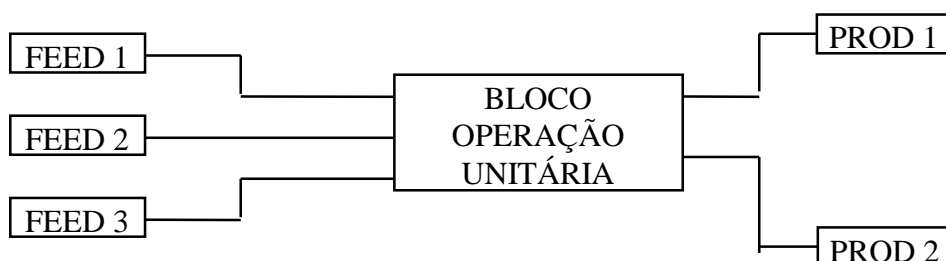




## BREVE INTRODUÇÃO

AO

## ASPEN PLUS



M. Gabriela Bernardo-Gil

Abril 1998

I. SIMULADORES DE PROCESSOS.....	7
USO DE SIMULAÇÃO DE PROCESSOS EM INVESTIGAÇÃO E DESENVOLVIMENTO ....	10
USO DE SIMULAÇÃO DE PROCESSOS EM PROJECTO.....	10
USO DE SIMULAÇÃO DE PROCESSOS EM PRODUÇÃO.....	11
EM QUE CONSISTE UM SIMULADOR DE PROCESSOS .....	12
SELECÇÃO DE ‘APPLICATION TYPE’ .....	13
TIPOS DE APLICAÇÕES .....	13
SELECÇÃO DE ‘RUN TYPE’ .....	14
ESPECIFICAÇÕES DE ‘INPUT’ .....	15
II. SIMULAÇÃO ‘FLOWSHEET’ - FORMA ‘MAIN’ .....	16
BLOCOS OPERAÇÕES UNITÁRIAS.....	16
BLOCOS ‘FEED’ .....	17
BLOCOS ‘PROD’ .....	17
CORRENTES.....	18
ESPECIFICAÇÕES DE CORRENTES .....	18
BLOCOS ‘HEAT’ E BLOCOS ‘WORK’ .....	20
MISTURA, DIVISÃO E MANIPULAÇÃO DE CORRENTES DE MATERIAL, CALOR E TRABALHO .....	22
CORRENTES DE PSEUDO-PRODUTOS.....	23
CONECÇÕES .....	23
MODIFICAÇÃO DO ‘FLOWSHEET’ USANDO GRÁFICOS.....	24
MODIFICAÇÃO DO ‘FLOWSHEET’ USANDO FORMAS .....	24
III. FORMA ‘SETUP’ .....	25
SISTEMAS DE UNIDADES DE MEDIDA.....	25

ESPECIFICAÇÕES DE PROPRIEDADES DE CORRENTES .....	26
CÁLCULOS NA BASE 'FREE-WATER' .....	27
CÁLCULOS APENAS DE BALANÇOS DE MASSA.....	28
IV. FORMA 'COMPONENTS' .....	30
BASES DE DADOS.....	30
COMPONENTES NÃO PERTENCENTES AO BANCO DE DADOS .....	31
ADICIONAR UM COMPONENTE .....	31
COMPONENTES ELECTRÓLITOS E REACÇÕES .....	31
IDENTIFICAR COMPONENTES SÓLIDOS .....	32
SÓLIDOS CONVENCIONAIS.....	32
SÓLIDOS NÃO CONVENCIONAIS .....	33
COMPONENTES SUPERCRÍTICOS .....	33
GRUPOS UNIFAC .....	33
V. FORMA 'PROPERTIES' .....	34
MÉTODOS E MODELOS .....	36
COMO ESCOLHER A EQUAÇÃO? .....	37
E SE FOR UM SISTEMA POLAR NÃO ELECTRÓLITO? .....	38
COMO ESCOLHER A EQUAÇÃO PARA COEFICIENTES DE ACTIVIDADE? .....	39
ESPECIFICAÇÃO DE UMA OPÇÃO LOCAL .....	39
COMPONENTES SUPERCRÍTICOS .....	40
DETERMINAÇÃO DE VALORES 'K' DE ÁGUA NA FASE ORGÂNICA.....	40
VI. PARÂMETOS DE PROPIEDADES E DADOS .....	41
ESPECIFICAÇÕES.....	42
ESTIMATIVA DE PARÂMETROS DE PROPRIEDADES.....	44

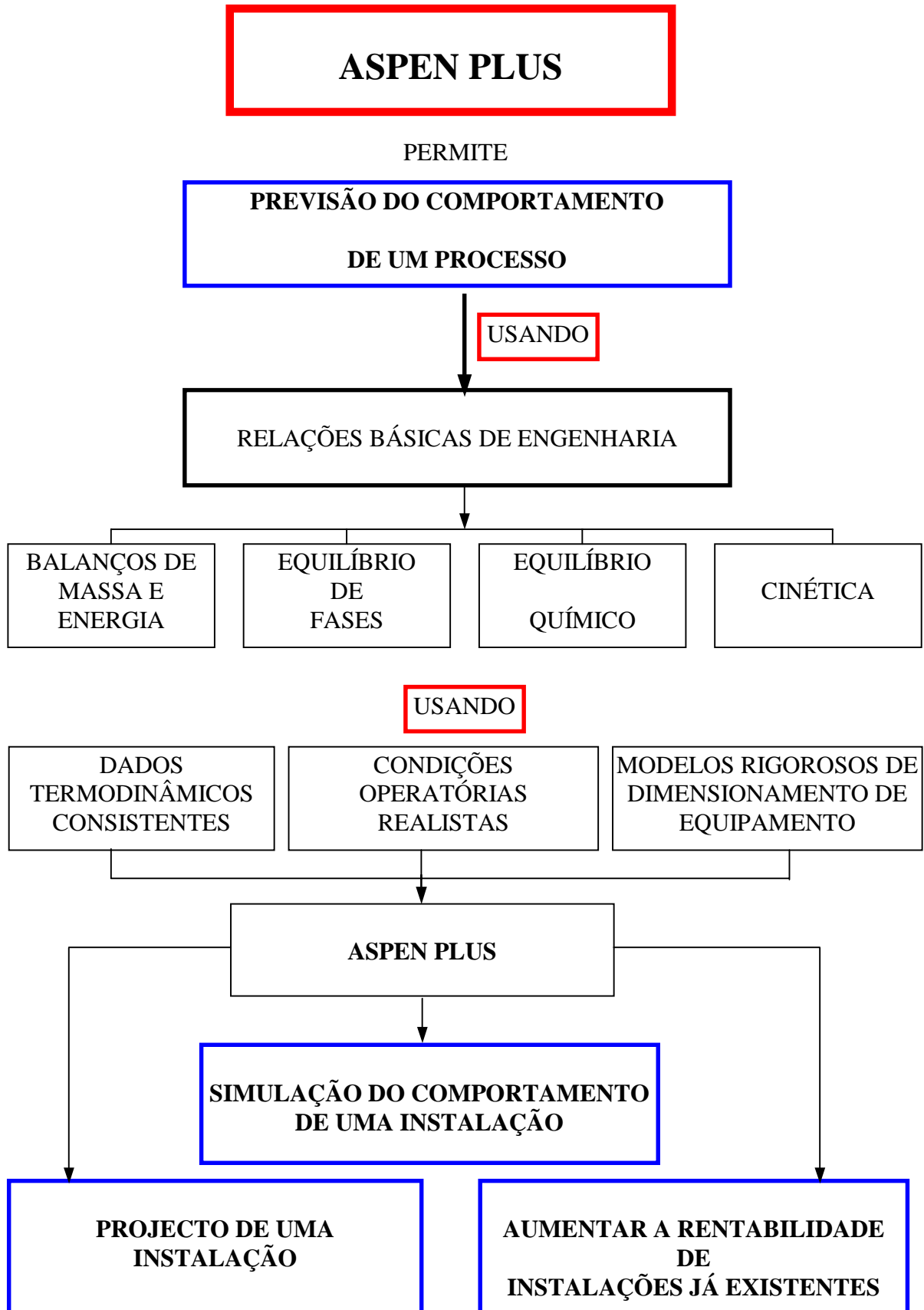
PCES .....	44
IDENTIFICAÇÃO DE PARÂMETROS A SEREM ESTIMADOS A PARTIR DE SIMULAÇÕES .....	47
REGRESSÃO DE DADOS DE PROPRIEDADES .....	48
DRS .....	48
TIPOS DE DADOS E PROPRIEDADES A SEREM CORRELACIONADOS .....	49
GERAÇÃO DE DADOS BINÁRIOS DE ELV E ELL .....	51
VII. FORMA ‘BLOCKS’ .....	52
DESTILAÇÃO “SHORTCUT” .....	52
DSTWU .....	52
DISTL .....	53
SCFRAC .....	53
DESTILAÇÃO RIGOROSA .....	54
RADFRAC .....	54
MULTIFRAC .....	56
EXTRACÇÃO LÍQUIDO - LÍQUIDO RIGOROSA .....	57
EXTRACT .....	57
REACTORES .....	58
CRITALIZADORES .....	59
TUBAGENS E VÁLVULAS .....	60
MANUSEAMENTO DE SÓLIDOS .....	61



## I. SIMULADORES DE PROCESSOS

OS SIMULADORES DE PROCESSOS PERMITEM:

- ❖ PREVER O COMPORTAMENTO DE UM PROCESSO.
- ❖ PROJECTAR MELHORES INSTALAÇÕES PILOTO E / OU INDUSTRIAIS
- ❖ ANALISAR, SIMULTANEAMENTE, DE UMA MANEIRA EXPEDITA, VÁRIOS CASOS, VARIANDO VALORES DE VARIÁVEIS.
- ❖ OPTIMIZAR CONDIÇÕES OPERATÓRIAS DE INSTALAÇÕES JÁ EXISTENTES OU NOVAS
- ❖ ACOMPANHAR UMA INSTALAÇÃO EM TODA A SUA VIDA ÚTIL, PROVENDO AS ALTERAÇÕES NECESSÁRIAS POR VIA ECONÓMICA OU DE AUMENTO DE ESCALA (AMPLIAÇÕES)





**ESTUDAR  
NOVOS CASOS**

**ANALISAR  
ALTERNATIVAS**

- \* **ANÁLISE DE SENSIBILIDADE**
- \* **GERAÇÃO DE GRÁFICOS E TABELAS**
- \* **ESTIMATIVA E REGRESSÃO DE PROPRIEDADES FÍSICO-QUÍMICAS**
- \* **AJUSTE DE MODELOS DE SIMULAÇÃO A DADOS OPERATÓRIOS**
- \* **DIMENSIONAMENTO DE EQUIPAMENTOS**
- \* **ANÁLISE DE CUSTOS**
- \* **OPTIMIZAÇÃO DE PROCESSOS**
- \* **INTRODUÇÃO DE DADOS EM FOLHAS DE CÁLCULO**



## **USO DE SIMULAÇÃO DE PROCESSOS EM INVESTIGAÇÃO E DESENVOLVIMENTO**

- \* PREVISÃO DE PROPRIEDADES COM UM GRANDE CONJUNTO DE RELAÇÕES.
- \* REALIZAÇÃO DE EXTRAPOLAÇÃO DE ESCALAS ('SCALE-UP') USANDO MENOS DADOS EXPERIMENTAIS LABORATORIAIS OU PILOTO.
- \* COMPARAÇÃO DE RESULTADOS PRELIMINARES DE EXTRAPOLAÇÃO.
- \* INTRODUÇÃO DE NOVAS CORRELAÇÕES PARA PREVISÃO DE PROPRIEDADES.

## **USO DE SIMULAÇÃO DE PROCESSOS EM PROJECTO**

- \* PREVISÃO DE PROPRIEDADES COM UM GRANDE CONJUNTO DE RELAÇÕES.
- \* COMPARAÇÃO DE ALTERNATIVAS DE PROJECTO.
- \* DESENVOLVER BALANÇOS DE MASSA E ENERGIA.
- \* AVALIAR OS CUSTOS.
- \* OPTIMIZAR AS CONDIÇÕES OPERATÓRIAS.
- \* DIMENSIONAR O EQUIPAMENTO.
- \* AVALIAR RENDIMENTOS EM CONDIÇÕES DIFERENTES DE OPERAÇÃO.

## **USO DE SIMULAÇÃO DE PROCESSOS EM PRODUÇÃO**

- \* PREVISÃO DO EFEITO DA VARIAÇÃO DE CONDIÇÕES OPERATÓRIAS EM:
  1. QUANTIDADES ('STOCKS') DE:
    - MATÉRIAS PRIMAS
    - PRODUTOS.
  2. ESPECIFICAÇÕES DE PRODUTOS
- \* AVALIAÇÃO DE MODIFICAÇÕES QUER POR:
  - AMPLIAÇÕES
  - REPARAÇÕES ('REVAMPS')
- \* AVALIAÇÃO DO GRAU DE DEGRADAÇÃO DO RENDIMENTO DE UMA PEÇA DE EQUIPAMENTO OU DA INSTALAÇÃO GLOBAL..

## **EM QUE CONSISTE UM SIMULADOR DE PROCESSOS**

- ☒ DEFINIÇÃO DA CONFIGURAÇÃO DE UM **DIAGRAMA DE OPERAÇÕES**, ENVOLVENDO:
  - DEFINIÇÃO DAS **OPERAÇÕES UNITÁRIAS** DO PROCESSO E SUA **SEQUÊNCIA**.
  - DEFINIÇÃO DAS **CORRENTES** (CAUDAIS) QUE FLUEM ENTRE ESSAS OPERAÇÕES UNITÁRIAS.
  - SELECÇÃO DE UM **MODELO** QUE REPRESENTA (**SIMULE**) BEM AS OPERAÇÕES UNITÁRIAS
- ☒ ESPECIFICAÇÃO DOS **COMPONENTES QUÍMICOS** DO PROCESSO QUE PODE SER EFECTUADO A PARTIR DE **BANCO DE DADOS** DO SIMULADOR OU SER DADA PELO UTILIZADOR.
- ☒ ESCOLHA DE **MODELOS TERMODINÂMICOS APROPRIADOS** QUE REPRESENTEM AS **PROPRIEDADES DOS COMPONENTES PUROS E SUAS MISTURAS**.
- ☒ ESPECIFICAÇÃO DOS CAUDAIS E DAS CONDIÇÕES TERMODINÂMICAS DAS CORRENTES.
- ☒ ESPECIFICAÇÃO DAS CONDIÇÕES OPERATÓRIAS DAS OPERAÇÕES UNITÁRIAS DO DIAGRAMA DE PROCESSOS.

## SELECÇÃO DE 'APPLICATION TYPE'

- ❖ UNIDADES DE MEDIDA
- ❖ INFORMAÇÃO SOBRE COMPOSIÇÕES DE CORRENTES E PROPRIEDADES A SEREM REFERIDAS APÓS CADA SIMULAÇÃO
- ❖ FORMATO DO RELATÓRIO SOBRE AS CORRENTES
- ❖ CENÁRIOS DE COSTUMÂNCIA ('DEFAULT') PARA OPÇÃO DE BASES LIVRES DE ÁGUA ('FREE-WATER')
- ❖ OPÇÃO DE CONJUNTO DE PROPRIEDADES
- ❖ OUTRAS APLICAÇÕES E/OU ESPECIFICAÇÕES DE COSTUMÂNCIA

## TIPOS DE APLICAÇÕES

- |                  |                       |
|------------------|-----------------------|
| ✘ GENERAL        | ✘ SPECIALITY CHEMICAL |
| ✘ PETROLEUM      | ✘ PHARMACEUTICAL      |
| ✘ GAS PROCESSING | ✘ HYDROMETALLURGY     |
| ✘ AIR SEPARATION | ✘ PYROMETALLURGY      |
| ✘ CHEMICAL       | ✘ SOLIDS              |
| ✘ ELECTROLYTES   |                       |

**SELECÇÃO DE 'RUN TYPE'**

TIPO DE SIMULAÇÃO	DESCRIÇÃO	USO
<b>FLOWSHEET</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Simulação de processos, incluindo estudos de sensibilidade e optimização</li> <li>• Pode integrar análise de custos</li> <li>• Pode integrar estimativas de parâmetros de propriedades</li> <li>• Pode integrar análise de dados / pseudocomponentes</li> <li>• Pode integrar geração de tabelas de propriedades</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Simulação</li> </ul>
<b>TGS</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Processo standard de geração de tabelas de propriedades</li> <li>• Pode integrar estimativas de parâmetros de propriedades</li> <li>• Pode integrar análise de consistência de cálculo de dados</li> </ul>	Geração isolada de tabelas de: <ul style="list-style-type: none"> <li>• propriedades,</li> <li>• curvas 'flash,</li> <li>• envelopes <b>pt</b>,</li> <li>• mapas de resíduos</li> </ul>
<b>ADA</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Processo standard de análise de consistência de dados</li> <li>• Correlações para pseudocomponentes</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Análise isolada da consistência de dados</li> </ul>
<b>PCES</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Processo standard de estimativa de parâmetros de propriedades físico-químicas</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Estimativa isolada de parâmetros de correlação de propriedades</li> </ul>
<b>DRS</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Processo standard de regressão de dados</li> <li>• Pode conter estimativa de parâmetros de propriedades</li> <li>• Pode conter geração de tabelas</li> </ul>	Correlação de: <ul style="list-style-type: none"> <li>• propriedades físicas de componentes puros,</li> <li>• equilíbrio LV,</li> <li>• equilíbrio LL,</li> <li>• outros dados de misturas</li> </ul>
<b>PROP</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• PROPERTIES PLUS</li> </ul>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Preparação de propriedades para o SPEEDUP ou o ADVENT</li> </ul>
<b>COST</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• Processo standard de cálculo de custos</li> </ul>	Determina: <ul style="list-style-type: none"> <li>• custos de equipamento</li> <li>• custos operatórios</li> <li>• rentabilidade</li> </ul>

## ESPECIFICAÇÕES DE 'INPUT'

1) DEFINIÇÃO DA SIMULAÇÃO, INDICANDO:

- ◆ BLOCOS
- ◆ CORRENTES
- ◆ CONECCÇÕES

2) DEFINIÇÃO DE ESPECIFICAÇÕES DE ENTRADA

FORMAS	ESPECIFICAÇÕES
<b>SETUP</b>	Opções globais da simulação
<b>COMPONENTS</b>	Componentes químicos, pseudocomponentes
<b>PROPERTIES</b>	Métodos e dados usados em cálculos de propriedades físicas
<b>STREAMS</b>	Condições da alimentação: composição, fluxo e outras
<b>BLOCKS</b>	Condições operatórias e/ou de projecto para cada bloco de operação unitária no 'flowsheet'

3) INTRODUÇÃO DE ESPECIFICAÇÕES ADICIONAIS

FORMAS	ESPECIFICAÇÕES
<b>FLWSHEETING OPTIONS</b>	Constrangimentos e especificações, tais como: <ul style="list-style-type: none"> <li>• controle 'feedforward' e 'feedback'</li> <li>• cálculos de perdas de pressão</li> </ul>
<b>MODEL ANALYSIS</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• estudos de sensibilidade</li> <li>• optimização</li> <li>• correlação de dados de modelos de equipamento ou de laboratório</li> </ul>
<b>CONVERGENCE</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• blocos de convergência</li> <li>• sequências</li> </ul>
<b>COSTING</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• custos de equipamento</li> <li>• avaliação económica</li> </ul>
<b>REPORT OPTIONS</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• opções para gerar relatórios</li> </ul>
<b>REACTIONS</b>	<ul style="list-style-type: none"> <li>• química de electrólitos</li> <li>• cinética reaccional para modelação de reactores</li> <li>• cinética reaccional para modelação de destilação reactiva</li> </ul>

## II. SIMULAÇÃO 'FLOWSHEET' - FORMA 'MAIN'

### BLOCOS OPERAÇÕES UNITÁRIAS

<b>Tipo</b>	<b>Modelo</b>	<b>Descrição</b>
Misturadores e divisores	MIXER	Mistura de correntes
	FSPLIT	Separação de correntes
	SEP	Separação de componentes
	SEP2	Separação de componentes - duas saídas
Flashes, permutadores de calor	HEATER	Aquecimento / arrefecimento
	FLASH2	Flash de duas saídas
	FLASH3	Flash de três saídas
	DECANTER	Decantador líquido-líquido
	HEATX	Permutadores de calor de duas correntes
	MHEATX	permutadores de calor multi-correntes
Destilação 'short-cut'	DSTWU	Binária - Winn-Underwood-Gilliland
	DISTIL	Multicomponente - Edmister
	SCFRAC	Colunas para refinação de petróleo
Separação Multi-andares	RADFRAC	Destilação rigorosa
	MULTIFRAC	Destilação rigorosa em colunas complexas
	PETROFRAC	Destilação rigorosa para petróleo
	RATEFRAC	Destilação
Destilação descontínua	BATCHFRAC	Destilação descontínua rigorosa
Extracção líquido-líquido	EXTRACT	Extracção líquido-líquido rigorosa
Reactores	RSTOIC	Reacção estequiométrica
	RYIELD	Reacção com conhecimento dos rendimentos
	REQUIL	Reacção em equilíbrio em duas fases
	RGIBBS	Reacção em equilíbrio multifásico
	RCSTR	Reactor continuamente agitado com cinética conhecida
	RPLUG	Reactor tipo pistão com cinética conhecida
	RBATCH	Reactor descontínuo com cinética conhecida
Bombas e Compressores	PUMP	Bomba / turbina hidráulica
	COMPR	Compressor / turbina
	MCOMPR	Compressor multi-andares / turbina
Manipuladores de correntes	MULT	Multiplicador de correntes
	DUPL	Duplicador de correntes
	CLCHNG	Modificador de correntes

Cristalizador	CRYSTALLIZER	Suspensão mista, produtos mistos cristalizador
Queda de pressão	PIPELINE	Tubagem de segmentos múltiplos
	PIPE	Tubagem de segmento simples
	VALVE	Válvulas
Moagem de sólidos e Separadores de sólidos	CRUSHER	Moagem de sólidos e
	SCREEN	Separadores de sólidos
Separadores gas-sólido	FABFL	Filtro
	CYCLONE	Ciclone
	VSCRUB	Venturi
	ESP	Precipitador electrotático
Separadores sólido-líquido	HYCYC	Hidrociclone
	CFUGE	Filtro centrífugos
	FILTER	Filtro rotativo de vácuo
Lavadores de sólidos	SWASH	Lavadores de sólidos andar único
	CCD	Decantador contra corrente

### **BLOCOS 'FEED'**

- ALIMENTAÇÕES
- REAGENTES

### **BLOCOS 'PROD'**

- SAÍDAS
- PRODUTOS DE REACÇÃO



## CORRENTES

- ◆ LIGAM BLOCOS DE OPERAÇÕES UNITÁRIAS
- ◆ 'TRANSPORTAM' FLUXOS DE MASSA E DE ENERGIA DUM BLOCO PARA OUTRO.

PODEM SER:

- ALIMENTAÇÕES
- CORRENTES DE INTERLIGAÇÃO
- PRODUTOS
- PSEUDO-PRODUTOS QUE REPRESENTAM FLUXOS INTERNOS PARA UM BLOCO

TÊM QUE SER ESPECIFICADOS PARA CADA CORRENTE:

- CAUDAL
- COMPOSIÇÃO
- CONDIÇÕES TERMODINÂMICAS

## ESPECIFICAÇÕES DE CORRENTES

- CONDIÇÕES TERMODINÂMICAS

<b>Especificação</b>	<b>Campo</b>
Temperatura	Temp
Pressão	Pres
Fracção molar do vapor	Vfrac
Opção 'livre de água'	Free-Water
Número de fases	Nphase
Tipo de fase	Phase

- **COMPOSIÇÕES E CAUDAIS**

<b>Para:</b>	<b>Entrar valores nas bases:</b>
Fluxos ou fracções de componentes	Molares, mássicos, volumétricos
Concentrações	Molares, mássicos,
Fluxos totais	Molares, mássicos, volumétricos

- **OUTROS ATRIBUTOS**

- A partir do menu 'Stream input' seleccionar 'Comp.Attr'
- Especificar os que vêm listados

- **DISTRIBUIÇÃO GRANULOMÉTRICA DE SÓLIDOS**

- A partir do menu 'Stream input' seleccionar PSD
- Entrar as fracções em peso para os vários tamanhos de partícula

Existem 10 intervalos de distribuição granulométrica pré-definidos. Mas pode alterar-se a distribuição alterando o nº. de intervalos.

## BLOCOS 'HEAT' e BLOCOS 'WORK'

SERVEM PARA TRANSFERIR CALOR E/OU POTÊNCIA ENTRE BLOCOS,  
OU PARA ESPECIFICAR CONSUMOS / FLUXOS DE CALOR E/OU POTÊNCIA.

- Ex.: Transferência de trabalho duma turbina para um compressor.

<b>Qualquer modelo que:</b>	<b>Deve ter:</b>
calcule fluxos de calor	correntes de saída 'heat'
calcule potências/trabalho	correntes de saída 'work'
permita especificações de fluxos de entrada de calor	correntes de entrada 'heat'
permita especificações de entrada de potência/trabalho	correntes de entrada 'work'
<b>Qualquer modelo que crie uma corrente de calor ou trabalho usando:</b>	<b>Faz:</b>
Gráficos (quando relacionados com um bloco)	Selecciona uma saída rotulada 'heat stream' ou 'work stream'
Gráficos (quando relacionados com um bloco 'feed' ou 'prod')	Selecciona o 'FEED' ou 'PROD' rotulado de 'HEAT' ou 'WORK'
Selecciona uma saída rotulada 'heat stream' ou 'work stream'	Selecciona uma saída rotulada 'HS' ou 'WS'

### ⇒ ESPECIFICAÇÕES DE CORRENTES 'HEAT'

- FORMA 'HEAT.MAIN'  
A partir de 'FORMS', seleccionar 'Streams'

- ESPECIFICAR O CONSUMO DE CALOR

<b>Se o consumo é:</b>	<b>Então o calor é:</b>
Positivo	Fornecido ao bloco
Negativo	Removido do bloco

- DEIXAR EM BRANCO O CAMPO DO CONSUMO NO BLOCO DE DESTINO

⇒ **ESPECIFICAÇÕES DE CORRENTES 'WORK'**

FORNECEM POTÊNCIA A UMA BOMBA OU COMPRESSOR

- FORMA 'WORK.MAIN'

A partir de 'FORMS', seleccionar 'Streams'

- ESPECIFICAR A POTÊNCIA

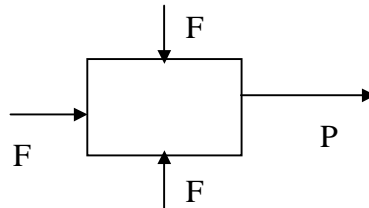
<b>Se a potência é:</b>	<b>Então o trabalho é:</b>
Negativo	Fornecido ao bloco
Positivo	Removido do bloco

- NO BLOCO DE DESTINO, DEIXAR O RESPECTIVO CAMPO POTÊNCIA EM BRANCO

## MISTURA, DIVISÃO E MANIPULAÇÃO DE CORRENTES DE MATERIAL, CALOR E TRABALHO

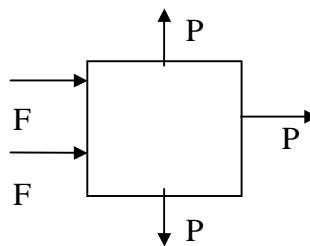
- BLOCO 'MIXER' - MISTURADOR

COMBINA 2 OU + CORRENTES DE MATÉRIA, CALOR OU TRABALHO NUMA SÓ CORRENTE



- BLOCO 'FSPLIT' - DIVISOR

COMBINA 2 OU + CORRENTES DE MATÉRIA, CALOR OU TRABALHO E O RESULTADO DIVIDE-O EM DUAS OU MAIS CORRENTES



TODAS AS SAÍDAS TÊM AS MESMAS COMPOSIÇÕES E PROPRIEDADES

Usa-se para divisor de fluxo e purgas

- BLOCO 'MULT' - MULTIPLICADOR

- MULTIPLICA CORRENTES POR UM DADO FACTOR
- OS BALANÇOS DE MASSA E DE ENERGIA NÃO SE MANTÊM
- AS CORRENTES DE SAÍDA TÊM A MESMA COMPOSIÇÃO E OS MESMOS VALORES DAS PROPRIEDADES DA CORRENTE DE ENTRADA

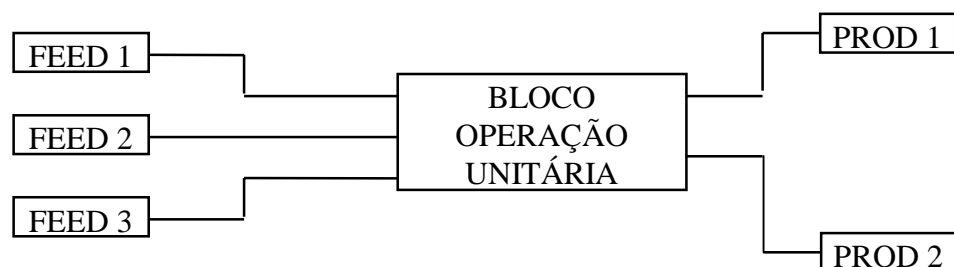
- BLOCO 'DUPL' - DUPLICADOR
  - COPIA A CORRENTE DE ENTRADA PARA QUALQUER NÚMERO DE CORRENTES DE SAÍDA
  - NÃO SATISFAZ BALANÇOS DE MASSA E DE ENERGIA
  - É ÚTIL PARA PROCESSAR SIMULTANEAMENTE UMA DADA CORRENTE EM DIFERENTES TIPOS DE UNIDADES

### CORRENTES DE PSEUDO-PRODUTOS

PODERÁ HAVER NECESSIDADE DE UTILIZAR PSEUDO-COMPONENTES EM ALGUMAS OPERAÇÕES UNITÁRIAS:

- PETROFRAC
- RADFRAC
- MULTIFRAC
- RATEFRAC
- EXTRACT
- CCD

### CONECÇÕES



NOTA: As conexões são efectuadas fazendo um 'double click' no bloco OPERAÇÃO UNITÁRIA ou nos blocos 'FEED' ou 'PROD'.

## MODIFICAÇÃO DO 'FLOWSHEET' USANDO GRÁFICOS

<b>Para:</b>	<b>Fazer:</b>
Apagar ou dar um novo nome a uma operação unitária	A partir do menu 'Block' ou 'Edit', seleccionar 'delete' ou 'rename'
Desconectar uma corrente	A partir do menu 'stream', seleccionar 'disconnect source' ou 'disconnect destination'
Reconectar uma corrente	A partir do menu 'stream', seleccionar 'reconnect'. Ou clicar duas vezes na corrente e entrar com modo 'connect' e efectuar a conexão.
Inserir um bloco numa corrente	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Desconectar 'source' ou 'destination'</li> <li>2. Colocar um novo bloco no 'flowsheet'</li> <li>3. Reconectar a corrente ao novo bloco</li> <li>4. Conectar uma nova corrente do novo bloco à 'source' ou 'destination' original.</li> </ol>

## MODIFICAÇÃO DO 'FLOWSHEET' USANDO FORMAS

<b>Para:</b>	<b>Fazer:</b>
Adicionar um bloco	Num bloco branco 'ID'. entrar a nova identificação de bloco 'ID'
Inserir um bloco	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Mover para o bloco 'ID' na linha onde se quer inserir o bloco</li> <li>2. A partir do 'Edit' no menu 'form', seleccionar 'insert row'</li> <li>3. Entrar a nova 'ID'</li> </ol>
Dar um novo nome a um bloco	<ol style="list-style-type: none"> <li>1. Mover para o bloco 'ID' Mover para o bloco 'ID'</li> <li>2. Dar novo nome ou apagar a 'ID'</li> <li>3. Seleccionar 'rename'. Não se perdem os dados</li> </ol>
Apagar um bloco ou uma corrente	

### III. FORMA 'SETUP'

#### SISTEMAS DE UNIDADES DE MEDIDA

<b>Sistema</b>	<b>Temp</b>	<b>Pres.</b>	<b>Fluxo de massa</b>	<b>Fluxo molar</b>	<b>Fluxo entálpico</b>	<b>Fluxo volum.</b>
<b>ENG</b>	F	PSI	LB/HR	LBMOL/HR	BTU/HR	CUFT/HR
<b>MET</b>	K	ATM	KG/HR	KMOL/HR	CAL/SEC	L/MIN
<b>METCBAR</b>	C	BAR	KG/HR	KMOL/HR	MMKCAL/HR	CUM/HR
<b>METCKGGM</b>	C	KG/SQCM	KG/HR	KMOL/HR	MMKCAL/HR	CUM/HR
<b>SI</b>	K	N/SQM	KG/SEC	KMOL/SEC	WATT	CUM/SEC
<b>SI-CBAR</b>	C	BAR	KG/HR	KMOL/HR	WATT	CUM/HR

É POSSÍVEL DEFINIR O NOSSO PRÓPRIO CONJUNTO DE UNIDADES



## ESPECIFICAÇÕES DE PROPRIEDADES DE CORRENTES

1. A PARTIR DO MENU 'FORMS', SELECIONAR 'SETUP' E A SEGUIR 'MAIN'. APARECE O 'SETUP.MAIN'.
2. USAR A OPÇÃO 'FLOW/FRAC PARA ESPECIFICAR A MANEIRA COMO SE QUEREM AS FRACÇÕES.

<b>Para descrever:</b>	<b>Seleccionar a opção:</b>
Fluxos molares	MOLEFLOW
Fracções molares	MOLEFRAC
Fluxos mássicos	MASSFLOW
Fracções mássicas	MASSFRAC
Fluxos volumétricos de correntes de líquido	STDVOLFLOW
Fracções volumétricas de correntes de líquido	STDVOLFRAC

3. USAR OS CAMPOS 'PROPERTY SETS' PARA ADICIONAR PROPRIEDADES DE CORRENTES QUE SE QUEIRAM DESCRIVER
4. AS PROPRIEDADES SELECIONADAS NESTE MENU APARECEM NA FORMA 'STREAM-SUM.MAIN'.
5. NO MENU-FORMA 'SETUP.MAIN', O CAMPO 'STREAM FORMAT' MOSTRA A TABELA 'TABLE FORMAT FILE' (TFF), QUE DETERMINA O FORMATO COM OPÇÕES COMO 'ORDER', 'LABELS', 'PRECISION'.

## **CÁLCULOS NA BASE 'FREE-WATER'**

MANUSEAMENTO DA ÁGUA COMO ELA SE DECANTE COMO UM SEGUNDO LÍQUIDO NA PRESENÇA DE HIDROCARBONETOS.

ASSUME:

- A FASE ÁGUA É PURA.
- CÁLCULA AUTOMATICAMENTE A SOLUBILIDADE DA ÁGUA NA FASE ORGÂNICA.

COMO SE FAZ:

1. NO MENU-'FORMS' SELECIONAR 'SETUP' E DE SEGUIDA 'MAIN'.
2. NO 'SETUP.MAIN' INDICAR 'YES' NO CAMPO 'FREE-WATER'.

### **CÁLCULOS APENAS DE BALANÇOS DE MASSA**

- \* SÃO APROPRIADOS QUANDO NÃO SÃO REQUERIDOS BALANÇOS DE ENERGIA
- \* NÃO SÃO CALCULADAS ENTALPIAS, ENTROPIAS OU ENERGIAS LIVRES, REDUZINDO ASSIM O TEMPO DE CÁLCULO
- \* REDUZEM A ENTRADA DE DADOS QUANDO SÃO CALCULADOS PARÂMETROS DE PROPRIEDADES FÍSICAS.

### **NÃO REQUEREM:**

- \* 'CPIG', 'DHFORM' E PARÂMETROS 'DGFORM
- \* PARÂMETROS PARA MODELOS QUE CALCULAM APENAS ENTALPIAS, ENTROPIAS E ENERGIAS LIVRES.

COMO SE FAZ:

1. A PARTIR DO MENU 'FORMS', SELECIONAR 'SETUP' E DE SEGUIDA 'SIM-OPTIONS'.
2. ESPECIFICAR 'ENERGY-BAL' =NO
3. SELECIONAR '**NOFLASH**'
4. CORRENTE S'HEAT' E 'WORK' NÃO SÃO PERMITIDAS.

5. PODEM USAR-SE AS SEGUINTE OPERAÇÕES:

CFUGE	FABFL	MULT	VSCRUB
CRUSHER	FILTER	SCREEN	
CYCLONE	FSPLIT	SEP	
DUPL	HYCYC	SEP2	
ESP	MIXER	SSPLIT	

6. PODEM USAR-SE OS SEGUINTE MODELOS SE SE NÃO QUISER ESPECIFICAR TRANSFERÊNCIAS DE CALOR:

CCD	FLASH2	RCSTR	SWASH
DECANTER	FLASH3	RPLUG	
DISTL	HEATER	RSTOIC	
DSTWU	RBATCH	RYIELD	

7. NUM ESTUDO EM QUE SE CALCULAM APENAS BALAÇOS DE MASSA, PODEM USAR-SE:

BATCHFRAC	HEATX	PETROFRAC	RATEFRAC
COMPR	MCOMPR	PIPELINE	REQUIL
CRYSTALLIZER	MHEATX	PUMP	RGIBBS
EXTRACT	MULTIFRAC	RADFRAC	SCFRAC

## IV. FORMA 'COMPONENTS'

### BASES DE DADOS

<b>Databank</b>	<b>Conteúdo</b>	<b>Uso</b>
PURECOMP	Parâmetros de componentes puros orgânicos e alguns inorgânicos	É o banco de dados principal
AQUEOUS	Parâmetros de componentes puros de espécies iônicas ou moleculares em solução aquosa	Simulações contendo electrólitos
SOLIDS	Parâmetros de componentes puros de sais de electrólitos fortes e outros sólidos	Simulações contendo electrólitos e sólidos
INORGANIC	Parâmetros de componentes puros inorgânicos e orgânicos	Aplicações com sólidos, electrólitos e metalúrgicas
PURE856	PURECOMP da versão 8.5-6	
ASPENPCD	banco de dados da versão 8.5-6	
COMBUST	Parâmetros de componentes puros para produtos de combustão, incluindo radicais livres	Para cálculos a altas temperaturas e fases gasosas
AQU92	AQUEOUS da versão 9.2	

## **COMPONENTES NÃO PERTENCENTES AO BANCO DE DADOS**

PARA DEFINIR UM COMPONENTE QUE NÃO PERTENCE AO BANCO DE DADOS:

1. A PARTIR DO MENU 'FORMS', SELECIONAR 'COMPONENTS' E A SEGUIR 'MAIN'.
2. APARECE A FORMA 'COMPONENTS.MAIN'.
3. ESPECIFICAR APENAS A IDENTIFICAÇÃO DO COMPONENTE: 'ID'.

SE SE ENCONTRAR NO BANCO DE DADOS UM COMPONENTE COM A IDENTIFICAÇÃO ESCOLHIDA, APAGAR A 'FORMULA' OU O 'NOME DO COMPONENTE'.

O ASPEN PLUS RECONHECE ENTÃO O COMPONENTE COMO SENDO UM COMPONENTE NÃO DO BANCO DE DADOS.

4. INDICAR TODOS OS PARÂMETROS NECESSÁRIOS.
  - PODEM SER FORNECIDOS ATRAVES DAS FORMAS: 'PROPERTIES DATA' E 'PARAMETERS'
  - OU PODE SER USADO O 'PCES' PARA ESTIMAR OS PARÂMETROS, USANDO AS FORMAS 'PROPERTIES ESTIMATION'.

## **ADICIONAR UM COMPONENTE**

PARA ADICIONAR UM COMPONENTE NO FIM DUMA LISTA JÁ EXISTENTE:

1. A PARTIR DO MENU 'FORMS', SELECIONAR 'COMPONENTS' E A SEGUIR 'MAIN'.
2. MOVER PARA O 1º. CAMPO DE 'COMP ID' E ENTRAR UM NOVO 'COMPONENT ID'

## **COMPONENTES ELECTRÓLITOS E REACÇÕES**

## **IDENTIFICAR COMPONENTES SÓLIDOS**

1. A PARTIR DO MENU 'FORMS', SELECIONAR 'COMPONENTS' E A SEGUIR 'MAIN'.
2. ESPECIFICAR A IDENTIFICAÇÃO 'ID'
3. NO CAMPO 'TYPE', ESPECIFICAR 'SOLOD' PARA SÓLIDOS CONVENCINAIS OU 'NC' PARA UM SÓLIDO NÃO CONVENCIONAL

## **SÓLIDOS CONVENCIONAIS**

- SÃO MATERIAIS PUROS.
- PODEM ESTAR PRESENTES EM MISTURAS EM EQUILÍBRIO DE FASES OU QUÍMICO, INCLUINDO SAIS DE ELECTRÓLITOS

Ex.: NaCl pode ser um sólido convencional precipitando a partir duma solução electrolítica.

- OS SÓLIDOS CONVENCIONAIS SÃO CARACTERIZADOS POR PROPRIEDADES:
  1. PESO MOLECULAR
  2. PRESSÃO DE VAPOR
  3. PROPRIEDADES CRÍTICAS
- OS SÓLIDOS CONVENCIONAIS QUE NÃO PARTICIPAM EM CÁLCULOS DE EQUILÍBRIO DE FASES, SÃO SÓLIDOS CONVENCIONAIS INERTES:
  - A) PODEM PARTICIPAR EM EQUILÍBRIO QUÍMICO, MODELADO PELO MODELO DE OPERAÇÃO 'RGIBBS'.
  - B) SÃO ASSINALADOS COMO SUB-CORRENTES TIPO 'CISOLID' PARA OS DISTINGUIR DOS OUTROS SÓLIDOS CONVENCIONAIS.

## **SÓLIDOS NÃO CONVENCIONAIS**

- SÃO MATERIAIS CARACTERIZADOS POR FACTORES EMPÍRICOS DESIGNADOS 'ATRIBUTOS'. ESTES 'ATRIBUTOS' REPRESENTAM COMPOSIÇÕES DE COMPONENTES POR UM OU MAIS CONSTITUINTES.
- NUNCA PARTICIPAM EM CÁLCULOS DE EQUILÍBRIO, QUER SEJA QUÍMICO OU DE FASES.
- O ASPEN PLUS ASSINÁLA-OS COMO COMPONENTES 'NC'.

ATRIBUTOS DE COMPONENTES CONVENCIONAIS

ATRIBUTOS DE COMPONENTES NÃO CONVENCIONAIS

## **COMPONENTES SUPERCRÍTICOS**

- COMPONENTES 'HENRY'

## **GRUPOS UNIFAC**

1. A PARTIR DO MENU 'FORMS', SELECIONAR 'COMPONENTS' E A SEGUIR 'UNIFAC-GROUP'
2. NO CAMPO DA IDENTIFICAÇÃO, INDICAR O 'ID'
3. NO CAMPO 'GROUP NO' USAR A LISTAGEM (F5) PARA DETERMINAR OS GRUPOS E AS INTERACÇÕES
4. SE SE QUIZER DEFINIR UM NOVO GRUPO, ENTRAR UM NÚMERO ENTRE 4000 E 5000.



## V. FORMA 'PROPERTIES'

UM CONJUNTO DE PROPRIEDADES É UMA COLECÇÃO DE PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS, DE TRANSPORTE E OUTRAS NECESSÁRIAS PARA:

- RELATÓRIOS DE CORRENTES
- TABELAS DE PROPRIEDADES FÍSICAS
- CURVAS DE AQUECIMENTO / ARREFECIMENTO PARA OPERAÇÕES UNITÁRIAS
- PROPRIEDADES DE ANDARES DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO E ESPECIFICAÇÕES DE DESEMPENHO.
- PERFIS DE REACTORES
- ESPECIFICAÇÕES DE PROJECTO E CONSTRANGIMENTOS
- BLOCOS SENSIBILIDADE E FORTRAN
- BLOCOS DE OPTIMIZAÇÃO E CORRELAÇÃO DE DADOS.

PARA OBTER:

PROPRIEDADES TERMODINÂMICAS:

- COEFICIENTE DE FUGACIDADE (VALORES K)
- ENTALPIA
- ENTROPIA
- ENERGIA LIVRE DE GIBBS
- VOLUME

PROPRIEDADES DE TRANSPORTE:

- VISCOSIDADE
- CONDUCTIVIDADE TÉRMICA
- COEFICIENTE DE DIFUSÃO
- TENSÃO SUPERFICIAL

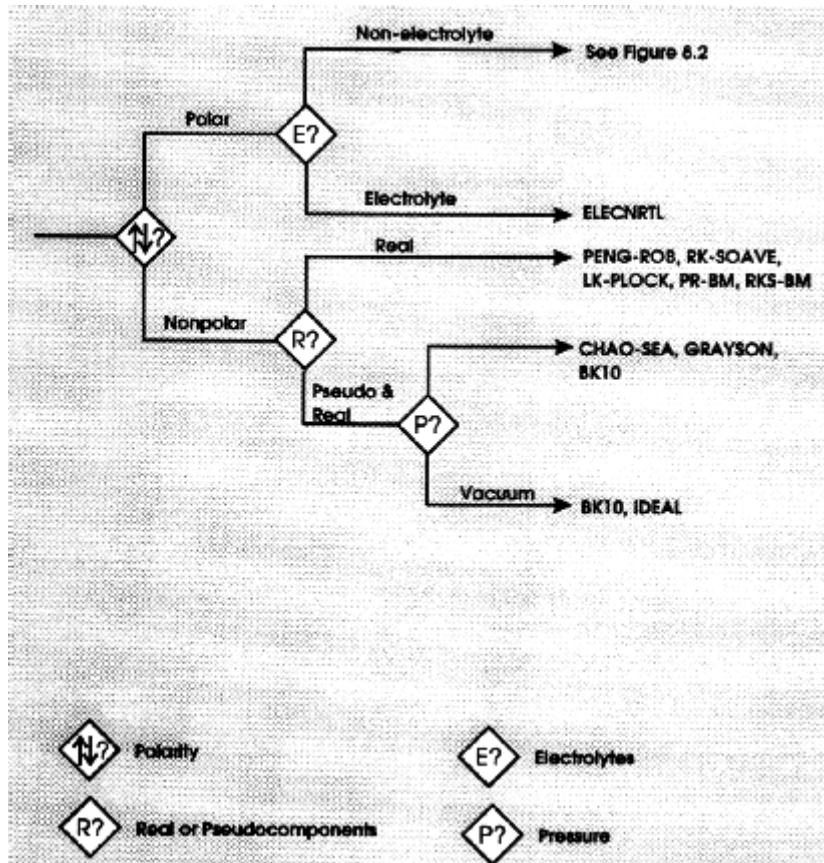
<b>'Grupo' propriedades</b>	<b>Descrição</b>
<b>THERMAL</b>	<p><b>Propriedades térmicas</b>, incluindo:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• entalpia de fases vapor e líquidas</li> <li>• capacidade calorífica de fases vapor e líquidas</li> <li>• condutividade térmica de fases vapor e líquidas</li> </ul>
<b>TXPORT</b>	<p><b>Propriedades de transporte</b>, incluindo:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• densidade de fases vapor e líquidas</li> <li>• viscosidade de fases vapor e líquidas</li> <li>• tensão superficial de fases líquidas</li> </ul>
<b>VLE</b>	<p>Informação sobre <b>componentes em equilíbrio líquido-vapor</b>, incluindo:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• coeficientes de fugacidade de componentes de fases vapor e líquidas</li> <li>• coeficientes de actividade de componentes de fases líquidas</li> <li>• pressões de vapor de componentes puros</li> </ul>
<b>VLLE</b>	<p>Informação sobre <b>componentes em equilíbrio líquido-líquido-vapor</b>, incluindo:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• coeficientes de fugacidade de componentes de fases vapor e líquidas</li> <li>• coeficientes de actividade de componentes de fases líquidas</li> <li>• pressões de vapor de componentes puros</li> </ul>
<b>HXDESIGN</b>	<p><b>Propriedades térmicas e de transporte</b>, em unidades SI, necessárias para o <b>projecto de permutadores de calor</b>, incluindo:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• fracção mássica no vapor</li> <li>• velocidade mássica global e para as fases vapor e líquida</li> <li>• entalpia mássica global e para as fases vapor e líquida</li> <li>• densidade global e para as fases vapor e líquida</li> <li>• capacidade calorífica global e para as fases vapor e líquida</li> <li>• pressão pseudo-crítica global e para as fases vapor e líquida</li> <li>• viscosidade das fases vapor e líquida</li> <li>• condutividade térmica das fases vapor e líquida</li> <li>• peso molecular médio global e para as fases vapor e líquida</li> </ul>

## MÉTODOS E MODELOS

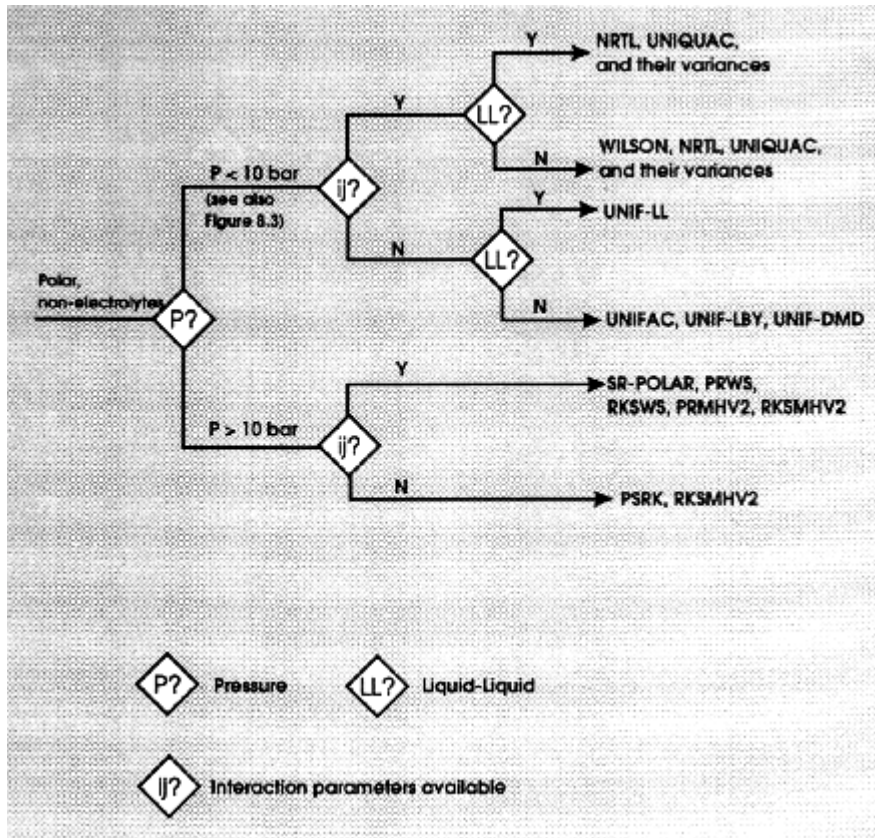
<b>Modelo</b>	<b>Método para determinar os valores 'K'</b>
IDEAL	Gás ideal / lei de Raoult / lei de Henry
BRW-LS	EOS BWR Lee-Starling
LK-PLOCK	EOS Lee-Kesler-Plocker
PENG-ROB	EOS Peng-Robinson
PR-BM	EOS Peng-Robinson com função alfa de Boston-Mathias
PRWS	EOS Peng-Robinson com regra de mistura de Wong-Sandler
PRMHV2	EOS Peng-Robinson com regra de mistura de Huron-Vidal
PSRK	EOS Redlich-Kwong-Soave predictiva
RKSWS	EOS Redlich-Kwong-Soave com regra de mistura de Wong-Sandler
RKSMHV2	EOS Redlich-Kwong-Soave com regra de mistura de Huron-Vidal
RK-ASPEN	EOS Redlich-Kwong-ASPEN
RK-SOAVE	EOS Redlich-Kwong-Soave
RKS-BM	EOS Redlich-Kwong-Soave com função alfa de Boston-Mathias
SR-POLAR	EOS Schwartzentruber-Renon

- PARA COEFICIENTES DE ACTIVIDADE DE LÍQUIDOS PODEM USAR-SE EQUAÇÕES COMO A DE VAN LAAR, DE WILSON, NRTL, UNIQUAC OU UNIFAC.
- PARA COEFICIENTES DE FUGACIDADE DA FASE VAPOR PODE CONSIDERAR-SE ESSA FASE IDEAL OU PODEM USAR-SE EQUAÇÕES DE ESTADO (EOS) TAIS COMO PENG-ROBINSON, REDLICH-KWONG, REDLICH-KWONG-SOAVE, HAYDEN-O'CONNELL OU NOTHNAGEL.

## COMO ESCOLHER A EQUAÇÃO?

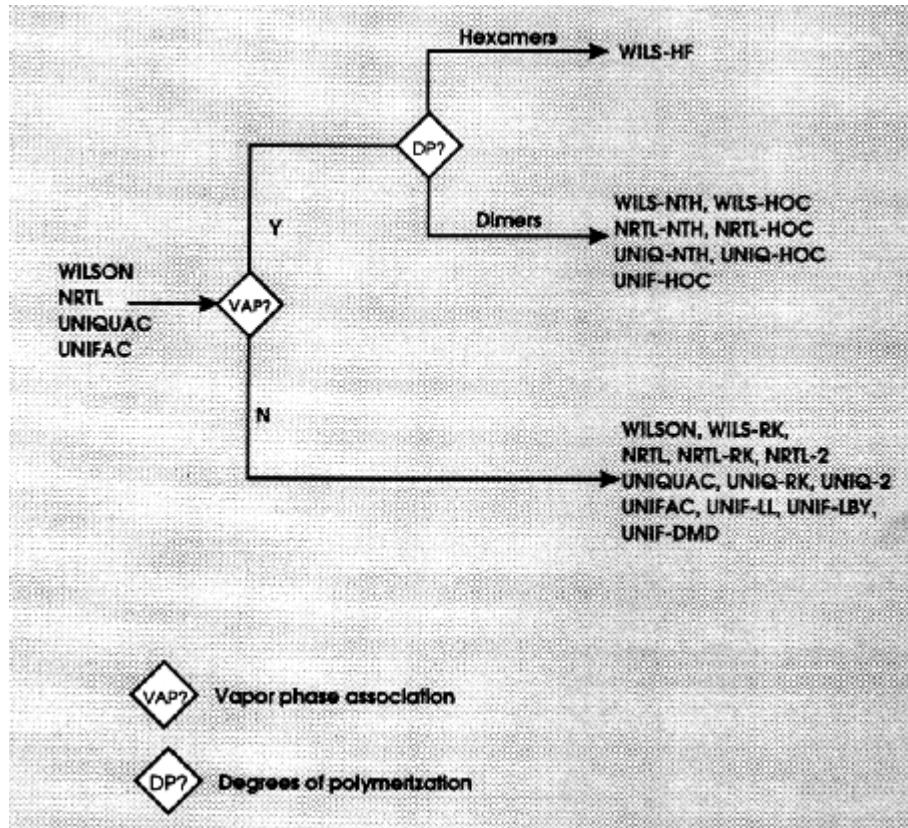


## E SE FOR UM SISTEMA POLAR NÃO ELECTRÓLITO?





## COMO ESCOLHER A EQUAÇÃO PARA COEFICIENTES DE ACTIVIDADE?



## ESPECIFICAÇÃO DE UMA OPÇÃO LOCAL

POR VEZES É CONVENIENTE USAR UMA OPÇÃO LOCAL PARA DEFINIÇÃO DE PROPRIEDADES, USANDO A FORMA 'BLOCKOPS', POR EXEMPLO:

Modelo	Forma	Permite especificar opções para:
DECANTER	Decanter.Phaseprops	Fases líquidas 1 e 2
RADFRAC	Radfrac.Prop-Section	Segmentos de coluna, decantadores, caldeiras termo-sifão
RGIBBS	Rgibbs.Phases	Cada fase
MULTIFRAC	Multifrac.Prop-Section	Segmentos de coluna
PETROFRAC	Petrofrac.Prop-Section Stripper.Prop-Section	Segmentos de coluna para coluna principal Segmentos de coluna para esgotamento
HEATX	Heatx.FlashSpecs	Lados quente e frio de um permutador de calor
MHEATX	Mheatx.AddSpecs	Cada corrente num permutador
RPLUG	Rplug.Blockops	Correntes 'reactantes' e arrefecedoras externas

## **COMPONENTES SUPERCRÍTICOS**

## **DETERMINAÇÃO DE VALORES 'K' DE ÁGUA NA FASE ORGÂNICA**

## **VI. PARÂMETROS DE PROPIEDADES E DADOS**

- **A PARTIR DO BANCO DE DADOS, É POSSÍVEL OBTER:**
  - PARÂMETROS DE COMPONENTES PUROS
  - PARÂMETROS BINÁRIOS DE EQUAÇÕES DE ESTADO
  - PARÂMETROS BINÁRIOS DE COEFICIENTES DE ACTIVIDADE
  - CONSTANTES DA LEI DE HENRY
  
- **QUANDO NÃO HÁ PARÂMETROS NO BANCO DE DADOS, OU QUEREMOS USAR OUTROS, É POSSÍVEL:**
  - ENTRAR DIRECTAMENTE COM PARÂMETROS OU DADOS.
  - ESTIMAR PARÂMETROS (PCES)
  - FAZER REGRESSÃO DE DADOS EXPERIMENTAIS (DRS)



## ESPECIFICAÇÕES

A PARTIR DO MENU 'FORMS', SELECIONAR 'PROPERTIES' E DE SEGUIDA SELECIONAR:

<b>A OPÇÃO:</b>	<b>PARA OBTER:</b>
Estimation	Estimativa de parâmetros de propriedades físicas
Molec-Struct	Informação de estrutura molecular, incluindo grupos funcionais
Parameters	Parâmetros de propriedades físicas
Data	Dados experimentais para estimativa ou regressão
Regression	Especificações para regressão

<b>PARA OBTER:</b>	<b>FAZER:</b>
Parâmetros de <b>componentes puros</b> a partir do banco de dados	Forma 'Components.Main' Campo 'Data Bank'
Parâmetros de componentes puros a introduzir pelo utilizador	Forma 'Properties parameters Unary.Scalar' Campos 'Comp ID' 'Param Name'
Coefficientes para correlação de propriedades de componentes puros	Forma 'Properties parameters Unary.T-Dependent' Campos 'Comp ID' 'Param Name'
Parâmetros <b>binários de equações de estado</b> a partir do banco de dados	Forma 'Properties parameters Binary.Scalar'
Parâmetros binários de equações de estado a introduzir pelo utilizador	Forma 'Properties parameters Binary.Scalar' Campo 'Comp ID' e entrar na matriz ij os parâmetros
Parâmetros <b>binários de coeficientes de actividade</b> a partir do banco de dados	Forma 'Properties parameters Binary.T-Dependent' (É possível verificar a qualidade dos parâmetros a partir do 'Help')
Parâmetros <b>binários de coeficientes de actividade</b> a introduzir pelo utilizador	Forma 'Properties parameters Binary.T-Dependent' Campo 'Comp ID' e listar pares de binários para os quais se podem entrar parâmetros
Constantes da <b>lei de Henry</b>	Forma 'Binary.T-Dependent'
Parâmetros binários ou de pares de <b>electrólitos do modelo NRTL</b>	Forma 'Properties parameters Binary.T-Dependent' ou Forma 'Parameters.Pair'
Parâmetros binários da <b>'DECHEMA'- WILSON, NRTL e UNIQUAC</b>	Forma 'Properties parameters Binary.T-Dependent' Campo 'Comp ID' Clicar no botão Aij/RT na régua do programa. Aparecem os dados da 'DECHEMA'. Retirar os valores a partir do ELV ou do ELL O ASPEN converte os valores para serem usados por ele.
Estimativa de parâmetros para modelos de coeficientes de actividade	Forma 'Properties parameters Binary.T-Dependent' Campo 'Estimate' e usar 'list'
Estimativa de parâmetros de pares de electrólitos Modelos NRTL ou Pitzer (GMPTB0)	Forma 'Properties parameters Binary.T-Dependent' Forma 'Parameters.Pair' Campos 'Molecule i' (ou 'Electrolyte i') e 'Molecule j' (ou 'Electrolyte j')
Parâmetros ternários de Pitzer	Forma 'Properties parameters Ternary'

**ESTIMATIVA DE PARÂMETROS DE PROPRIEDADES****PCES****ESTIMATIVA DE TODOS OS PARÂMETROS:****Pure Component Constants**

<b>Description</b>	<b>Parameter</b>	<b>Method</b>	<b>Information Required<sup>†</sup></b>
Molecular weight	MW	FORMULA	Structure
Normal boiling point	TB	JOBACK	Structure
		OGATA-TSUCHIDA	Structure
Critical temperature	TC	JOBACK	Structure, TB
		LYDERSEN	Structure, TB
		FEDORS	Structure
		AMBROSE	Structure, TB
		SIMPLE	MW, TB
Critical pressure	PC	JOBACK	Structure
		LYDERSEN	Structure, MW
		AMBROSE	Structure, MW
Critical volume	VC	JOBACK	Structure
		LYDERSEN	Structure
		AMBROSE	Structure
		RIEDEL	TB, TC, PC
		FEDORS	Structure
Critical compressibility factor	ZC	DEFINITION	TC, PC, VC
Acentric factor	OMEGA	DEFINITION	TC, PC, PL
		LEE-KESLER	TB, TC, PC
Standard heat of formation	DHFORM	BENSON	Structure
		JOBACK	Structure
Standard Gibbs free energy of formation	DGFORM	JOBACK	Structure
		BENSON	Structure
Solubility parameter	DELTA	DEFINITION	TB, TC, PC, DHVL, VL
UNIQUAC R	GMUQR	BONDI	Structure
UNIQUAC Q	GMUQQ	BONDI	Structure

<sup>†</sup> Structure indicates that molecular structure must be defined using the Properties Molec-Struct forms. Data indicates that correlation parameters are determined directly from experimental data you enter on Properties.Data forms. When another parameter is required, such as TB, it can come from a databank or from another estimation method. Or you can enter it on a Properties Parameters form.

### Temperature-Dependent Properties

Description	Parameter	Method	Information Required <sup>†</sup>
Ideal gas heat capacity	CPIG	DATA	Data
		BENSON	Structure
		JOBACK	Structure
Vapor pressure	PLXANT	DATA RIEDEL	Data TB, TC, PC
Heat of vaporization	DHVLWT	DATA	Data
		DEFINITION	TC, PC, PL
		VETERE	MW, TB
Liquid molar volume	RKTZRA	DATA	Data
		GUNN-YAMADA	TC, PC, OMEGA
		LEBAS	Structure
Liquid viscosity	MULAND	DATA	Data
		ORRICK-ERBAR	Structure, MW, VL, TC, PC
		LETSOU-STIEL	MW, TC, PC, OMEGA
Vapor viscosity	MUVDIP	DATA	Data
		REICHENBERG	Structure, MW, TC, PC
Liquid thermal conductivity	KLDIP	DATA	Data
		SATO-RIEDEL	MW, TB, TC
Vapor thermal conductivity	KVDIP	DATA	Data
Surface tension	SIGDIP	DATA	Data
		BROCK-BIRD	TB, TC, PC
		MCLEOD-SUGDEN	TB, TC, PC, VL, PARC

<sup>†</sup> Structure indicates that molecular structure must be defined using the Properties Molec-Struct forms. Data indicates that correlation parameters are determined directly from experimental data you enter on Properties Data forms. When another parameter is required, such as TB, it can come from a databank or from another estimation method. Or you can enter it on a Properties Parameters form.

**Binary Parameters<sup>††</sup>**

Description	Parameter	Method	Information Required <sup>†</sup>
Wilson parameters	WILSON/2 [WILSON/1]	DATA UNIFAC UNIF-LL UNIF-DMD UNIF-LBY	Data Structure Structure Structure Structure
NRTL parameters	NRTL/2 [NRTL/1]	DATA UNIFAC UNIF-LL UNIF-DMD UNIF-LBY	Data Structure Structure Structure Structure
UNIQUAC parameters	UNIQU/2 [UNIQU/1]	DATA UNIFAC UNIF-LL UNIF-DMD UNIF-LBY	Data Structure, GMUQR, GMUQQ Structure, GMUQR, GMUQQ Structure, GMUQR, GMUQQ Structure, GMUQR, GMUQQ

**UNIFAC Group Parameters**

Description	Parameter	Method	Information Required <sup>†</sup>
UNIFAC R	GMUFR	BONDI	Structure
Dortmund UNIFAC R	GMUFDR	BONDI	Structure
Lyngby UNIFAC R	GMUFLR	BONDI	Structure
UNIFAC Q	GMUFQ	BONDI	Structure
Dortmund UNIFAC Q	GMUFDQ	BONDI	Structure
Lyngby UNIFAC Q	GMUFLQ	BONDI	Structure

<sup>†</sup> Structure indicates that molecular structure must be defined using the Properties Molec-Struct forms. Data indicates that correlation parameters are determined directly from experimental data you enter on Properties Data forms. When another parameter is required, such as TB, it can come from a databank or from another estimation method. Or you can enter it on a Properties Parameters form.

<sup>††</sup> In FLOWSHEET, TGS, PROP, or DRS runs, ASPEN PLUS estimates missing binary parameters only if you request them on the Properties Estimation Binary form. If infinite dilution activity coefficients are estimated or supplied on the Properties Data.Mixture form at only one temperature, then the parameters in brackets [ ] are set to zero.

**COMO SE FAZ:**

1. SELECCIONAR PCES NO TIPO DE SIMULAÇÃO E EFECTUAR A ESTIMATIVA
2. FORMA 'FORMS', SELECCIONAR 'SETUP' E DE SEGUIDA 'MAIN'  
NA FORMA 'SETUP.MAIN', SELECCIONAR PCES NO CAMPO 'RUN TYPE' E EFECTUAR A ESTIMATIVA.

**IDENTIFICAÇÃO DE PARÂMETROS A SEREM ESTIMADOS A PARTIR DE SIMULAÇÕES**

- FLOWSHEET
- DRS
- TGS

**COMO SE FAZ:**

1. A PARTIR DA FORMA 'FORMS', SELECCIONAR 'PROPERTIES' E DE SEGUIDA 'ESTIMATION'
2. SELECCIONAR 'ESTIMATION.MAIN'
3. ESPECIFICAR A OPÇÃO DE ESTIMATIVA:  
ALL (Altamente recomendável)  
ONLY

## **REGRESSÃO DE DADOS DE PROPRIEDADES**

### **DRS**

ESTIMATIVA DE PARÂMETROS A PARTIR DE DADOS EXPERIMENTAIS DE:

- ELV
- ELL
- DENSIDADE
- CAPACIDADE CALORÍFICA
- COEFICIENTES DE ACTIVIDADE
- OUTROS, INCLUINDO DE ELECTRÓLITOS
- MODELOS PRÓPRIOS

### **COMO SE FAZ:**

1. FORMA 'FORMS', SELECIONAR 'SETUP' E DE SEGUIDA 'MAIN'
2. NA FORMA 'SETUP.MAIN', SELECIONAR 'DRS' NO CAMPO 'RUN TYPE'
3. DEFINIR COMPONENTES 'COMPONENTS.MAIN'
4. SELECIONAR 'PROPERTIES.MAIN'
5. ESTIMAR PROPRIEDADES QUE SEJAM NECESSÁRIAS
6. ENTRAR OS DADOS EXPERIMENTAIS NA FORMA 'PROPERTIES.DATA'
7. ESPECIFICAR A REGRESSÃO A SER EFECTUADA NA FORMA  
'PROPERTIS.REGRESSION.MAIN'

## TIPOS DE DADOS E PROPRIEDADES A SEREM CORRELACIONADOS

### Vapor-Liquid Equilibrium Data

Select	For this data
TXY	Isobaric VLE
PXY	Isothermal VLE
TPXY	T-P-x-y VLE

### Liquid-Liquid Equilibrium Data<sup>†</sup>

Select	For this data
TXX	T-x-x
PXX	P-x-x
TPXX	T-P-x-x
TPXXY <sup>††</sup>	T-P-x-x-y

### Mixture Property Data

Select	For this data
CPLMX	Liquid heat capacity
CPVMX	Vapor heat capacity
GLXS	Excess liquid Gibbs free energy
HLMX	Liquid enthalpy
HLXS	Excess liquid enthalpy
HVMX	Vapor enthalpy

<sup>†</sup> Use with NRTL or UNIQUAC-based option sets; the ELECNRTL option set; or SR-POLAR, PRWS, PRMHV2, RKSWs, RKSMHV2, and PSRK equation-of-state option sets.

<sup>††</sup> Vapor-liquid-liquid equilibrium data

### Mixture Property Data (continued)

Select	For this data
KLMX	Liquid thermal conductivity
KVMX	Vapor thermal conductivity
MULMX	Liquid viscosity
MUVMX	Vapor viscosity
RHOLMX	Liquid mass density
RHOVMX	Vapor mass density
SIGLMX	Liquid surface tension
USER-X	User property versus x
USER-Y	User property versus y
VLMX	Liquid molar volume
VVMX	Vapor molar volume



**Partial Property Data (Data for Components in a Mixture)**

Select	For this data
DLMX	Liquid diffusion coefficients
DVMX	Vapor diffusion coefficients
GAMMA	Liquid activity coefficients
GAMMAS	Solid activity coefficients
GAMINF	Infinite dilution activity coefficients
HENRY	Henry's constants
KLL	Liquid-liquid distribution coefficients
KVL	Vapor-liquid K-values
USERI-X	User partial property versus x
USERI-Y	User partial property versus y

<sup>†</sup> Use with NRTL or UNIQUAC-based option sets; the ELECNRTL option set; or SR-POLAR, PRWS, PRMHV2, RKSWS, RKSMHV2, and PSRK equation-of-state option sets.

<sup>††</sup> Vapor-liquid-liquid equilibrium data

Select	For this type of data	To
GAMMAM	Mean ionic activity coefficient <sup>†</sup>	Determine parameters for the electrolyte activity coefficient model
HLMX	Liquid molar enthalpy	Determine the temperature dependency of binary or pair parameters for the activity coefficient model <sup>††</sup>
OSMOT	Osmotic coefficient	Determine parameters for the electrolyte activity coefficient model
PH	pH	Determine chemical equilibrium constants (use only the apparent component approach)
TPX	Salt solubility <sup>†††</sup>	Regress parameters for the electrolyte activity coefficient model and chemical equilibrium constants for precipitating salts
		Obtain electrolyte-electrolyte pair parameters for the electrolyte NRTL model
TXY, PXY, or TPXY	Vapor liquid equilibrium	Regress electrolyte activity coefficient model parameters, Henry's constants, and chemical equilibrium constants
TXX, TPXX, or TPXXY	Liquid liquid equilibrium	Regress electrolyte activity coefficient model parameters and chemical equilibrium constants
VLMX	Liquid molar volume	Determine parameters for the Clarke density model

<sup>†</sup> You can enter only the molality scale mean ionic activity coefficient data of single electrolyte systems.

<sup>††</sup> Use data at several temperatures to ensure accurate representation of heat of mixing.

<sup>†††</sup> Enter at saturation, for single or mixed electrolyte solutions. You must specify the salt precipitation reactions on the Reactions.Chemistry form.

## GERAÇÃO DE DADOS BINÁRIOS DE ELV E ELL

GERAR, por exemplo, DADOS DE ELV USANDO A EQUAÇÃO UNIFAC E DEPOIS CORRELACIONAR ESSES DADOS USANDO OUTRO MÉTODO, por exemplo NRTL ou WILSON ou UNIQUAC

- NA FORMA 'FORMS', SELECIONAR 'PROPERTIES' E DE SEGUIDA 'DATA'

NO CAMPO 'DATA TYPE', SELECIONAR:

TXY, PXY, TPXY	ELV
TXX, TPXX	ELL

- NO CAMPO 'COMPONENTS' ESPECIFICAROS DOIS COMPONENTES
- NOS CAMPOS 'TEMP E 'PRES', ESPECIFICAR A TEMPERATURA E A PRESSÃO
- NA RÉGUA SELECIONAR 'GEN-DATA'
- SELECIONAR A OPÇÃO DE PROPRIEDADES

## VII. FORMA ‘BLOCKS’

### DESTILAÇÃO “SHORTCUT”

#### DSTWU

#### MÉTODO DE WINN-UNDERWOOD-GILLILAND

TEM:

- 1 alimentação
- 2 produtos de saída
- condensador total ou parcial

ESTIMA O MÍNIMO DE:

- Razão de refluxo
- N.º. teórico de pratos

DETERMINA

- Razão de refluxo para um dado n.º de pratos
- N.º. teórico de pratos para um dado refluxo
- O prato de alimentação
- consumos no condensador e ebulidor

## **DISTL**

### **DESTILAÇÃO MULTICOMPONENTE MÉTODO DE EDMISTER**

TEM:

- 1 alimentação
- 2 produtos de saída
- condensador total ou parcial

PODEM SER ESPECIFICADOS:

- N°. de andares teóricos
- Razão de refluxo
- Razão do produto de cabeça em relação à alimentação
- consumos no condensador e ebulidor

## **SCFRAC**

### **COLUNAS PARA REFINAÇÃO DE PETRÓLEO - UNIDADES DE CRUDE E COLUNAS DE VÁCUO**

### **MULTICOMPONENTE PARA n-PRODUTOS E n-1 SECÇÕES**

TEM:

- 1 alimentação
- 1 Saída opcional de esgotamento
- Vários produtos de saída
- condensador total ou parcial

ESTIMA:

- N°. de andares teóricos por secção
- Fluxos e composições dos produtos
- consumos para o aquecimento e o arrefecimento

## **DESTILAÇÃO RIGOROSA**

### **RADFRAC**

MÉTODO DE SIMULAÇÃO RIGOROSA DE TODOS OS TIPOS DE FRACCIONAÇÃO EM MULTI-ANDADES DE ELV.

SIMULA-SE:

- DESTILAÇÃO
- ABSORPÇÃO
- ESGOTAMENTO
- DESTILAÇÃO EXTRACTIVA
- DESTILAÇÃO AZEOTRÓPICA

PARA:

- SISTEMAS COM DUAS FASES
- SISTEMAS COM TRÊS FASES
- SISTEMAS COM FASES FORTEMENTE NÃO IDEAIS
- SÓLIDOS EM CADA ANDAR
  
- FASES EM EQUILÍBRIO
- REACÇÕES DENTRO DA COLUNA
- ELECTRÓLITOS
- COM DUAS FASES LÍQUIDAS AMBAS ENVOLVENDO REACÇÕES QUÍMICAS, COM CINÉTICAS DIFERENTES
- COM PRECIPITAÇÃO DE SAIS

CALCULA:

- Temperaturas
- Caudais
- Perfis de fracções molares

ACEITA:

- Razão de refluxo
- N°. teórico de pratos
- temperaturas
- caudais
- purezas
- recuperações de componentes
- Eficiências, incluindo de Murphree
- Propriedades das correntes, como caudal volumétrico e viscosidade, em qualquer ponto da coluna

TEM CAPACIDADES DE:

- Projectar pratos de vários tipos
- Projectar enchimentos para uma variedade de aleatórios e estruturados

## MULTIFRAC

MÉTODO DE SIMULAÇÃO RIGOROSA DE TODOS OS TIPOS DE FRACCIÓNAMENTO EM MULTI-ANDADES DE ELV PARA VÁRIAS UNIDADES DE FRACCIÓNAMENTO.

APLICA-SE A:

- Qualquer número de colunas, cada qual com um número de andares
- Qualquer número de conexões entre colunas e dentro delas

PARA:

- Saídas laterais
- Bombas em qualquer corrente
- ‘Bypasses’
- Permutadores de calor externos
- ‘Flashes’ de um andar

INCLUI:

- Integração de calor
- Sistemas com separação de ar
- Combinações de colunas de rectificação e esgotamento

PODE DETECTAR UMA FASE ‘FREE-WATER’ NO CONDENSADOR OU EM QUALQUER PARTE DA COLUNA. Pode decantar água ‘free-water’ em qualquer andar

ACEITA:

- Razão de refluxo
- Nº. teórico de pratos
- temperaturas
- caudais
- purezas
- recuperações de componentes
- Eficiências, incluindo de Murphree
- Propriedades das correntes, como caudal volumétrico e viscosidade, em qualquer ponto da coluna

TEM CAPACIDADES DE:

- Projectar pratos de vários tipos
- Projectar enchimentos para uma variedade de aleatórios e estruturados

## **EXTRACÇÃO LÍQUIDO - LÍQUIDO RIGOROSA**

### **EXTRACT**

PODE TER:

- Múltiplas alimentações
- Múltiplas unidades de aquecimento ou arrefecimento
- saídas laterais

ACEITA ESPECIFICAÇÕES PARA COMPONENTES E EFICIÊNCIAS DE ANDARES



**REACTORES**

<b>Modelos</b>	
RSTOIC	<p>Modela um reactor quando:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• a cinética é desconhecida</li> <li>• a estequiometria é conhecida</li> <li>• pode especificar-se a conversão</li> </ul>
RYIELD	<p>Modela um reactor quando:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• a cinética e a estequiometria são desconhecidas</li> <li>• conhece-se a distribuição de dados</li> </ul>
REQUIL	<p>Modela um reactor quando:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• alguma ou todas as reacções atingem o equilíbrio</li> <li>• pode existir equilíbrio químico e simultaneamente equilíbrio de fases</li> </ul>
RGIBBS	<p>Modela um reactor quando:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• alguma ou todas as reacções atingem o equilíbrio</li> <li>• pode existir equilíbrio químico e simultaneamente equilíbrio de fases para multi-fases</li> </ul> <p>Minimiza a energia livre de Gibbs e não necessita da estequiometria da reacção</p> <p>Podem meter-se sólidos, incluindo como fase sólida</p>
RCSTR	<p>Modela rigorosamente um reactor continuamente agitado quando:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>• as cinéticas das reacções são conhecidas</li> <li>• o conteúdo do reactor tem as mesmas propriedades que a corrente de saída</li> <li>• pode existir equilíbrio químico e simultaneamente equilíbrio de fases</li> </ul>
RPLUG	<p>Modela rigorosamente um reactor tipo pistão</p> <p>Pode existir, opcionalmente, uma corrente de arrefecimento à volta do reactor</p>
RBATCH	<p>Modela rigorosamente um reactor descontínuo</p>

RSTOIC, RYIELD, RGIBBS e RCSTR podem ter qualquer número de correntes de alimentação de material, que são misturadas internamente.

## CRITALIZADORES

### CRYSTALLIZER

- EXECUTA:
  - Balanços de massa e energia
- PODE DETERMINAR
  - A distribuição granulométrica dos cristais
- ASSUME
  - Que o produto de saída deixa o cristalizador em equilíbrio
  - O licor no produto de saída está saturado
  - A alimentação ao cristalizador mistura-se com o produto reciclado e passa através de um permutador de calor antes de entrar no cristalizador
  - O produto de saída contém líquidos e sólidos
  - Pode também ter uma corrente de saída na fase vapor
  
- PARA SEPARAR AS FASES DA CORRENTE DE SAÍDA PODE PASSAR-SE ESTA POR:
  - um hidrociclone
  - um filtro
  - outro separador sólido-líquido

## TUBAGENS E VÁLVULAS

<b>PIPE</b>	<p>Calcula a queda de pressão e a transferência de calor num segmento de tubagem</p> <p>Assume que o fluxo é a uma dimensão, em estado estacionário</p> <p>Realiza cálculos para uma, duas ou três fases</p> <p>Se se conhece a pressão de entrada, calcula a pressão de saída e vice-versa</p>
<b>PIPELINE</b>	<p>Calcula a queda de pressão e a transferência de calor num segmento de tubagem</p> <p>Pode modelar qualquer n.º de segmentos para descrever a geometria da tubagem</p> <p>Assume que o fluxo é a uni-dimensional, em estado estacionário</p> <p>Realiza cálculos para uma, duas ou três fases</p> <p>Se se conhece a pressão de entrada, calcula a pressão de saída e vice-versa</p>
<b>VALVE</b>	<p>Relaciona a queda de pressão na válvula com o coeficiente de fluxo para a válvula</p> <p>Pode modelar:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>Válvulas de controle</li> <li>Válvulas variadoras de pressão</li> </ul> <p>Determina as condições térmicas e as fases da corrente de saída, baseadas nas especificações para uma, duas ou três fases</p> <p>Assume fluxo adiabático</p> <p>Tem dois modos:</p> <p><b>SET-PRESSURE</b> - A pressão de saída ou a queda de pressão são especificadas, e o modelo calcula o coeficiente de fluxo da válvula</p> <p><b>CALC-PRESSURE</b> - A pressão de saída e a queda de pressão são calculadas baseadas na especificação para o coeficiente de fluxo da válvula</p>

## MANUSEAMENTO DE SÓLIDOS

<b>CRUSHER</b>	<p>Simula a quebra de partículas sólidas</p> <p>Modela operações, via seca ou húmida de:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ moínhos giratórios de maxilas</li> <li>■ moínhos de rolo simples</li> <li>■ moínhos de rolos múltiplos</li> <li>■ moínhos de gaiola e impacto</li> </ul> <p>Assume que a alimentação é homogénea</p> <p>Não entra com o calor desenvolvido pela redução de tamanho</p>
<b>SCREEN</b>	<p>Simula a separação de partículas em vários tamanhos</p> <p>Cada uma das duas saídas contém partículas dum tamanho mais uniforme</p>
<b>FABFL</b>	<p>É um separador gás-sólido</p> <p>Simula filtros de sacos de tela</p> <p>Possui várias células, cada uma das quais está montada verticalmente num cilindro</p> <p>Os sacos trabalham em paralelo para separar partículas sólidas de uma corrente gasosa</p>
<b>CYCLONE</b>	<p>Simula a operação de ciclones</p> <p>Remove partículas sólidas de uma corrente gasosa usando a força centrífuga</p>
<b>VSCRUB</b>	<p>Simula separadores venturi</p> <p>Remove partículas sólidas de uma corrente gasosa por contacto directo com um líquido atomizado</p>
<b>ESP</b>	<p>Simula precipitadores electrostáticos por via seca</p>
<b>HYCYC</b>	<p>Simula hidrociclones</p>
<b>CFUGE</b>	<p>Simula filtros centrífugos</p> <p>Assume que o filtrado não contém sólidos. Eficiência = 1</p>
<b>FILTER</b>	<p>Simula filtros rotativos de vácuo</p> <p>Assume que o filtrado não contém sólidos. Eficiência = 1</p>
<b>SWASH</b>	<p>Modela a separação de partículas sólidas de uma corrente sólida com um líquido aderente</p> <p>Não considera uma fase vapor</p>
<b>CCD</b>	<p>Simula uma bateria de decantadores em contra corrente.</p> <p>Calcula caudais e composições, a partir de:</p> <ul style="list-style-type: none"> <li>■ Pressão</li> <li>■ Eficiência</li> <li>■ N.º de andares</li> <li>■ Razão mássica entre a fase líquida e a fase sólida</li> </ul> <p>Pode calcular consumos de calor a partir do perfil de temperaturas</p> <p>Não considera fases de vapor</p>