recursos computacionais exigidos por cada simulador
Protocolo de arranque da simulação, com linhas cheias de azoto
Conclusão
Referências
Anexo A: Lista alfabética de casos implementados nos simuladores de processos 52
Anexo B: Codificação do ficheiro de input do caso de produção de amoníaco 56
Anexo C: Nova nomenclatura dos produtos AspenTech Process Engineering V7 60
Anexo D: Cuidados a ter na simulação de Processos Químicos reais

# Índice de figuras

Figura 1: Software usado por engenheiros químicos de 4 universidades norte-americanas, que	
terminaram o curso entre 1998 e 2002.	3
Figura 2: Desenvolvimento dos simuladores de processos dinâmicos	4
Figura 3: Conteúdo do disco de documentação da AspenTech	5
Figura 4: Janela intermédia do dvdBrowser	6
Figura 5: No browser predefinido surge o conteúdo navegável	6
Figura 6: Ecrã inicial da enciclopédia multimédia	7
Figura 7: Passo da apresentação multimédia para Aspen Plus	8
Figura 8: Caso de produção de amoníaco, da enciclopédia multimédia, em Aspen Plus	9
Figura 9: Caso de produção de amoníaco, da enciclopédia multimédia, em HYSYS1	0
Figura 10: Aspen Plus: exportação para Input file1	1
Figura 11: Resultado do caso de produção de amoníaco, importado no HYSYS1	2
Figura 12: Aspen Plus: forma expedita de gerar ficheiro de Input1	2
Figura 13: HYSYS: caso de separação flash, importado do Aspen Plus14	4
Figura 14: HYSYS: especificação da fracção de vapor, na corrente FEED14	4
Figura 15: HYSYS: especificação do modelo de propriedades1	5
Figura 16: Processo de síntese de amoníaco que serviu para verificar os modelos de	
propriedades1	6
Figura 17: Alterações do modelo termodinâmico RKS-BM para o amoníaco no Aspen Plus 1	7
Figura 18: Introdução de parâmetros binários no Aspen Plus1	7
Figura 19: Alterações do modelo termodinâmico do amoníaco, no HYSYS1	8
Figura 20: Introdução de parâmetros binários no HYSYS1	8
Figura 21: Aspen Plus: como visualizar os dados termodinâmicos dos componentes1	9
Figura 22: Aspen Plus: tabelas com os vários parâmetros dos modelos termodinâmicos que	
descrevem os componentes2	0
Figura 23: Métodos para cálculo de perdas de carga no leito de um PFR, no Aspen Plus 2	1
Figura 24: Especificação de um leito catalítico, no Aspen Plus2	1
Figura 25: Condensadores no modelo do Aspen Plus2	2
Figura 26: Condensadores no modelo do HYSYS2	2
Figura 27: Reciclagem no Aspen Plus	4
Figura 28: Reciclagem no HYSYS2	4
Figura 29: HYSYS Dynamics Assistant2	6
Figura 30: Definição das perdas de carga, no HYSYS Dynamics Assistant2	7
Figura 31: Adição do esquema de cores para as correntes do flowsheet do HYSYS2	7
Figura 32: Correntes que definem a pressão e o caudal, antes de aplicar as propostas do	
Dynamics Assistant	8
Figura 33: Correntes que definem a pressão e o caudal, depois de aplicar as propostas do	
Dynamics Assistant	8

Figura 34: Activação do atributo "Check Valve" numa válvula do HYSYS	29
Figura 35: Activação do aviso de inversão de fluxo num T de derivação do HYSYS	30
Figura 36: No HYSYS, o bloco do separador gás-líquido tem opção para adicionar o	
controlador do nível de líquido, através do botão [Add/Configure Level Controller]	31
Figura 37: No HYSYS, o bloco de um separador gás-líquido tem opção para configurar o	
permutador de calor integrado	31
Figura 38: Flowsheet do HYSYS com o controlo implementado	32
Figura 39: Iniciar uma simulação dinâmica no Aspen Plus	34
Figura 40: Especificação da componente dinâmica do PFR, no Aspen Plus	34
Figura 41: Especificação dinâmica para um misturador, no Aspen Plus	35
Figura 42: Modelos de transferência de calor, disponíveis para o separador gás-líquido	35
Figura 43: Especificação da geometria de um separador gás-líquido, no Aspen Plus	36
Figura 44: Configuração de uma válvula de gás, no Aspen Plus	36
Figura 45: Flowsheet quase pronto para migração para Aspen Dynamics	37
Figura 46: A falta de uma válvula entre PFR-101 e PFR-102 impede a migração "Pressure	
driven" do modelo de Aspen Plus para Aspen Dynamics	38
Figura 47: Apresentação inicial do processo no Aspen Dynamics	38
Figura 48: Apresentação final do processo no Aspen Dynamics	39
Figura 49: Selecção do modelo de fluxo reversível, no Aspen Dynamics	40
Figura 50: Página de configuração de uma válvula, no Aspen Dynamics	40
Figura 51: Apresentação final da simulação no Aspen Dynamics	41
Figura 52: Captura da disposição dos objectos, para posterior recuperação4	41
Figura 53: Recuperação da disposição dos objectos, no Aspen Dynamics	42
Figura 54: Ocupação de memória de vários processos, para simulações em estado	
estacionário	43
Figura 55: Reconciliação de todas as correntes da simulação, no Aspen Plus	44
Figura 56: Ocupação de memória de vários processos, para simulações dinâmicas4	44
Figura 57: Criação de Snapshots no HYSYS.	46
Figura 58: Simulação de arranque em HYSYS, com linhas cheias de azoto	47

### Introdução

Os novos engenheiros químicos passam mais de metade do tempo de trabalho à frente de um computador. Mas o que é que fazem? Que aplicações usam no trabalho, para além do e-mail, Internet, processamento de texto e preparação de apresentações em PowerPoint?

Em primeiro lugar [Fig. 1], utilizam uma folha de cálculo, normalmente o Excel. Há mais de uma década que continua a ser a ferramenta mais versátil, onde é feita análise numérica, análise de dados, balanço de massa e avaliação económica. Verifiquei, entre 2003 e 2005, a importância do Excel numa fábrica de semicondutores, onde é utilizado para planear toda a produção, distribuindo a cada área o respectivo plano de produção semanal. Os engenheiros (de produção industrial), responsáveis pela programação (VBA: Visual Basic for Applications) das Macros Excel, eram conhecidos como "Excel Engineers".

Em segundo lugar, consultam bases de dados. Na mesma empresa, conheci duas gerações de ferramentas locais para gestão de produção, baseadas, respectivamente em Oracle® e Microsoft® SQL. Para aplicações menos abrangentes (e com menos transacções), cada departamento construía a sua base de dados Access.





Mesmo nos EUA, cada aplicação técnica é usada por uma minoria dos engenheiros químicos. Destaca-se, ainda assim, o simulador de processos. Segundo um inquérito [1], os dois simuladores da Aspentech, Aspen Plus e HYSYS dominam o mercado. O DEQB-IST tem licenciado o Aspen Plus desde 1997. Em Setembro de 2007, o DEQB passou a ter licença para HYSYS, pois a partir desse ano, o pacote fechado, licenciado às universidades, passou a incluir ambos os simuladores. Pode-se finalmente conduzir uma comparação, verificando a integração entre si e os restantes produtos do pacote.

Segundo a Aspentech [2], o HYSYS é o simulador de processos com maior acolhimento nas indústrias de refinação de petróleo e de processamento de gás natural. Para este sucesso contribuiu a facilidade de utilização do simulador, em particular a forma expedita com que um modelo de estado estacionário pode ser colocado em modo dinâmico. É ainda de salientar que a simulação dinâmica no HYSYS foi criada há mais tempo do que o seu concorrente, Aspen Dynamics (Figura 2).



Figura 2: Desenvolvimento dos simuladores de processos dinâmicos. Estão assinalados, com uma moldura, os produtos disponíveis no DEQB-IST. [3]

## Trabalhar com software da AspenTech

O *portfolio* da empresa, publicado em <u>http://www.aspentech.com/products</u>, teve um incremento importante em 2002, com a aquisição da HyproTech, na altura seu maior concorrente. Desde então, seja pela convergência, venda ou descontinuar de alguns títulos, a lista tem-se simplificado.

No passado, o licenciamento académico era mais flexível, permitindo a selecção por produto, depois só em pacotes fechados (ainda em 2006 o DEQB teve também o pacote de "Advanced Process Control") e actualmente resume-se ao pacote fechado "University Package for Process Engineering", descrito em:

http://www.aspentech.com/corporate/university/products.cfm

Para utilização restrita e individual, pode-se ainda verificar as disponibilidades nas redes de "peer to peer".

O portal de suporte da AspenTech, <u>http://support.aspentech.com</u> só está disponível às duas ou três pessoas designadas no contrato da licença académica, pelo que não pode ser o primeiro meio para pesquisa de informação. Os colaboradores do LTI a finalizar Eng. Química, eu ou o Prof. Filipe Freire poderemos providenciar acesso ao portal. No entanto, por experiência própria, é pouco provável que se obtenha uma resposta útil, caso se tenha de colocar a questão num dos fóruns de discussão. São poucos os participantes oriundos do meio académico e os consultores da AspenTech só suportam os utilizadores do meio empresarial.

No conjunto de discos que compõe o software está o DVD de documentação, que inclui uma aplicação de navegação, que dispensa instalação:



Figura 3: Conteúdo do disco de documentação da AspenTech. O dvdBrowser permite explorar a documentação dos programas, sem instalação.

💸 AspenTech Installation Bro	wser			
The AspenTech Installation Browser allows you to install aspenDNE applications and/or individual AspenTech products. To get started, select the path for a particular group of products or aspenDNE application and click Install. You will be prompted later for specific product and component selections.				
operational industry	Install aspenONE Documentation			
value but pess 5 Of	aspenONE Documentation DVD	You can perform the following actions:		
Help		Browse - View aspenONE 2006 online help and PDF documentation in a browser.		
License Configuration Support Services Contact Information		Note: Microsoft Internet Explorer may block elements necessary to navigate this DVD. Select Allow Blocked Content from the Information Bar to allow the documentation browser to run.		
AspenTech Home Aspen Update Center		Install - Install aspenONE 2006 PDF documentation on this computer.		
		Exit - Close the aspenONE 2006 Documentation DVD Setup.		
aspenNE		Browse Install Exit		

Figura 4: Janela intermédia do dvdBrowser. Escolhe-se o botão "Browse..."

💋 AspenTech 2006 Documentation - Mi	crosoft Internet Explorer	_ 🗆 ×
G 🕤 👻 🌈 D:\Aspen 2006 Docs\aspe	nONE2006Start.htm	<b>P</b> -
😤 🍪 🖉 AspenTech 2006 Documentati	on 🚺 - 🗟 - 🖶 - 🔂 Page -	🗿 T <u>o</u> ols 👻 »
entech aspenONE 2006	Documentation	
Home DVD All Prod	ucts Installation Guides Release Notes	۲
I DVD		
Aspen Supply Chain		
Aspen Fuels Marketing     Aspen Supply and Distribution	Aspenintsts	
Aspen Engineering	Release Notes	
<ul> <li>Aspen Engineering</li> <li>Documentation</li> </ul>	Aspen Engineering 2006 Known Issues	
Aspen ACOL	Aspen Engineering 2006 What's New	
Aspen Adsim	Manuals	
<ul> <li>Aspen Aerotran</li> <li>Aspen APLE</li> </ul>	Aspen Engineering 2006 Installation Guide	
Aspen Batch Plus	Aspen HYSYS User's Guide	
<ul> <li>Aspen BatchCAD</li> <li>Aspen BatchSep</li> </ul>	Aspen HYSYS Operations Guide	
Aspen Case Analysis	Aspen HYSYS Customization Guide	
<ul> <li>Aspen CatRef</li> <li>Aspen Chromatography</li> </ul>	Aspen HYSYS Simulation Basis	
Aspen Custom Modeler	Aspen HYSYS Tutorials And Applications	
Aspen Dynamics     Aspen ECC	Aspen HYSYS Dynamic Modeling Guide	
<ul> <li>Aspen FIHR</li> </ul>	Aspen HYSYS OLI Interface Reference Guide	
Aspen FLARENET	Aspen COMThermo Reference Guide	
Aspen Hetran	Help	
Aspen HTFS	Aspen HVSVS Cetting Started	
Aspen HTFS+     Aspen HX-Net	Aspen HYSYS Optime Help	
Aspen Hydrocracker	Aspentitions online help	
Aspen Hydrotreater	Aspen Hudraulias Defenses Quide Unla	
Aspentitata .	Aspen Hydraulics Reference Guide Help	<b></b>
	🛛 🔰 🚽 🚽 🖓 My Computer 🔤 🤻	100% 🝷 🅼

Figura 5: No browser predefinido surge o conteúdo navegável. Para além de manuais em PDF, estão também disponíveis os ficheiros de ajuda contextual, usados pela aplicação.

Note-se, na figura 5 (Aspen HYSYS), que há um manual de "Tutorials And Applications". No Aspen Plus a mesma função é assegurada pelos manuais "Getting Started...", no Polymers Plus, pelo "Examples and Applications". Mesmo não existindo um documento PDF que introduza o programa que se pretende conhecer, vale a pena verificar se o ficheiro de ajuda contém um capítulo de introdução.

Salvaguardando a antiguidade do Aspen Plus 11, do HYSYS 3.0.1, ou do MATLAB 5.3 (® MathWorks), o CD (enciclopédia) multimédia "Using Process Simulators in Chemical Engineering", que acompanha o livro "Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis, and Evaluation" [4] é uma óptima ferramenta introdutória às versões mais recentes destes simuladores, ou para relembrar alguma função nela descrita. Note-se que o MATLAB é uma ferramenta de análise numérica e modelação matemática, com uso bastante mais abrangente do que a simulação de processos químicos.



Figura 6: Ecrã inicial da enciclopédia multimédia. A actualização 2.2 é disponibilizada pelos autores, em http://www.seas.upenn.edu/~dlewin/Upgrade\_2004.htm

Os exemplos passo-a-passo têm locução em inglês, bem sincronizada com o posicionamento do rato e destaque de campos editáveis. Cada exemplo é mais facilmente acompanhado, caso se possa recorrer a dois monitores: um com a apresentação multimédia, outro com o programa em estudo.

using Process Simulators in Chemic	al Engineering	_ 🗆 🗙	
🚾 ASPEN PLUS - Tower O	ptimization		
📃 File Edit View Data Tools Ru	n Plot Library Window Help		
FHTAAADN	440		
Specifications		AII 🔽 >> 🛄 🏙 🙀	
E Setup	Global Flowsheet Sections Referen	ced	
Properties	Property methods & models	Property method: CHA0-SEA 💌	
Property Methods      Fination	Base method: CHAO-SEA	Modify property models	
	Henry components:	Vapor EOS: ESRK 💌	
Data	Petroleum calculation options	Data set: 1	
Analysis Prop-Sets	Free-water method: STEAM-TA	Data set: 1	
		Liquid enthalpy: HLMX13 💌	
Electric Blocks	Chemistry ID:	Liquid volume: VLMX20	
	Use true-components	Poynting correction	
Flowsheeting Options			
EO Configuration	All process types.		
4 🔟 🧿 🛞 🗡		< > 📂	

Figura 7: Passo da apresentação multimédia para Aspen Plus, num exemplo de destilação: fraccionamento de parafinas. É aqui destacado o modelo de propriedades seleccionado.

Para além dos exemplos descritos nos manuais dos programas, ou no CD (enciclopédia) multimédia "Using Process Simulators in Chemical Engineering" [4], destacam-se, ainda, duas fontes de casos implementados nos simuladores de processos da AspenTech:

I) O livro "Plantwide Dynamic Simulators in Chemical Processing and Control" [5]. Sempre que possível, cada caso é implementado em Aspen Plus/Dynamics (versão 10.2.2) e HYSYS (versão 2.4.1). Tendo por objectivo a simulação dinâmica, a cinética das reacções é fornecida, embora os dados sejam arbitrados em alguns casos. Não há um compromisso de utilizar os mesmos bancos de dados e modelos de propriedades físicas nos dois simuladores, nem a tentativa de migrar uma simulação de Aspen para HYSYS (ou vice-versa). São destacadas as diferenças e dificuldades sentidas na implementação de cada modelo, em cada um dos simuladores. II) Aspen PEP. É a implementação de relatórios Process Economics Program da SRI Consulting, sobre Aspen Plus. O produto foi descontinuado, tendo os últimos desenvolvimentos ocorrido na versão 11.1. Os modelos são estritamente para estado estacionário, sendo pontualmente fornecidos dados cinéticos. Tendo-se recuperado os relatórios em PDF e os ficheiros .bkp do Aspen 11.1, verificou-se que há modelos que não convergem, mesmo na versão original do programa.

No anexo A listam-se os casos implementados nos simuladores de processo. Para o desenvolvimento desta tese interessam casos com cinética disponível, implementados sobre Aspen Plus, mas não necessariamente sobre HYSYS. Foi escolhido a síntese de amoníaco, por ser um processo bem conhecido. Adoptou-se, em particular, a implementação desenvolvida na enciclopédia multimédia [4], o tutorial de "Amonnia Converter Design". Neste CD são disponibilizados os ficheiros para estado estacionário, quer para Aspen Plus, quer para HYSYS.



Figura 8: Caso de produção de amoníaco, da enciclopédia multimédia [4], implementado em Aspen Plus.

Tal como está descrito no CD [4], este caso base inclui 3 reactores pistão adiabáticos, em série, com adição de reagentes ao 2º e 3º reactores. Existe ainda integração energética entre a saída do 3º reactor e a alimentação ao 1º reactor.

No presente trabalho, o caso será complementado com a separação do amoníaco e reciclagem de reagentes, ilustrando a diferente forma como é implementada uma reciclagem, nos dois simuladores.



Figura 9: Caso de produção de amoníaco, da enciclopédia multimédia [4], implementado em HYSYS.

## Migração de um caso de Aspen Plus para HYSYS

Tendo em conta a experiência de utilização de Aspen Plus no DEQB, a migração de ficheiros entre o Aspen Plus e o HYSYS é uma função desejável, no sentido de aproveitar o trabalho já realizado. Contudo, mesmo passados 6 anos com o HYSYS no *portfolio* da AspenTech, não há mecanismo para abrir um ficheiro de HYSYS no Aspen Plus. O inverso é possível, embora com muitas limitações e muito pouca documentação disponível.



Para ilustrar estas limitações, utiliza-se o caso do amoníaco, já apresentado na figura 8:

Figura 10: Exportação para *Input file*. A janela de "Export" aparece no menu "File" ou premindo Ctrl+E.

O ficheiro .inp gerado (Fig. 10) pode ser aberto pelo HYSYS, no menu "File->Open Case..." ou premindo Ctrl+O. O resultado é apresentado na figura 11. Destaca-se logo o facto de desaparecerem os reactores, tal como a descrição das próprias reacções. Toda esta informação está, no entanto, presente na codificação do ficheiro, como se pode observar no anexo B. O HYSYS importa ficheiros com a extensão \*.inp, quer do Aspen Plus, quer do PRO II<sup>\*</sup>, mas o resultado da importação é o mesmo, independentemente da origem do ficheiro.

Mesmo com um caso bastante simples, como uma separação *flash* de uma mistura de n-pentano e n-hexano, a importação não é perfeita. Tomando este mesmo exemplo da enciclopédia multimédia [4], gerou-se o ficheiro \*.inp a partir do \*.bkp (Fig. 12). A codificação é apresentada adiante, na página 13.

PRO II (® INVENSYS) é outro simulador de processos em estado estacionário, bastante usado nas indústrias de refinação de petróleo e processamento de gás natural.

💐 nh3_convertor_opt.inp - Aspen HYSYS 2006.5 - aspenONE	
Eile Edit Simulation Flowsheet PFD Iools Window Help	
🗋 🙆 🖬 - 👯 🚍 🌫 🚧 🐨 🐨 🖓 🖆 🖆	ent: (Main) de: Steady State
珍 PFD - (Main)	
H M ⊠ H M ∕ A ⁄ ŵ 🖁 💿 🖸	)efault Colour Scheme 💌
	S4 S-1B MDX-101 S5
Optional Info : S1 - Unknown Compositions <ul> <li>S4:::Flow Unknown Compositions</li> <li>Optional Info : S1 - Unknown Temperature</li> <li>Optional Info : S1 - Unknown Flowsure</li> <li>Optional Info : S1 - Unknown Compositions</li> <li>Optional Info : CS-1B - Unknown Compositions</li> <li>Optional Info : CS-1B - Unknown Flowsure</li> <li>Optional Info : CS-1B - Unknown Compositions</li> <li>Optional Info : SS - Unknown Temperature</li> </ul> <ul> <li>Optional Info : SS - Unknown Temperature</li> </ul> <ul> <li>Optional Info : SS - Unknown Temperature</li> </ul> <ul> <li>Optional Info : SS - Unknown Temperature</li> </ul> <ul< td=""><td>: 2.00000 tion was not read. : 2.000000</td></ul<>	: 2.00000 tion was not read. : 2.000000
Holding	

Figura 11: Resultado do caso de produção de amoníaco, produzido no Aspen Plus e importado no HYSYS. Compare-se com a figura 9.

🗁 New Folder				
File Edit View Favorites Tools Help				
📀 Back 🔹 💮 🖌 🏂 🔎 Search 🎼 Folders 🚦	•			
Address 🛅 D:\Migrate Aspen to Hysys\Flash\New Folder	Address 🛅 D:\Migrate Aspen to Hysys\Flash\New Folder 💿 🕞 Go			
File and Folder Tasks *	Backup File			
<ul> <li>Rename this file</li> <li>Move this file</li> <li>Copy this file</li> <li>Opy this file</li> <li>Publish this file to the Web</li> <li>E-mail this file</li> <li>Delete this file</li> <li>Delete this file</li> </ul> Other Places <ul> <li>Flash</li> <li>My Documents</li> <li>Shared Documents</li> <li>My Computer</li> <li>My Network Places</li> </ul>	Open         Generate Input         Open with Aspen Plus 2006.5         Restore         Extract files         Extract Here         Test archive         Add to archive         Copy to Creative ZEN         Open With         Image: Second for viruses         Image: WinZip         Send To         Cut			
Details ¥	Copy Create Shortcut			
	Delete Rename			
Generate Input	Properties			

Figura 12: Forma expedita de gerar ficheiro de *Input*. Este método pode ser usado para vários ficheiros em simultâneo. Analogamente, é útil para correr simulações (a partir de ficheiros \*.inp) ou gerar backups, a partir de ficheiros \*.apw ou \*.inp.

, Input Summary created by Aspen Plus Rel. 21.0 at 22:08:27 Wed Jul 16, 2008 ;Directory D:\Migrate Aspen to Hysys\Flash Filename D:\Migrate Aspen to Hysys\Flash\flash.inp ;

DYNAMICS DYNAMICS RESULTS=ON

TITLE 'C5-C6 flash'

**IN-UNITS ENG** 

DEF-STREAMS CONVEN ALL

DATABANKS PURE93 / AQUEOUS / SOLIDS / INORGANIC / & NOASPENPCD

PROP-SOURCES PURE93 / AQUEOUS / SOLIDS / INORGANIC

COMPONENTS C5H12-1 C5H12-1 / C6H14-1 C6H14-1

FLOWSHEET BLOCK F1 IN=FEED OUT=VAP LIQ

**PROPERTIES IDEAL** 

USER-PROPS DRUSR2 1 2 3

STREAM FEED SUBSTREAM MIXED TEMP=130 PRES=73.5 MOLE-FLOW=1 MOLE-FRAC C5H12-1 .5 / C6H14-1 .5

BLOCK F1 FLASH2 PARAM TEMP=120 PRES=13.23

EO-CONV-OPTI

#### STREAM-REPOR MOLEFLOW

, , , , ,

Nesta codificação, note-se que o sistema de unidades inglesas, designado no Aspen como ENG, não é reconhecido no HYSYS. Este facto causa que a informação física da corrente de alimentação (temperatura, pressão e caudal molar) seja ignorada. Se no ficheiro flash.inp ENG for substituído pela designação correspondente do HYSYS, FIELD, a corrente de alimentação passa a estar especificada. Já no HYSYS, é ainda necessário explicitar para a corrente FEED a fracção de vapor 0 (figura 14). Com o sistema de unidades SI não há este problema: tem a mesma designação nos dois simuladores.

O HYSYS não incorpora o modelo de propriedades **IDEAL** (lei de Raoult e lei de Henry). Mas qualquer que seja o modelo de propriedades definido no Aspen, no ficheiro importado no HYSYS surge a equação de estado de Peng-Robinson.

🔊 flash_worked.inp - Aspen HY5Y5 2006.5 - aspenONE	
<u>File Edit Simulation Flowsheet PFD Tools Window H</u> elp	
📄 👌 🔒 🕂 🏥 🛤 隆 💳 ኡ 🔗 🐵 硘 👗 Environment: (Main) Mode: Steady State	
🕸 PFD - (Main)	<u>- □ ×</u> ∸
🕂 🕅 🗗 🔛 🛤 🔎 A 🌮 🏶 📱 🛛 🧐 Default Colour Schem	• 💌
FEED F1(BAL)	
Optional Info : VAP Unknown Compositions Optional Info : VAP Unknown Temperature Optional Info : VAP Unknown Pressure Optional Info : VAP Unknown Flow Rate Optional Info : VAP Not Solved	
Holding A	

Figura 13: Caso de separação *flash,* importado do Aspen Plus. A especificação de unidades foi previamente alterada de ENG para FIELD.

🔊 flas	sh_worked.inp - Aspe	n HYSYS 2006.5 - aspenONE		
<u>File</u>	Edit Simulation Flowsh	eet <u>T</u> ools <u>W</u> indow <u>H</u> elp		
<u></u>	👌 🔒   🗗 📼 🕯	• [ἒ   <mark>=</mark> ≫  ॐ   ∞  ∞	P 🛛 🕹 Environment: (Main) Mode: Steady State	
Û PF	FEED		<u> </u>	₋□×∸
H		Charles Marrie	pur Schem	
	Worksheet	Stream Name	FEED	
	- Conditions	Vapour / Phase Fraction	100.0	
	- Properties	Temperature [F]	130,0	
	Composition	Pressure [psia]	73,50	
	- K Value	Molar Flow [Ibmole/hr]	000,1	
	- User Variables	Mass Flow [Ib/hr]	<empty></empty>	
	Notes	Std Ideal Liq Vol Flow [barrel/day]	<empty></empty>	
	Cost Parameters	Molar Enthalpy [Btu/Ibmole]	<empty></empty>	
	Cust raidilieteis	Molar Entropy [Btu/Ibmole-F]	<empty></empty>	
		Heat Flow [Btu/hr]	<empty></empty>	
		Liq Vol Flow @Std Cond [barrel/day]	<empty></empty>	
		Fluid Package	Basis-1 *	
		, i	· · · · · ·	
<u> </u>				
Option	al Info : VAP Unknown	Compositions		
Option	al Info : VAP Unknown			
Uption	al Infol : VAP Unknown	Pressure		
Option	al Info : VAP Onknown al Info : VAP Not Solve	ad The second seco		
- Copylon				
	Holding All St	ream Properties		

Figura 14: Especificação da fracção de vapor, na corrente FEED. Para chegar a este quadro, basta fazer duplo clique sobre a corrente. Para ver o modelo de propriedades (figura seguinte), carrega-se no botão mais à direita, com forma de Erlenmeyer.

S flash_worked.inp - Aspen HYSYS 2006.5 - aspenONE File Edit Basis Tools Window Help	
🗋 🚵 🔒 👗 🐮 🗢	Environment: Basis Mode: Steady State
🤾 Simulation Basis Manager	<u>^</u>
Current Fluid Packages           Basis-1         NC: 2         PP: Peng-Robinson         View           Add         Delete         Copy	Flowsheet - Fluid Pkg Associations Flowsheet Fluid Pkg To Use (Main) Basis-1
<u>Import</u> Export	Default Fluid Pkg Basis-1 Fluid Pkg for New Sub-FlowSheets © Use Default Fluid Pkg © Use Parent's Fluid Pkg
Components Fluid Pkgs Hypotheticals Oil Manager	Reactions Component Maps User Properti
Holding	<b>A!V</b>

Figura 15: Especificação do modelo de propriedades. Para alterar o modelo, selecciona-se o botão [<u>V</u>iew...]. Para voltar ao ecrã do PFD (figura 13), carrega-se na seta que aponta para a esquerda, logo por baixo do <u>H</u>elp.

Por fim, note-se a definição de componentes, apresentados anteriormente a verde no texto de codificação flash.inp. A nomenclatura usada, fórmula química com um índice, é pouco robusta, pois poderá resultar na substituição por outros isómeros. O banco de dados do HYSYS é diferente e inclui menos componentes do que o banco de dados do Aspen.

Para migrar um caso com alguma complexidade de Aspen para HYSYS, verificou-se que é mais rápido construir o caso de raiz, usando o mesmo sistema de unidades. Recomenda-se que a lista de componentes esteja na mesma ordem. Desta forma pode-se recorrer a operações de cópia e colagem entre os dois programas, para definir a composição (ou o caudal) de cada corrente de alimentação.

#### Modelos de Propriedades

Para comparar os dois simuladores de processos, é conveniente usar o mesmo modelo termodinâmico de propriedades. Para a sua verificação, recorreu-se a um exemplo sobre a síntese do amoníaco, descrito na "Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry" [6]. Na figura 16, reproduz-se o processo que serve de referência.

Vol. A 2

Ammonia 201



**Figure 41.** Example of a synthesis loop for  $1150 \text{ t/day NH}_3$  a) Waste heat recovery; b) Heat exchanger; c) Water cooling; d) No. 1 separator; e) Purge; f) Refrigerated cooling; g) No. 2 separator; h) Converter

The operating conditions at the individual points of the recycle loop are given in the Table

No.	Flow rate,	t,	<i>p</i> ,	Gas con	position, m	ol%			Production
	m³(STP)/h	°C	MPa	N <sub>2</sub>	H <sub>2</sub>	CH4	Ar	NH <sub>3</sub>	of NH <sub>3</sub> liquid, t/h
1	246 000	150	31.5	21.07	61.21	10.97	4.03	2.72	
2	273750	150	31.5						
3	456950	351	30.6	17.9	49.01	12.48	4.58	16.84	
4		170	30.4						
5		69	30.3						
6	400 650	20		19.43	55.73	14.09	5.20	5.55	
7	4 200	20							
8	396 450	20	30.0						
9	527 750	44	32.0	20.75	60.30	10.81	3.97	4.17	
10		9	31.9						
11	519 750	-1	31.7	21.07	61.21	10.97	4.03	2.72	
12	132 060	35	2.5	24.74	74.08	0.93	0.25	0	
13	56 300	20		0.40	1.05	1.03	0.18	97.34	41.65
14	8 000	-1		0.28	0.82	0.60	0.10	98.20	5.97

Figura 16: Processo de síntese de amoníaco que serviu para verificar os modelos de propriedades. [6]

Para a validação do modelo termodinâmico de propriedades interessam particularmente as operações de separação, neste caso a condensação de amoníaco. No diagrama acima, corresponde às operações "d" e "g". Os modelos de propriedades utilizados na enciclopédia multimédia [4] (PSRK<sup>\*</sup> no Aspen Plus, SRK<sup>†</sup> no HYSYS) não reproduzem correctamente a condensação de amoníaco. Em particular, com o modelo PSRK, não há condensação de amoníaco nas condições da operação "g".

É então necessário encontrar um modelo de propriedades que descreva a condensação do amoníaco. Recentemente (Abril de 2008), a AspenTech [7] publicou um

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup> Equação de estado Predictive Soave-Redlich-Kwong

<sup>&</sup>lt;sup>†</sup> Equação de estado Soave-Redlich-Kwong

modelo de produção de amoníaco a partir de gás natural, em Aspen Plus 2006.5. Nele constam operações de refrigeração, onde o amoníaco é condensado. Para o modelo termodinâmico utilizado, RKS-BM, são fornecidos parâmetros de interacção binária entre o amoníaco e cada um dos outros componentes da mistura. Foram também alteradas algumas propriedades termodinâmicas do amoníaco. Resolveu-se o caso do amoníaco da enciclopédia multimédia [4] utilizando o modelo RKS-BM, introduzindo os parâmetros conforme as figuras 17 e 18:

NH3_prop_RKSBM.apw - Aspen Plus 2006.5 - asp	enONE - [Properties P Window Help	arameters Pure	Component NH	3 - Data Browse	
	<u>w</u> indow <u>n</u> ep				
🗸 NH3 🔽 🔁 🔀 MET 💌	(AII	- >> 📋	🖄 🕸 🕨	10 / X	
🗄 🔁 Setup	/Input				
Components					
Propercies	Fure component scale	ar parameters	I		
E Property Methods	Parameters	Units Data	Component	Component	
Estimation		36(	AMMON-01		
🕀 📆 Molecular Structure	▶ PCRKS N/	sqm 1	10503790		
🔁 🖂 Parameters	OMGRKS	1	0,2201195		
🖻 🗹 Pure Component	DHFORM J/k	(mol 1	-45900000		
			-43300000		
Binary Interaction	<u>*</u>				
ANDKIJ-1					
Electrolyte Pair					
Electrolyte Ternary					
UNIFAC Group					
UNIFAC Group Binary					
E Results					
Data					
Analysis	(alus retrieved from LICE)				
Prop-Sets	alue retrieved from USE	n.			
For Help, press F1		C:\la	y)Recycle Ammoni	ia\Aspen   N	JM Results Available //

Figura 17: Alterações do modelo termodinâmico RKS-BM para o amoníaco, no Aspen Plus. A designação do bloco *Pure Component* "NH3" não é relevante, é só uma etiqueta.

NH3_prop_RKSBM.apw - Aspen Plus 2006.5 - as         Ele Edit View Data Tools Run Plot Library         Ele Edit View Data Tools Run Plot Library         Ele Edit View Data Tools Run Plot Library	penONE - [Properties Pa Window Help	arameters Binary	Interaction RK	5KBV-1 (T-DEPE	NDENT) - Data B	
			 È	*) / X		
Setup     Components     Properties     Specifications     Property Methods     Etimation	Parameter: RKSKt     Temperature-depende	3V [ nt binary parameters	Data set: 1			
Molecular Structure     Parameters     Organization	Component i Component j	HYDRO-01 V AMMON-01 V	NITRO-01 💌	ARGON 💌	METHA-01 💌	
NH3     Binary Interaction     ANDKIJ-1	Temperature units Source	K USER	K USER	K USER	K USER	
ANDMIJ-1		0,2622665	0,2765894	0,0 0.0	0,2282545	
RKSLBV-1 RKTKIJ-1 Electrolyte Pair		0,0	0,0	0,0	0,0	
Electrolyte Ternary     UNIFAC Group     UNIFAC Group Binary			1000,000	1000,000		
Results					Search Sv	vap
Analysis Prop-Sets	Value retrieved from USEF	3. C:\lay	\Recycle Ammonia)	Aspen NU	M Results Av	vailable

Figura 18: Introdução de parâmetros binários no Aspen Plus. Os blocos apresentados são criados automaticamente, segundo o(s) modelo(s) de propriedades seleccionado(s). Para o bloco editado, RKSKBV (Redlich-Kwong-Soave "K<sub>ij</sub> Binary Values"), os parâmetros são simétricos, isto é, o parâmetro de "i" com "j" é igual ao de "j" com "i".

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup> Equação de estado Redlich-Kwong-Soave com função alfa de Boston-Mathias

No HYSYS não há o modelo de propriedades RKS-BM. No entanto, obtiveram-se bons resultados no HYSYS com o modelo SRK, depois de se ter introduzido as modificações ao modelo termodinâmico do amoníaco (parâmetros da figura 17 e procedimento da figura 19) e aos seus parâmetros binários (figura 20), com os valores usados no Aspen Plus:



Figura 19: Alterações do modelo termodinâmico do amoníaco, no HYSYS. Da esquerda para e direita e de cima para baixo. Na janela "Editing Properties[...]", "SRK Acentricity" corresponde "OMGRKS" no Aspen Plus (figura 17).

NH3_CONVERTOR_OPT_RECYCLE_PROPSET-SRK.HSC - #	spen HYSYS 200	6.5 - aspenON	E					_ 🗆 X
Elle Edit Basis Tools Window Help						Env	vironment: Basis Mode: Steady State	
Simulation Basis Manager						×		
Current Fluid Packages	👗 Fluid Packag	e: Basis-1						
Basis-1 NC: 5 PP: SRK	Equation of Sta	ate Interaction P	arameters					1
		Hydrogen	Nitrogen	Ammonia	Argon	Methane		
<u>A</u> dd	Hydrogen		-0,00100	0,26227	0,00000	0,00010		
Delate	Nitrogen	-0,00100		0,27659	-0,00200	0,03120		
Delete	Ammonia	0,26227	0,27659		0,41045	0,22825		
Conv	Argon	0,00000	-0,00200	0,41045		0,03900		
	Methane	0,00010	0,03120	0,22825	0,03900			
Export	Treatment of Estimate H	Interaction Coef IC-HC / Set Nor	ficients Unavai HC-HC to 0.0	lable from the L (	.ibrary O Set <u>A</u> ll to 0.1	)	Reset Parameters	
Components Fluid Pkgs Hypotheticals Oil Manager	Set Up Pa	arameters Bin Name Ba	ary Coeffs	StabTest PH Property Pk	nase Order 🔤 F	lxns Tabular SRK	Notes Edit Pr	operties
		· · · ·		•			<b>▲</b>	

Figura 20: Introdução de parâmetros binários no HYSYS. Os parâmetros a vermelho fazem parte do banco de dados. Os parâmetros a azul foram introduzidos pelo utilizador e são idênticos aos parâmetros binários usados no Aspen Plus (figura 18).

A tabela seguinte mostra a composição (molar) das correntes de saída, para as duas
operações de condensação referidas no Ulmann's ("d" a 20ºC e "g" a -1ºC) [6] e simuladas quer
em Aspen Plus, quer em HYSYS. Ambos os modelos apresentam uma boa concordância.

Corrente	Fonte	Hidrogénio	Azoto	Amoníaco	Argon	Metano
	Referência (fig. 16)	1,05%	0,40%	97,34%	0,18%	1,03%
Líquido-d	Aspen+ (figs. 17 e 18)	1,18%	0,46%	97,19%	0,18%	0,98%
	HYSYS (figs. 19 e 20)	1,09%	0,54%	97,04%	0,20%	1,12%
	Referência (fig. 16)	0,82%	0,28%	98,20%	0,10%	0,60%
Líquido-g	Aspen+ (figs. 17 e 18)	0,82%	0,30%	98,22%	0,10%	0,55%
	HYSYS (figs. 19 e 20)	0,77%	0,36%	98,12%	0,11%	0,64%
	Referência (fig. 16)	55,73%	19,43%	5,55%	5,20%	14,09%
Gás-d	Aspen+ (figs. 17 e 18)	54,29%	19,83%	6,67%	5,06%	14,14%
	HYSYS (figs. 19 e 20)	54,58%	19,91%	6,23%	5,09%	14,19%
	Referência (fig. 16)	61,21%	21,07%	2,72%	4,03%	10,97%
Gás-g	Aspen+ (figs. 17 e 18)	60,83%	20,93%	3,33%	4,00%	10,90%
	HYSYS (figs. 19 e 20)	61,01%	20,99%	3,05%	4,02%	10,93%

Tentando aplicar no HYSYS o mesmo modelo termodinâmico de propriedades do Aspen Plus, avaliou-se no HYSYS a opção de modelo termodinâmico "Aspen Properties". Dentro desta opção foi seleccionado o modelo termodinâmico de propriedades RKS-BM e introduzidos os parâmetros binários da figura 20. A concordância dos resultados é pior do que a apresentada na tabela anterior. Os resultados não são publicados por falta de licenciamento da opção "Aspen Properties for HYSYS".

💽 NH3_prop_RKSBM.apw - Aspen Plus 2006.5 - as	penONE - [Componen	ts Specification	s - Data Browser	] [	
📃 File Edit View Data Tools Run Plot Library	' <u>W</u> indow <u>H</u> elp			[	_ 8 ×
	\$a ≝a -@ 60° №		K I	🗹 🛛 🖲	$\bigcirc \bigcirc$
Specifications 🔽 🛅	IA >> << AI	• >> (	<u> </u>		
Em Setup	Selection Petroleu	um [ Nonconve	ntional 🛛 🗸 Databa	nks	
Specifications	Define components				
Assay/Blend	Component ID	Type	Component name	Formula	
Light-End Properties	HYDRO-01	Conventional	HYDROGEN	H2	
Pseudocomponents	NITRO-01	Conventional	NITROGEN	N2	
Attr-Comps	AMMON-01	Conventional	AMMONIA	НЗМ	
Henry Comps	ARGON	Conventional	ARGON	AR	
UNIFAC Groups	METHA-01	Conventional	METHANE	CH4	
Comp-Groups	¥				
🗄 🗹 Comp-Lists					1
E Polymers					
Attr-Scaling					
Specifications					
Estimation					
	Find   Ele	o Wizard I Hay	er Defined Beo		
Pure Component					~~
NH3					
Binary Interaction					
For Help, press F1	C:\lay\R	ecycle Ammonia\A	Aspen NUM	Results Ava	ilable 🏼 //,

Figura 21: No Aspen Plus, para visualizar os dados termodinâmicos dos componentes carregar no botão Review.

No HYSYS 2006.5, <u>mesmo com a opção "Aspen Properties"</u>, os dados termodinâmicos dos <u>componentes puros provêm do banco de dados do HYSYS</u>. Esta limitação é eliminada na versão seguinte (V7.0), segundo a documentação [7].

NH3_prop_RKSBM.apw - Aspen Plus 2006.5 - aspe	nONE - [Propert	ties Paramete	ers Pure	Component RE	VIEW-1 - Data E	Browser]			
	<u>w</u> indow <u>m</u> eip ∣⊭⊨l∡sta⊲l ∣								
🗸 REVIEW-1 💌 🖻 😫 MET 💌	⇐⇒ < </td <td>N - N</td> <td>·&gt; 🛄</td> <td>👜 🧐 N</td> <td>2 / X</td> <td></td> <td></td> <td></td> <td></td>	N - N	·> 🛄	👜 🧐 N	2 / X				
Attr-Scaling	Input								
Properties     Specifications	- Pure componen	t scalar paramel	ers						
Property Methods	Parameter	s Units	Data	Component	Component	Component	Component	Component	
Estimation     Molecular Structure			set	HYDRO-01 💌	NITRO-01 💌	AMMON-01 💌	ARGON 💌	METHA-01 💌	
Parameters	OMEGA		1	-,215993000	,0377215000	,2526080000	0,0	,0107665000	
E-W Pure Component	PC	atm	1	12,95830249	33,55539107	111,3249445	48,33999507	45,43794720	
CPIGDP-1	RKTZRA		1	,3187000000	,2897000000	,2466000000	,2924000000	,2882000000	
CPSDIP-1	S025E	cal/mol-K	1	31,21238177	45,76502341	69,70108436	36,98409286	63,79583453	
DHVLDP-1	SG		1	,3000000000	,3000000000	,3000000000	,300000000	,3000000000	
DNSDIP-1		ĸ	1	20,39000000	77,34400000	239,7200000	87,28000000	111,6600000	
KLDIP-1		ĸ	1	33,19000000	126,2000000	405,6500000	150,8600000	190,5800000	4
KVDIP-1 MULDIP-1			1	13,95000000	63,14900000	195,4100000	83,78000000	90,67000000	4
MUVDIP-1		cum/kmol	1	28,55810000	34,67230000	24,98010000	28,58650000	37,83920000	
NH3		cc/mol	1	,0641470000	,0892100000	0724700000	,0745854000 DB-PLIBE 856	,099200000	4
PLXANT-1	70	oor mor	1	05,00700000	00,00700000	040000000	001000000	03,00730000	-
REVIEW-1				•				<u>P</u>	
SIGDIP-1	- h h i								
WATSOL-1	alue retrieved from	IDB-FURE836.							
Binary Interaction									
Input Complete									
For Help, press F1					C:\lay\	Recycle Ammonia\	Aspen NUM	1 Input Ch	anged //,

Figura 22: No Aspen Plus, depois do passo indicado na figura anterior, surgem várias tabelas com os vários parâmetros dos modelos termodinâmicos que descrevem os componentes. Em particular, note-se que o valor do volume crítico do amoníaco difere do valor apresentado pelo HYSYS, 8.04E-2 m<sup>3</sup>/kmol. Veja-se a figura 19.

## Simulação em estado estacionário

A equação de Ergun é o único método disponível no HYSYS para o cálculo da perda de carga num *Plug Flow Reactor*. No Aspen Plus existem mais opções (figura 23). O caso de amoníaco em Aspen Plus, disponibilizado na enciclopédia multimédia [4] não estima a perdas de carga nos reactores, ao contrário do que acontece com o mesmo caso implementado em HYSYS. Foram inseridas as especificações em falta no Aspen Plus (figuras 23 e 24).



Figura 23: Métodos para cálculo de perdas de carga no leito de um PFR.

NH3_prop_RKSBM.apw - Aspen Plus 2006.5 - asp Ele Edit View Data Iools Run Plot Library	DenONE - [Block PFR-100 (RPlug) Setup - Data Browser]       □□X         Window       Help       □@X         Handler       □@X         Handler       □@X
Setup Se	
For Help, press F1	C:\lay\Recycle Ammonia\Aspen NUM Results Available //

Figura 24: Especificação de um leito catalítico, no Aspen Plus.

À semelhança do processo apresentado na figura 16, introduzem-se duas etapas de condensação, SEP1 e SEP2. A primeira a 25°C, pode utilizar água de refrigeração. A segunda, terá uma temperatura entre os -20 e os -33°C. A pressão máxima do processo, 150 atm, é atingida neste condensador. É colocado um compressor, antes desta unidade, para compensar as perdas de carga a montante. A temperatura do 2º condensador (SEP2) é escolhida, para que a composição do amoníaco na corrente gasosa resultante seja 1,5% molar.



Figura 25: Condensadores no modelo do Aspen Plus.



Figura 26: Condensadores no modelo do HYSYS.

Note-se que no Aspen Plus é dispensável a especificação do compressor, pois o segundo separador incorpora a subida de pressão. Já no HYSYS a mesma acção, através de uma perda de carga negativa, produz um aviso e o bloco fica assinalado a amarelo. Contudo, os balanços são resolvidos.

No HYSYS é ainda necessário explicitar os fluxos energéticos: utilidades frias nos separadores (Q1 e Q2) e trabalho no compressor (QC).

Na tabela seguinte resumem-se as propriedades de algumas correntes correspondentes às figuras 25 e 26. A composição da corrente "Recycle" serviu de referência para a escolha da temperatura do separador SEP2.

		Aspen Plu	us, sem r	eciclage	em		
		S1	S9	Liq	Liq2	Gas2	Recycle
Fr	Hidrogénio	0,647	0,520	0,007	0,002	0,610	0,610
ac	Azoto	0,213	0,171	0,003	0,001	0,200	0,200
mo	Amoníaco	0,010	0,160	0,983	0,994	0,015	0,015
lare	Argon	0,033	0,038	0,001	0,000	0,045	0,045
es	Metano	0,097	0,111	0,006	0,003	0,130	0,130
Cau	udal molar (kmol/h)	60000	52256	3079	4675	44502	40000
Са	udal mássico (kg/h)	619951	619951	52254	79544	488153	438842
Ter	nperatuta (K)	298,0	508,4	298,2	242,1	242,1	298,2
Pre	ssão (atm)	150,0	143,8	143,8	150,0	150,0	150,0
Fra							
	Hidrogénio	0.647	0.521	0.006	0.002	0.611	0,610
Frac	Hidrogénio Azoto	0,647 0,213	0,521 0,171	0,006 0,003	0,002 0,001	0,611 0,200	0,610 0,200
Frac mo	Hidrogénio Azoto Amoníaco	0,647 0,213 0,010	0,521 0,171 0,159	0,006 0,003 0,983	0,002 0,001 0,994	0,611 0,200 0,015	0,610 0,200 0,015
Frac molar	Hidrogénio Azoto Amoníaco Argon	0,647 0,213 0,010 0,033	0,521 0,171 0,159 0,038	0,006 0,003 0,983 0,001	0,002 0,001 0,994 0,000	0,611 0,200 0,015 0,045	0,610 0,200 0,015 0,045
Frac molares	Hidrogénio Azoto Amoníaco Argon Metano	0,647 0,213 0,010 0,033 0,097	0,521 0,171 0,159 0,038 0,111	0,006 0,003 0,983 0,001 0,006	0,002 0,001 0,994 0,000 0,003	0,611 0,200 0,015 0,045 0,129	0,610 0,200 0,015 0,045 0,130
Frac molares	Hidrogénio Azoto Amoníaco Argon Metano udal molar (kmol/h)	0,647 0,213 0,010 0,033 0,097 60000	0,521 0,171 0,159 0,038 0,111 52306	0,006 0,003 0,983 0,001 0,006 3271	0,002 0,001 0,994 0,000 0,003 4439	0,611 0,200 0,015 0,045 0,129 44596	0,610 0,200 0,015 0,045 0,130 40000
Frac molares Cal	Hidrogénio Azoto Amoníaco Argon Metano udal molar (kmol/h) udal mássico (kg/h)	0,647 0,213 0,010 0,033 0,097 60000 619950	0,521 0,171 0,159 0,038 0,111 52306 619946	0,006 0,003 0,983 0,001 0,006 3271 55566	0,002 0,001 0,994 0,000 0,003 4439 75540	0,611 0,200 0,015 0,045 0,129 44596 488840	0,610 0,200 0,015 0,045 0,130 40000 438842
Frac molares Cau Cau	Hidrogénio Azoto Amoníaco Argon Metano udal molar (kmol/h) udal mássico (kg/h) nperatuta (K)	0,647 0,213 0,010 0,033 0,097 60000 619950 298,0	0,521 0,171 0,159 0,038 0,111 52306 619946 511,3	0,006 0,003 0,983 0,001 0,006 3271 55566 298,2	0,002 0,001 0,994 0,000 0,003 4439 75540 243,4	0,611 0,200 0,015 0,045 0,129 44596 488840 243,4	0,610 0,200 0,015 0,045 0,130 40000 438842 298,2
Frac molares Cau Cau Pre	Hidrogénio Azoto Amoníaco Argon Metano udal molar (kmol/h) udal mássico (kg/h) nperatuta (K) ssão (atm)	0,647 0,213 0,010 0,033 0,097 60000 619950 298,0 150,0	0,521 0,171 0,159 0,038 0,111 52306 619946 511,3 144,5	0,006 0,003 0,983 0,001 0,006 3271 55566 298,2 144,5	0,002 0,001 0,994 0,000 0,003 4439 75540 243,4 150	0,611 0,200 0,015 0,045 0,129 44596 488840 243,4 150	0,610 0,200 0,015 0,045 0,130 40000 438842 298,2 150,0
Frac molares Cau Cau Ter Pre	Hidrogénio Azoto Amoníaco Argon Metano udal molar (kmol/h) udal mássico (kg/h) nperatuta (K) ssão (atm)	0,647 0,213 0,010 0,033 0,097 60000 619950 298,0 150,0 <b>\$1</b>	0,521 0,171 0,159 0,038 0,111 52306 619946 511,3 144,5 <b>\$9</b>	0,006 0,983 0,001 0,006 3271 55566 298,2 144,5 Liq	0,002 0,994 0,000 0,003 4439 75540 243,4 150 Liq2	0,611 0,200 0,015 0,045 0,129 44596 488840 243,4 150 <b>Gas2</b>	0,610 0,200 0,015 0,045 0,130 40000 438842 298,2 150,0 Recycle

Como esperado, as temperaturas de operação do 2º separador diferem entre os dois simuladores, devido aos diferentes modelos de propriedades usados. Em particular, deve-se às pequenas diferenças dos pesos moleculares, a discrepância de 1 kg/h no caudal mássico da corrente S1, entre o Aspen Plus e o HYSYS.

No HYSYS, o balanço da reacção não é perfeito: o amoníaco tem menor peso molecular do que os seus reagentes, originando a perda de 4 kg/h entre S1 e S9. Note-se que o processo foi especificado com composições e caudais molares.

Para fechar a reciclagem, a corrente Gas2 precisa de ser aquecida até 25°C e purgada, para manter o inventário dos inertes: árgon e metano. Estima-se uma "purga" na ordem dos 10%. No Aspen Plus, o *flowsheet* é fechado com uma simples interligação de blocos (figura 27). Já no HYSYS, a reciclagem tem de ser explicitada (figura 28).







Figura 28: Reciclagem no HYSYS.

A tabela seguinte resume as propriedades de algumas correntes correspondentes às figuras 27 e 28. A composição da corrente "Recycle" já não é uma especificação do processo, mas manteve-se o caudal molar (40 Mmol/h). O modelo do Aspen Plus é uma melhor aproximação do processo descrito na enciclopédia multimédia [4].

Aspen Plus, com reciclagem									
		S1	S9	Liq	Liq2	Gas2	Recycle		
F	Hidrogénio	0,647	0,520	0,007	0,002	0,611	0,611		
ac	Azoto	0,215	0,173	0,003	0,001	0,203	0,203		
mo	Amoníaco	0,010	0,160	0,984	0,994	0,015	0,015		
lare	Argon	0,032	0,037	0,001	0,000	0,044	0,044		
Se	Metano	0,095	0,109	0,006	0,003	0,128	0,128		
Cau	udal molar (kmol/h)	60000	52241	3102	4668	44470	40000		
Cau	udal mássico (kg/h)	619893	619893	52648	79426	487819	438784		
Ter	nperatuta (K)	298,0	509,0	298,2	242,1	242,1	298,2		
Pre	ssão (atm)	150,0	143,8	143,8	150,0	150,0	150,0		
П									
Т	Hidrogénio	0,650	0,524	0,006	0,000	0,614	0,614		
Frac	Hidrogénio Azoto	0,650 0,216	0,524 0,174	0,006 0,003	0,000 0,002	0,614 0,204	0,614 0,204		
Frac mc	Hidrogénio Azoto Amoníaco	0,650 0,216 0,010	0,524 0,174 0,159	0,006 0,003 0,983	0,000 0,002 0,994	0,614 0,204 0,015	0,614 0,204 0,015		
Frac molar	Hidrogénio Azoto Amoníaco Argon	0,650 0,216 0,010 0,032	0,524 0,174 0,159 0,037	0,006 0,003 0,983 0,001	0,000 0,002 0,994 0,001	0,614 0,204 0,015 0,043	0,614 0,204 0,015 0,043		
Frac molares	Hidrogénio Azoto Amoníaco Argon Metano	0,650 0,216 0,010 0,032 0,093	0,524 0,174 0,159 0,037 0,107	0,006 0,003 0,983 0,001 0,006	0,000 0,002 0,994 0,001 0,003	0,614 0,204 0,015 0,043 0,124	0,614 0,204 0,015 0,043 0,124		
Frac molares	Hidrogénio Azoto Amoníaco Argon Metano udal molar (kmol/h)	0,650 0,216 0,010 0,032 0,093 60000	0,524 0,174 0,159 0,037 0,107 52286	0,006 0,003 0,983 0,001 0,006 3309	0,000 0,002 0,994 0,001 0,003 4421	0,614 0,204 0,015 0,043 0,124 44557	0,614 0,204 0,015 0,043 0,124 40000		
Frac molares Cal	Hidrogénio Azoto Amoníaco Argon Metano udal molar (kmol/h) udal mássico (kg/h)	0,650 0,216 0,010 0,032 0,093 60000 617122	0,524 0,174 0,159 0,037 0,107 52286 617118	0,006 0,003 0,983 0,001 0,006 3309 56203	0,000 0,002 0,994 0,001 0,003 4421 75232	0,614 0,204 0,015 0,043 0,124 44557 485683	0,614 0,204 0,015 0,043 0,124 40000 436014		
Frac molares Cau Cau	Hidrogénio Azoto Amoníaco Argon Metano udal molar (kmol/h) udal mássico (kg/h) nperatuta (K)	0,650 0,216 0,010 0,032 0,093 60000 617122 298,0	0,524 0,174 0,159 0,037 0,107 52286 617118 512,1	0,006 0,003 0,983 0,001 0,006 3309 56203 298,2	0,000 0,002 0,994 0,001 0,003 4421 75232 243,4	0,614 0,204 0,015 0,043 0,124 44557 485683 243,4	0,614 0,204 0,015 0,043 0,124 40000 436014 298,2		
Frac molares Cau Cau Pre	Hidrogénio Azoto Amoníaco Argon Metano udal molar (kmol/h) udal mássico (kg/h) nperatuta (K) ssão (atm)	0,650 0,216 0,010 0,032 0,093 60000 617122 298,0 150,0	0,524 0,174 0,159 0,037 0,107 52286 617118 512,1 144,6	0,006 0,003 0,983 0,001 0,006 3309 56203 298,2 144,6	0,000 0,002 0,994 0,001 0,003 4421 75232 243,4 150,0	0,614 0,204 0,015 0,043 0,124 44557 485683 243,4 150,0	0,614 0,204 0,015 0,043 0,124 40000 436014 298,2 150,0		
Frac molares Cau Cau Ter Pre	Hidrogénio Azoto Amoníaco Argon Metano udal molar (kmol/h) udal mássico (kg/h) nperatuta (K) ssão (atm)	0,650 0,216 0,010 0,032 0,093 60000 617122 298,0 150,0 <b>\$1</b>	0,524 0,174 0,159 0,037 0,107 52286 617118 512,1 144,6 <b>\$9</b>	0,006 0,983 0,983 0,001 0,006 3309 56203 298,2 144,6 Liq	0,000 0,994 0,001 0,003 4421 75232 243,4 150,0 Liq2	0,614 0,204 0,015 0,043 0,124 44557 485683 243,4 150,0 <b>Gas2</b>	0,614 0,204 0,015 0,043 0,124 40000 436014 298,2 150,0 <b>Recycle</b>		

## Simulação Dinâmica no HYSYS

Não tendo nenhuma experiência com ASPEN Dynamics ou com HYSYS Dynamics, optei começar pelo HYSYS, pois usa a mesma interface da simulação estacionária. No HYSYS, a transição de uma simulação em estado estacionário para dinâmica (transiente) é facilitada por um assistente, que propõe as alterações necessárias para iniciar a simulação dinâmica (figura 29).

🔊 NH3_C	DNVERTOR_OPT_RECYCLE_PROPSET-SRK.HSC - Aspen HYSYS 2006.5 - aspenONE	<u>- 0 ×</u>
<u>F</u> ile <u>E</u> dit	Simulation Flowsheet Tools Window Help	
🗋 👌	🔚 📲 🛤 隆 💳 📯 🔗 🐨 👁 👗 Environment: Case (M Mode: Steady	1ain) State
🔀 Dynan	nics Assistant Dynamics Assistant 💷 🗖 🗙	OHeat
lf you	The assistant has identified the following items for consideration. are using non-uniform tray , you may lose the information by chosing "Make Change".	leat
	Make changes	
	Disable stream pressure specifications	
	Enable stream flow specifications	
	Enable pressure flow equations not pressure drop	
	Miscellaneous specification changes 🧹 🗸 👘	-
	Volumes not known 🧹 👘	
	Pressure flow k values not known 🗸 🦯 🖓	
	<u>About</u> <u>Preferences</u> <b>▼</b> Save steady state case	
Gene	ral Streams Pressure Flow Specs Unknown Sizes Tray sections er	
<u>A</u> na	lyze Again <u>Make Changes</u> <u>C</u> ancel	
	RUY-1 ga≲21 Purge TEE-101	
<u> </u>		
	Open the Dynamics Assistant 4	

Figura 29: *Dynamics Assistant*, no HYSYS, é chamado com o botão que está à esquerda do semáforo verde (integrador activo). Ao fazer duplo clique sobre a última linha, surge o ecrã representado na figura 30.

A selecção, com duplo clique, de qualquer uma das linhas apresentadas, permite visualizar, em maior detalhe, as alterações propostas. O utilizador pode obter mais informação, através do botão [Tell me why...]. Veja-se o exemplo das perdas de carga, na figura 30.

Ainda antes de aplicar as alterações, sugiro que se visualize em que correntes o utilizador estipula a pressão e/ou o caudal. A representação das correntes no *flowsheet* do HYSYS pode seguir diversos esquemas de cores. Na figura 31 mostra-se a adição do esquema *Dynamic P/F Specs*. As diferenças entre o estado inicial e o resultado de aplicar as alterações propostas pelo *Dynamic Assistant* são visíveis, respectivamente, nas figuras 32 e 33.

1	NH3_CONVER	TOR_OPT_	RECYCLE_PROPSET-SR	K.HSC - Aspen H	<b>1Y5Y5 2006.5</b> - (	aspenONE	
Eile	Edit Simula	tion Flowsl	neet <u>T</u> ools <u>W</u> indow (	Help	<u>д</u> Enviror	iment: Case (Main)	
				8-    <b>0</b>   0		Mode: Steady State	
	S Dynamics	SASSISCAN					QHeat —
	Sizi	ng	These items have unknow	own k values. Use	the values listed b	elow: Heat	
	Valves		Name	E-100	E-100	PFR-	
	Volumes		Number OK				
	k values		k	12,05	30,93	2,	
			Pressure drop [atm] Mass flow [kg/h]	9,869e-003 330176	9,869e-003 617118	<u>0,6</u> 330	
			Mass density [kg/m3]	57,90	30,71	26	
		k ¥alues			<u>×</u>		
		The flow	resistances of these item	s are unknown.			
		Make su New val	re that you agree with the ues may be provided or yo	suggested k valu ou can calculate th	es. iem		
١.		by chan	ging the flow and pressure	e drop values.	Tell me	why	
TEI	General	Streams	Pressure Flow Specs	 Unknown Size	s Trav sections		
		· · · · · · · · · · · · · · · · · · ·					
	Analyze	Again	<u>M</u> ake Changes	<u>C</u> ancel			
				RCY-1	Purge TEE-1	yaszh 101	<b>_</b>
◄							
		Ente	r Basis Environment			<b>A</b> .	

Figura 30: Definição das perdas de carga, no HYSYS Dynamics Assistant. Podem-se contrariar as sugestões apresentadas, retirando a selecção do bloco, na linha "OK". Podem-se editar os valores apresentados. Os valores a vermelho representam os valores-padrão do HYSYS, enquanto as entradas do utilizador ficam a azul.



Figura 31: Adição do esquema de cores para as correntes do *flowsheet*. O processo é iniciado carregando no ícone da paleta de cores.



Figura 32: Correntes que definem a pressão e o caudal, <u>antes</u> de aplicar as propostas do *Dynamics Assistant*.



Figura 33: Correntes que definem a pressão e o caudal, <u>depois</u> de aplicar as propostas do *Dynamics Assistant*. Cada alteração é assinalada com uma moldura laranja.

Ao aplicar as propostas do *Dynamics Assistant* o processo é recalculado, ainda em estado estacionário. Antes de comutar para modo dinâmico, recomenda-se que sejam adicionadas válvulas em todas as saídas de cada T e que cada uma delas seja anti-retorno (*check valve*), conforme a figura 34. No caso em estudo, adicionou-se uma válvula na corrente S-2 e na corrente de reciclagem. Notar-se-á na figura 38 que uma vez em modo dinâmico, não é preciso explicitar a reciclagem no HYSYS.

Se por qualquer razão for inconveniente aplicar *Check Valves* em todas as saídas de cada T de derivação, será útil activar o aviso de inversão de fluxo (figura 35).

NH3_CONVERTOR_OPT_F	RECYCLE_PROPSET-SRK.HSC - Aspen HYSYS 2006.5 - aspenONE neet Tools Window Help	
📄 🙆 🔒   🗘 🕮 🖊	🐐 📴 🔰 📯 🖗 🖤 🍄 🖉 🕹 Environment: Lase (Mai Mode: Steady Sta	nj ate
1: PFD - Case (Main)	PA 🦻 🕷 📕 😕 Dynamic P/F Spec	
₩ ¥L¥-100	SEP1 SEP2 Heat	×
Dynamics Specs Pipe Holdup Actuator Flow Limits Stripchart	Dynamic Specifications         Total Delta P [atm]       0,6033         Pressure Flow Relation       ✓         Dynamic Parameters       ✓         Valve Opening [%]       50,00         Conductance (Cv) [USGPM]       517,2         Mass Flow [kg/h]       139462         Friction Delta P [atm]       0,6033         ✓       Check Valve (Prevents Backflow)         Size Valve       Size Valve	
TEE Design Rating Delete	Worksheet Dynamics OK I gnored VLV-Purge Purge-1	
		<b></b>

Figura 34: Activação do atributo "Check Valve" numa válvula do HYSYS.

A adição dos anéis de controlo<sup>\*</sup> no HYSYS está bem apresentada na enciclopédia multimédia [4] e desenvolvida no livro de Luyben, já apresentado: "Plantwide Dynamic Simulators in Chemical Processing and Control" [5].

<sup>&</sup>lt;sup>\*</sup> Um anel de controlo é constituído basicamente por um sensor, um controlador e um actuador.

Eile     Edit     Simulation     Flowshe <ul> <li></li></ul>	et Iools Window Help Es = >> ?> ?> @ @ A ? ?	En	vironment: Case (Main) Mode: Steady State	
S-9 I TEE-100 Design Connections Parameters User Variables Notes	SEP1 gasCou Splits S-2 CS-1A CS-2A C	Flow Ratios 0,5350 0,2260 0,2390	Heat	
Delete	Worksheet Dynamics	VLV-Purge	I Ignored	

Figura 35: Activação do aviso de inversão de fluxo num T de derivação do HYSYS.

Sobre o caso em estudo, importa realçar o controlo dos condensadores. No HYSYS o modelo de separador gás-líquido tem opção (Add/Configure Level Controller, na figura 36) para inserir um controlador PI, já afinado, para o nível de líquido. Perante este controlador, o *Dynamic Assistant*, adiciona a válvula na corrente líquida.

A representação gráfica seguida no HYSYS para as utilidades indica que os fornecimentos de energia (calor ou trabalho) entram no respectivo equipamento. É isso que se observa com os aquecedores, compressor ou separadores gás-líquido em funcionamento isotérmico. É possível usar o modelo de um *Heater* para uma operação de arrefecimento (ou um *Cooler* para aquecimento), mas o uso da utilidade terá um valor negativo. Isto implica que o anel de controlo de um condensador possa ter uma acção inversa sobre o caudal da utilidade fria, tendo neste caso a "válvula" fechada para obter o caudal máximo nessa utilidade. É esta a opção subjacente na representação gráfica do separador gás-líquido.

Ainda que o sentido do fluxo de energia possa ser invertido, conforme ilustrado na figura 37, a representação gráfica não é afectada: a utilidade entra no bloco, apesar de o arrefecer.

Para simular cada condensador aplicou-se um *Cooler* seguido de um separador gás-líquido adiabático: a utilidade fria tem valor positivo e a representação gráfica esperada (sai do bloco).

Teste_cond_DYN.H9	5C - Aspen HYSYS 2006.5 flowsheet Tools Window	- aspenONE Help		
🗋 👌 🔒 🛛 🗗	n [ŧ   <u>−</u> ×	🌮 🐵 🔺	Environment: Case (Main) Mode: Steady State	
Dynamics         Specs         Holdup         StripChart         Heat Exchanger	Model Details   Initialize From Products  Dy Startup  Initialize From User  Init HoldUp  Lag Rxn Temperature  Dynamic Specifications  Feed Delta P [atm] Vessel Pressure [atm]  Add/Configure Level Control	Vessel Volume [m3] [ Vessel Diameter [m] [ Height [m] ] Liq Volume Percent [%] Level Calculator [ Fraction Calculator ] ] 0,00 315		
Design Reactions	s Rating Worksheet D	lynamics OK	∏ Igno	red
	Dynamics Mode			

Figura 36: No HYSYS, o bloco do separador gás-líquido tem opção para adicionar o controlador do nível de líquido, através do botão [<u>A</u>dd/Configure Level Controller]

Teste_cond_DYN.HSC - Aspen HYSYS 2006	5.5 - aspenONE	
	w Help : 🎸 🐨 🕸 🔏 Environment: Case (Main) Mode: Steady State	
Teste-G		
Dynamics       ○ None ○ Duty         Specs       □ Liquid Heater         Holdup       ○ Vessel Heater         StripChart       ○ Direct Q         O Direct Q       ○ Utility	C Tube Bundle (Tube Bundle is now only valid in dynamic mo Heater Height as % Vessel Volume Top of Heater 5,00 % Bottom of Heater 0,00 % Direct Q Direction: C Heating Cooling SP 1,7292e+05 kJ/h Min. Available <empty> Max. Available <infinite></infinite></empty>	de)
Design Reactions Rating Worksheet	Dynamics	-
Delete	OK Ignored	- -
•		
	<b>▲</b>	

Figura 37: No HYSYS, o bloco de um separador gás-líquido tem opção para configurar o permutador de calor integrado.

A utilização de calor directo para o aquecimento ou arrefecimento é uma função que exige cautela na simulação dinâmica. Não havendo o limite imposto pela temperatura da própria utilidade, corre-se o risco de a operação ser conduzida a temperaturas absurdas, quando a corrente de processo atinge caudais muito baixos.

O *flowsheet* com o controlo do processo é apresentado na figura 38. As entradas (H2 e N2) e saídas (liq-1, liq2-1, Purge-1) têm a pressão especificada. Assim, qualquer sensor de pressão colocado nestas correntes daria pressão constante, não podendo ser utilizado num anel de controlo.

Verifica-se também que a explicitação da reciclagem foi oportunamente substituída por uma válvula. Esta opera normalmente aberta, mas o controlo (manual), assim como a função anti-retorno são importantes para o arranque ou paragem do processo.

A explicitação da reciclagem é ignorada durante uma simulação dinâmica, pelo que pode ser eliminada ou substituída por outro bloco, poupando a criação de mais uma corrente. Recomenda-se que esta alteração seja feita <u>depois</u> de comutar a simulação para modo dinâmico. Normalmente, a comutação de modo estacionário para dinâmico grava automaticamente a simulação estacionária, num ficheiro com a terminação "\_ss0.hsc".



Figura 38: *Flowsheet* do HYSYS com o controlo implementado.

Cada controlador assume a designação da variável controlada (FIC, PIC, TIC), desde que o nome do controlador não seja editado antes de estabelecer a variável controlada. Por outro lado, o nome não é alterado com a alteração da variável controlada, pelo que há que ter o cuidado de renomear o controlador.

Acerca do controlo implementado no caso em estudo, apresentam-se quatro apontamentos:

- Globalmente, o controlo só funciona com uma boa referência (e controlo) da pressão. Assim, a purga é controlada pela pressão do 2º separador gás-líquido e a potência do compressor pela pressão do 1º separador.
- As válvulas 100 e 101 são manipuladas por controladores de caudal, mas os set-points são obtidos remotamente, por relações com a corrente S-2. O objectivo é reproduzir as relações obtidas da optimização da conversão dos 3 reactores, em estado estacionário. Em modo dinâmico, é ignorado o *Optimizer* definido na enciclopédia multimédia [4].
- O controlador de caudal de H2 obtém o set-point remotamente, por um controlador de composição na corrente S-1. Este controlo é importante para o arranque da instalação, a partir de linhas cheias de azoto.
- 4. No caso escolhido da enciclopédia multimédia [4], verificou-se que a capacidade calorífica do catalisador é muito alta. O valor de 250 kJ/kg-K é apresentado por omissão no HYSYS, ainda na especificação do estado estacionário. Corrigiu-se para 0,250 kJ/kg-K. Ver-se-á, na figura 40, que a especificação dinâmica do Aspen Plus impõe limites a este parâmetro: a capacidade calorífica é limitada entre 0,1 e 10 kJ/kg-K.

## Simulação Dinâmica no Aspen Plus/Dynamics

Construir uma simulação dinâmica a partir do Aspen Plus dá mais trabalho do que no HYSYS. A comutação para modo dinâmico (figura 39) abre o acesso à configuração das capacidades dos equipamentos (figura 40). Cada equipamento é configurado individualmente.



Figura 39: Iniciar uma simulação dinâmica no Aspen Plus: pode-se mudar o *Input mode* no *Setup* da simulação ou simplesmente premir o botão *Dynamic*, na respectiva barra de ferramentas.

💽 NH3_prop_RK5BM_recycle_DYN.apw - Asp	en Plus 2006.5 - aspenONE	- 🗆 ×
File Edit View Data Tools Run Plot Librar	ry Window Help	
	▞ڲਙਙਤਿਆ № ▥ ▸ ▸ ዞ ■ ▥ ◙ ⊠ ●○● №₽	→ →
Block PFR-100 (RPlug) Dynamic - Data Br	owser	
🝼 Dynamic 💽 🗈 🔢 ENG	• <b>• • · · · · · · · · · · · · · · · · ·</b>	
Estup     Setup     Components	Catalyst Specification Equipment heat transfer	
	Catalyst heat transfer option	
Elewsheet	O No heat transfer	
Electron Streams	Heat transfer at equal temperature	
	C Heat transfer at different temperatures	
HEATER	Catalyst heat transfer specifications	
🕂 🔂 MIX-100	Heat capacity: 250 k.U/k.g.K	
II → MIX-101		
	Overell heat transfer coefficient	
	Btu/hr-sqtt-R	
Setup	Aspen Plus	
Convergence		
Report	Value is out of range; it must be between 0.1 and 10	
User Subroutine		
Dynamic Black Ontions		
	UK	
Profiles		
EO Variables		
📔 🛛 🧭 😿 EO Input	Specific heat capacity of the catalyst.	
For Help, press F1	C:\ulio\Desktop\AspenAPW_dyn Input Cha	nged //

Figura 40: Especificação da componente dinâmica do PFR (Plug Flow Reactor).

No caso dos PFRs (figura 40), são impostos limites no valor da capacidade calorífica do catalisador, que não existem no HYSYS.

Outra diferença, em relação ao HYSYS, é a possibilidade de configurar a geometria de um misturador (figura 41). No HYSYS implicaria a selecção de um tanque e não de um misturador.

🥘 NH3_prop_RK58M_recycle_DYN.apw - Aspen Plus 2006.5 - aspenONE - [Block MIX-100 (Mixer) Dynamic - Data Browser]									
Eile Edit View Data Tools Run Plot L	Ele Edit View Data Tools Run Plot Library Window Help								
	D≊∎ ⊴⊠ № <mark>∏~∕</mark> ‰≒⊲<∽ № ⊡ ▶ ▷ K =  ⊠ <b>X ●</b> ○● № ♪ ;;								
🝼 Dynamic 💿 🗈 🔢 ENG	🍼 Dynamic 🔻 🖻 🖹 ENG 💌 🗢 🔿 📢 All 🔍 >> 🛄 🕲 🛞 📂 🖉 🗡								
Setup     Components     Yoperties     Setup     Properties     Setup     Streams     COMP     Co	Vessel initial Condition       Equipment Heat Transfer       Vessel Wall Heat Transfer       Controllers         Vessel geom/Instantaneous               Vessel geom/Instantaneous               Vessel geom/Instantaneous               Head type:       Vestical             Length:                 Diameter:								
Custom Stream Results      MIX-101      MIX-102      MIX-103      MIX-103      PFR-100	A horizontal cylinder.								
For Help, press F1	C:\ulio\Desktop\AspenAPW_dyn Input Cha	anged //,							

Figura 41: Especificação dinâmica para um misturador. Nas simulações efectuadas aplicou-se "Intantaneous".

No que diz respeito aos separadores gás-líquido (figura 42) são propostos vários modelos para a transferência de calor. Utilizar-se-á a opção *Constant duty* (fig. 42), que corresponde à potência de arrefecimento e a "Direct Q" no HYSYS (figura 37).



Figura 42: Modelos de transferência de calor, disponíveis para o separador gás-líquido.

Quanto ao volume dos separadores, as dimensões são dados a introduzir na caixa diálogo (figura 43). No HYSYS, o Dynamics Assistant propõe os valores em função do tempo de residência do gás.



Figura 43: Especificação da geometria de um separador gás-líquido.

A especificação dinâmica (básica) dos permutadores de calor é semelhante entre os dois simuladores, embora o Aspen Plus os proponha inicialmente como estacionários (instantâneos). No HYSYS é proposto um *holdup* pequeno: 100 litros por cada corrente de processo que atravessa o permutador.

💽 NH3_prop_RK5BM_recycle_DYN.apw - Aspen Plus 2006	
File Edit View Data Tools Run Plot Library Window	
	– <li>▲ <p< th=""></p<></li>
Block VLV-PGE (Valve) - Data Browser	
🔁 VLV-PGE 🔽 🔁 🔀 MET 💌 🗲	
TEE-100	Valve Parameters Calculation Options Pipe Fittings
E Calculatio	on type
VLV-100 O Adiab	vatic flash for specified outlet pressure (pressure changer)
	late valve flow coefficient for specified outlet pressure (design)
🕀 🖂 VLV-H2 🔿 Calcu	late outlet pressure for specified valve (rating)
VIV-LIQ2     Pressure     VIV-N2     Outle	toressure 150
Input Input	
Block Options	ions
EO Variables Valid pha	ses: Vapor-Only 🔻 Maximum iterations: 30 🚎
EO Input	Vapor-Only Error tolerance: 0,0001
Spec Groups	Liquid-Only Vacad June 1
Ports	Vapor-Liquid-Liquid
Custom Stream Results	Liquid-FreeWater Vacor Liquid-FreeWater
	Liquid-DirtyWater
For Help, press F1	Vapor-Liquid-DirtyWater C:\user\Desktop\AspenAPW_dyn NUM Input Changed

Figura 44: Configuração de uma válvula de gás.

Optou-se por modelar cada válvula como *flash* adiabático (figura 44). Posteriormente, o Aspen Dynamics introduz uma correlação simples entre a abertura e o caudal. É também conveniente indicar, para cada válvula, se a corrente é gasosa ou líquida, pois para além de simplificar o modelo, garante a correcta inicialização da corrente. Como inconveniente, o modelo não suportará a inundação da válvula de gás ou o esgotamento do líquido, na válvula da base do condensador. No modelo desenvolvido em HYSYS, as válvulas suportam as duas fases.



Figura 45: *Flowsheet* quase pronto para migração para Aspen Dynamics. Compare-se com o HYSYS (figura 38).

As válvulas nas entradas e saídas do processo (H2, N2, PURGE, LIQ e LIQ2) têm de ser colocadas pelo utilizador, ao contrário do que aconteceu no HYSYS. O assistente *Pressure Checker* do Aspen Plus exige também uma válvula entre cada par de PFRs. Se no caso dos reactores PFR-100 e PFR-101, a questão é resolvida deslocando VLV-2 da corrente S2 para a corrente S4, já no caso dos reactores PFR-101 e PFR-102 não é razoável colocar uma válvula em S6 ou S7, pois inviabiliza o controlo de caudal a montante (VLV-2 e VLV-100; também VLV-101, para uma válvula em S7). Mas sem esta válvula, o *flowsheet* apresentado na figura 45 não é exportado para Aspen Dynamics, numa simulação que especifica a pressão das correntes de entrada e saída (figura 46).

#### Warning: Connectivity may cause convergence failure if reverse flow is not used

Este aviso, presente na figura 46 indica que por omissão, o modelo adoptado no Aspen não suporta inversão de fluxo. Não é o caso do HYSYS, embora neste simulador se possa activar a opção global de fluxos não reversíveis.



Figura 46: A falta de uma válvula entre PFR-101 e PFR-102 impede a migração "*Pressure driven*" do modelo de Aspen Plus para Aspen Dynamics.

Assinalo que não encontrei, no ambiente do Aspen Plus, forma de activar o modelo de fluxos reversíveis nem tão pouco de válvulas anti-retorno. Só encontrei estas opções no Aspen Dynamics.

Depois de incluir uma válvula em S6, foi possível fazer a migração, embora com alguns avisos. O Aspen Dynamics (figura 47) adiciona controladores de pressão para PFR-100 e PFR-101, que foram removidos, tal como a válvula em S6.



Figura 47: Apresentação inicial do processo no Aspen Dynamics.



O aspecto final do *flowsheet*, com controlo implementado, é apresentado na figura seguinte:

Figura 48: Apresentação final do processo no Aspen Dynamics. Compare-se com a figura 38.

O Aspen Dynamics não oferece um "*Ratio Controller*". O módulo *Ratio*, inserido numa hierarquia designada "*ControlModels*", é apenas um divisor (por ex. RAT101). O resultado da divisão (CS-2A/S2) é a variável de processo para um controlador PI (RC-101), que tem como *setpoint* a razão de caudais desejada. O *output* deste controlador dá o *setpoint* a outro controlador PI (FIC-101), que controla directamente o caudal.

Exceptuando os controladores implementados logo após a migração de Aspen Plus para Dynamics, a nomenclatura dos controladores não é automática: ao contrário do que se viu no HYSYS, a nomenclatura não está relacionada com a variável controlada.

Como já foi referido, só no Aspen Dynamics se encontra a opção de seleccionar o modelo de fluxos reversíveis (figura 49). Igualmente, só aqui é possível activar a opção de *"check-valve"* (figura 50). Na mesma figura é visível o parâmetro *"ValidPhases"*, onde é possível alterar a opção importada do Aspen Plus.

Ao contrário do que seria esperado, ao fechar e voltar a abrir um documento de Aspen Dynamics, não se preserva a apresentação. Para um arranjo com bastantes controladores e indicadores, apresentado na figura 51, é fastidioso abrir e posicionar todos os objectos, de cada vez que se abre o documento. A alternativa (figura 52) é utilizar a combinação de teclas ALT+F8 para fazer "*Capture Screen Layout…*", gravar o *layout* (no exemplo usou-se MyLayout). Depois é ainda preciso gravar o ficheiro, antes de sair. Quando se abre o ficheiro, recupera-se o MyLayout, debaixo da hierarquia "*Flowsheet*" (figura 53).

NH3_prop_RKSBM_recycle_	DYN6.dynf - Aspen Dynan	nics 2006.5 - aspenONE		l	- 🗆 🗵
<u>File Edit View Tools Run Wi</u>	ndow <u>H</u> elp				
D 🖻 🖬   🍜 🖪   X 🖻	🛍 🗠 റ 🕅 🖸	vnamic 🔽 🕨 Þ 🗉 🖬 🐗 🍕	K 🔏 🕅 🕅	🦻 🚳 🖉	<mark>ĕ  ⊿</mark>   l
Exploring - Si 💶 🗙	💭 Process Flowsheet Wir	ndow			
All Items	F # 7 Grid 0.05	1227			
Simulation	DynamicsOntio	ons - Editing form definition Table		_ [[]]	×I
Component Lists					≅
		Description	Value	Units	
	GlobalPropMode	Global property mode	Rigorous		
	GlobalFlashBasis	Global flash calculation method	Equation		
	GlobalFlashSmooth	Global tolerance for SmoothEquation flash	1,e-006		
Paralleter Ty	GlobalPropDamping	Flag for damping local property coefficients	Off		
Procedures	WaterID	Component name used for water			IQ2
Seriete	GlobalPDriven	Simulation is pressure driven	True		
Stream Types	GlobalRFlow	Simulation supports reverse flow	True		
Tacks	GlobalLiqHead	Liquid outlet pressure includes hydrostatic head	No		
	GlobalTimeScaler	Seconds per model time unit	3600,0		
	F_max	Flow rate upper limit (kmol/hr)	1,e+006		
	P_max	Pressure upper limit (bar)	500,0		
	P_min	Pressure lower limit (bar)	1,e-005		FR-10
Contents of Globals	T_max	Temperature upper limit (C)	800,0		$\sim$
	T_min	Temperature lower limit (C)	-100,0		
	TAmb	Ambient Temperature	283,15	ĸ	
Add Global AllGlobals	PropFilter	Time constant (hours) to be used in property filte	1,e-004		
Table	GlobalPolMethod	ZN/FR only: Equation or Procedure	Procedure		
	Distribution	Switch for Polymer MVD	Off		
	NptsMVVD	Number of points sampled in calculation of MVVD	100		
划 🛛	Upper	Upper limit on distribution	100000		
DynamicsOptio	GPC	GPC distribution calculation mode	On		
ns	DistType	Distribution plot style: MVVD or CLD	MWD		
Ready	Ready	ocal Dynamic at 0.00 Minutes			

Figura 49: Selecção do modelo de fluxo reversível.



Figura 50: Página de configuração de uma válvula.

NH3_prop_RK5BM_recycle_	DYN6.dynf - Asp	en Dynamics 20	06.5 - aspenONE										<u>_ 8 ×</u>
File Edit View Tools Run W	Aindow Help							845 (275 (845					
						<b>Ma G &amp; D B</b>		<u>xa oo xa</u>	<u>-</u> (]	NIE-100.Res	sults Table		_ <b>_ _ X</b>
Exploring - Si	Process Flor	vsheet Window		X R HZ.Resu	its rable				츾		Bescription	Yalue	linite
E C Simulation	[የ ቹ ሻ 6	id 0.05 💌 🔏	2 24 36 B) []	<u> </u>		Description	Value	Units	31	0	Duty	1.66794e+007	cal/s
Component Lists				Em		Total mass flow	38644.8	kalbr		QEnv	Rate of env. ht.	0,0	cal/s
🐚 Globals				Fv		Total volume flow	44463.9	Vmin		LMTD_Corr	LMTD (Corrected)	150,438	K
🕀 🚉 Flowsheet				T		Temperature	298,15	K	ł	Pdrop_hot	Hot side pressure drop	0,0100029	atm
🗄 🌄 Local Library				P		Pressure	151,0	atm	ł	Pdrop_cold	Cold side pressure drop	0,0100016	atm
E Ubraries	1 - 0 - 0	_ <del></del>		vf		Molar vapor fraction	1,0		-1	P_in_hot	Hot side inlet port press	sure 145,012	atm
Apalysis Tools	10			<u>I I I I I I I I I I I I I I I I I I I </u>		Total mass flow	142460,0	kginr	1	P in cold	Cold side inlet port tempt	stree 150,806	atm
UOM Sets	║┕╼╦━━━	• <del>•••</del> >		S4.Resu					<u>꾁</u>	T in cold	Cold side inlet port temp	eratu 297,146	K
Interfacing		<b>L</b> L -		- 1		Description	Value	Units	▲	P_out_hot	Hot side outlet port pres	sure 145,002	atm
	∥ ∿∿⊷		•	F		Takat is also danna	00450.4	lan alder		T_out_hot	Hot side outlet port temp	peratu 508,403	к
			T	Fi 🖉 59.R		2			۱×	_out_cold	Cold side outlet port pre	ssure 150,796	atm
				1 // E		Description	Value	Units	1		Cold side outlet port ten	nperat 543,273	K
				F		Total mole flow	52225,5	kmol/hr		4			
	Simulation	Messages											_ [0] ×[
Contents of Simulation	Number of	equations	9702 numb	er of state	s = 570								
	Simulation	n saved to :	ile C:\Docu	ments and S	ettings\.	Julio/Desktop/S	51mul\NH3_pro	op_RKSBM_:	rec	ycle_DYN6	dynt		
Lists													
~~ ~	FIC-N2		FIC-2	_ 🗆 🗵	TI-Ri	_ 🗆 ×	PIC-SEP1		1×	PIC-SEP	2 <u>-                                   </u>	TIC-HEA	<u>- 🗆 ×</u>
				w[ <mark>⊟</mark> ]∞a[ r⊒[			🖉 🔊 🤰	% 🗾 🐖	П	1 🖉 🔊 15		a 🖓 🔊 🕷	
Elauchast Clabals							SP SP	145.002	2				200.15
	SP	5000,	SP	32326,5305	SP	543,2733	PV	145,002	12	I SP	151,2		298,15
	PV	5000,188	PV	32325,7099	PV	543,2731		140,002		PV	151,2	PV	298,1498
	OP	50,7131	OP	50,4816	OP	0,0		12081,04	36		49,9021	UP	5540973,63
	FIC-H2	- 🗆 🗵	FIC-100	_ 🗆 🗡	TTI-Ro		SEP1_LC		l ×	SEP2_LO		XIC-H2	_ 🗆 🗵
🗢 <u>} ?</u> % 🗾 🖅 🖉	- A A 4		- 2 5 9			<u>ام العالم الما</u>		% <mark>-</mark> 3	лÌ		ાં બાનાં નાં નાં		
5P 0,4167					<u></u>	2 2 3 3 3 3 3 3 4 4						······································	
PV 0,4167	SP	14995,8075	SP	13471,9309	SP	690,4983	SP	1,9275	_	SP	5,8674	SP	0,6467
DP 13471 9012	PV	14996,2965	PV	13471,0374	PV	690,4982	PV	1,9275	_	PV	5,8674	PV	0,6467
	OP	50,6987	OP	50,0049	OP	0,0		49,5819		OP	50,2999	OP	14995,9015
]RC-101	FIC-REC	- 🗆 ×	RIFIC-101	- [D[ ×]	Not over		TIC-SEP1	_ [0	) ×	DI TIC-SEP		FI-PGE	- 🗆 🗡
🛥 🗞 🐧 🕺 🗾 🞜				لص ارسا – ۲				ec   -	172		<u>م محمد</u> م ارتبین ا م ا	a S S la	
SP 0 4393	www. <u>vs x</u> %				1 - A 1	2 % 🗩 🖾 🕫	Ma <u>wa</u> .	70 - 21 - 22	1	# <u>**</u> _%}]	70	<u> </u>	
0,4333	SP	40000,	SP	14201,0741	SP	49109,0256	SP	298,15		SP	241,0509	SP	4439,9882
1,4093	PV	40000,2746	PV	14200,0118	PV	49109,1497	PV	298,150	01	PV	241,051	PV	4440,0832
J14201,0856	0P	50,3638	OP	50,0451	<b>NP</b>	Inn	OP	-285476	626,	OP	-12914646,	OP	0,0
Ready						Re	ady 🛛	local		Dynamic at 0.0	0 Minutes		

Figura 51: Apresentação final da simulação no Aspen Dynamics, com as janelas de configuração dos vários controladores e indicadores.

NH3_prop_RK	SBM_recycle_DYN6.dynf - Aspen	Dynamics	; 2006.5 - aspen	ONE					<u>- 🗆 ×</u>
File Edit View	Tools Run Window Help								
D 🖻 🖬 ا 🗧	Explorer	Alt+F2	nic 🔹	> >	> 11 N	« / <b>%</b> 🔏	💢 🖄 😿 🙋	i 🙆 🛛	🔓 🛃 🛛 l
S Exploring - 6	Units of Measurement	•			H2.Res	ults Table			
	Custom Modeling						<b>.</b>		
	Snapshots	Alt+F3	<u>рал</u> ы				Description		value
	Variable Find	Ctrl+F			F		Total mole flow	14	996,3
Globa	Specification Analysis				Fm		Total mass flow	38	644,8
E - Flows	Homotopy				T		Temperature	29	403,9 8 15
📙 🦉 Local	Simulation Access Extensions				P		Pressure	15	1.0
🗄 🖳 🏹 Librar	Optimization	Alt+F4			vf		Molar vapor fractio	n 1.0	)
Simul	Estimation	Alt+F5			, FW		Total mass nov	N	142460,0
🗌 🦳 💭 Analy	On Line Links				DI 54.Res	ults Table			
	Configure Properties	Alt+F6					Description		
	Forms Browser	Ctrl+F2					Description		Value
	New Form				F F( ) 59.F	Results Table			147 H A
	New Script				Ē		Descript	ion	Va
	New Task						Total mole flow	,	52225.5
	Take Snapshot	Alt+F7		_					01110,0
Contents of Simu	Capture Screen Layout	Alt+F8			1 1 0	2 4 4 2		-	IN MILO
	Tables Control Colores		file U: ND	ocumen	its and S	bettings∿	Julio\Deskto	p/Sim	ul/NH3
	Initialize Control Scheme		file C:\D	ocumen	its and 9	Settings\	Julio∖Deskto	p∖Sim	ul\NH3
Analysis Tools	New Reaction Global Structure								
	Custom Reactions Model Wizard		118		1-1-1	ú s		[ [	DI PTC-SE
20	Generate Procedure Code		FIC-2			TI-Ri		Lě li	
	Export Compiled Flowsheet		🖉 🖓 🦻	8	7 2 1	a 🔊 🖓	) % 🗾 🖂		1 <u>88 [v</u> ]
Flowsheet			SP		32326 5305		E42 272	≓∥	SP 🗾
	Server Configuration				22220,0000		543,273	<u>-</u>	PV
	Settings	Alt+F9			J32320,7089		1543,273	<u>-   </u>	OP
Capture form layout	script Ready	local	Dynam	ic at 0.00	) Minutes				

Figura 52: Captura da disposição dos objectos, para posterior recuperação.



Figura 53: Recuperação da disposição dos objectos.

A documentação do Aspen Dynamics é mais pobre do que a encontrada para o Aspen Plus ou o HYSYS. Não há ajuda de contexto para as tabelas apresentadas nas figuras 49 e 50. Também não existe linha no rodapé, com comentário sobre o campo seleccionado.

Nem todos os modelos disponíveis no Aspen Plus têm correspondência no Aspen Dynamics. Enquanto que no HYSYS os modelos não suportados têm uma referência explícita a esse facto na *TAB "Dynamics*", no Aspen Plus pode-se procurar pelo objecto "*Dynamics*" no *Input* de cada modelo. No entanto, apesar das válvulas e dos "Tês" não terem o objecto "*Dynamics*", têm correspondência no Aspen Dynamics.

Em comum, nos dois simuladores: as operações envolvendo sólidos não podem ser utilizadas em simulação dinâmica. As limitações poderão ser ultrapassadas em futuras versões dos programas.

Por enquanto, simulações recorrendo ao Polymers Plus são incompatíveis com o modelo de fluxos reversíveis [7]. A simulação com reacções e modelos de propriedades de polímeros e oligómeros é exclusiva do Aspen Plus/Dynamics.

## Análise dos recursos computacionais exigidos por cada simulador

Na figura 54 mostram-se os processos a correr no computador, enquanto estão abertas as simulações de estado estacionário, quer do Aspen Plus (figura 27), quer do HYSYS (figura 28). Ao Aspen Plus estão associados dois processos, *apwn.exe* e *apmain.exe*, enquanto o HYSYS tem apenas o processo com o mesmo nome. O Aspen Plus consome mais do dobro da memória do que o HYSYS, para uma simulação equivalente.

E٧	Vindows Tas	ik Mana	ger				_		<
Eile	Options <u>V</u> i	ew Shy	t Down	<u>H</u> elp					
AD	Applications Processes Performance Networking Users								
			1						1
	Image Name			PID	User Name	CPU	Mem Usage		
	apwn.exe			2448	Julio	00	146.756 K		L
	Mcshield.exe	,		3632	SYSTEM	00	76.892 K		L
	hysys.exe			1404	Julio	00	65.152 K		L
	apmain.exe			1632	Julio	00	32.320 K		L
	explorer.exe	,		2472	Julio	00	19.304 K		L
	svchost.exe			1700	SYSTEM	00	8.688 K		L
	winlogon.exe	Э		1024	SYSTEM	00	3.544 K		L
	taskmgr.exe			3864	Julio	02	3.248 K		L
	ctfmon.exe		2552	Julio	00	2.332 K		L	
	CeEKey.exe		3564	Julio	00	2.328 K		L	
	RTHDCPL.EXE		2376	Julio	00	2.056 K		L	
	services.exe			1068	SYSTEM	00	1.932 K		L
	svchost.exe			3948	SYSTEM	00	1.856 K		L
	csrss.exe			992	SYSTEM	00	1.796 K		L
	svchost.exe			1296	SYSTEM	00	1.704 K		L
	svchost.exe			1376	NETWORK SERVICE	00	1.660 K		L
	igfxsrvc.exe			2188	Julio	00	1.592 K		L
	MDM.EXE			576	SYSTEM	00	1.368 K	<u> </u>	L
	•						<u> </u>		L
Show processes from all users     End Process						;			
Proce	Processes: 53 CPU Usage: 2% Commit Charge: 739M / 2442M								

Figura 54: Ocupação de memória de vários processos. *Mcshield.exe* é o antivírus.

O HYSYS recorre a um ficheiro, com a extensão .HSC. Quando é efectuada qualquer alteração ou se grava o documento, é criado um backup, com a extensão .bk0. Este backup preserva a versão anterior do ficheiro .HSC.

O Aspen Plus abre algumas dezenas de ficheiros embora restem seis, caso se encerre a simulação airosamente. Pode-se, em alternativa, trabalhar com base no ficheiro .bkp do Aspen Plus, em vez de utilizar o .apw. Ao utilizar o .bkp, é recomendável a reconciliação de todas as correntes (copiar o output para o input, veja-se a figura 55), pois o ficheiro .bkp não guarda os resultados da simulação (output). É possível abrir e guardar a simulação como .bkp, sem que restem outros ficheiros.



Figura 55: Reconciliação de todas as correntes da simulação: para abrir a janela de comando, selecciona-se "*Streams*" com o botão direito do rato.

Naturalmente, as simulações dinâmicas são mais exigentes do que as simulações em estado estacionário. Veja-se a figura seguinte.

<b>国</b> 、	Vindows Task Ma	anager					
Eile	Options <u>V</u> iew	Sh <u>u</u> t Dowi	n <u>H</u> elp				
Ар	plications Process	ses Perfo	ormance	Networking Users	1		1
	Image Name		PID	User Name	CPU	Mem Usage	
	AspenModeler.ex	e	2836	Julio	01	210.736 K	
	Mcshield.exe		3632	SYSTEM	00	77.676 K	
	hysys.exe		1044	Julio	00	67.384 K	
	WINWORD.EXE		1484	Julio	00	60.744 K	
	sim_server.exe		3680	Julio	00	48.376 K	
	svchost.exe		1700	SYSTEM	00	27.440 K	
	explorer.exe		2472	Julio	00	22.200 K	
	taskmgr.exe		3144	Julio	01	2.884 K	
	csrss.exe		992	SYSTEM	00	2.852 K	
	RTHDCPL.EXE		2376	Julio	00	2.772 K	
	ctfmon.exe		2552	Julio	00	2.672 K	
	winlogon.exe		1024	SYSTEM	01	2.600 K	
	CeEKey.exe		3564	Julio	00	2.472 K	
	DLACTRLW.EXE		1508	Julio	00	2,360 K	
	services.exe		1068	SYSTEM	00	2.292 K	
	svchost.exe		3948	SYSTEM	00	2.032 K	
	am_task_server.e	xe	3976	Julio	00	2.028 K	
	svchost.exe		1296	SYSTEM	00	2.012 K	<u> </u>
	•					<u>)</u>	
Show processes from all users     End Process						5	
Proc	Processes: 55 CPU Usage: 3% Commit Charge: 812M / 2442M //						

Figura 56: Ocupação de memória de vários processos: *AspenModeler.exe*, *sim\_server.exe* e *am\_task\_server.exe* foram carregados pelo Aspen Dynamics.

As simulações dinâmicas carregadas são as já apresentadas nas figuras 38 e 48, para HYSYS e Aspen Dynamics, respectivamente. A especificação dinâmica do HYSYS tem pouco peso na utilização de memória RAM, como se pode ver pelo incremento marginal do processo *hysys.exe*, entre as figuras 54 e 56. Já a simulação em Aspen Dynamics recorre a três processos, levando o seu conjunto quase 4 vezes a memória ocupada pelo HYSYS, para uma simulação equivalente.

Efectuaram-se dois testes de desempenho dos simuladores dinâmicos:

- Com base nas condições do estado estacionário, quanto tempo (real) é que demora a obter 60 segundos de simulação dinâmica. A actualização do ecrã ocorre ao fim de 60 segundos (frequência de actualização de 1 min<sup>-1</sup>).
- Numa função de "treino de operador", com actualização do ecrã a cada segundo (frequência de actualização de 1 s<sup>-1</sup>), quanto tempo de simulação é que se obtém em 60 segundos de tempo real.

Os resultados obtidos resumem-se na tabela seguinte. O resultado, adimensional, é a razão (tempo de simulação)/(tempo de cronómetro). Quanto mais alto, mais rápida é a simulação.

Frequência de	Tempo simulação/Tempo de cronómetro					
actualização	HYSYS	Aspen Dynamics				
1 min⁻¹	6,0	93,9				
1 s <sup>-1</sup>	4,5	2,2				

O HYSYS adequa-se mais a simulações interactivas, enquanto o Aspen Dynamics se adequa mais a simulações previsionais, com tempos de actualização bastante longos. Só com o *Communication (time)* de uma hora, é que a simulação do Aspen Dynamics fica limitada pelo desempenho do CPU. No entanto, caso se introduza uma perturbação (por ex. alteração de *setpoint*), o desempenho cai bruscamente para valores comparáveis ao HYSYS, até que se atinja novo "estado estacionário".

Cada simulação correu num sistema com processador Intel Core Duo T2400 (1,83GHz) e verificou-se que nenhuma delas é escalável aos dois *cores*. A ocupação global deste processador, com os processos de uma simulação, não vai além dos 50%.

A simulação em Aspen Dynamics é definida por dois ficheiros, .dynf e .appdf, que não têm necessariamente o mesmo nome, nem a mesma data. O ficheiro .appdf pode ser usado por vários ficheiros .dynf, pelo que se desaconselha a alteração do nome. Ao abrir o ficheiro .dynf, o .appdf deve estar no mesmo directório, ou num sub-directório com o nome do ficheiro .dynf. Neste sub-directório são criados os ficheiros temporários da simulação, incluindo uma cópia do .appdf. Fechada a simulação, o sub-directório mantém-se, mas a maioria do seu conteúdo é eliminado, incluindo a cópia do .appdf. Os *snapshots* (momentos de simulação) gravados ficam no sub-directório.

O HYSYS dinâmico recorre ao ficheiro .HSC, tal como no estado estacionário. Recomenda-se, portanto, que uma vez convertida a simulação de estado estacionário para dinâmico, o ficheiro seja gravado com novo nome. Por cada ficheiro gravado, é criado um backup, com a extensão .bk0. É também possível criar *snapshots*, conforme se indica na figura 57. Os ficheiros criados têm extensão .hsp. Por omissão, podem ser usados autonomamente, pois incluem o *flowsheet*. Caso se criem *snapshots* para diferentes ficheiros .HSC, deve-se ter o cuidado de nomear adequadamente, ou dirigir para os directórios adequados. Por omissão, o HYSYS junta todos os *snapshots* num mesmo directório.



Figura 57: Criação de Snapshots no HYSYS.

### Protocolo de arranque da simulação, com linhas cheias de azoto

Baseado na simulação dinâmica HYSYS, conseguiu-se purgar toda a instalação com a corrente de Azoto do processo (96% de N<sub>2</sub> e 4% de Argon). Foi mantido o controlo automático da pressão (PIC-SP1=144 atm e PIC-SP2=151 atm). Para este efeito, é mantido um caudal de 500 kmol/h de azoto (FIC-N2 em AUTO). Os controladores de temperatura estão em manual e a zero. O controlador FIC-2 em manual e 50%, FIC-101 e 102 em manual e 0%.

O arranque implica o aquecimento dos reactores a 550 K. Recorre-se, para esse efeito ao controlador TIC-HEA e à corrente de reciclagem, regulada pelo FIC-RG. Há no entanto que proteger o compressor e o 2º condensador (SEP2) das altas temperaturas. SEP2 deverá ficar abaixo dos 310 K, que é facilmente assegurado se TIC-SP1 estiver abaixo dos 300 K. No entanto, temperaturas excessivamente baixas (TIC-SP1 < 280 K) causarão certamente descompressão. Caso PIC-SP1 se mantenha abaixo de 144 atm, levará à paragem do compressor.



Figura 58: Simulação de arranque em HYSYS, com linhas cheias de azoto. O *flowsheet* apresenta um esquema de cores dependente da pressão.

Com base na figura 58, sugere-se um protocolo de arranque que demorará cerca de 45 minutos.

- 1) FIC-RG AUTO. SP=18000 kmol/h
- 2) TIC-SP1 MAN. OP=1%

3) TIC-HEA AUTO. SP=350 K. TIC-SP1 OP=3

- 4) TIC-HEA SP=400K. TIC-SP1 OP=6
- 5) TIC-HEA SP=450 K. TIC-SP1 OP=9
- 6) TIC-HEA SP=500 K. TIC-SP1 OP=12
- 7) TIC-HEA SP=530 K. TIC-SP1 OP=15
- 8) TIC-HEA SP=560 K. TIC-SP1 OP=16, subir para 17 quando TIC-SP2 indicar mais de 305 K.

Aos 20 minutos, TI-Ri deve estar próximo de 550 K. Se assim for:

9) Confirmar RATO-100 AUTO, SP=0,4224; RATO-101 AUTO, SP=0,4467

- 10) FIC-100 Casc (remote); FIC-101 Casc (remote)
- 11) FIC-H2 AUTO, SP=1500 kmol/h. TIC-SP1 OP=19
- 12) FIC-H2 SP=3000 kmol/h. TIC-SP1 OP=21
- 13) FIC-H2 SP=5000 kmol/h. TIC-SP1 OP=23
- 14) TIC-HEA SP=450 K; TIC-SP1 AUTO, SP=298,15 K

15) Baixar progressivamente TIC-HEA SP até 298,15 K; no entanto, a temperatura final apresentada será idêntica a TIC-SP2, que tem OP=0. Este ponto é atingido aproximadamente aos 30 minutos.

- 16) FIC-H2 SP=7000 kmol/h
- 17) FIC-RG SP=30000 kmol/h
- 18) FIC-H2 SP=10000 kmol/h
- 19) FIC-N2 SP=3000 kmol/h
- 20) LIC-SP1 AUTO, SP=50%
- 21) TIC-SP2 AUTO. SP=290 K
- 22) FIC-2 OP=70%

23) FIC-RG SP=40000 kmol/h; no entanto, a válvula poderá abrir completamente, sem que se atinjam as 40000 kmo/h.

- 24) FIC-H2 SP=12000 kmol/h
- 25) FIC-N2 SP=4000 kmol/h
- 26) TIC-SP2 SP=280 K
- 27) FIC-H2=15000 kmol/h
- 28) TIC-SP2=243,2 K
- 29) XIC-H2: colocar em MAN
- 30) Quando XIC-H2 PV≈0,655, colocar em AUTO e SP=0,6548. FIC-H2 Casc (remote)
- 31) Subir progressivamente FIC-N2 SP até 5000 kmol/h
- 32) FIC-2 AUTO, SP=32100 kmol/h
- 33) LIC-SP2 AUTO, SP=50%. O nível só atingirá esse ponto depois dos 60 minutos.

## Conclusão

Computacionalmente, o conjunto Aspen Plus/Dynamics tem uma arquitectura modular e aparentemente, mais aberta. Os modelos existentes podem ser expandidos com subrotinas em FORTRAN: os programas e a documentação referem-no constantemente.

O HYSYS incorpora um editor de Visual Basic, para a escrita de *User Variables*. Tem um mecanismo próprio de importação de *Extensions*, designação atribuída a módulos externos, programados normalmente em Visual Basic ou C++. O portal de suporte da Aspentech disponibiliza alguns exemplos [7].

Ambos os simuladores aceitam os modelos desenvolvidos na plataforma Aspen Custom Modeler (ACM), mas por razões históricas, a integração e documentação é melhor no Aspen Plus.

Conclui-se, portanto, que a capacidade de qualquer um dos simuladores não se esgota nos modelos pré-instalados. Mas tendo em conta a experiência adquirida ao longo deste trabalho, aconselha-se um ou outro simulador, consoante o problema a resolver. Perante duas alternativas, a primeira indica a minha preferência.

O problema inclui:

#### 1) Polímeros?

- a) Reacção de polimerização: Aspen Plus
- b) Separação entre fracções de polímeros: Aspen Plus
- c) Separação baseada na solubilidade de polímeros num solvente: Aspen Plus
- d) Separação de sólidos: Ver 2). Hypocomponent-HYSYS; Pseudocomponent-Aspen Plus.
- e) Com simulação dinâmica: Aspen Plus/Dynamics.
- 2) Sólidos? Operações de sólidos não estão disponíveis para simulação dinâmica.
  - a) Ciclone: HYSYS ou Aspen Plus
  - b) Hidrociclone: **HYSYS** ou Aspen Plus
  - c) Filtro rotativo sob vácuo: HYSYS ou Aspen Plus
  - d) Filtro de mangas: HYSYS ou Aspen Plus
  - e) Outra operação envolvendo sólidos: verificar se está disponível no Aspen Plus.
- 3) Destilação reactiva?
  - a) Só estado estacionário: Aspen Plus ou HYSYS
  - b) Simulação dinâmica: Aspen Plus/Dynamics. Para HYSYS, o suporte da Aspentech não tem informação [7]. Luyben reportou insucesso [5].
- 4) Simulação dinâmica?
  - a) Simulação dinâmica com o objectivo de prever o resultado de uma perturbação, horas depois da sua ocorrência: Aspen Plus/Dynamics ou HYSYS
  - b) Simulação dinâmica, com enfoque na afinação dos controladores, testando diferentes métodos: Aspen Plus/Dynamics ou HYSYS
  - c) Simulação dinâmica para verificar se os anéis de controlo permitem o arranque e/ou paragem do processo: HYSYS ou Aspen Plus/Dynamics.

De facto, conseguem-se resolver mais problemas com o Aspen Plus/Dynamics do que com o HYSYS. Mas excluídos os problemas particulares, indicados acima, recomenda-se o HYSYS:

- Em estado estacionário, o cálculo bidireccional possibilita a resolução do problema, fornecendo os dados das correntes de saída e sem recorrer a *design-specs* (restrições e objectivos de convergência da simulação);
- 2) Solver activo, que produz resultados (ou erros), logo que se fornece a informação suficiente;
- 3) Dynamic Assistant, que facilita muito a migração para modo dinâmico;
- 4) Possibilidade de adicionar os anéis de controlo ao flowsheet, ainda em estado estacionário;
- 5) Interface comum, entre simulação estacionária e dinâmica;
- 6) Um só ficheiro para cada simulação.

## Referências

[1] http://www.che.utexas.edu/cache/Appendix%20A-survey.ppt

[2] http://www.aspentech.com/brochures/1270\_Aspen\_HYSYS\_Product\_Brochure\_FINAL.pdf

[3] "A Real-Time Approach to Process Control", 2<sup>nd</sup> Edition, W. Y. Svrcek, D. P. Mahoney and B. R. Young
© 2006 John Wiley & Sons, Ltd. ISBN: 978-0-470-02533-8

[4] CD (enciclopédia) multimedia "Using Process Simulators in Chemical Engineering", que acompanha o livro "Product and Process Design Principles: Synthesis, Analysis, and Evaluation", 2<sup>nd</sup> Edition, Seider, Seader & Lewin
 © 2004 John Wiley & Sons, Ltd., ISBN: 978-0-471-21663-6,

**[5]** "Plantwide Dynamic Simulators in Chemical Processing and Control", 1<sup>st</sup> edition, Luyben © 2002 CRC Press, ISBN: 978-0824708016

[6] "Ullmann's encyclopedia of industrial chemistry", 5th ed. © 1985-1995 VCH, ISBN: 3527201009

[7] http://support.aspentech.com

## Anexo A

#### Lista alfabética de casos implementados nos simuladores de processos

Nas tabelas seguintes resume-se a lista de casos que acompanham a bibliografia [4], [5] e os próprios programas. Não se trata de uma recolha exaustiva, pois na pesquisa inicial, realizada ainda sobre a versão 2006.0, procurava casos com cinética de reacção disponível.

A lista foi entretanto actualizada, em Outubro de 2008, para incluir casos de biocombustíveis que acompanham a versão 2006.5. Incluíram-se também exemplos não seleccionados na primeira pesquisa.

Cada nova geração de simuladores traz novos exemplos. A próxima versão de Aspen Plus V7.0 incluirá novos casos de co-geração, ácido sulfúrico, central termoeléctrica de ciclo combinado (IGCC) e exemplos de remoção de CO<sub>2</sub>, usando várias aminas e outros solventes.

Há ainda exemplos disponíveis no portal de suporte da Aspentech [7], mediante credenciais de acesso. Em caso de necessidade, os colaboradores do LTI-DEQB, eu ou o Prof. Filipe Gama Freire poderemos providenciar o acesso.

Processo	Fonte	Aspen +	Aspen Dyn	HYSYS (Est/Din)	Cinética disponível
1,2-dicloropropano	Luyben	Sim	Sim	Ambos	Sim (PFR)
2-Etilhexanol	PEP	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
Acetato de etilo (destilação reactiva)	Luyben	Sim	Sim	Ambos	Sim
Acetato de vinilo, água, ácido acético (dest. azeotrópica)	Luyben	Sim	Sim	Ambos	Não
Ácido acético	PEP	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
Ácido Tereftálico	PEP	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
Acrilonitrilo	PEP	Sim	Não	Não	Não (Rendimento, Conversão)
$Al_2O_3$ (alumina)	Aspen Applications	Sim	Não	Não	Não (Conversão), electrólitos
Alquilação (por H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub> )	PEP	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
Amoníaco	HYSYS 2006.5 Samples	Não	Não	Estacionário	Sim (PFR)
Amoníaco	Seider & Lewin	Sim	Não	Estacionário	Sim (PFR)
Benzeno e ciclohexano, destilação azeotrópica c/ acetona	HYSYS 2006.5 Samples	Não	Não	Dinâmico	Não
Benzeno, tolueno (destilação c/ integração energética)	Luyben	Sim	Sim	Ambos	Não
Bifenilo (por hidroalquilação do tolueno)	Luyben	Sim	Sim	Ambos	Sim (PFR)
Bifenilo (por hidroalquilação do Tolueno)	Seider & Lewin	Sim	Não	Não	Sim (PFR)
Biodiesel	Aspen App 2006.5	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
Bioetanol (a partir de "palha" de milho)	Aspen App 2006.6	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
Bioetanol (a partir de grão de milho)	Aspen App 2006.6	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
Butadieno (destilação extractiva com DMF)	PEP	Sim	Não	Não	Não (s/reactor)
Butanol	PEP	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
Carvão (combustão e processamento)	Aspen Examples	Sim	Não	Não	Não (Gibbs)
Carvão: central de ciclo combinado (IGCC)	Aspen Applications	Sim	Não	Não	Não (Gibbs, Conversão, Rendimento)
Ciclohexano (por hidrogenação do benzeno)	Aspen Dynamics Ex.	Sim	Tutorial	Não	Não (Conversão)
Ciclohexano (por hidrogenação do benzeno)	Aspen Examples	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
Ciclohexilamina	Luyben	Sim	Sim	Ambos	Sim (CSTR)
Cloreto de Vinilo	PEP	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
CO <sub>2</sub> (separação de)	PEP	Sim	Não	Não	Não
Compressor (simulação de)	HYSYS 2006.5 Samples	Não	Não	Dinâmico	Não
Crude, coluna de fraccionamento (tutorial)	HYSYS tutorial	Não	Não	Ambos	Não
Cumeno	Aspen Examples	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
Cumeno	PEP	Sim	Não	Não	Não (Conversão)

Processo	Fonte	Aspen +	Aspen Dyn	HYSYS (Est/Din)	Cinética disponível
Debutanizer: separação hidrocarbonetos $C_4(-)$ de $C_5(+)$	HYSYS 2006.5 Samples	Não	Não	Dinâmico	Não
Depropanizer: sep de hidrocarbonetos de $C_3(-)$ de $C_4(+)$	HYSYS 2006.5 Samples	Não	Não	Ambos	Não
Enxofre (remoção de), SRU	PEP	Sim	Não	Não	Não (Rendimento, Conversão)
Estireno (destilação de)	Aspen Applications	Sim	Não	Não	Sim [CSTR], Polymers Plus
Estireno (processo FINA/Badger)	PEP	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
Estireno (processo Lummus/Monsanto/UOP)	PEP	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
Estireno (processo Snamprogetti)	PEP	Sim	Não	Não	Sim, só p/ dest. rectiva (Conversão)
Etanol (de fermentador, separação)	HYSYS 2006.5 Samples	Não	Não	Estacionário	Não
Etanol (destilação azeotrópica c/ benzeno)	HYSYS 2006.5 Samples	Não	Não	Estacionário	Não
Etanol (destilação azeotrópica c/ ciclohexano)	Aspen Dynamics Ex.	Sim	Tutorial	Não	Não
Etilbenzeno	Luyben	Sim	Sim	Ambos	Sim (CSTR)
Etilbenzeno	PEP	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
Etileno	PEP	Sim	Não	Não	Não (Rendimento, Conversão)
Etileno glicol (destilação reactiva)	Luyben	Sim	Sim	Ambos	Sim
Etilenodiamina	PEP	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
FCC	PEP	Sim	Não	Não	Não (s/ reactor)
Formaldeído	PEP	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
Gás natural (desidratação de)	Aspen Applications	Sim	Não	Não	Não
Gás natural (desidratação de)	HYSYS 2006.5 Samples	Não	Não	Estacionário	Não
Gás natural (dessulfuração de)	HYSYS tutorial	Não	Não	Estacionário	Não
Gás natural (expansão de)	HYSYS 2006.5 Samples	Não	Não	Estacionário	Não
Gás natural (liquefacção de), NGL	PEP	Sim	Não	Não	Não
HDPE	Aspen Applications	Sim	Não	Não	Sim (CSTR), Polymers Plus
HDPE	Aspen Dynamics Ex.	Sim	Tutorial	Não	Sim (CSTR), Polymers Plus
Hexanoato de metilo	Aspen Dynamics Ex.	Sim	Sim	Não	Sim (CSTR)
Hidrogénio (gás de síntese)	HYSYS tutorial	Não	Não	Estacionário	Não (Conversão)
Isobutano (isomerização do n-butano)	Luyben	Sim	Sim	Ambos	Sim (PFR)
Isooctano (aquilação isobutano + buteno)	Luyben	Sim	Sim	Ambos	Sim (CSTR)
LDPE	Aspen Applications	Sim	Não	Não	Sim (PFR), Polymers Plus
LDPE	PEP	Sim	Não	Não	Sim (PFR ou CSTR), Polymers Plus
LLDPE	PEP	Sim	Não	Não	Sim (CSTR), Polymers Plus

Processo	Fonte	Aspen +	Aspen Dyn	HYSYS (Est/Din)	Cinética disponível
Metanol	PEP	Sim	Não	Não	Não (equilíbrio, conversão)
Metilaminas	Luyben	Sim	Sim	Não	Não (Gibbs)
Metilciclohexano e Tolueno (dest. extractiva c/ fenol)	Aspen Dynamics Ex.	Sim	Tutorial	Não	Não
Metil-Cloroacetato	Aspen Applications	Sim	Não	Não	Sim (Dest. Reactiva, 3 fases)
Monoclorobenzeno	Seider & Lewin	Sim	Não	Não	Não (s/reactor, só separação)
MTBE (destilação reactiva)	Aspen Dynamics Ex.	Sim	Tutorial	Não	Sim (Fortran)
Nylon-6	Aspen Applications	Sim	Não	Não	Sim (CSTR & PFR), Polymers Plus
Nylon-6	Aspen Dynamics Ex.	Sim	Tutorial	Não	Sim (CSTR & PFR), Polymers Plus
Óxido de etileno	PEP	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
Óxido de propileno	PEP	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
Penicilina (recuperação de)	Aspen Applications	Sim	Não	Não	Não
Permutador de calor: controlo de nível de liq da caixa	HYSYS 2006.5 Samples	Não	Não	Dinâmico	Não
Piridina e picolina	PEP	Sim	Não	Não	Não (Conversão)
РММА	Aspen Applications	Sim	Não	Não	Sim (Batch), Polymers Plus
Poli(estireno-butadieno)	Aspen Applications	Sim	Não	Não	Sim (Batch), Polymers Plus
Poli(estireno-etilacrilato)	Aspen Applications	Sim	Não	Não	Sim (Batch), Polymers Plus
Policarbonato	PEP	Sim	Não	Não	Sim (CSTR & PFR), Polymers Plus
Poliestireno	Aspen Applications	Sim	Não	Não	Sim (CSTR & PFR), Polymers Plus
Poliestireno	Aspen Dynamics Ex.	Sim	Tutorial	Não	Sim (CSTR & PFR), Polymers Plus
Poliestireno expandido (em suspensão)	Aspen Applications	Sim	Não	Não	Sim (Batch), Polymers Plus
Polipropileno	PEP	Sim	Não	Não	Sim (CSTR), Polymers Plus
Polipropileno (Ziegler-Natta)	Aspen Applications	Sim	Não	Não	Sim (CSTR), Polymers Plus
Propileno	PEP	Sim	Não	Não	Não (Rendimento)
Propileno/Propano, <i>splitter</i> de	HYSYS 2006.5 Samples	Não	Não	Estacionário	Não
Propilenoglicol	HYSYS tutorial	Não	Não	Ambos	Sim (CSTR)
Propilenoglicol	Seider & Lewin	Sim	Não	Não	Sim (CSTR)
Rede de distribuição de água	HYSYS 2006.5 Samples	Não	Não	Dinâmico	Não
SBR	Aspen Applications	Sim	Não	Não	Sim (Batch), Polymers Plus
Sour Water Stripper	HYSYS 2006.5 Samples	Não	Não	Estacionário	Não
Tetraclorometano	Aspen Dynamics Ex.	Sim	Tutorial	Não	Sim (CSTR)
Tetrahidrofurano, água (destilação azeotrópica)	Luyben	Sim	Sim	Ambos	Não

## Anexo B

#### Codificação do ficheiro de input do caso de produção de amoníaco

; ;Input Summary created by Aspen Plus Rel. 21.0 at 16:12:46 Fri Jul 18, 2008 ;Filename nh3\_convertor\_opt.inp ;

DYNAMICS DYNAMICS RESULTS=ON

TITLE 'Reactor Demo'

**IN-UNITS MET** 

DEF-STREAMS CONVEN ALL

SIM-OPTIONS IN-UNITS ENG SIM-OPTIONS FREE-WATER=NO NPHASE=2

DATABANKS PURE11 / AQUEOUS / SOLIDS / INORGANIC / & NOASPENPCD

PROP-SOURCES PURE11 / AQUEOUS / SOLIDS / INORGANIC

COMPONENTS HYDRO-01 H2 / NITRO-01 N2 / AMMON-01 H3N / ARGON AR / METHA-01 CH4

FLOWSHEET

BLOCK MIX-100 IN=FEED RECYCLE OUT=S1 BLOCK TEE-100 IN=S1 OUT=CS-2A S2 CS-1A BLOCK PFR-100 IN=S3 OUT=S4 BLOCK MIX-101 IN=S4 CS-1B OUT=S5 BLOCK PFR-101 IN=S5 OUT=S6 BLOCK MIX-102 IN=S6 CS-2B OUT=S7 BLOCK PFR-102 IN=S7 OUT=S8 BLOCK FFR-102 IN=S8 S2 OUT=S9 S3 BLOCK VLV-100 IN=CS-1A OUT=CS-1B BLOCK VLV-101 IN=CS-2A OUT=CS-2B

#### PROPERTIES PSRK PROPERTIES IDEAL / RK-SOAVE

PROP-DATA RKSKBV-1 IN-UNITS ENG PROP-LIST RKSKBV BPVAL HYDRO-01 NITRO-01 .0978000000 0.0 0.0 -459.6699923 & 1340.329993 BPVAL NITRO-01 HYDRO-01 .0978000000 0.0 0.0 -459.6699923 & 1340.329993 BPVAL HYDRO-01 METHA-01 -.0222000000 0.0 0.0 -459.6699923 &

1340.329993 BPVAL METHA-01 HYDRO-01 -.0222000000 0.0 0.0 -459.6699923 & 1340.329993 BPVAL NITRO-01 METHA-01 .0278000000 0.0 0.0 -459.6699923 & 1340.329993 BPVAL METHA-01 NITRO-01 .0278000000 0.0 0.0 -459.6699923 & 1340.329993 BPVAL NITRO-01 AMMON-01 .2222000000 0.0 0.0 -459.6699923 & 1340.329993 BPVAL AMMON-01 NITRO-01 .2222000000 0.0 0.0 -459.6699923 & 1340.329993 BPVAL NITRO-01 ARGON 0.0 0.0 0.0 -459.6699923 1340.329993 BPVAL ARGON NITRO-01 0.0 0.0 0.0 -459.6699923 1340.329993 BPVAL AMMON-01 ARGON -.2200000000 0.0 0.0 -459.6699923 & 1340.329993 BPVAL ARGON AMMON-01 -.2200000000 0.0 0.0 -459.6699923 & 1340.329993 BPVAL ARGON METHA-01 .0252000000 0.0 0.0 -459.6699923 & 1340.329993 BPVAL METHA-01 ARGON .0252000000 0.0 0.0 -459.6699923 & 1340.329993 STREAM FEED **IN-UNITS ENG** SUBSTREAM MIXED TEMP=25. <C> PRES=150. <atm> & MOLE-FLOW=20000. <kmol/hr> MOLE-FRAC HYDRO-01 0.72 / NITRO-01 0.24 / AMMON-01 0. / & ARGON 0.01 / METHA-01 0.03 STREAM RECYCLE SUBSTREAM MIXED TEMP=25. <C> PRES=150. MOLE-FLOW=40000. MOLE-FRAC HYDRO-01 0.61 / NITRO-01 0.2 / AMMON-01 0.015 / & ARGON 0.045 / METHA-01 0.13 STREAM S4 SUBSTREAM MIXED TEMP=690.2464 <K> PRES=150. MOLE-FLOW HYDRO-01 24696.7 / NITRO-01 8125.566 / AMMON-01 & 4708.867 / ARGON 1600. / METHA-01 4640. BLOCK MIX-100 MIXER **IN-UNITS ENG** PARAM PRES=150. <atm> T-EST=25. <C> **BLOCK MIX-101 MIXER IN-UNITS ENG** PARAM PRES=0. <atm> **BLOCK MIX-102 MIXER IN-UNITS ENG BLOCK TEE-100 FSPLIT IN-UNITS ENG** FRAC CS-2A 0.1 / CS-1A 0.1 **BLOCK E-100 HEATX** PARAM T-COLD=270. <C> CALC-TYPE=DESIGN U-OPTION=PHASE & F-OPTION=CONSTANT CALC-METHOD=SHORTCUT FEEDS HOT=S8 COLD=S2 PRODUCTS HOT=S9 COLD=S3 HEAT-TR-COEF L-L=100. B-L=140. V-L=50. L-B=140. B-B=250. &

V-B=60. L-V=50. B-V=60. V-V=35.

BLOCK PFR-100 RPLUG IN-UNITS ENG PARAM TYPE=ADIABATIC LENGTH=1.5 <meter> DIAM=2. <meter> & NPHASE=2 PRES=0. <atm> NPOINT=20 IGN-CAT-VOL=YES & CAT-PRESENT=YES BED-VOIDAGE=0.5 CAT-RHO=2500. <kg/cum> & OPT-PDROP=SPECIFIED INTEG-PARAMS CUTOFF=1E-005 BLOCK-OPTION FREE-WATER=NO REACTIONS RXN-IDS=R-1

BLOCK PFR-101 RPLUG IN-UNITS ENG PARAM TYPE=ADIABATIC LENGTH=2. <meter> DIAM=2. <meter> & NPHASE=2 PDROP=0. <atm> NPOINT=20 IGN-CAT-VOL=YES & CAT-PRESENT=YES BED-VOIDAGE=0.5 CAT-RHO=2500. <kg/cum> & OPT-PDROP=SPECIFIED BLOCK-OPTION FREE-WATER=NO REACTIONS RXN-IDS=R-1

BLOCK PFR-102 RPLUG IN-UNITS ENG PARAM TYPE=ADIABATIC LENGTH=2.5 <meter> DIAM=2. <meter> & NPHASE=2 PDROP=0. NPOINT=20 IGN-CAT-VOL=YES & CAT-PRESENT=YES BED-VOIDAGE=0.5 CAT-RHO=2500. <kg/cum> & OPT-PDROP=SPECIFIED BLOCK-OPTION FREE-WATER=NO REACTIONS RXN-IDS=R-1

BLOCK VLV-100 VALVE PARAM P-DROP=1.325

BLOCK VLV-101 VALVE PARAM P-DROP=1.325

EO-CONV-OPTI

```
CONSTRAINT C-1
DEFINE TEMPS5 STREAM-VAR STREAM=S5 SUBSTREAM=MIXED &
VARIABLE=TEMP
SPEC "TEMPS5" GE "573"
TOL-SPEC "0.1"
```

CONSTRAINT C-2 DEFINE TEMPS7 STREAM-VAR STREAM=S7 SUBSTREAM=MIXED & VARIABLE=TEMP SPEC "TEMPS7" GE "573" TOL-SPEC "0.1"

CONSTRAINT C-3 DEFINE CS1 BLOCK-VAR BLOCK=TEE-100 SENTENCE=FRAC & VARIABLE=FRAC ID1=CS-1A DEFINE CS2 BLOCK-VAR BLOCK=TEE-100 SENTENCE=FRAC & VARIABLE=FRAC ID1=CS-2A SPEC "CS1+CS2" LE "0.6" TOL-SPEC "0.001"

OPTIMIZATION O-1 DEFINE NH3 MOLE-FRAC STREAM=S8 SUBSTREAM=MIXED & COMPONENT=AMMON-01 MAXIMIZE "NH3" CONSTRAINTS C-1 / C-2 / C-3 VARY BLOCK-VAR BLOCK=TEE-100 SENTENCE=FRAC VARIABLE=FRAC & ID1=CS-1A LIMITS "0.0" "0.4" VARY BLOCK-VAR BLOCK=TEE-100 SENTENCE=FRAC VARIABLE=FRAC & ID1=CS-2A LIMITS "0.0" "0.4"

STREAM-REPOR MOLEFLOW MOLEFRAC

REACTIONS R-1 POWERLAW IN-UNITS SI REAC-DATA 1 KINETIC PHASE=V CBASIS=PARTIALPRES REAC-DATA 2 PHASE=V CBASIS=PARTIALPRES RATE-CON 1 PRE-EXP=5.844E-007 ACT-ENERGY=91000. <kJ/kmol> RATE-CON 2 PRE-EXP=76980. ACT-ENERGY=140000. <kJ/kmol> STOIC 1 MIXED HYDRO-01 -3. / NITRO-01 -1. / AMMON-01 2. STOIC 2 MIXED AMMON-01 -2. / HYDRO-01 3. / NITRO-01 1. POWLAW-EXP 1 MIXED HYDRO-01 1.5 / MIXED NITRO-01 0.5 POWLAW-EXP 2 MIXED AMMON-01 1.

;;;;

;

59

## Anexo C

## Nova nomenclatura dos produtos AspenTech Process Engineering V7

Product Name Release 2006.5	Product Name V7
Aspen Acol+™	Aspen Air Cooled Exchanger
Aspen Adsim®	Aspen Adsorption
Aspen Batch Plus®	Aspen Batch Process Developer
Aspen BatchSep™	Aspen Batch Distillation
Aspen CatRef®	Aspen Plus® Reformer
Aspen COMThermo®	Aspen HYSYS® Thermodynamics COM Interface
Aspen Dynamics®	Aspen Plus® Dynamics
Aspen FCC®	Aspen Plus® CatCracker
Aspen FiredHeater	Aspen Fired Heater
Aspen FLARENET™	Aspen Flare System Analyzer
Aspen HX-Net®	Aspen Energy Analyzer
Aspen Hydrocracker®	Aspen Plus® Hydrocracker
Aspen Hydrotreater™	Aspen Plus® Hydrotreater
Aspen HYSYS OLGAS™	Aspen HYSYS® Pipeline Hydraulics - OLGAS 2-Phase
Aspen HYSYS OLGAS 3-Phase™	Aspen HYSYS® Pipeline Hydraulics - OLGAS 3-Phase
Aspen HYSYS PIPESYS™	Aspen HYSYS® Pipeline Hydraulics - PIPESYS
Aspen HYSYS RTO™ Offline	Aspen HYSYS® Offline Optimizer
Aspen Icarus Process Evaluator®	Aspen Process Economic Analyzer
Aspen Icarus Project Manager®	Aspen In-Plant Cost Estimator
Aspen Kbase®	Aspen Capital Cost Estimator
Aspen Plate+™	Aspen Plate Exchanger
Aspen Polymers Plus™	Aspen Polymers
Aspen RateSep™	Aspen Rate-Based Distillation
Aspen RefSYS™	Aspen HYSYS® Petroleum Refining
Aspen RefSYS Catcracker™	Aspen HYSYS® CatCracker
Aspen RefSYS Hydrocracker™	Aspen HYSYS® Hydrocracker
Aspen RefSYS Reformer™	Aspen HYSYS® Reformer
Aspen Split™	Aspen Distillation Synthesis
Aspen Tasc+™	Aspen Shell & Tube Exchanger
Aspen Teams®	Aspen Shell & Tube Mechanical
Aspen Utilities Operations™	Aspen Utilities On-Line Optimizer
Aspen Zyqad™	Aspen Basic Engineering

Os produtos da versão 2006.5 que não constam nesta lista mantêm a designação. Fonte: <u>http://support.aspentech.com</u>

## Anexo D

#### Cuidados a ter na simulação de Processos Químicos reais

O computador é um instrumento que ajuda à tomada de decisão e não um substituto para o julgamento do Engenheiro. Ele é o responsável pelas suas decisões e cabe a ele verificar se a ferramenta informática é ou não adequada para representar/resolver um dado problema.

Os simuladores de processos são construtores de modelos, baseados em modelos de operações unitárias e em modelos termodinâmicos de propriedades. Os segundos recorrem a bancos de dados, quer para a caracterização dos componentes isolados (puros), quer para caracterizar as misturas de componentes.

A validade de um banco de dados é limitada a uma faixa mais ou menos larga de pressão e temperatura. Os modelos termodinâmicos de propriedades baseiam-se frequentemente em Equações Cúbicas de Estado. Como a extrapolação por polinómios dá maus resultados, é importante verificar que o banco de dados abrange as condições do processo.

Frequentemente, o banco de dados para as misturas de componentes não tem informação para todas as relações binárias dos componentes do processo. Esta falta de informação tem de ser analisada com cautela, pois um componente, mesmo residual, pode ter forte impacto nas propriedades da mistura. Um caso crítico é a presença de um tensioactivo.

Não há nenhum modelo termodinâmico de propriedades "universal". Esta é uma área especializada e perante qualquer dúvida deve ser procurada a ajuda dos especialistas. Em meio empresarial, quando se despende anualmente largas dezenas de milhar de euros pelo software de simulação de processos, obtém-se a informação necessária da *software-house*, nem que se tenha de assinar um acordo de confidencialidade. A licença académica do mesmo software não vale dois mil euros por ano, pelo que a informação especializada acessível aos estudantes se limita aos casos de estudo publicados.

Para avaliar o impacto da incerteza associada a um modelo (incluindo a falta de informação para descrevê-lo com maior detalhe), deve-se efectuar uma Análise de Sensibilidade. Com esta ferramenta procura-se identificar quais são as áreas críticas do modelo, isto é, quais as áreas que potenciam as consequências mais sérias, em função da incerteza. Com o auxílio da Análise de Sensibilidade, decide-se a necessidade de investir mais tempo e dinheiro para obter dados mais precisos ou a providenciar uma margem de projecto (sobredimensionamento).

Aos docentes e aos estudantes que se deparem com a responsabilidade de simular Processos Químicos reais, recomenda-se a leitura do Guia de Boas Práticas:

"The Use of Computers by Chemical Engineers", http://www.icheme.org/enetwork/MainFrameset.asp?AreaID=172