Graphical user interface

Description automatically generated with medium confidence

Laboratório de Computação e Visualização Científica - Módulo 4

**Modelação de Processos Industriais com Aspen Plus**

Alexandre Rodrigues nº 92993

Gonçalo Chaves nº 93109

João Machado nº 89132

5 de Junho de 2022

Universidade de Aveiro – Departamento de Física

Índice

[Índice 2](#_Toc622461998)

[Índice de Figuras 2](#_Toc1024512022)

[Introdução 4](#_Toc1297753290)

[Modelação de Processo Industriais com o software Aspen Plus 5](#_Toc1380678227)

[Exemplos 7](#_Toc1678793481)

[Conclusão 9](#_Toc909346658)

[Referências 10](#_Toc1154041629)

# Índice de Figuras

Figura 1 - Modelo Exemplo 7

Figura 2 - Curva de Sensibilidade 8

Resumo

A modelação de processos industriais e a simulação de modelos termodinâmicos, com recurso a softwares de modelação computacional, é uma área de cada vez maior interesse, pois o mundo está a passar por uma época de rápida evolução tecnológica em que as empresas deixaram de competir no mercado interno para competir a nível mundial contra as empresas que disputam os mercados globais. Tendo em conta estes novos desafios, houve a necessidade de explorar e otimizar computacionalmente os processos químicos já existentes que são aplicados numa variedade de indústrias desde o fabrico de polímeros à indústria bioquímica. Para este efeito, existe uma procura crescente de softwares de otimização de processos mais eficazes e simples de usar do que os que estão atualmente disponíveis no mercado.

Introdução

O objetivo deste trabalho consiste na identificação dos elementos constituintes e análise de desempenho dum reator de síntese de Amónia. Este método de síntese de Amónia, usando um reator, baseia-se no processo de *Haber-Bosch*, um dos mais importantes na criação deste composto.

Neste processo, gás nitrogénio (N2) reage com gás hidrogénio (H2) em condições de alta temperatura e pressão junto a um catalisador. (Equação 1.1). Na indústria, a reação geralmente acontece na presença de gases inertes, por exemplo o metano (CH4).

(1.1)

Este processo de produção de amónia consegue-se basicamente dividir nas seguintes etapas: purificação do gás de alimentação da reação, reforma catalítica primária, reforma catalítica secundária, *shift reaction*, remoção de CO2, metanação, *loop* de síntese e reciclagem (através duma unidade de conversão). Formalmente conhecida como “*water gas shift reaction”* ou reação de deslocamento de vapor de água, é uma reação que promove a conversão do monóxido de carbono em CO2 e da água em H2.

O “*loop*” de síntese é definido como a etapa do processo de produção de amónia que implica a compressão do gás de processo, sequências de trocas de calor, a reação de síntese e a reciclagem da parte de gás excedente de dentro do reator. Como a reação de formação de amónia ocorre a altas pressões e temperaturas, a compressão e as trocas de calor são vitais para que o gás dentro do reator atinga as condições necessárias para, através dele, se poder sintetizar a amónia.

O reator de síntese é a base da planta de produção de amónia e vários fatores podem influenciar a produção do gás e a estabilidade do reator tais como as condições operacionais (temperatura, escoamento, alimentação de reagente, concentração de gases inertes...), a cinética da reação termodinâmica e as propriedades catalíticas. Portanto, uma análise de desempenho do reator torna-se significativa através do controlo de temperatura nas paredes do catalisador, já que a reação envolvida é reversível e altamente exotérmica.

Obter as melhores condições durante o ciclo de síntese deste processo é um passo importante para melhorar o desempenho do reator de amónia e para poder reduzir os custos de sintetização deste material.

Para este efeito, usou-se o Aspen® que é um pacote de programas de simulação de processos e mais concretamente utilizado neste trabalho, o software *Aspen Plus*® é usado para modelar processos químicos a uma escala industrial, amplamente utilizado no ramo. Permite, dado um modelo especificado dum processo, desenvolvê-lo, resolvê-lo matematicamente com o algoritmo escolhido de maneira a prever o desempenho do processo e examinar, posteriormente, os resultados obtidos.

É vantajoso o uso desta versão do *Aspen Plus*® pois já contém uma base de dados pré-existente de espécies químicas e dos seus parâmetros puros e binários para aplicar num processo e é precisamente esta modelação exata de propriedades termodinâmicas que torna o *Aspen Plus*® especialmente útil no caso de separação de misturas não-ideais. Em adição, pode-se introduzir custos para a energia e para os materiais, de modo a otimizar o processo também a nível económico.

# Modelação de Processo Industriais com o software Aspen Plus

Simular processos industriais é uma parte importante da engenharia destes modelos. Tem a vantagem de ter custos muito reduzidos comparado com a produção de protótipos das linhas de produção reais. Permite também a rápida evolução entre modelos diferentes incluindo o uso de maquinaria que a empresa pode nem ter à disposição no momento.

O software *Aspen Plus* ® é usado para modelar processos industriais. Permite-nos desenvolver o modelo, resolvê-lo com o algoritmo escolhido e examinar os resultados. Adicionalmente pode-se introduzir custos para energia e materiais. Uma das suas vantagens é a inclusão de várias bases de dados de compostos químicos e parâmetros relacionados. Também permite o estudo de problemas variados e até um alto nível de complexidade.

Dado uma “maquete” do processo e uma seleção adequada de modelos termodinâmicos, o *Aspen Plus* ® usa modelos matemáticos para prever o desempenho deste processo.

Para começar a definir um processo, define-se as componentes, os compostos químicos que constituem o processo. Nas propriedades iniciais do processo, pode-se escolher o método base a usar e a sua tolerância.

Os principais blocos a usar na *flowsheet* para modelar os diversos passos do modelo são:

* Mixers/Splitters - combinam ou separam correntes, sendo que estas são o principal meio de transporte de reagentes/produtos de reação;
* Separators – separam a corrente em vapor-líquido, 2 fases líquidas, frações, etc.;
* Heat Exchangers – aquecem ou arrefecem a corrente;
* Columns – Destilação, extração, entre outras unidades especializadas;
* Reactors – reatores de diferentes tipos;
* Pressures Changers – bomba, compressores, válvulas e tubos;
* Manipulators – para cálculos, analises e manipulação;
* Solids – cristalizadores, filtros, etc.;
* Solid Separators.

Com estes blocos e com as correntes de material, pode-se construir a *flowsheet*. Cada bloco terá algumas propriedades a alterar/preencher, como pressões, temperaturas e modos de funcionamento.

Agora, já se pode executar o modelo com o botão “Run” e verificar os resultados. Pode ser necessário alterar o modelo e a tolerância usadas para garantir a convergência. Devem-se seguir os avisos e erros expostos no *Control Panel* de forma a efetuar potenciais alterações necessárias, reinicializando o processo e executando de novo.

Neste momento, já existe um modelo testado e funcional, podemos consultar os resultados de produção do objetivo selecionando os resultados da sua corrente no painel de simulação.

Opcionalmente pode-se introduzir recursos como eletricidade e água, registando o gasto destes em cada bloco do modelo. Podemos ainda adicionar um custo destes recursos para o programa calcular o custo total de operação do processo.

Para obter melhores resultados, podemos estudar a sensibilidade do processo a uma variável definida pelo utilizador, nomeadamente alterar a pressão de um reator com o objetivo de aumentar a produção do composto objetivo. Se quisermos otimizar o modelo de forma integrada, podemos usar a ferramenta de otimização que devolve apenas a melhor solução final. A ferramenta de sensibilidade permite estudar melhor os efeitos da variável, nomeadamente produzir uma curva de sensibilidade.

Para usar estas ferramentas, define-se uma variável associada a um parâmetro de um bloco do modelo, escolhe-se limites inferior e superior para os valores da variável. Pode-se, depois, escolher o resultado a estudar, usualmente a quantidade do composto produzido, e executa-se a simulação. Existe então a opção de visualizar a curva de sensibilidade (ver Figura 2).

Alternativa ou complementariamente, pode-se utilizar a ferramenta *Design Specification* para encontrar o valor ideal da variável do modelo. De forma semelhante, define-se a variável e os seus limites. Nesta ferramenta, existe o separador *Spec* que é utilizado para definir a variável e o valor objetivo com uma tolerância de aceitação. Ao executar o modelo, obtém-se um valor ideal para a variável no separador de resultados da *Design Specification* e o correspondente valor do composto produzido.

Finalmente, podemos alterar a especificação do bloco para usar o valor ideal e assim teremos o modelo otimizado, correndo de novo para obter resultados, após desativar as ferramentas.

# Exemplo

Para melhor exemplificar o uso do *Aspen Plus,* usamos o seguinte modelo:

Diagram

Description automatically generated

Figura 1 - Modelo Exemplo Implementado

Este modelo representa a produção de Amónia com base em Nitrogénio e Hidrogénio, sendo o Dióxido de Carbono um composto inerte neste caso. Usou-se unidades do sistema imperial para obter uma melhor correspondência com os exemplos dos vídeos produzidos [1].

É constituído por um compressor de múltiplos passos (MCOMP), que aumenta a pressão da corrente para 4000 psia, segue-se um *Mixer* (MIXR) para combinar a corrente reciclada (9). A corrente é aquecida para 900ºF no aquecedor (HEATER) e entra num reator de Gibbs (REACT) que reduz a pressão em 30 psia. É reaquecido para 80ºF no aquecedor (HXER2). Finalmente, entra no separador (FLASH) que separa o composto final de amónia (NH3) do gás que será reciclado. Parte desse gás é libertado (PURGE) no divisor (PURGESPL), sendo o restante recomprimido pelo compressor (COMP) para ser misturado na corrente que entrará no aquecedor (HEATER).

Fez-se variar a pressão do reator de 2000 a 6000 (psia) para perceber a região de maior eficiência do processo, produzindo a seguinte curva de sensibilidade.

Chart

Description automatically generated

Figura 2 - Curva de Sensibilidade

Através da análise da figura 2 é possível verificar uma eficiência elevada para pressões na ordem dos 2500 psia. Assim podemos avaliar melhor qual o melhor valor de pressão do reator, com a definição de um Design Spec, no aparente melhor intervalo de 2400 a 2600 psia com *target* de 0.98 de fração molar e tolerância de 0.05, assim obtendo o valor de 2580 psia que produz uma fração molar de 0.9795.

Usando uma única *utility* que representa a eletricidade, definimos um custo de 1$ por kWh de forma a facilitar a aquisição dos seguintes dados:

0.425 kg/s NH3  
HEATER - 1.685 kW/h  
HXER2 - 1.956 kW/h  
FLASH – 0 kW/h  
REACT - 0.369 kW/h  
COMP - 0.185 kW/h  
MCOMP - 0.076 kW/h

Assim podemos chegar a seguinte equação de custo para um kg de NH3 produzido:

Podemos concluir que o maior custo de produção é verificado no aquecimento da corrente, nomeadamente nas componentes HEATER e HXER2.

Conclusão

O Aspen Plus é um software poderoso para a modelação de processos químicos industriais, pois, ao unir uma vasta e completa base de dados de propriedades químicas de diversos compostos a uma capacidade de computação com recurso a variados algoritmos de otimização permite para um determinado processo químico computar inúmeras situações diferentes. Uma outra vantagem deste *software* reside na sua capacidade de integrar cálculos económicos no processo tornando a resolução de problemas de otimização nesta área possível, sem que se recorra a *softwares* adicionais.

Uma maneira de melhorar os resultados apresentados seria, em vez de utilizar os valores de referência da base de dados, obter valores de referência para o ambiente em que se pretende efetuar o processo em causa tornando a simulação ainda mais precisa. Uma outra maneira de melhorar os resultados será estudar mais profundamente os algoritmos de otimização utilizados desse modo tendo um melhor entendimento da sua região de convergência para o problema em causa. Apesar de estas potenciais melhorias aparentarem ser insignificantes no contexto de uma única reação, importa relembrar que num contexto industrial poderão representar um ganho ecónomo apreciável.

Com a realização deste relatório os autores puderam ter um primeiro contacto com o *software* *Aspen Plus* e adquirir conhecimentos válidos e valiosos a nível da indústria química. Como no final da experiência houve uma convergência dos valores computados para um mínimo (apesar de com alguma tolerância) o grupo considera que as simulações foram elaboradas com sucesso.

# Referências

|  |  |
| --- | --- |
| [1] | A. Tanksale, “Che2166: Introduction to Process Simulation,” Monash University, 2022. [Online]. Available: https://youtu.be/J6ZzL2d660I. |
| [2] | K. I. M. Al-Malah, Aspen plus: chemical engineering applications, Hoboken, New Jersey: Wiley, 2017. |