UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
ESCOLA DE QUÍMICA

EQE776 Modelagem e Simulação de Processos

Aula 07. Modelo customizado de separador por membrana em Aspen Plus

Professor: Roymel Rodríguez Carpio

E-mail: roymel@eq.ufrj.br

Recapitulando

- Craqueamento a vapor do etano em DWSIM

Temas da aula

- Modelo customizado de separador por membrana em Aspen Plus

Apresentação do problema

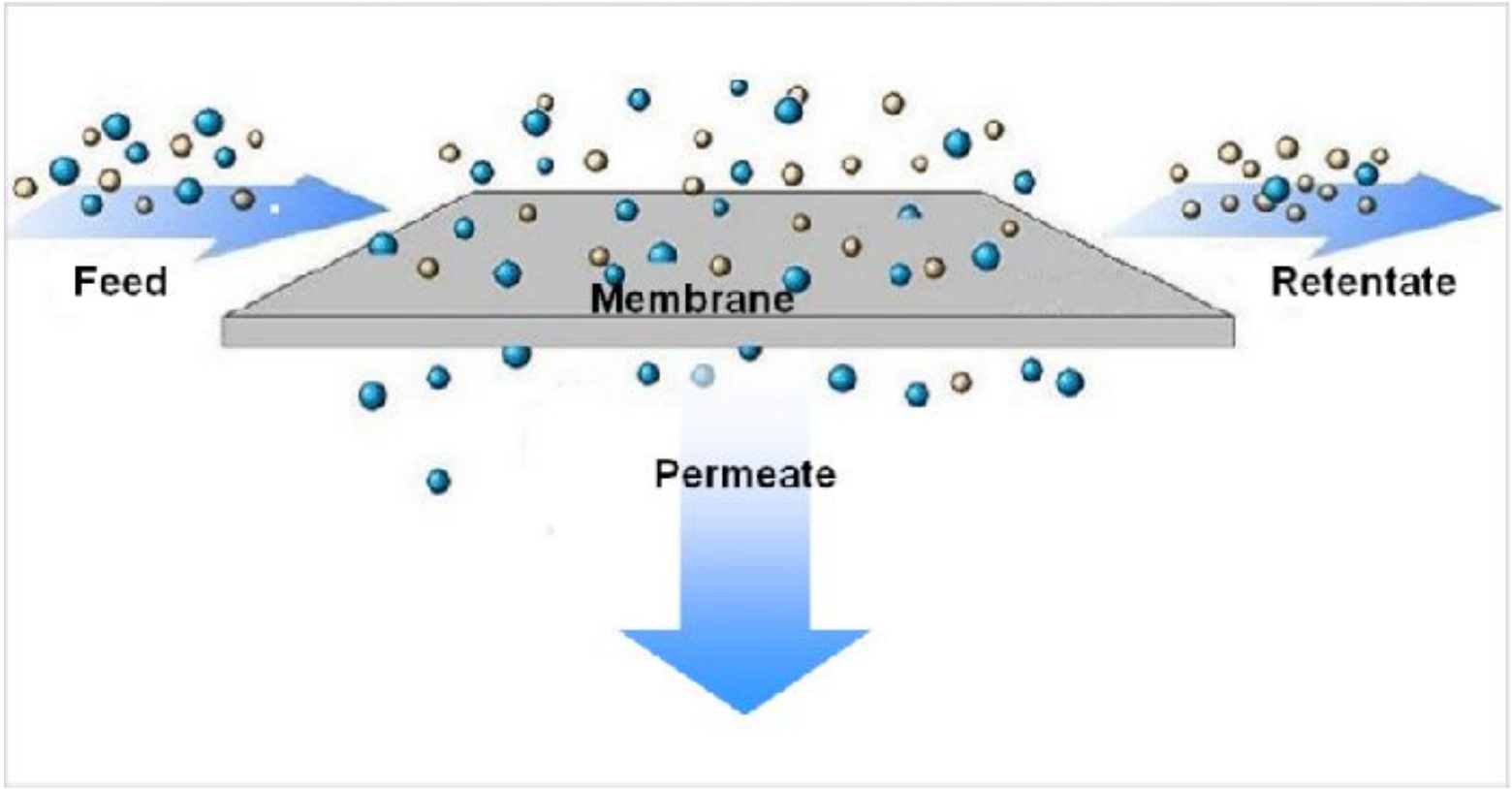
Sistemas de separação por membranas são amplamente utilizados para a remoção de CO_2 e H_2S do gás natural.

Simuladores mais comuns não apresentam módulo de separador por membranas.

Neste exemplo será criado um modelo simplificado de separador por membrana utilizando o “Aspen Custom Modeler”, de forma tal que possa ser integrado em simulações de Aspen Plus.

Apresentação do problema

Esquema simplificado do separador por membrana



Apresentação do problema

Condições da corrente de alimentação:

- Temperatura: 323 K
- Pressão: $5x10^5$ Pa
- Vazão: 100 kmol/s
- Fração molar CO_2: 0,20
- Fração molar de CH_4: 0,60
- Fração molar de C_2H_6: 0,15
- Fração molar de C_3H_8: 0,05

Apresentação do problema

Modelo simplificado:

Parâmetros:

L = $3x10^{-3}$ m; espessura da membrana

A = 10 m^2; área útil da membrana

P_ratio = 0,8; razão de pressão (P de Permeado / P de alimentação)

K_CO_2 = $4,6x10^{-8}$ $kmol.s^{-1}.m^{-1}.Pa^{-1}$; permeabilidade de CO_2

K_CH_4 = $1,8x10^{-8}$ $kmol.s^{-1}.m^{-1}.Pa^{-1}$; permeabilidade de CH_4

K_C_2H_6 = $6,1x10^{-9}$ $kmol.s^{-1}.m^{-1}.Pa^{-1}$; permeabilidade de C_2H_6

K_C_3H_8 = $8,2x10^{-10}$ $kmol.s^{-1}.m^{-1}.Pa^{-1}$; permeabilidade de C_3H_8

Apresentação do problema

Modelo simplificado:

Variáveis:

J_CO_2; $kmol.s^{-1}.m^{-2}$; fluxo molar de CO_2 através da membrana
J_CH_4; $kmol.s^{-1}.m^{-2}$; fluxo molar de CH_4 através da membrana
$J\_C_2H_6$; $kmol.s^{-1}.m^{-2}$; fluxo molar de C_2H_6 através da membrana
$J\_C_3H_8$; $kmol.s^{-1}.m^{-2}$; fluxo molar de C_3H_8 através da membrana

Apresentação do problema

Modelo simplificado:

Equações:

Permeate.T = Inlet.T;

Retentate.T = Inlet.T;

Permeate.P = P_ratio*Inlet.P;

Retentate.P = Inlet.P;

$J_i = K_i*(Inlet.P-Permeate.P)/L;$

$Permeate.F*Permeate.z_i = J_i*A;$

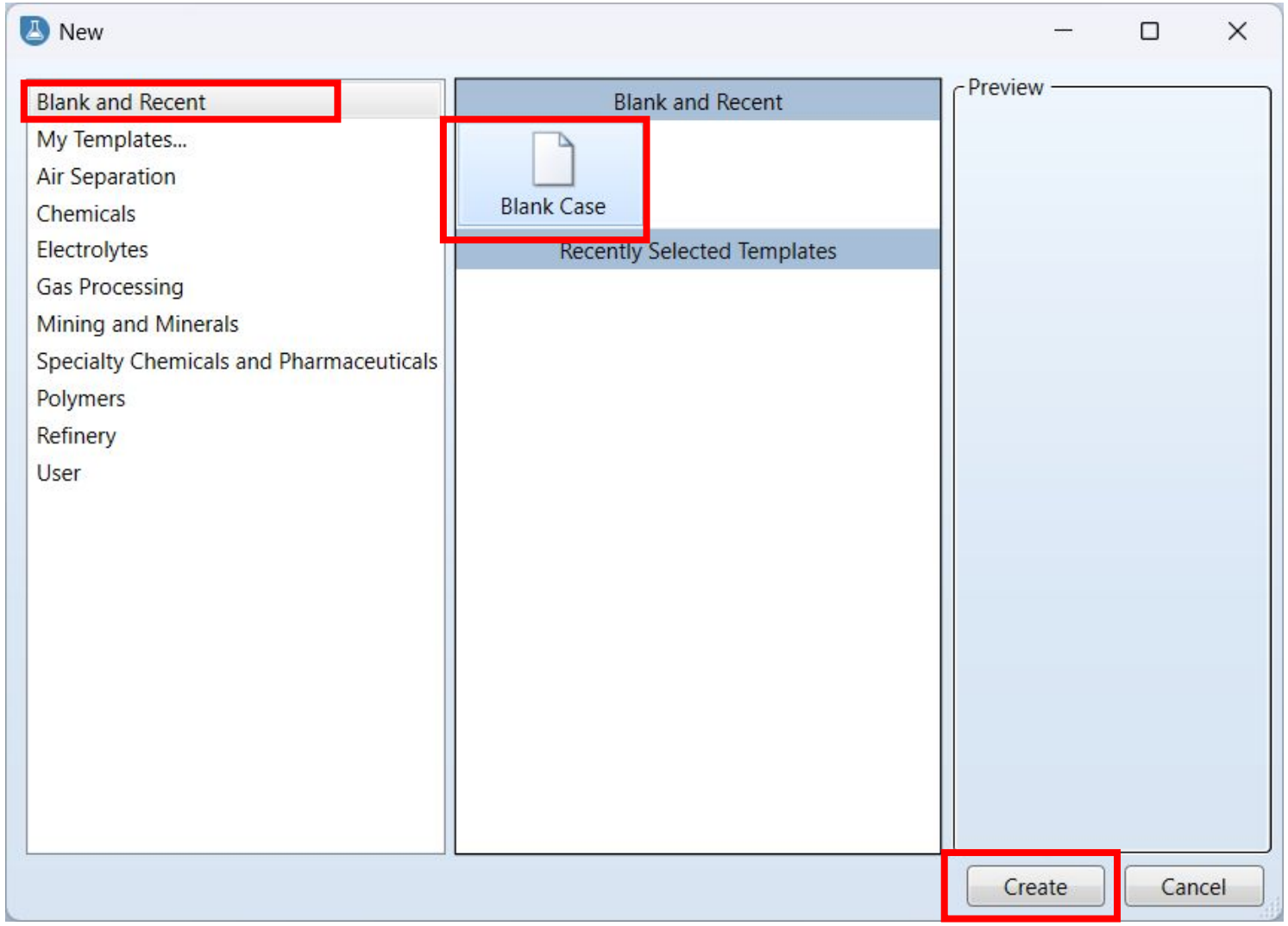
$Inlet.F*Inlet.z_i = Retentate.F*Retentate.z_i + Permeate.F*Permeate.z_i;$

$sum(Retentate.z_i) = 1;$

$sum(Permeate.z_i) = 1;$

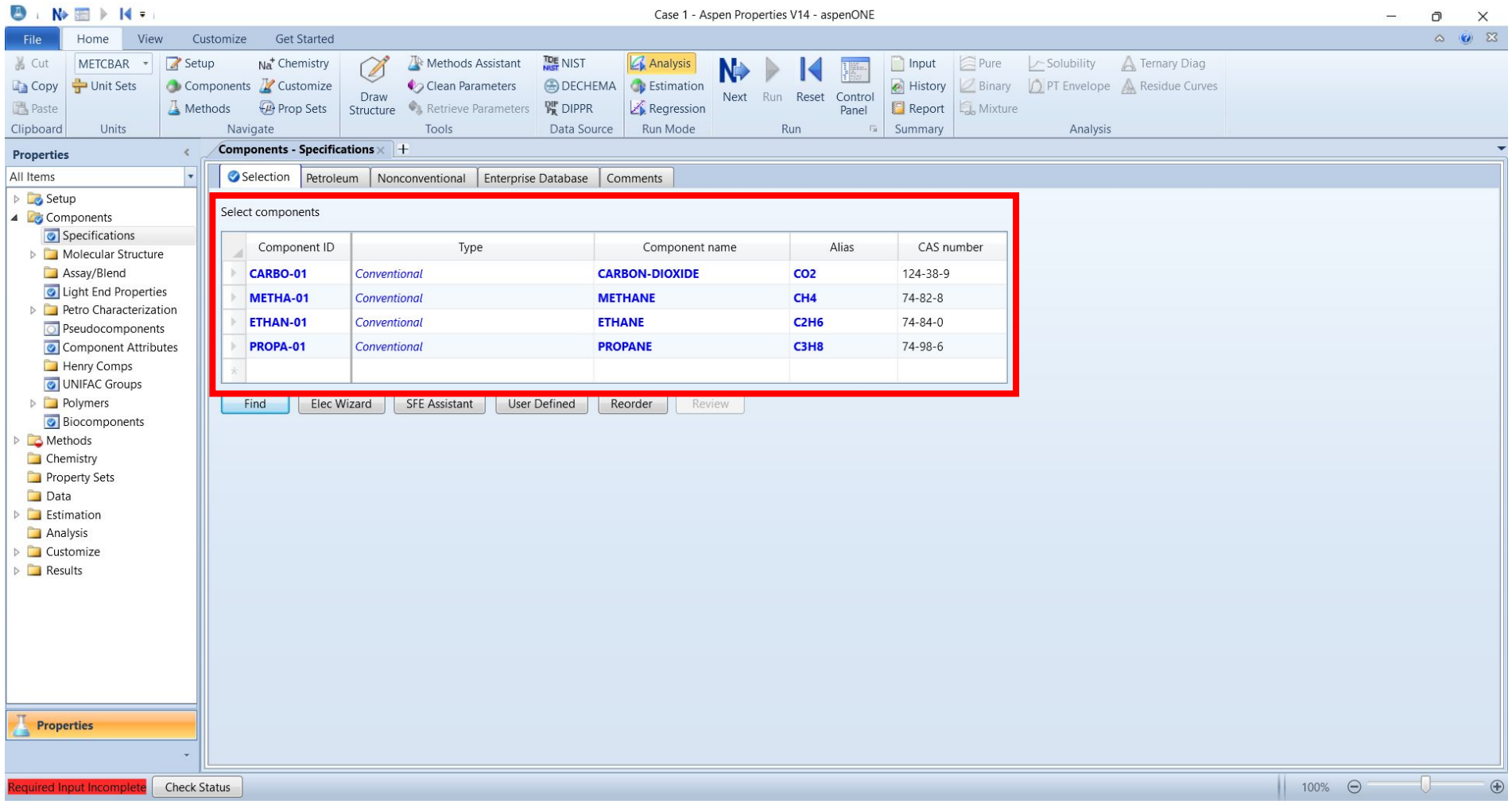
Criação do arquivo de propriedades

Criar um novo arquivo de “Aspen Properties”



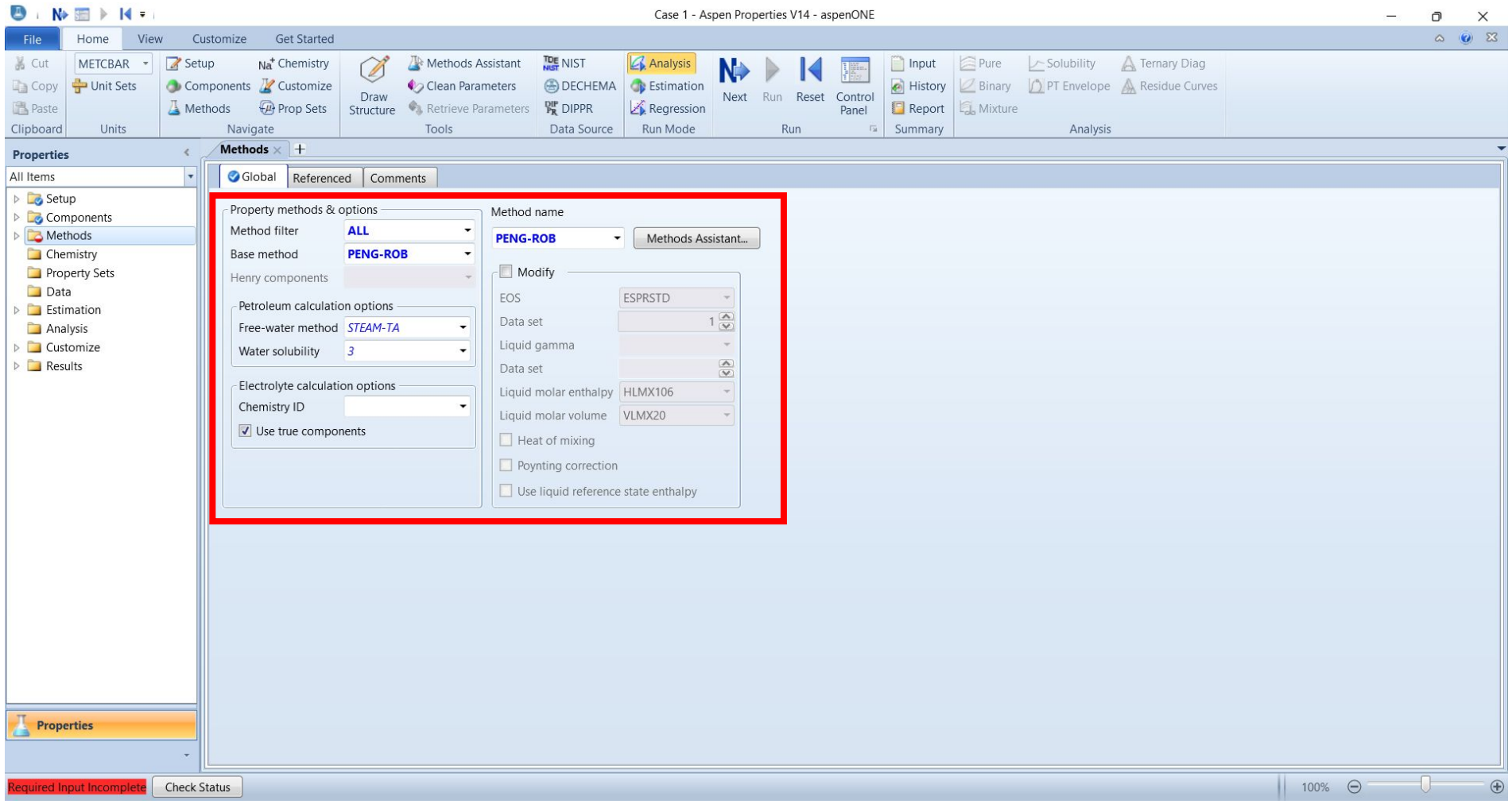
Criação do arquivo de propriedades

Escolher os componentes



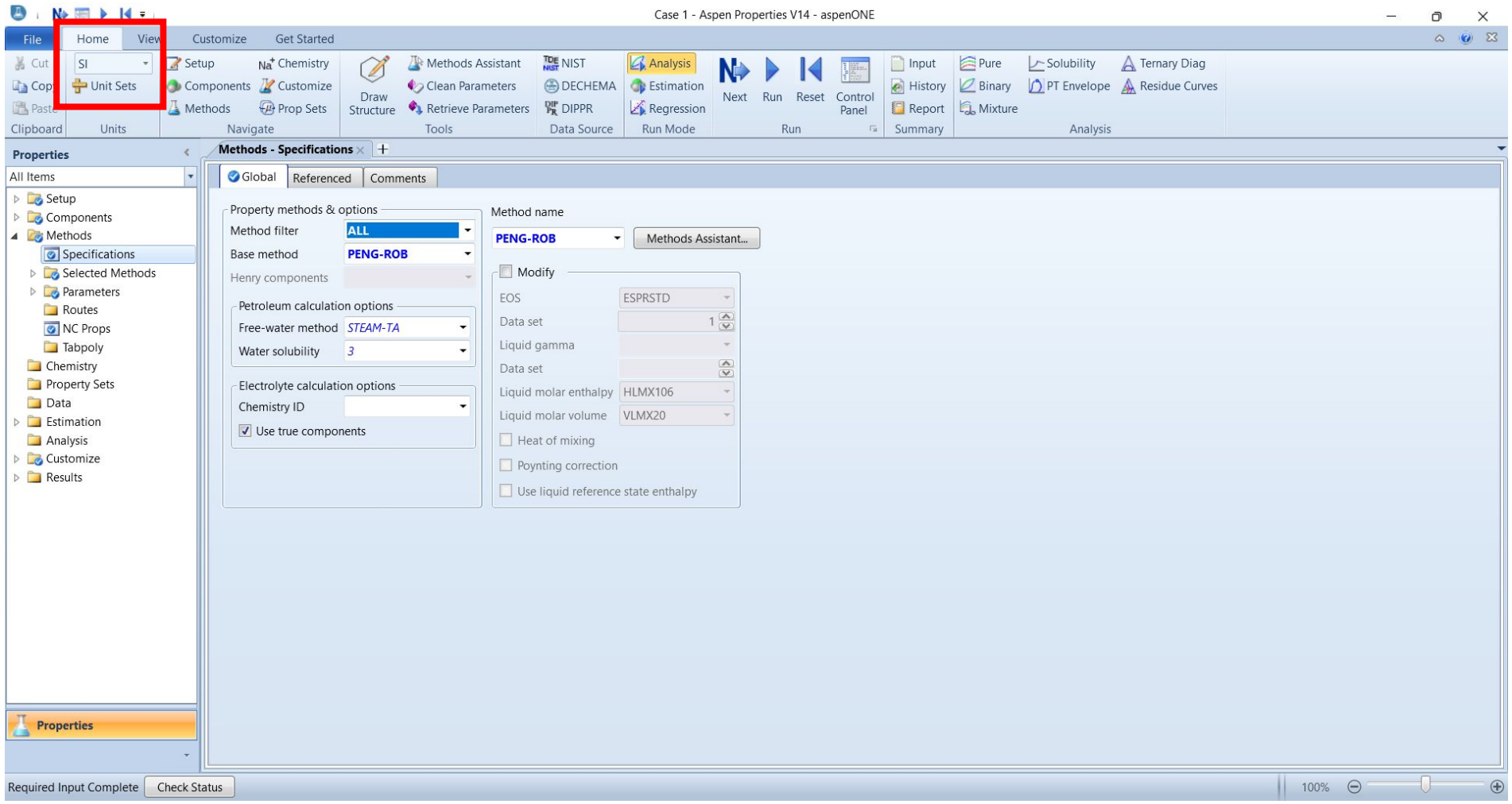
Criação do arquivo de propriedades

Escolher o modelo termodinâmico



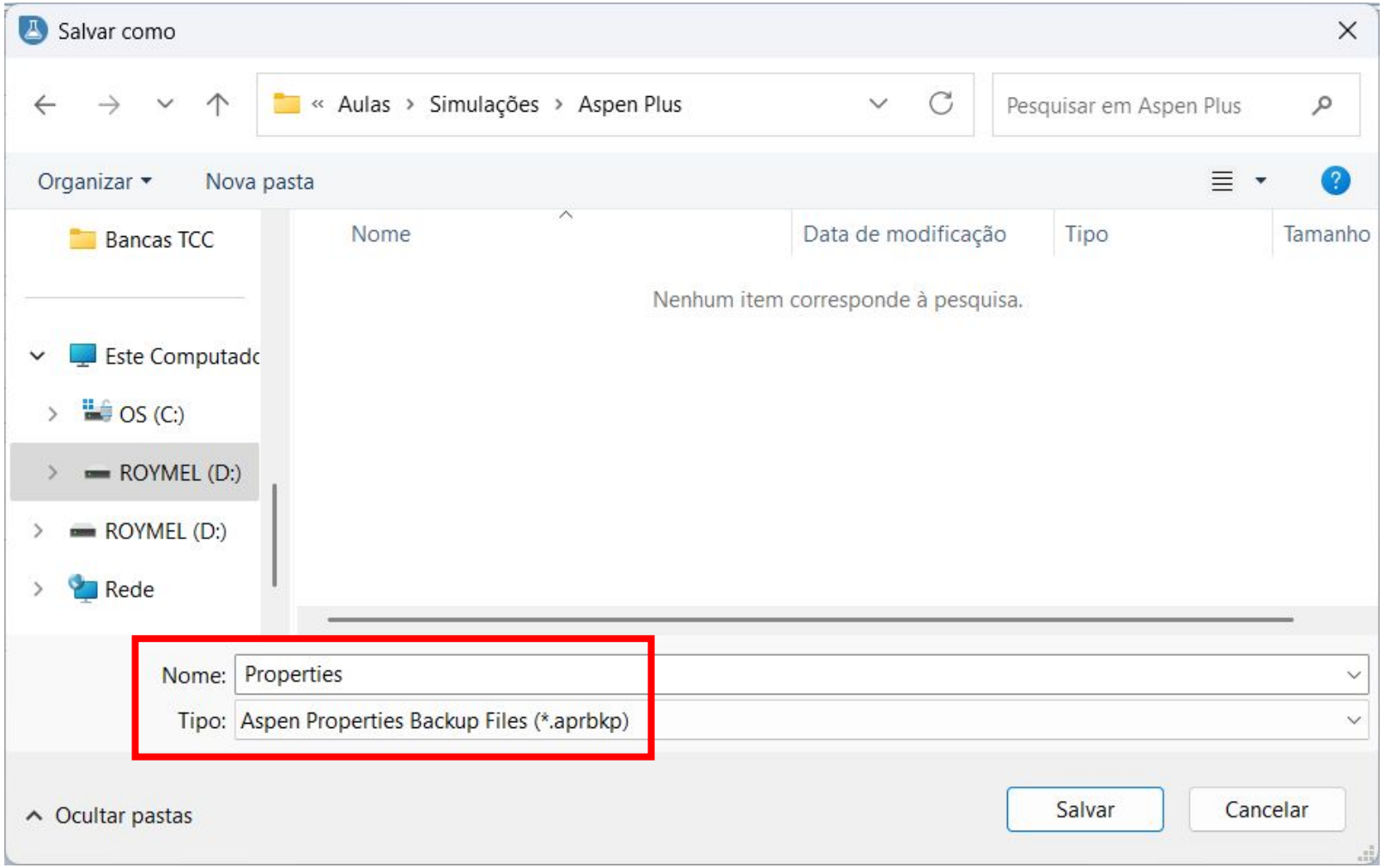
Criação do arquivo de propriedades

Escolher sistema internacional de unidades



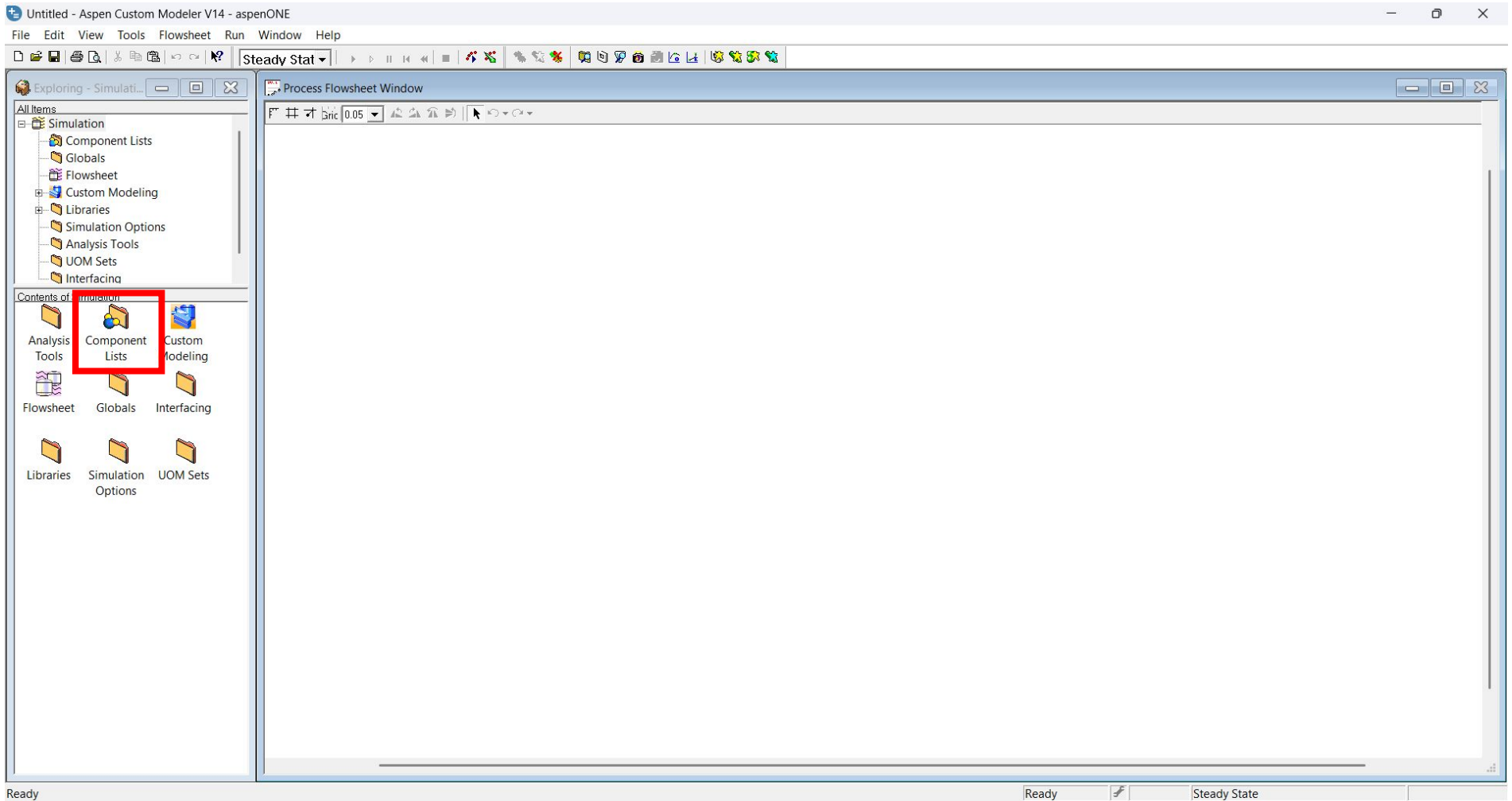
Criação do arquivo de propriedades

Salvar o arquivo com o formato “*.aprbkp”



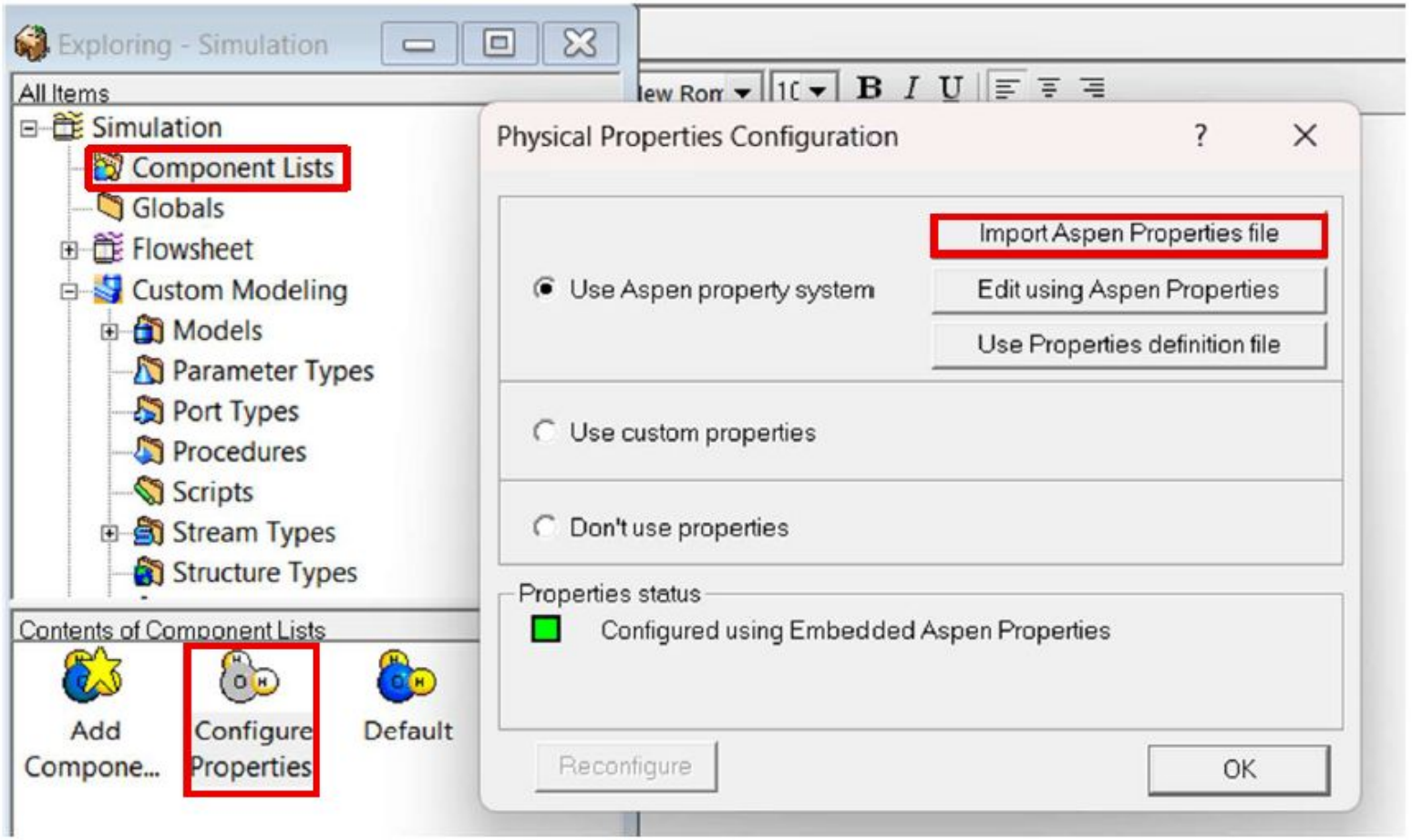
Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Abrir o “Aspen Custom Modeler”



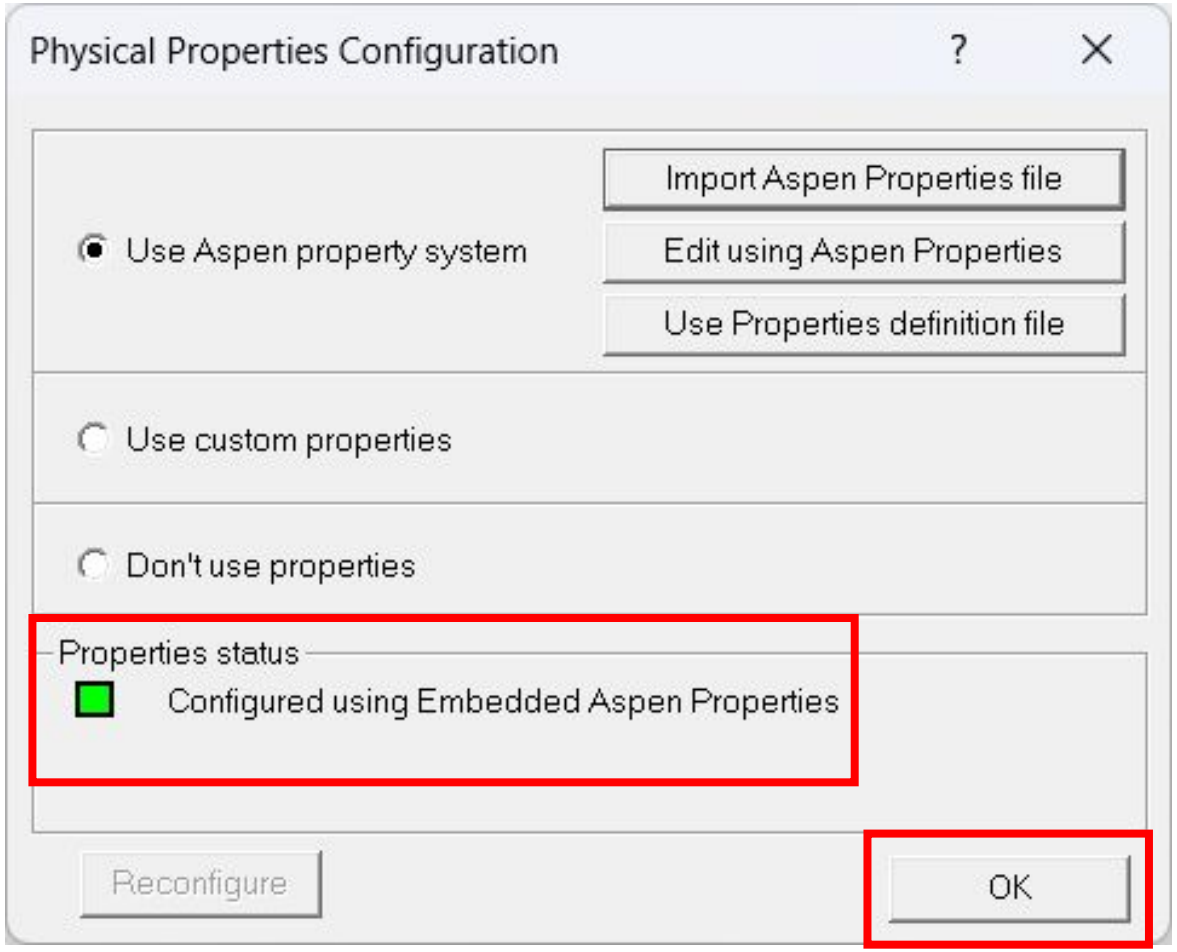
Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Importar o arquivo de propriedades criado anteriormente



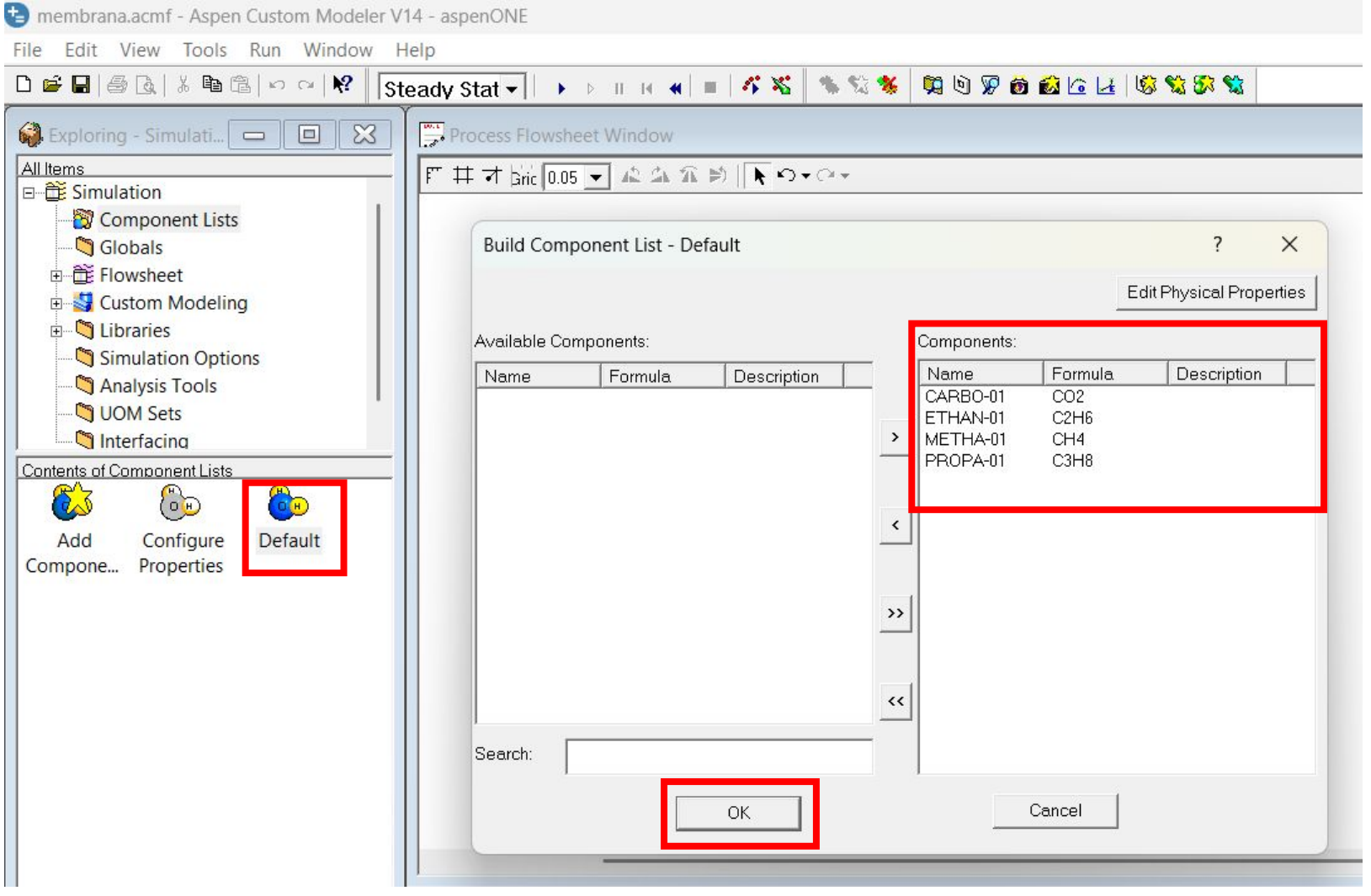
Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Propriedades configuradas satisfatoriamente



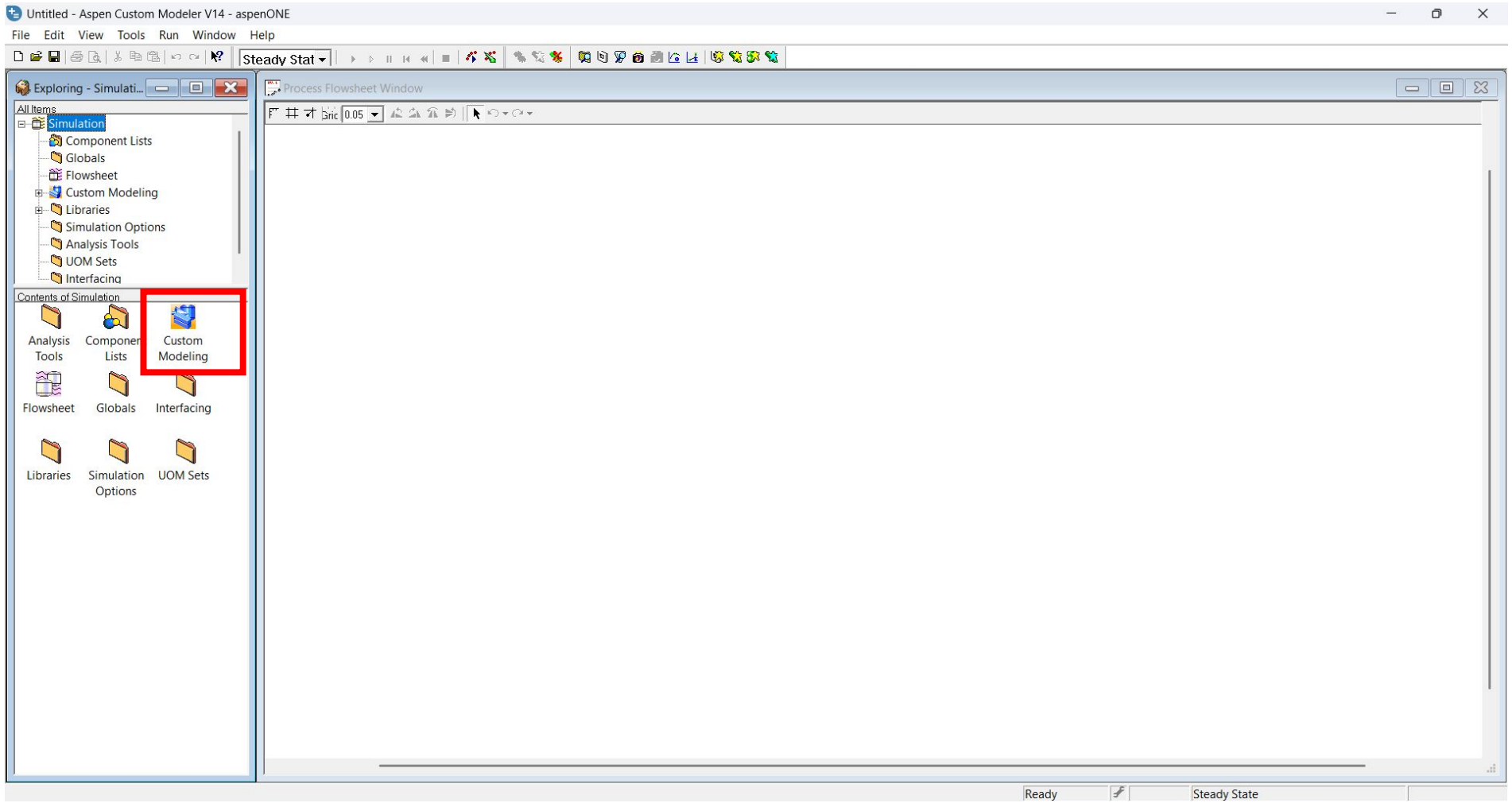
Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Adicionar os componentes à lista padrão de componentes



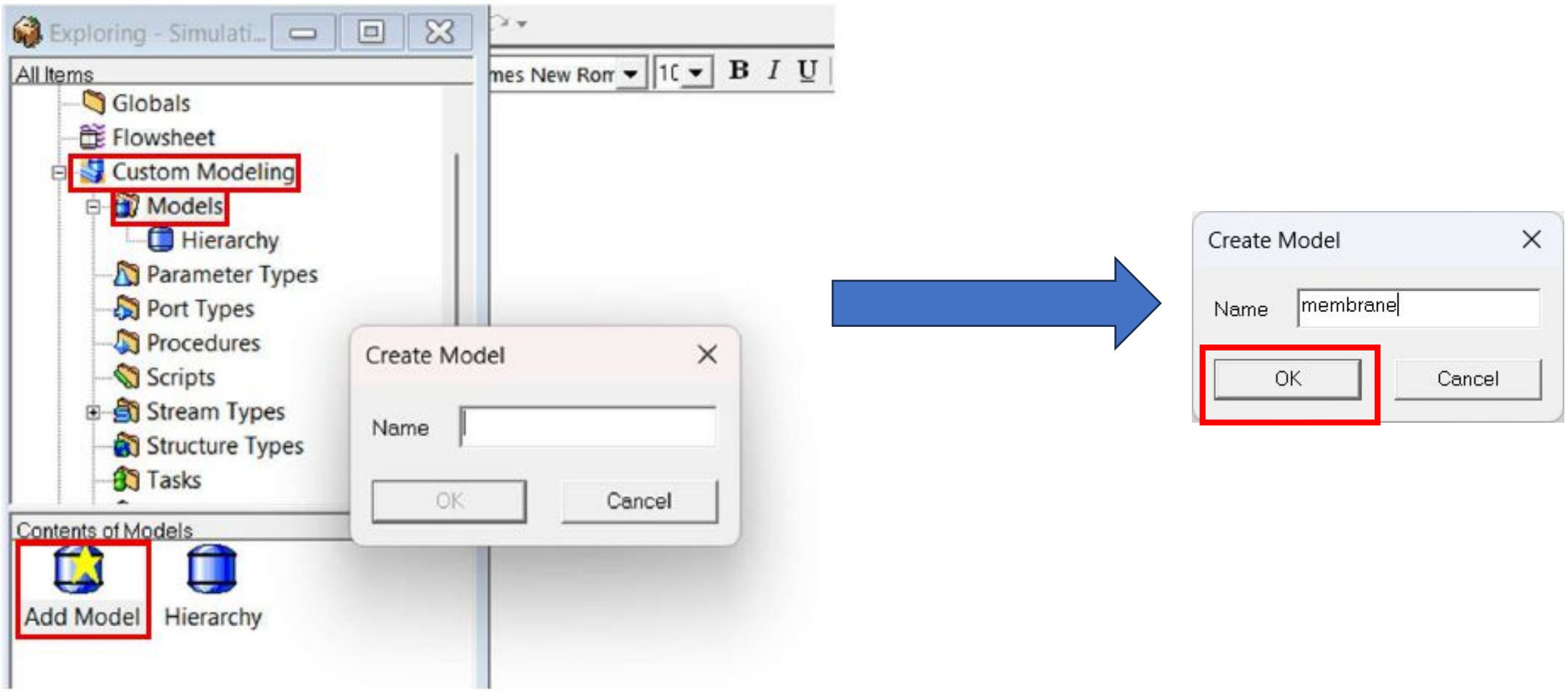
Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Modelo customizado



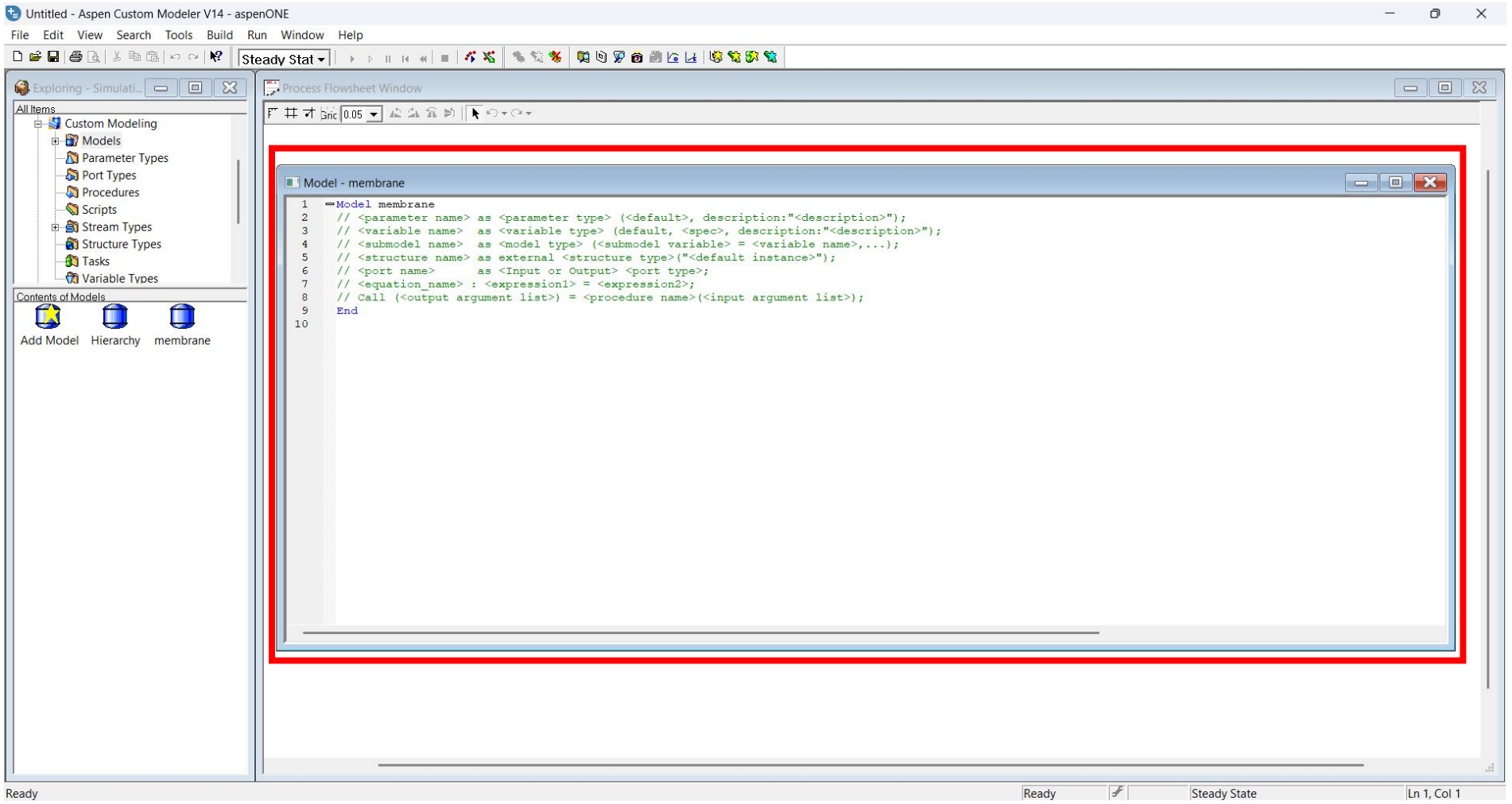
Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Adicionar modelo



Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Área para escrever o modelo



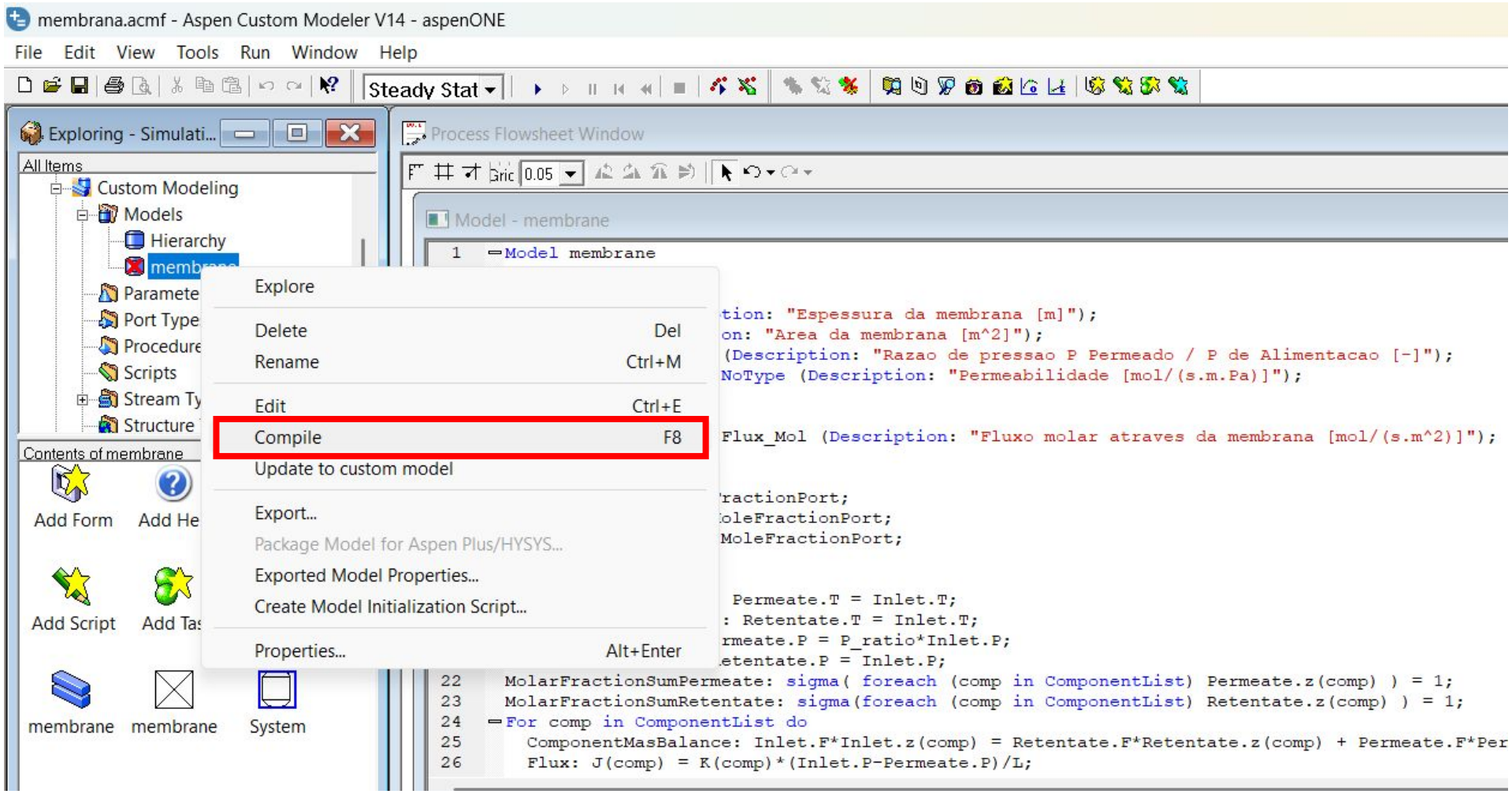
Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Modelo implementado

```
1   Model membrane
2
3     // Parameters
4     L as Length (Description: "Espessura da membrana [m]");
5     A as Area (Description: "Area da membrana [m^2]");
6     P_ratio as Fraction (Description: "Razao de pressao P Permeado / P de Alimentacao [-]");
7     K(ComponentList) as NoType (Description: "Permeabilidade [kmol/(s.m.Pa)]");
8
9     // Variaveis
10    J(ComponentList) as Flux_Mol (Description: "Fluxo molar atraves da membrana [kmol/(s.m^2)]");
11
12    // Conexoes
13    Inlet as Input MoleFractionPort;
14    Permeate as Output MoleFractionPort;
15    Retentate as Output MoleFractionPort;
16
17    // Equacoes
18    PermeateTemperature: Permeate.T = Inlet.T;
19    RetentateTemperature: Retentate.T = Inlet.T;
20    PermeatePressure: Permeate.P = P_ratio*Inlet.P;
21    RetentatePressure: Retentate.P = Inlet.P;
22    MolarFractionSumPermeate: sigma( foreach (comp in ComponentList) Permeate.z(comp) ) = 1;
23    MolarFractionSumRetentate: sigma(foreach (comp in ComponentList) Retentate.z(comp) ) = 1;
24    For comp in ComponentList do
25      ComponentMasBalance: Inlet.F*Inlet.z(comp) = Retentate.F*Retentate.z(comp) + Permeate.F*Permeate.z(comp);
26      Flux: J(comp) = K(comp)*(Inlet.P-Permeate.P)/L;
27      PermeateMolarFlow: Permeate.F*Permeate.z(comp)= J(comp)*A;
28    EndFor
29
30    End
```

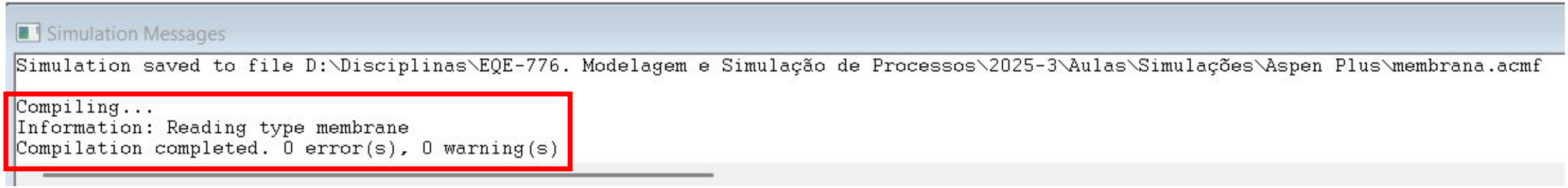
Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Salvar e compilar



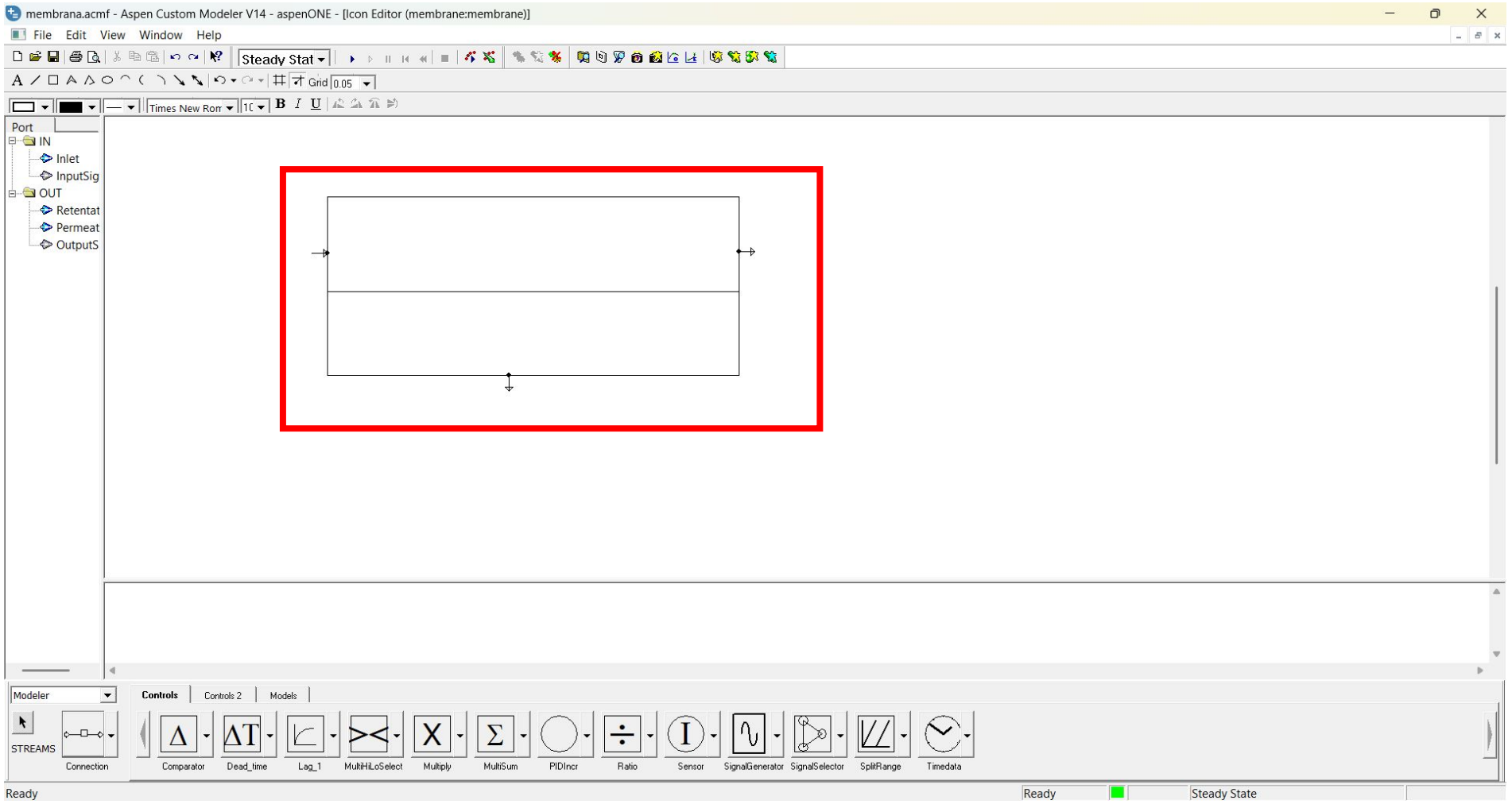
Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Conferir que não há erros de compilação



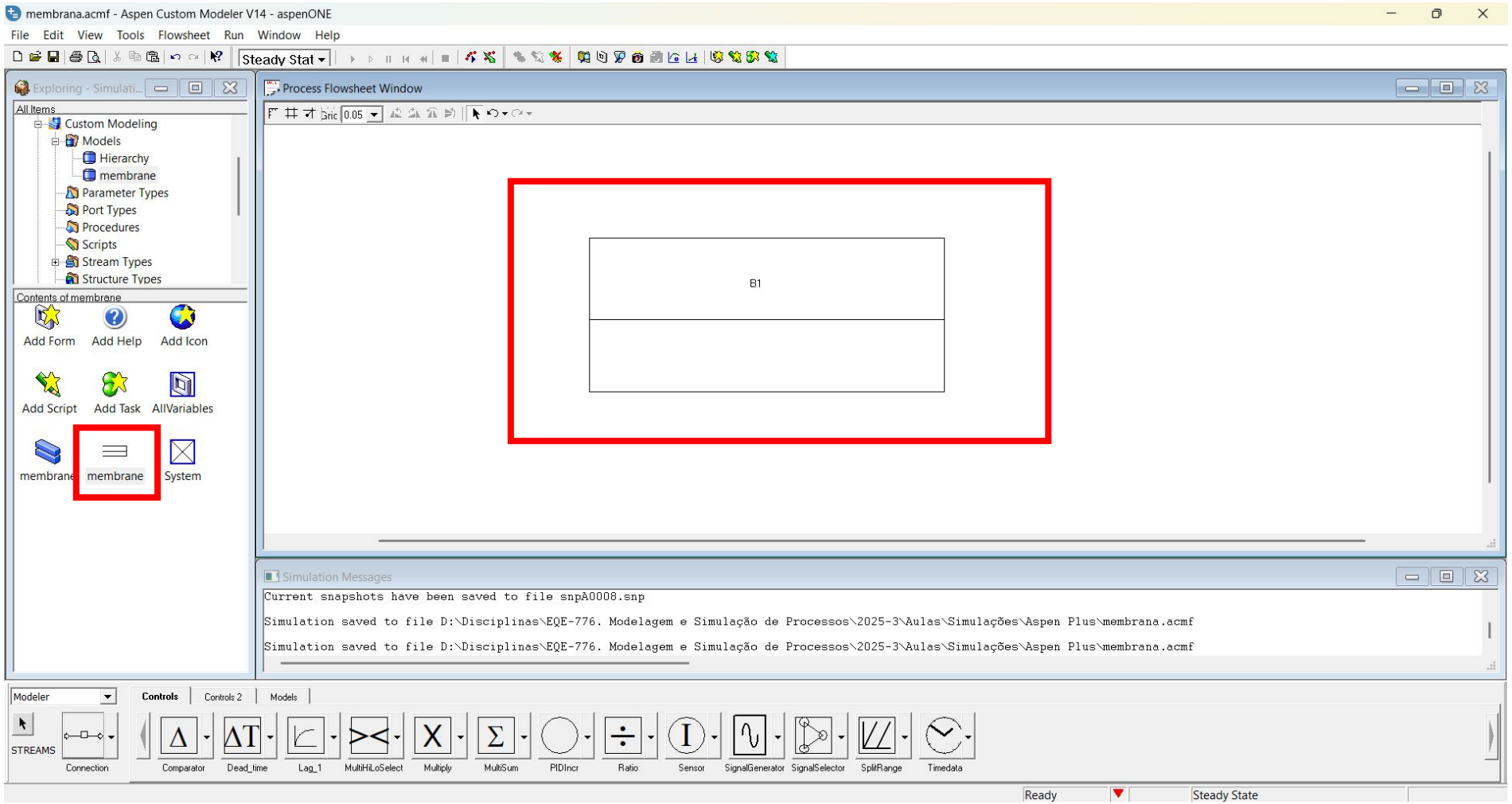
Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Criando um ícone



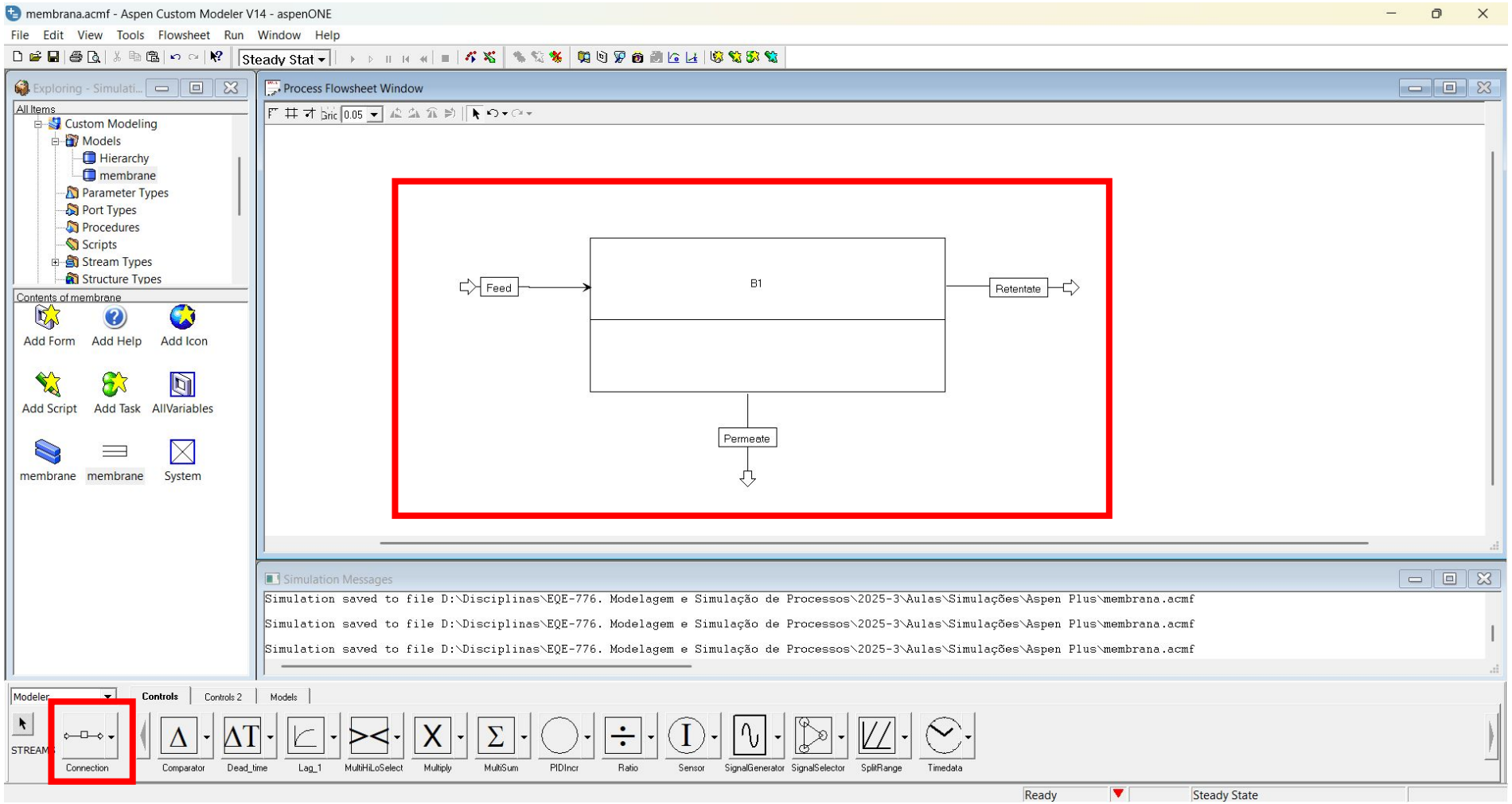
Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Arrastrando ícone para a janela de Flowsheet



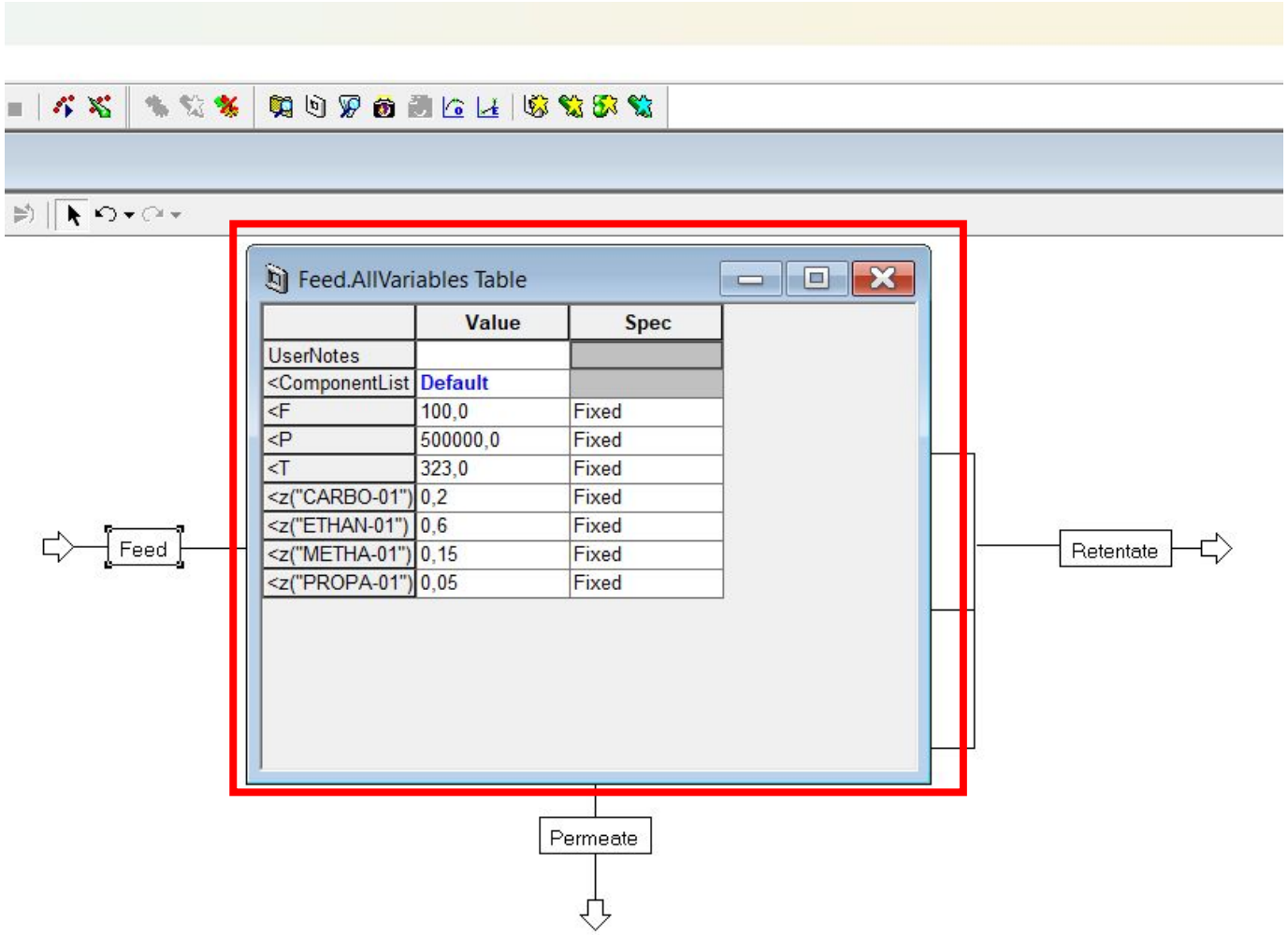
Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Conectando as correntes de entrada e saída



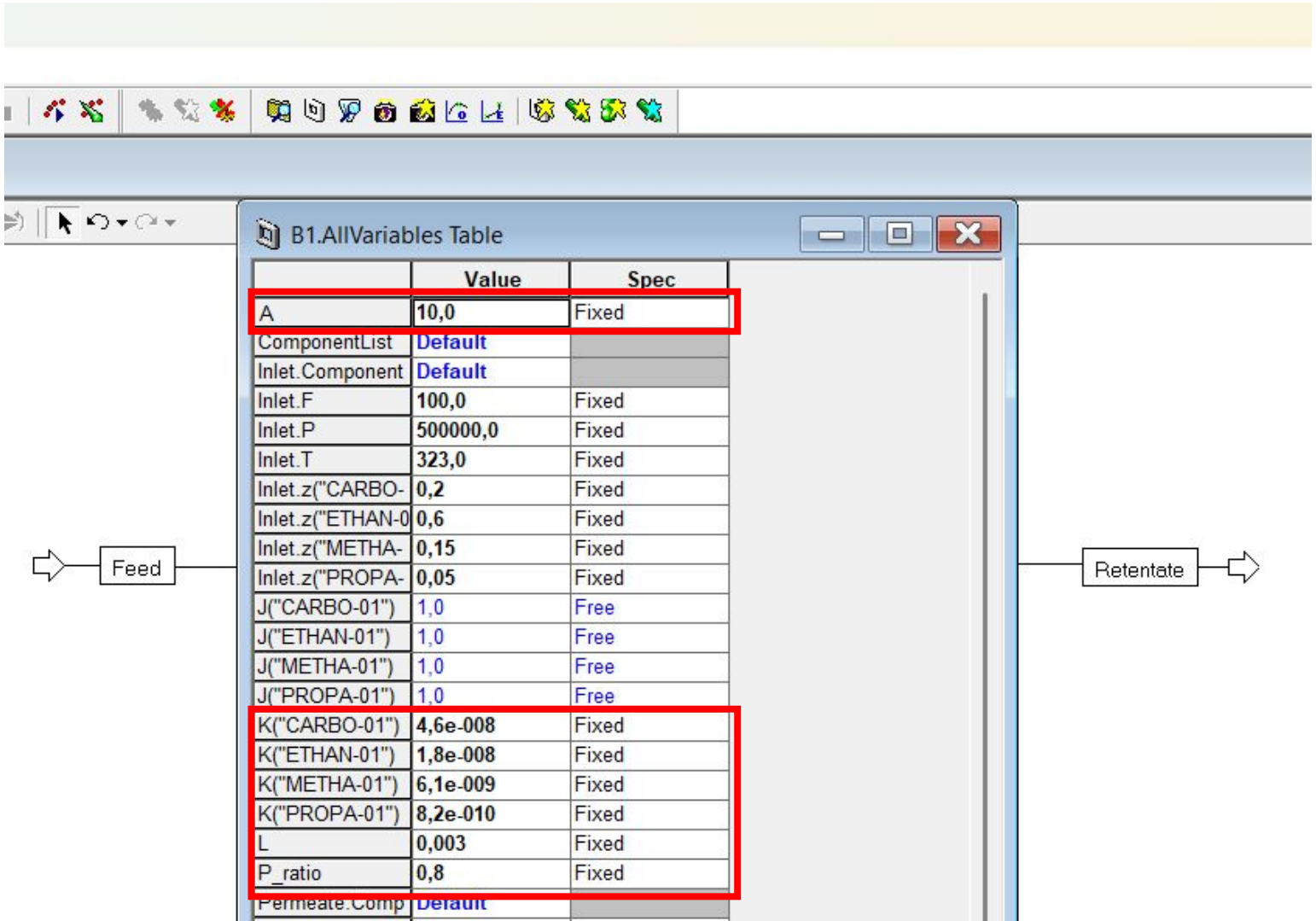
Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Especificando os valores da corrente de entrada



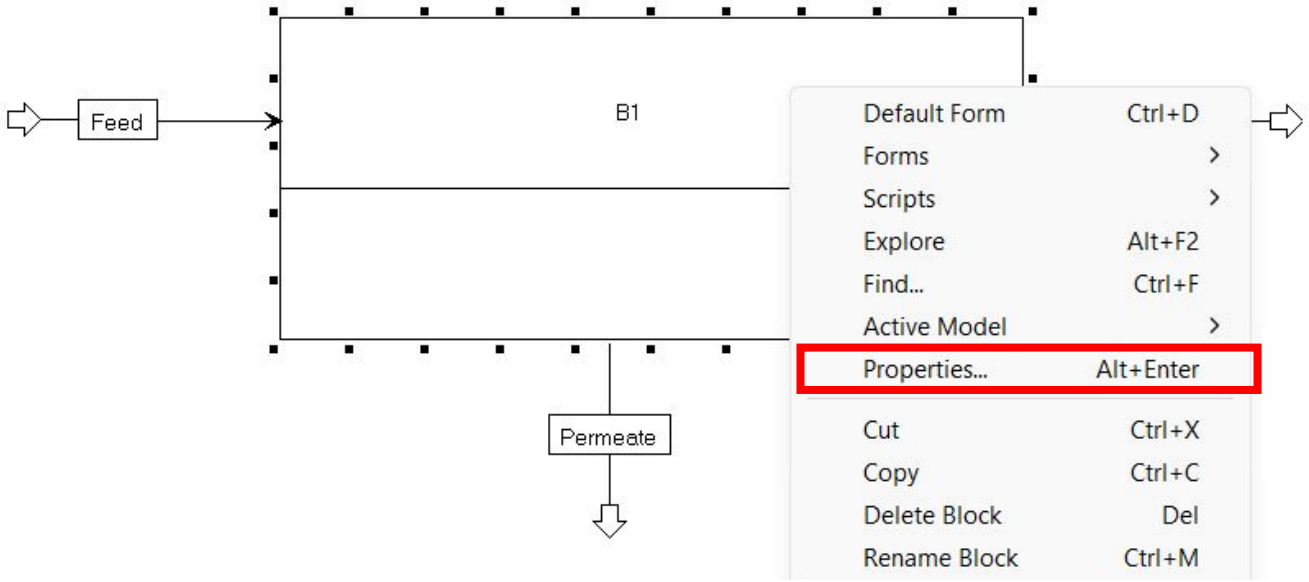
Trabalhando com Aspen Custom Modeler

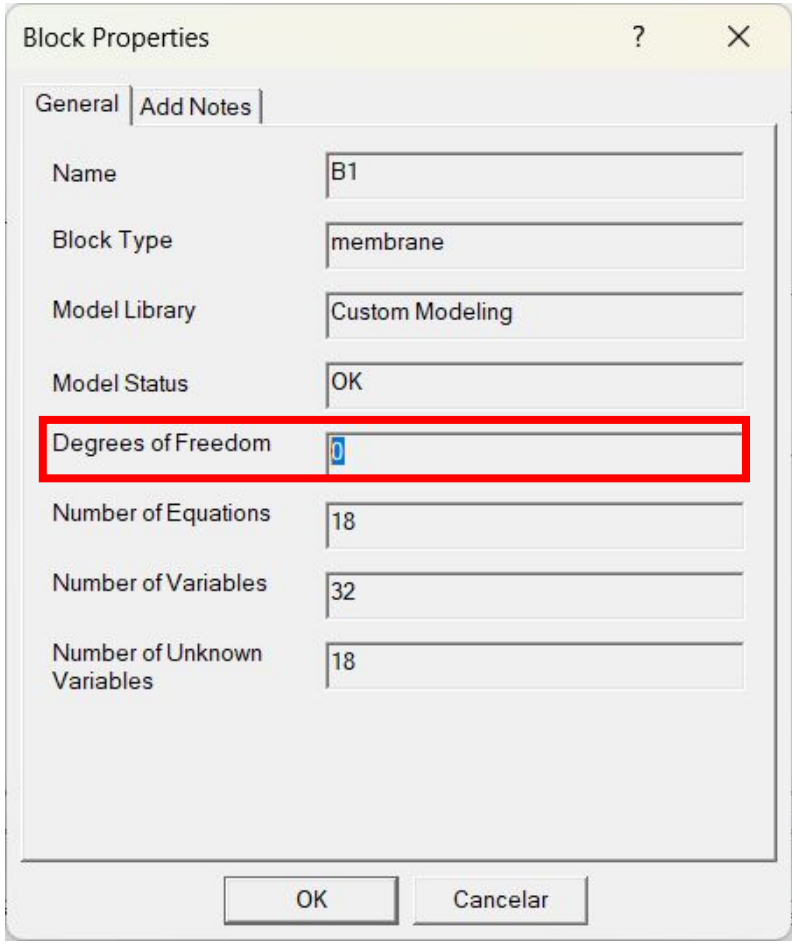
Especificando os parâmetros do modelo de separador por membrana



Trabalhando com Aspen Custom Modeler

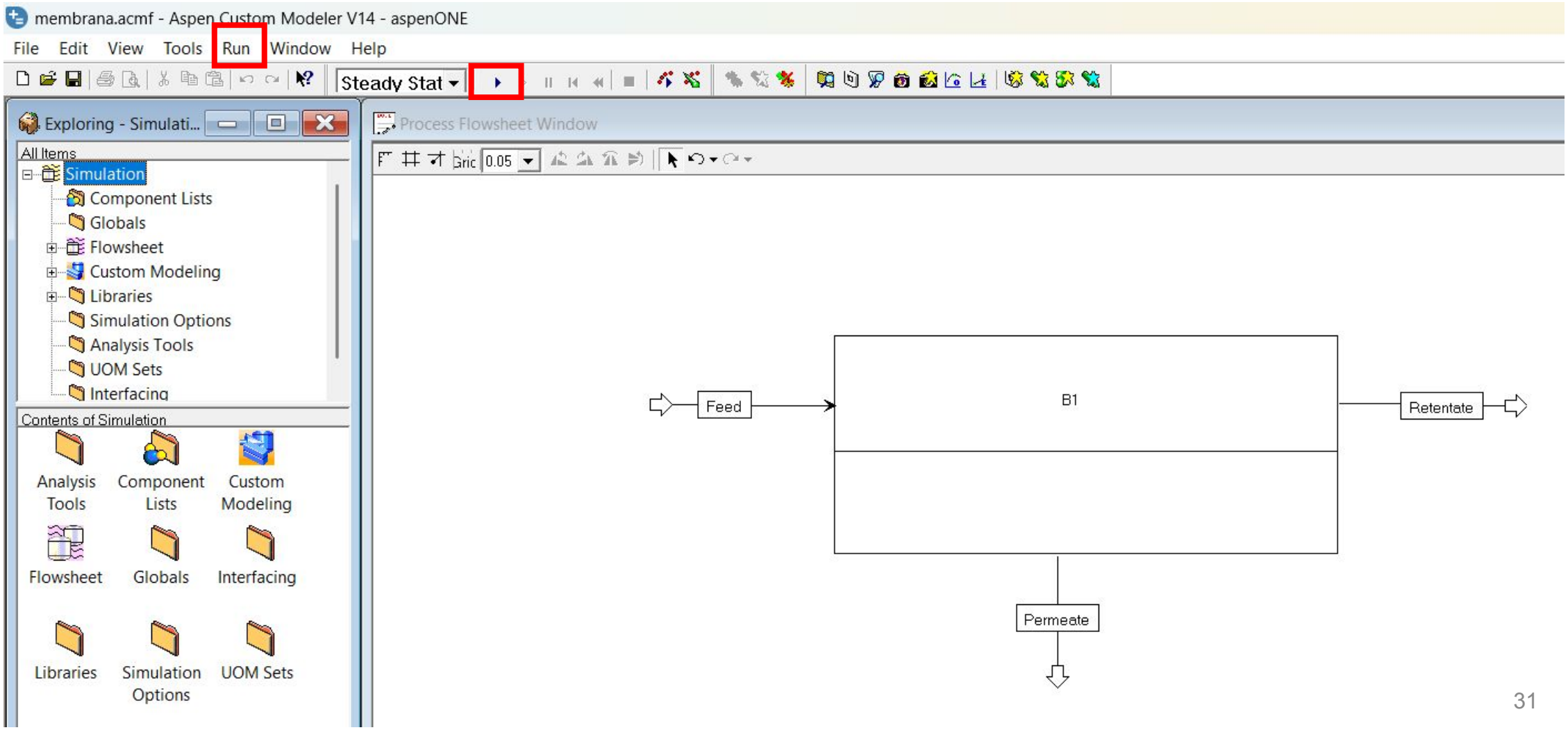
Conferindo se os graus de liberdade estão zerados





Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Executando a simulação



Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Conferir mensagem da simulação

```
Starting run at 13:42:28
Solving steady state ...
Decomposition:
   Total number of equations           = 18
   Total number of groups              = 10
   Number of explicit groups           = 8
   Number of nonlinear groups          = 2
   Largest group size                  = 5
Solving group 6, size 5, type Nonlinear
SPARSE: Iteration 0, Var. Norm= 0.000e+00, Eqn. Norm= 1.283e+01 (best  1.283e+01)
Check bounds: Step cut by  4.43525e-01 due to B1.Permeate.z("PROPA-01")
              below lower bound  0.00000e+00
SPARSE: Iteration 1, Var. Norm= 1.240e+00, Eqn. Norm= 4.613e+00 (best  4.613e+00)
SPARSE: Iteration 2, Var. Norm= 4.452e-01, Eqn. Norm= 2.161e-01 (best  2.161e-01)
SPARSE: Iteration 3, Var. Norm= 5.576e-03, Eqn. Norm= 8.882e-16 (best  8.882e-16)
SPARSE: Residual convergence after 3 iterations
Solving group 8, size 5, type Nonlinear
SPARSE: Iteration 0, Var. Norm= 0.000e+00, Eqn. Norm= 5.150e+01 (best  5.150e+01)
Check bounds: Step cut by  1.73330e-01 due to B1.Retentate.z("CARBO-01")
              below lower bound  0.00000e+00
SPARSE: Iteration 1, Var. Norm= 6.033e+00, Eqn. Norm= 3.561e+01 (best  3.561e+01)
SPARSE: Iteration 2, Var. Norm= 2.438e+00, Eqn. Norm= 2.871e+01 (best  2.871e+01)
SPARSE: Iteration 3, Var. Norm= 1.167e+00, Eqn. Norm= 1.974e+00 (best  1.974e+00)
SPARSE: Iteration 4, Var. Norm= 1.538e-02, Eqn. Norm= 8.882e-16 (best  8.882e-16)
SPARSE: Residual convergence after 4 iterations
Steady state solution complete
Run complete at 13:42:28
```

Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Resultados

Corrente “Permeate”

Permeate.AllVariables Table

	Value	Spec
UserNotes		
>ComponentList	Default	
>F	23,64	Free
>P	400000,0	Free
>T	323,0	Free
>z("CARBO-01")	0,648618	Free
>z("ETHAN-01")	0,253807	Free
>z("METHA-01")	0,0860124	Free
>z("PROPA-01")	0,0115623	Free

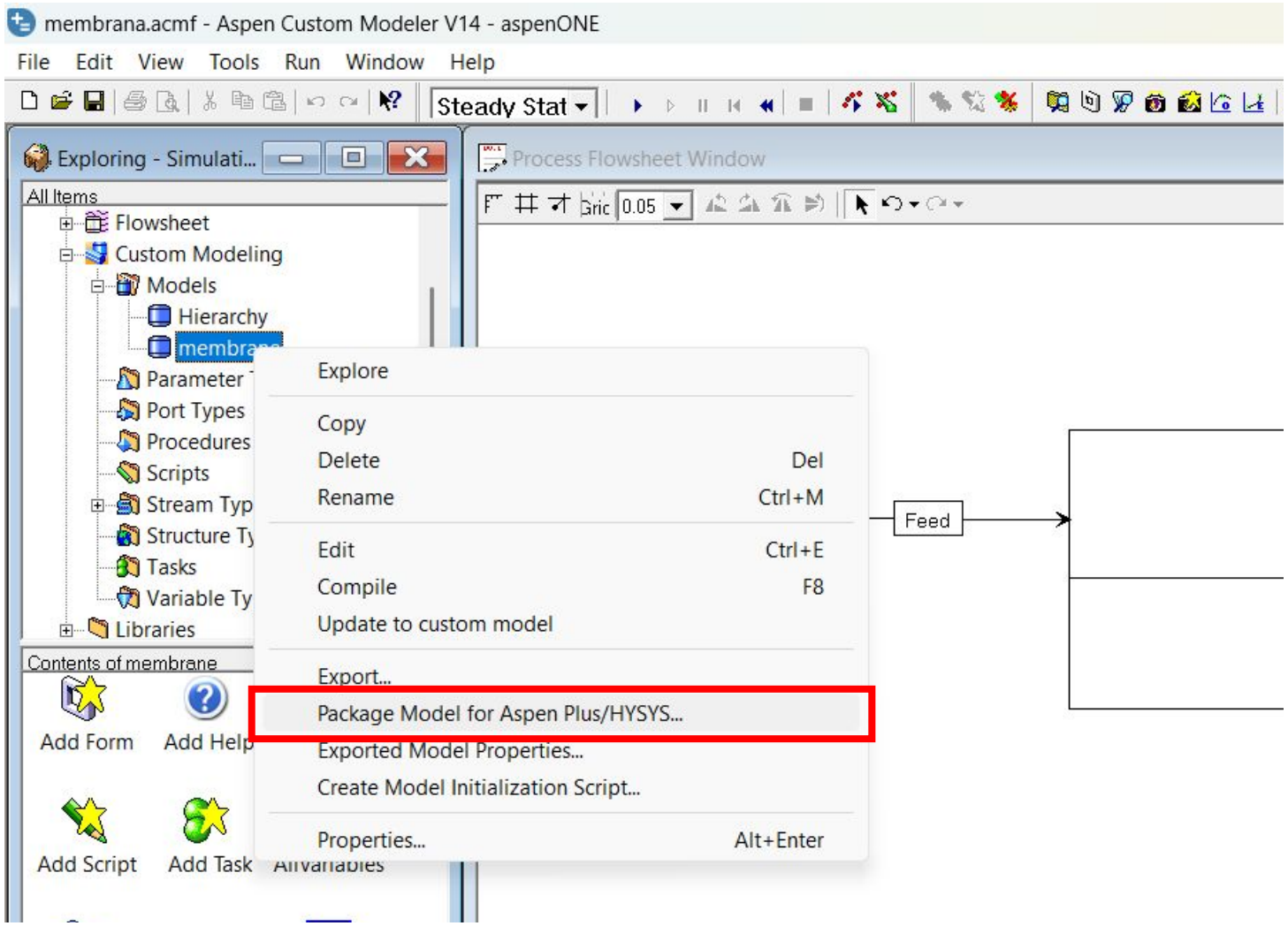
Corrente “Retentate”

Retentate.AllVariables Table

	Value	Spec
UserNotes		
>ComponentList	Default	
>F	76,36	Free
>P	500000,0	Free
>T	323,0	Free
>z("CARBO-01")	0,061114	Free
>z("ETHAN-01")	0,707177	Free
>z("METHA-01")	0,16981	Free
>z("PROPA-01")	0,0618998	Free

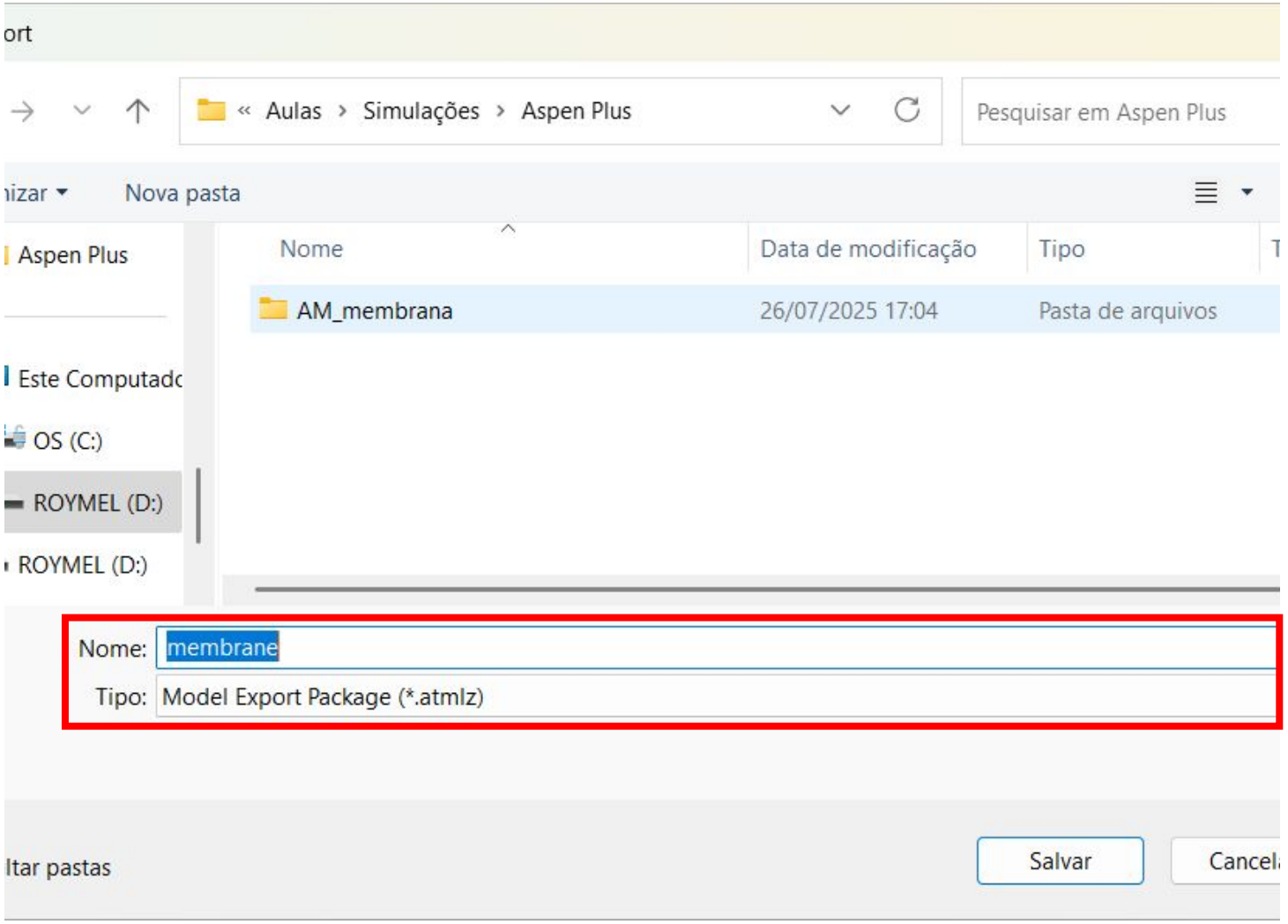
Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Exportando o modelo para ser usado no Aspen Plus



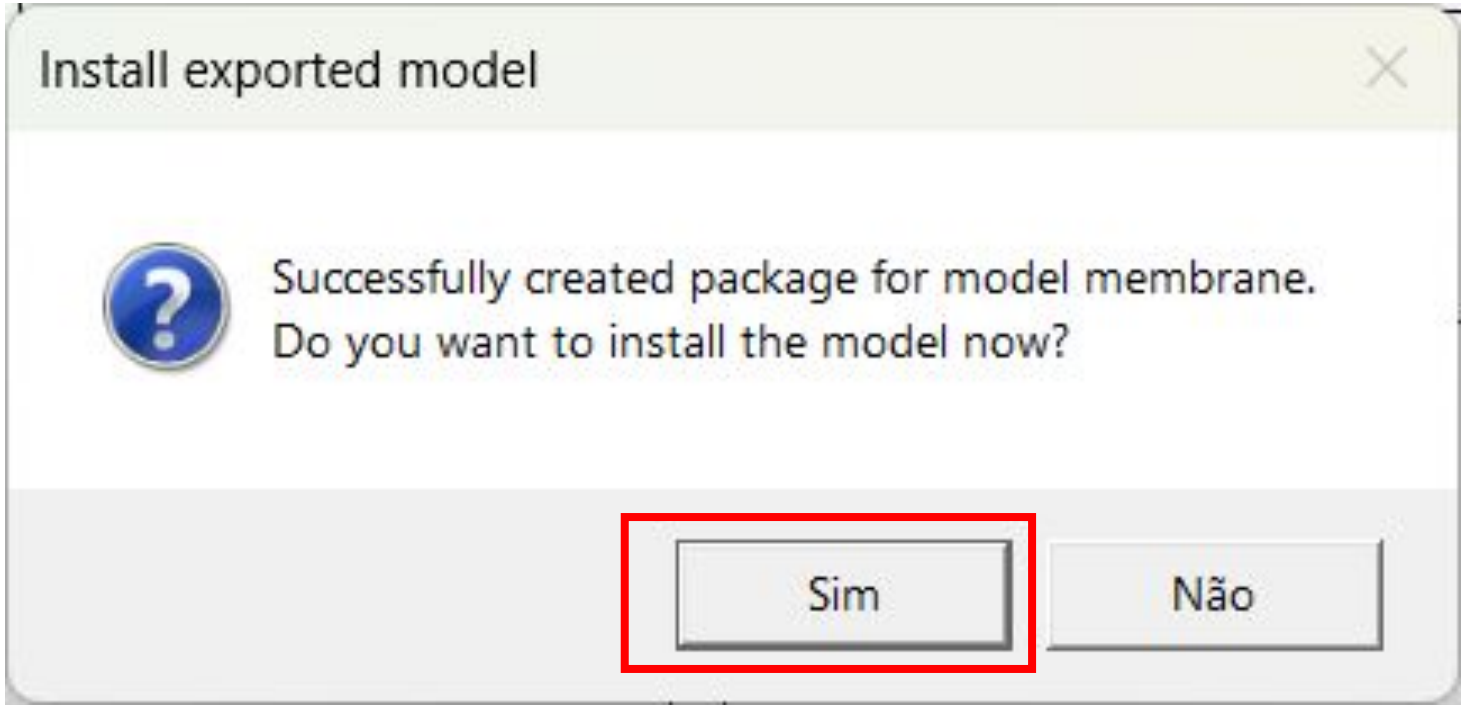
Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Salvar modelo no formato “*.atmlz”



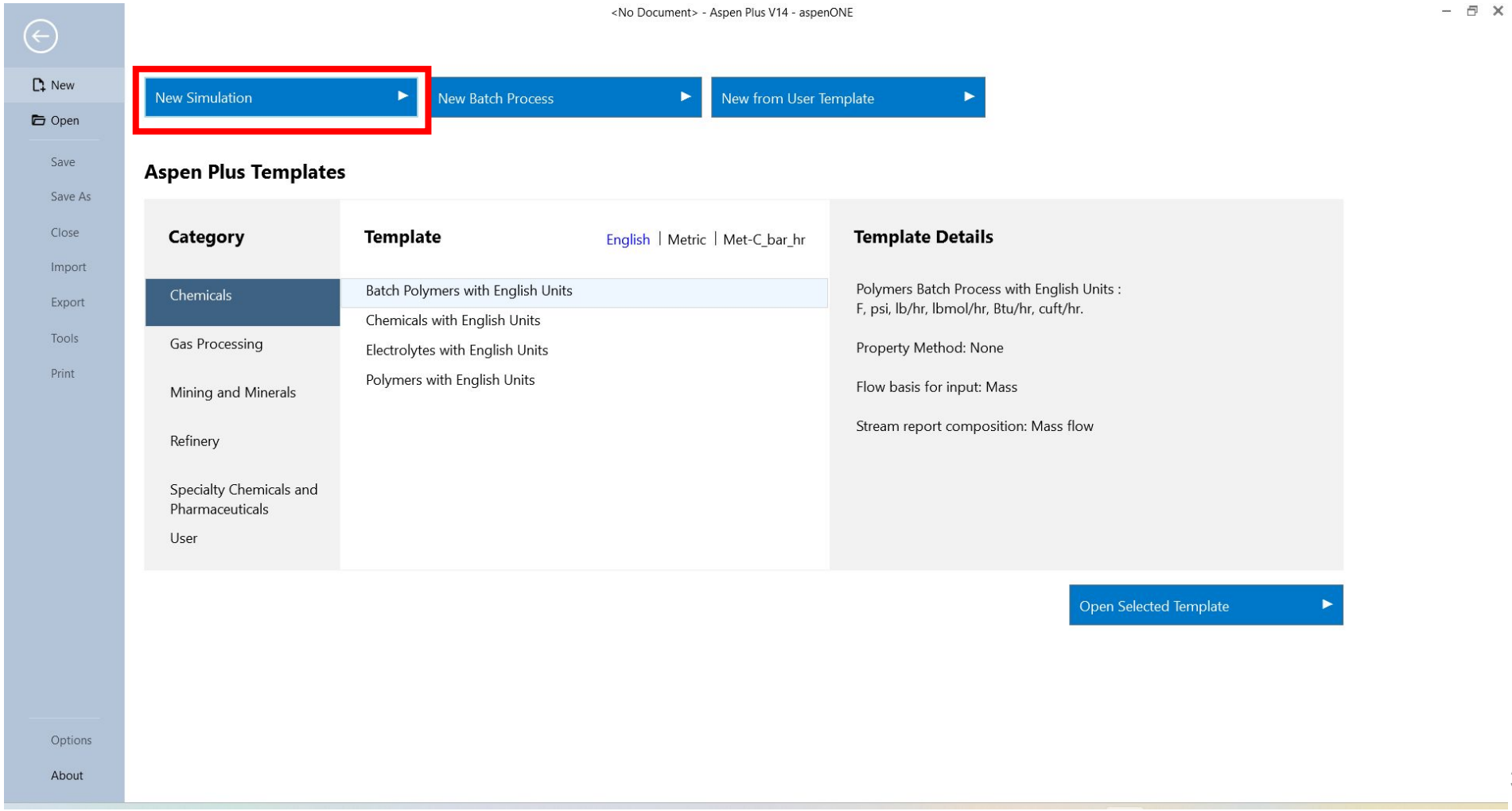
Trabalhando com Aspen Custom Modeler

Instalar o modelo exportado



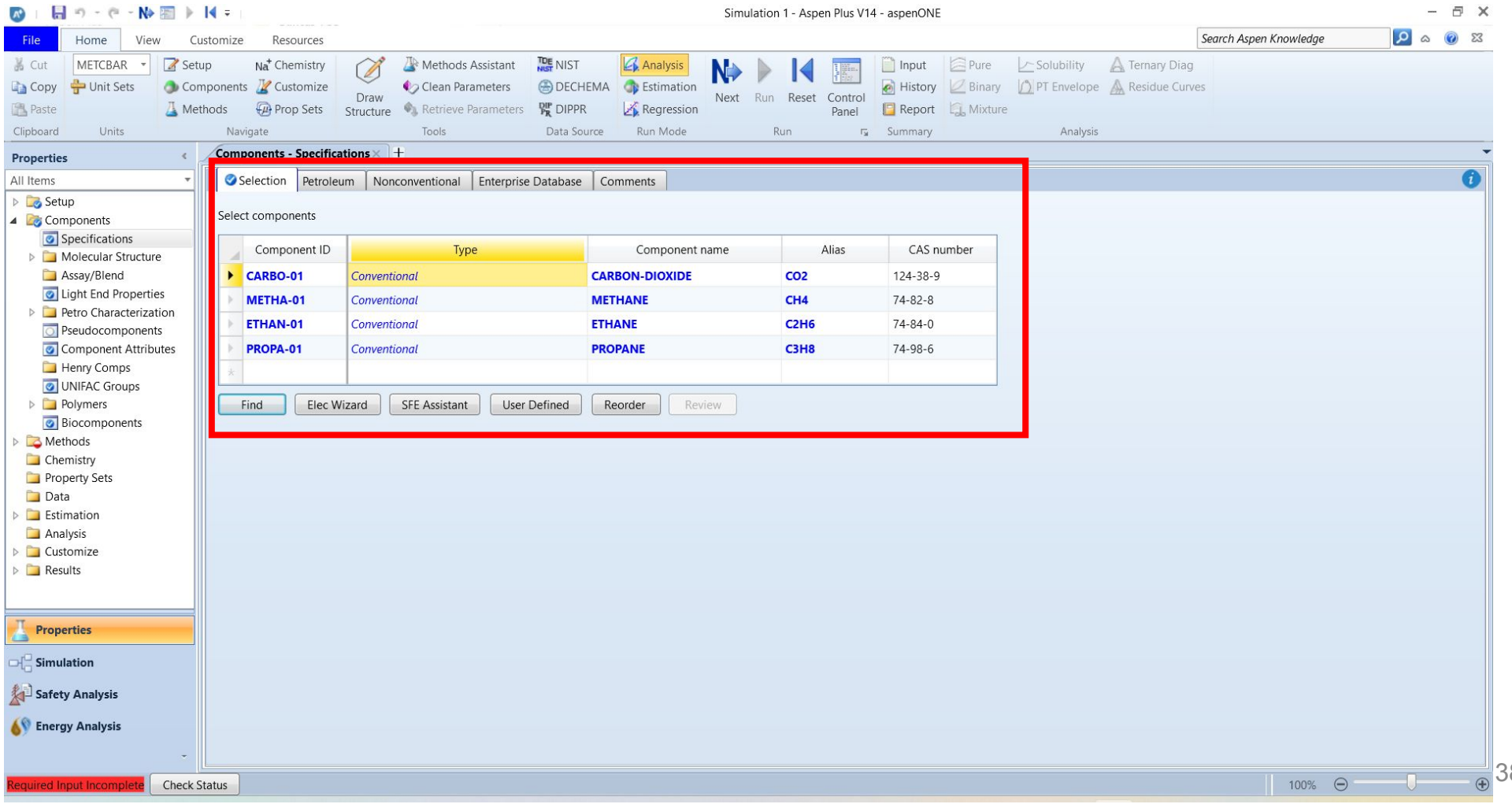
Utilizando em Aspen Plus o modelo criado

Criar uma nova simulação de Aspen Plus



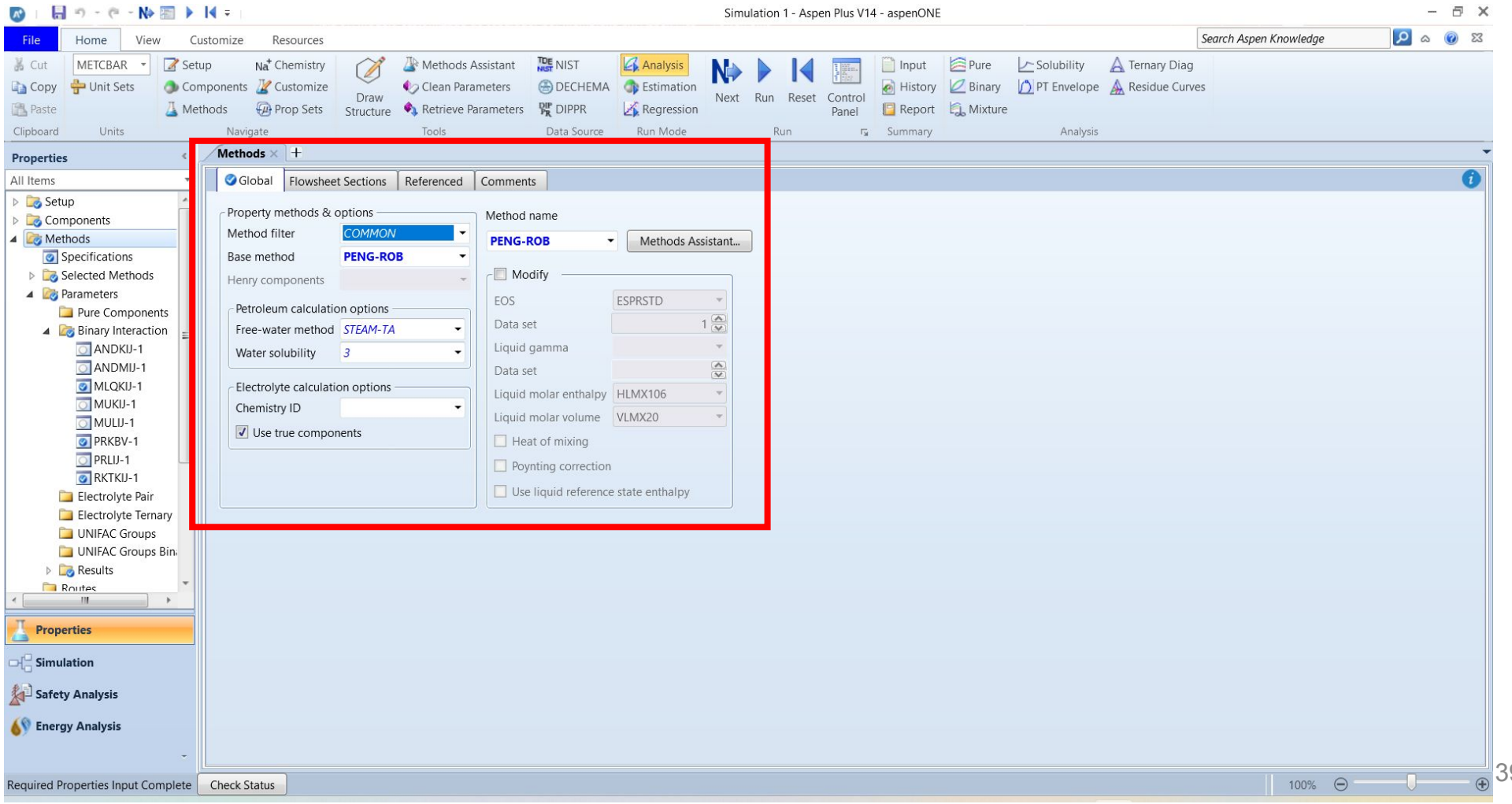
Utilizando em Aspen Plus o modelo criado

Escolher os compontes



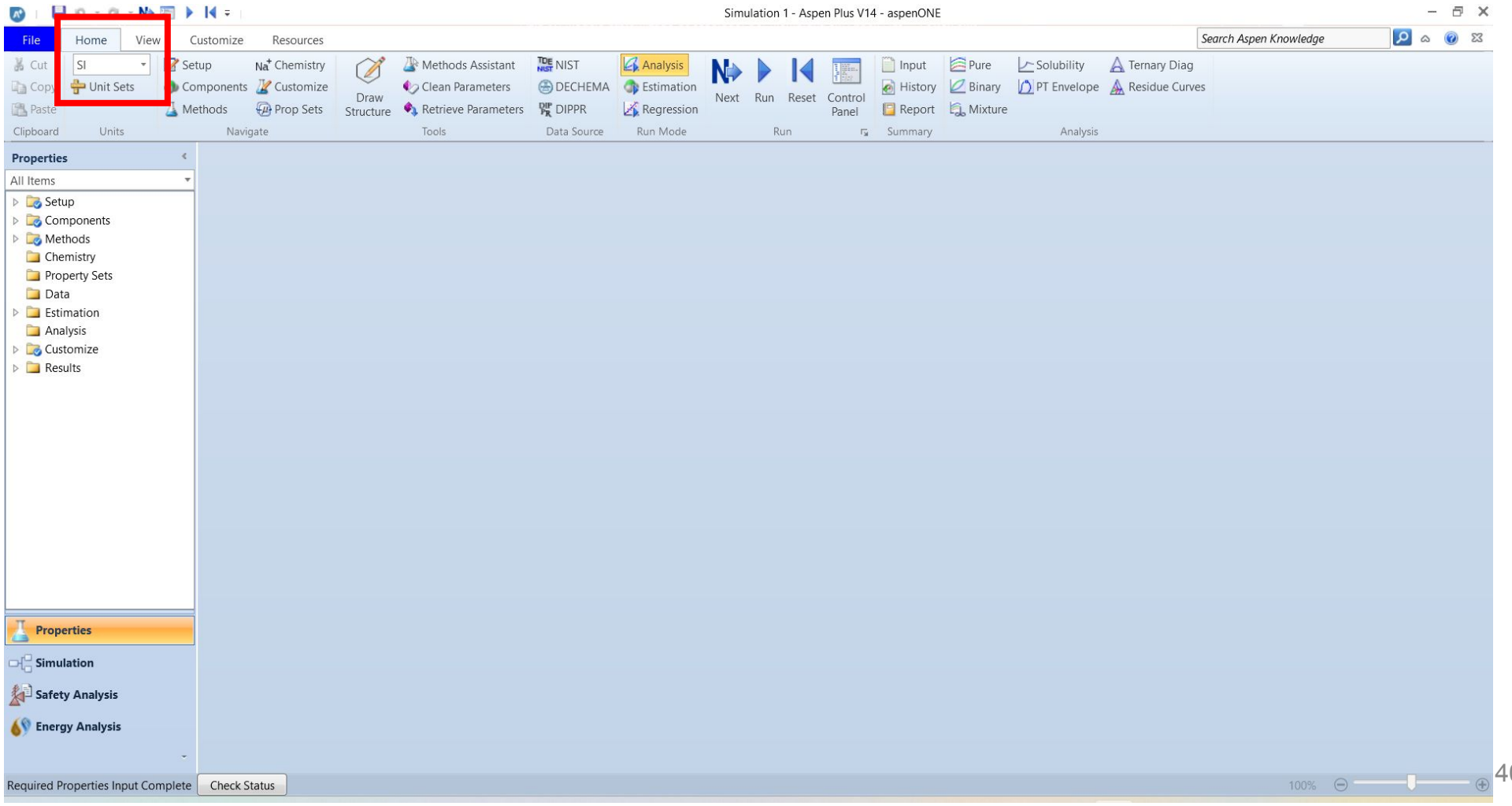
Utilizando em Aspen Plus o modelo criado

Escolher o modelo termodinâmico



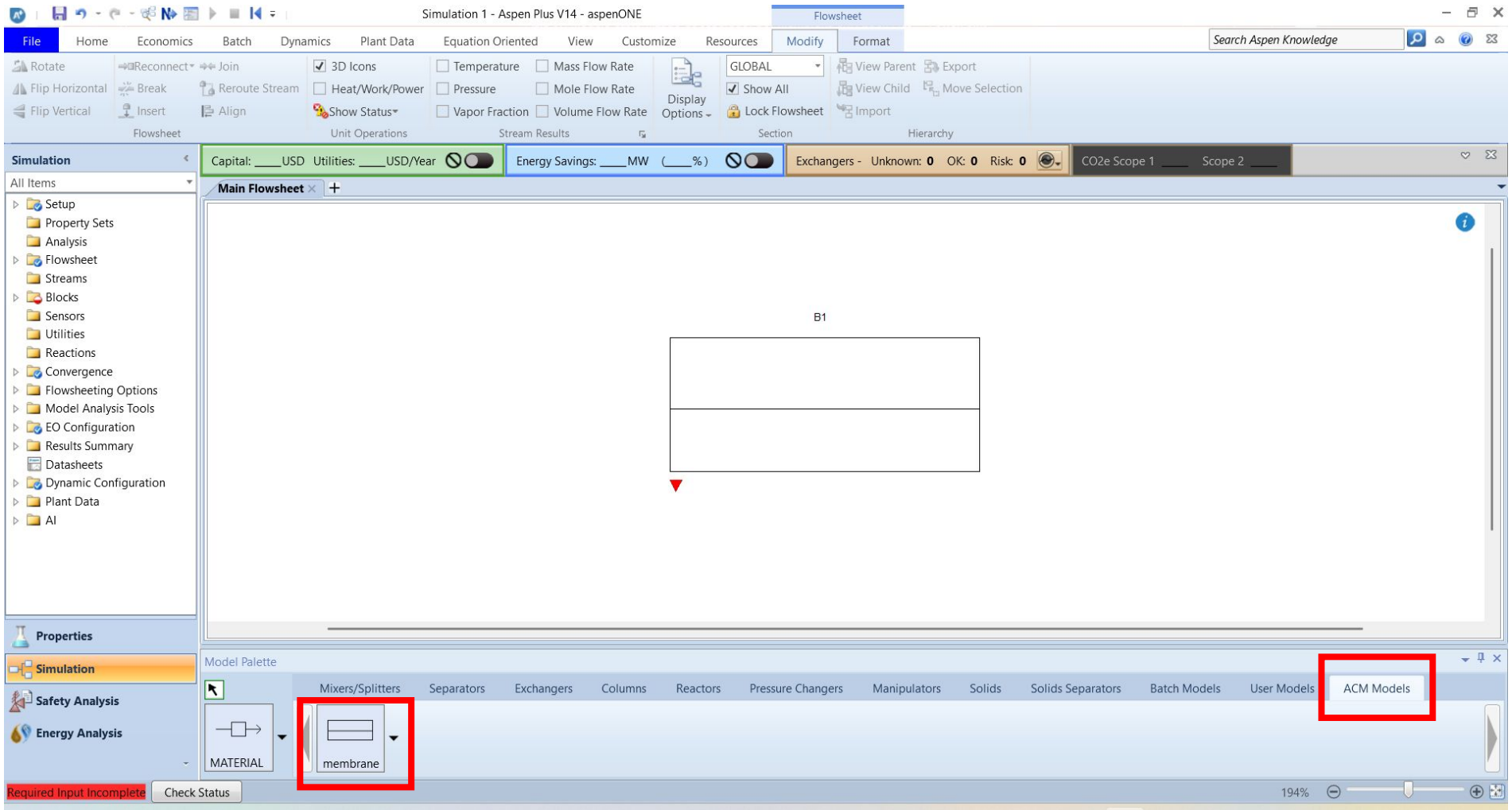
Utilizando em Aspen Plus o modelo criado

Escolher o sistema de unidades



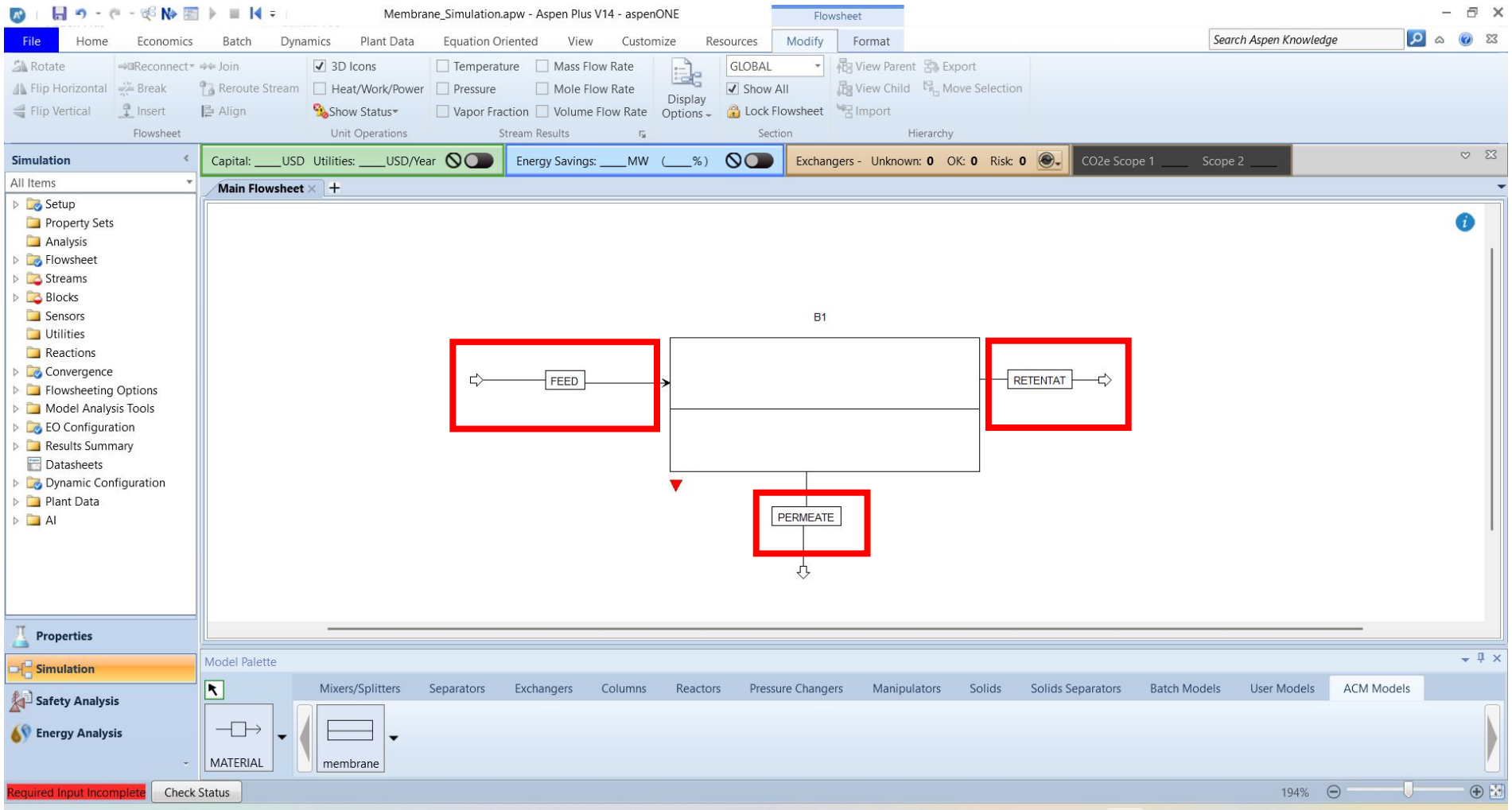
Utilizando em Aspen Plus o modelo criado

Inserir o modelo criado



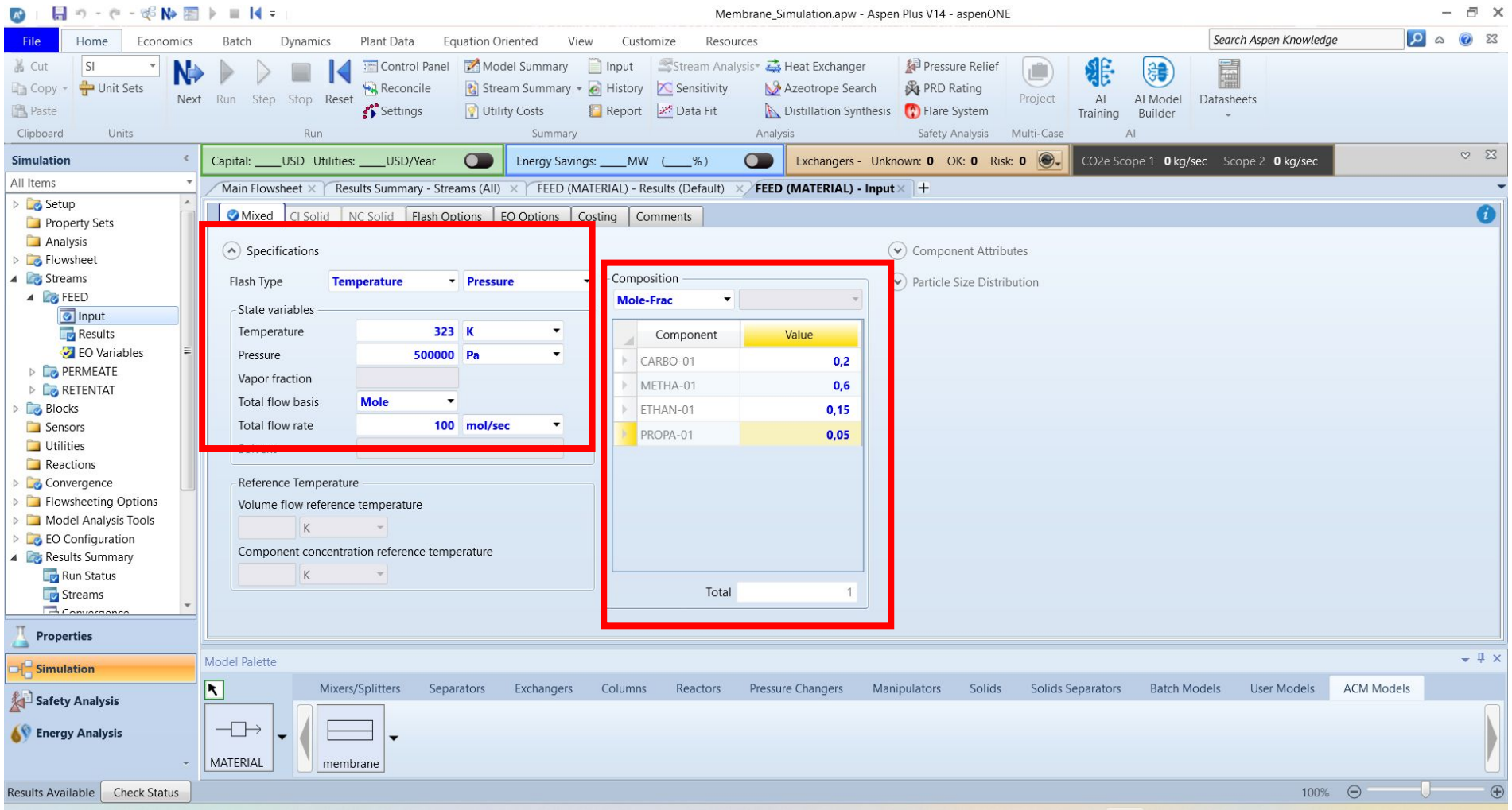
Utilizando em Aspen Plus o modelo criado

Conectar as correntes de entrada e saída



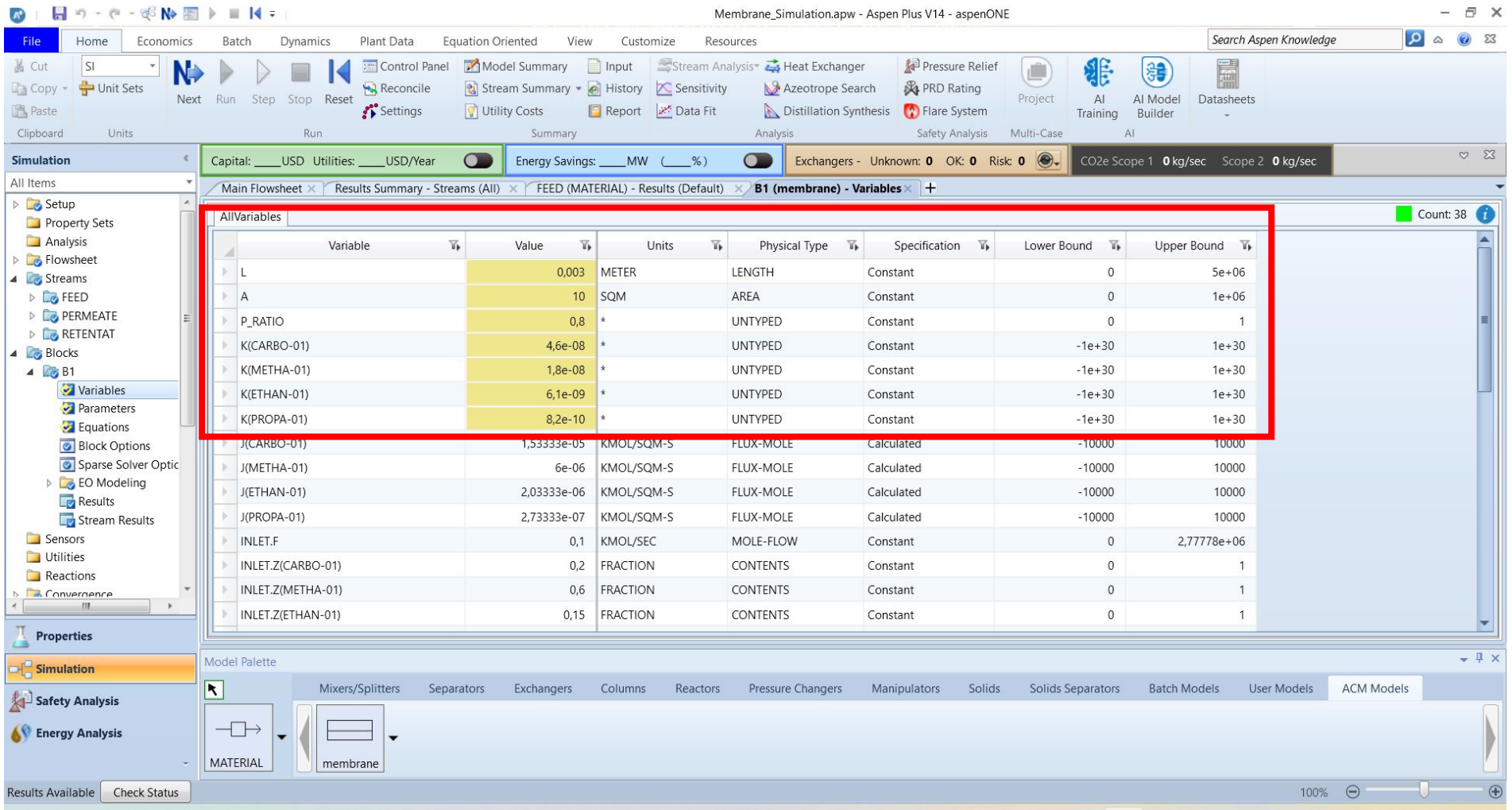
Utilizando em Aspen Plus o modelo criado

Especificar as condições da corrente de entrada



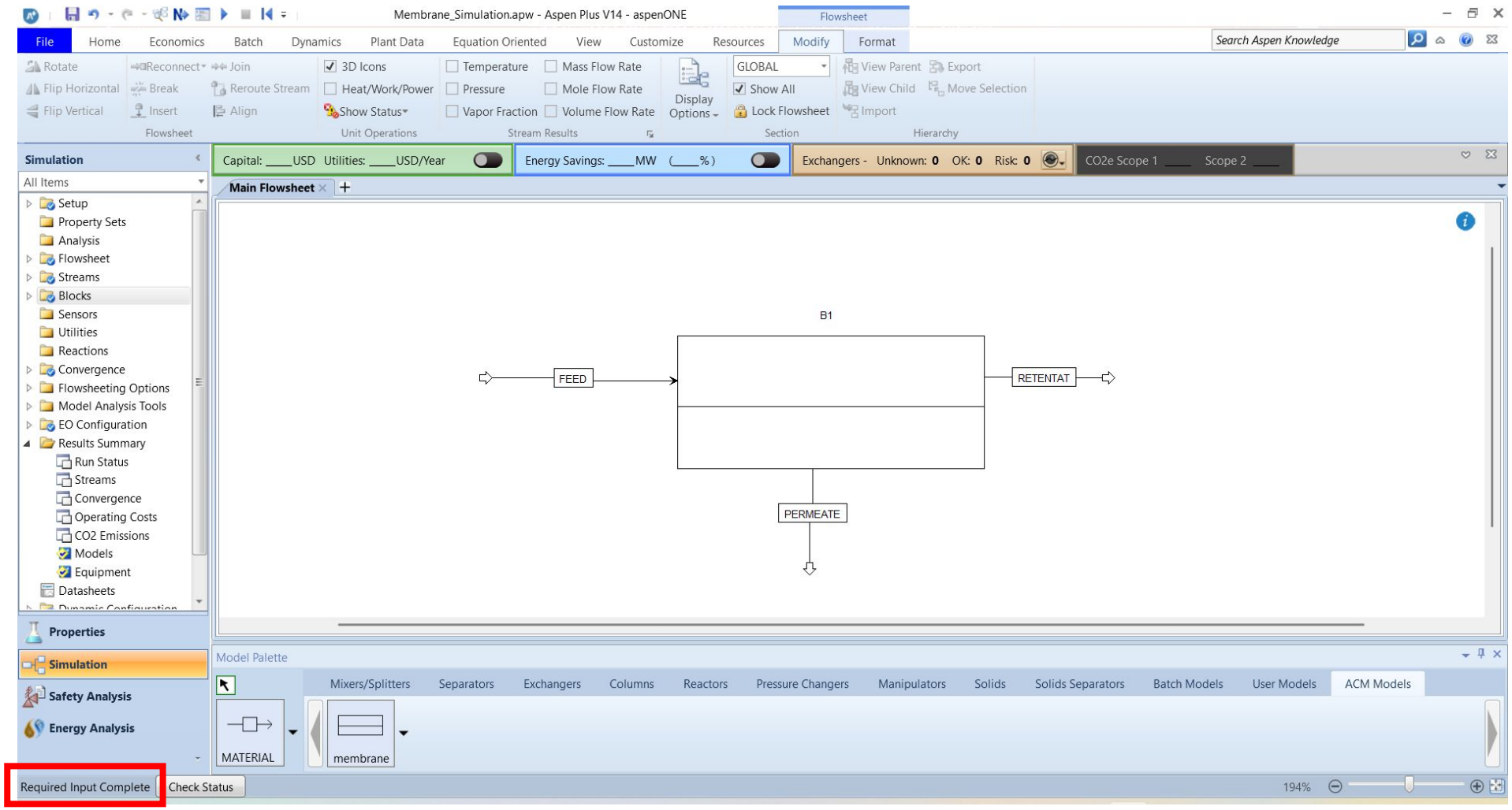
Utilizando em Aspen Plus o modelo criado

Especificar os parâmetros do modelo de membrana



Utilizando em Aspen Plus o modelo criado

Conferir que os graus de liberdade estão zerados e rodar a simulação



Dúvidas?

Recados importantes

- Próxima aula: Reator de Van der Vusse em EMSO
- Os slides desta aula estarão disponíveis no Classroom da disciplina.

“Ensinar não é transferir conhecimento, mas criar as possibilidades para a sua própria produção ou a sua construção.”

Paulo Freire