



2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS,
sustentabilidade e tecnologias ambientais

Minicurso: Introdução ao DWSIM

Prof. Dr. Félix Monteiro Pereira



2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

Introdução ao DWSIM

O DWSIM pode ser obtido na página do desenvolvedor:

<http://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=Downloads>

Tutorial:

<http://dwsim.inforside.com.br/wiki/index.php?title=Category:Tutorials>

Page Discussion Read View source View history Go Search

Main Page/pt

Languages: English • **Português** • Deutsch? • Español?

O DWSIM é um simulador "código aberto" de processos químicos, compatível com os padrões CAPE-OPEN, para Windows, Linux e Mac OS X. Desenvolvido para as plataformas .NET Framework e Mono e possuindo uma interface gráfica rica, o DWSIM permite que estudantes e profissionais de engenharia química entendam melhor o comportamento dos seus processos químicos através da utilização de modelos termodinâmicos rigorosos e de operações unitárias sem nenhum tipo de custo. Já que o DWSIM é aberto, eles podem ver como os cálculos são feitos através da inspeção do código fonte durante a execução do programa utilizando outras ferramentas disponibilizadas na internet.

O DWSIM possui uma interface gráfica de fácil utilização com muitos dos recursos disponíveis em simuladores comerciais:

- **Recursos CAPE-OPEN:** Soquete para Pacotes Termodinâmicos versão 1.0/1.1, Servidor de Propriedades Termodinâmicas versão 1.1, Soquete para Operações Unitárias e Objeto para Monitoramento de Fluxograma. Adicionalmente, o DWSIM expõe sua operação unitária de Script IronPython/IronRuby para todos os simuladores compatíveis com o padrão CAPE-OPEN.
- **Modelos termodinâmicos:** PC-SAFT, Peng-Robinson, Peng-Robinson com Translação de Volume e Água Imiscível, Soave-Redlich-Kwong, Lee-Kesler, Lee-Kesler-Plöcker, UNIFAC, UNIFAC Modificado (Dortmund), UNIQUAC, NRTL, COSMO-SAC, Chao-Seader, Grayson-Streed e Gás Ideal (Lei de Raoult);
- **Operações Unitárias:** Misturador, Divisor, Separador Gás/Líquido, Bomba, Compressor, Expansor, Aquecedor, Resfriador, Válvula, Segmento de Tubulação, Coluna Shortcut, Trocador de Calor, Reatores, Separador de Componentes, Placa de Orifício, Colunas Rigorosas de Absorção e Destilação e Operação Unitária Customizada (por scripts);
- **Utilitários:** Diagrama de Fases, Preditor de Hidratos, Propriedades dos Componentes Puros, Ponto Crítico Verdadeiro, Dimensionamento de Vasos e PSVs, Planilha de Cálculo e Propriedades de Escoamento a frio de Petróleos;
- **Ferramentas:** Regressão de Parâmetros Binários, Gerador de Hipotéticos, Caracterização de Petróleos e Gerenciador de Reações;
- **Análise Paramétrica:** Otimização Multivariável com Restrições e Análise de Sensibilidade;
- **Extras:** Sistema de Automação por Scripts, Interface com Excel.

Downloads

Clique em um dos botões abaixo para fazer o download direto do pacote apropriado para o seu sistema ou para navegar pelo código fonte. Mais informações sobre as notas de versão, requisitos de sistema e instruções de instalação específicas por sistema podem ser encontradas na [página de downloads](#).

Clique [aqui](#) para ver todos os arquivos disponíveis do DWSIM.

DWSIM Full Installer (Win/.NET 2.0)	Instalador completo para Windows Inclui os binários, documentação, exemplos e instalador do ChemSep 6.96.
DWSIM Mono Edition Linux / Mono 2.6.7+	Pacote ZIP para Linux e OS X Esta é uma distribuição ZIP do DWSIM que pode ser executada no Linux e OS X através do 'Mono 2.10 ou mais recente'. Você também pode descompactar esse arquivo zip em um Pen-Drive e executar o DWSIM no modo portátil em sistemas Windows com .NET 4.0 instalado ou sistemas Linux / OS X com Mono 2.10 ou superior instalado.
Browse Source Git Repository (.NET/Mono)	Repositório do Código Fonte no GitHub O Código fonte do DWSIM em Visual Basic .NET.

DWSIM no Windows 7 (.NET)

DWSIM no Ubuntu Linux (Mono)

DWSIM no Ubuntu Linux (Mono)



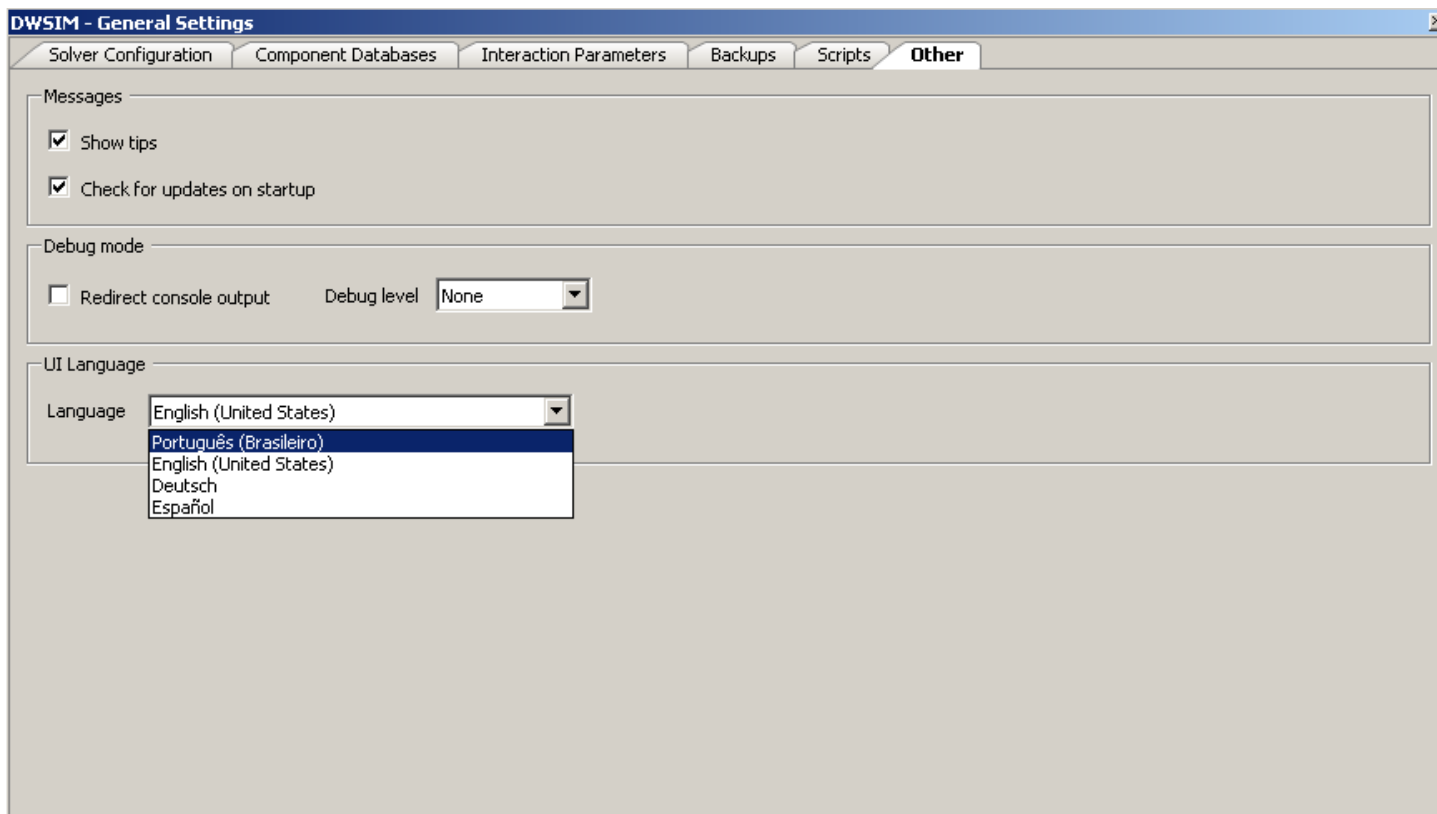
Introdução ao DWSIM

Alterando o idioma (opcional):

Abra o DWSIM, feche a janela de boas vindas (Welcome to DWSIM);

Clique em Settings (Configurações), escolha General Settings e Other;

Feche e reabra o DWSIM.





2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

Introdução ao DWSIM

Para iniciar a utilização do DWSIM vamos considerar a destilação flash 100 mol/s de uma mistura equimolar de etanol-água entrando em um aquecedor a 298K e 101325Pa, saindo do aquecedor e entrando no separador (flash) a 353 K e 101325 Pa.

Passos para implementação no simulador:

1)

DWSIM Open Source Chemical Process Simulator

Tarefas

- Nova Simulação**
Cria uma nova simulação em estado estacionário.
- Novo Criador de Componentes**
Abre uma nova janela do utilitário de criação de componentes.
- Novo Estudo de Regressão de Dados**
Abre uma nova janela do utilitário de regressão de dados experimentais.
- Abrir**
Abre uma simulação ou estudo já salva(o) em arquivo.
- Exemplos**
Abre a pasta contendo exemplos de simulações diversas.
- Documentação**
Exibe a documentação do DWSIM em PDF.

Arquivos Recentes

- C:\Users\Myllena\Documents\MSP\flasetanolagua.dwxml

Sempre exibir esta janela ao iniciar Fechar Janela

Suporte o Projeto

O DWSIM é um software de código aberto e sempre será. No entanto, existem custos de desenvolvimento (aquisição de livros e artigos técnicos) e de manutenção (taxas de servidor web, hardware) que são necessários para manter o projeto vivo e crecendo. Se o DWSIM lhe foi útil de alguma forma, por favor considere fazer uma doação, usando a sua conta do PayPal. Qualquer quantia será muito bem vinda e, caso deseje, seu nome será mostrado na lista de doadores em uma página do Wiki. Doar Agora



Introdução ao DWSIM

2) No assistente de configuração da simulação clique em próximo, digite o nome do primeiro componente (etanol) em procurar e adicione o componente, depois repita o procedimento para o segundo componente (água).

Componentes

- ✓ Introdução
- ▶ **Componentes**
- ▶ Pacote de Propriedades
- ▶ Algoritmo Flash
- ▶ Sistema de Unidades

Selecione os componentes que deseja adicionar à simulação. Utilize a caixa de texto para procurar e selecionar um componente na lista.

Clique em "Próximo" para continuar.

Procurar

Nome	No. CAS	Fórmula	Origem	CP	FP
Metanol (CH ₃ OH)	67-56-1	CH ₃ OH	DWSIM	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Etanol (C₂H₅OH)	64-17-5	C ₂ H ₅ OH	DWSIM	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>

↑
Adicione com um duplo clique no componente

Adicionar >

< Remover

Limpar Lista

Adicionados

Próximo >

Cancelar



Introdução ao DWSIM

3) Após verificar se todos os componentes foram adicionados clique em próximo.


Procurar

Nome	No. CAS	Fórmula	Origem	CP	FP
------	---------	---------	--------	----	----

Adicionados

- Etanol (C₂H₅OH)
- Água (H₂O)

Adicionar > < Remover
Limpar Lista

Após adicionar todos os componentes clique em próximo  Próximo > Cancelar



Introdução ao DWSIM

4) Adicione um pacote de propriedades adequado ao problema (por exemplo UNIQUAC) e clique em próximo.

Pacote de Propriedades

- ✓ Introdução
- ✓ Componentes
- ▶ **Pacote de Propriedades...**
- ▶ Algoritmo Flash
- ▶ Sistema de Unidades

Selecione e adicione os Pacotes de Propriedades que deseja utilizar na simulação. O primeiro da lista será selecionado por padrão por todos os objetos do fluxograma.

Você poderá configurar os Pacotes de Propriedades na janela de configuração da simulação após finalizar este assistente.

Clique em "Próximo" para continuar.

Pacotes Disponíveis

- PC-SAFT
- Peng-Robinson (PR)
- Peng-Robinson-Stryjek-Vera 2 (PRSV2-M)
- Peng-Robinson-Stryjek-Vera 2 (PRSV2-VL)
- Soave-Redlich-Kwong (SRK)
- Peng-Robinson / Lee-Kesler (PR/LK)
- UNIFAC
- UNIFAC-LL
- Modified UNIFAC (Dortmund)
- NRTL
- UNIQUAC**
- Chao-Seader
- Gravson

Pacotes Adicionados

Nome	Tipo
PP_1	UNIQUAC

Neste Pacote de Propriedades, o coeficiente de atividade da fase líquida é calculado através do modelo UNIQUAC. A fugacidade da fase vapor é calculada através da EDE Peng-Robinson. As entalpias de ambas as fases são calculadas pela equação Lee-Kesler. Outras propriedades termodinâmicas são calculadas pela EDE Peng-Robinson.

Clique aqui para configurar as propriedades dos fluidos.

Próximo >

Cancelar



Introdução ao DWSIM

5) Selecione um algoritmo adequado ao problema (por exemplo, loops aninhados equilíbrio líquido-vapor) e clique em |Próximo|.

Algoritmo Flash

- ✓ Introdução
- ✓ Componentes
- ✓ Pacote de Propriedades
- ▶ **Algoritmo Flash**
- ▶ Sistema de Unidades

Selecione um Algoritmo Flash adequado para a sua simulação. Se seu sistema pode apresentar instabilidades na fase líquida (sistemas imiscíveis), selecione um algoritmo capaz de prever o equilíbrio entre três fases (ELLV). Para calcular equilíbrio incluindo uma fase sólida, selecione o algoritmo correspondente. Para sistemas complexos, utilize o algoritmo de minimização de Gibbs mais adequado (duas ou três fases).

Clique em "Próximo" para continuar.

Algoritmo Flash

Loops Aninhados (Equilíbrio Líquido-Vapor)
Loops Aninhados (Equilíbrio Líquido-Líquido-Vapor)
Inside-Out (Equilíbrio Líquido-Vapor)
Inside-Out (Equilíbrio Líquido-Líquido-Vapor)
Minimização da Energia Livre de Gibbs (Equilíbrio Líquido-Vapor)
Minimização da Energia Livre de Gibbs (Equilíbrio Líquido-Líquido-Vapor)
Loops Aninhados (Equilíbrio Sólido-Líquido - Sistemas Eutéticos)
Loops Aninhados (Equilíbrio Sólido-Líquido - Solução Sólida)
Loops Aninhados (Equilíbrio Líquido-Líquido-Vapor, Fases Líquidas Completamente Imiscíveis)

[Clique aqui para saber mais detalhes e os limites de aplicabilidade de cada algoritmo.](#)

Próximo >

Cancelar



Introdução ao DWSIM

6) Selecione o sistema de unidades (por exemplo, SI) e clique em |finalizar|.

Sistema de Unidades

- ✓ Introdução
- ✓ Componentes
- ✓ Pacote de Propriedades
- ✓ Algoritmo Flash
- ▶ **Sistema de Unidades**

Selecione o Sistema de Unidades desejado para a sua simulação. Você poderá alterar as unidades de sistemas existentes, incluir novos sistemas e realizar outras operações na janela de configuração da simulação a qualquer momento após finalizar este assistente.

Clique em "Finalizar" para sair e iniciar a simulação.

Sistema de Unidades

Sistema SI

Propriedade	Unidade	Propriedade	Unidade
Temperatura	K	Pressão	Pa
Vazão mássica	kg/s	Vazão molar	mol/s
Vazão volumétrica	m ³ /s	Entalpia Específica	kJ/kg
Entropia Específica	kJ/[kg.K]	Massa molar	kg/kmol
Massa específica	kg/m ³	Tensão superficial	N/m
Capacidade Calorífica	kJ/[kg.K]	Condutividade térmica	W/[m.K]
Viscosidade Cinemática	m ² /s	Viscosidade dinâmica	Pa.s
Delta-T	K	Delta-P	Pa
Comprimento/Head	m	Fluxo de Energia	kW
Tempo	s	Volume	m ³
Volume Molar	m ³ /kmol	Área	m ²
Diâmetro/Espessura	mm	Força	N

Finalizar

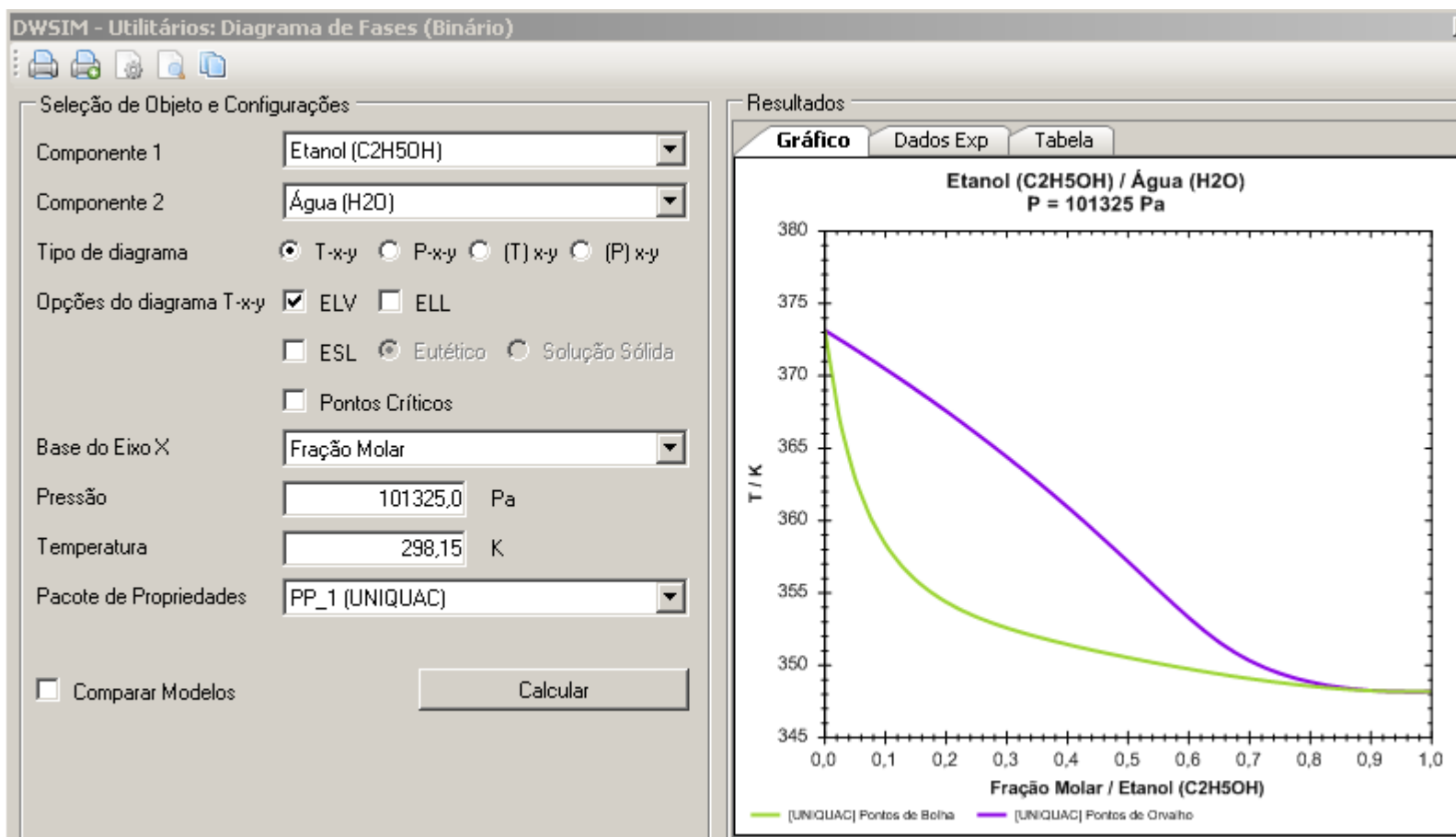
Cancelar



2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

Introdução ao DWSIM

7) Para verificar o pacote termodinâmico faça um gráfico de equilíbrio líquido-vapor clicando em |Utilitários| e em seguida em |Calcular|.





Introdução ao DWSIM

8) Feche o gráfico, arraste um aquecedor para o fluxograma e configure como na figura. (Obs. É importante que cada processo convirja individualmente antes de adicionar um novo processo)

The screenshot displays the DWSIM software interface. The main window is titled 'Fluxograma' and shows a process flow diagram on a grid. A central process unit, labeled 'HEAT-000' and represented by a blue diamond with an 'A' inside, is connected to three streams: 'Alimentação' (blue arrow), 'E0' (red arrow), and 'F0' (red arrow). The 'Alimentação' stream enters from the left, 'E0' enters from the bottom, and 'F0' exits to the right. The 'Status: Ocioso' indicator is visible at the bottom left of the diagram area.

On the left side, the 'Objeto selecionado' panel shows the following information:

- Objeto:** HEAT-000
- Tipo:** Aquecedor
- Status:** Não-Calculado

The 'Propriedades' panel is expanded to show the following sections:

- 1. Conexões**
 - Corrente de entrada: Alimentação
 - Corrente de saída: F0
 - Corrente de Energia: E0
- 2. Parâmetros de cálculo**
 - Queda de pressão: 0,0
 - Modo de Cálculo: OutletTemperature
 - Temperatura de S: 353,0
 - Eficiência (0-100): 100
- 3. Resultados**
 - Delta-T (K): 0,0
- 4. Miscelânea**
 - Ativo: True
 - Mensagem de erro:
- Outros**
 - Anotações:
 - ID: AQ-edcc2e33-8bfb-4325-b
 - Último cálculo bem: 0001-01-01T00:00:00,000
- Pacote de Propriedades**
 - Pacote de Propriedades: PP 1

On the right side, the 'Paleta de Objetos' (Object Palette) is visible, showing various process units and streams. The 'Aquecedor' (Heater) icon is highlighted in blue.



2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

Introdução ao DWSIM

9) Com um duplo clique em alimentação selecione a composição da mistura clique em confirmar alterações e em seguida em fechar.

Alimentação - Editar Composição

Identificação
Nome/Tag:

Base
 Fração Molar Fração Mássica Vazão Molar Vazão Mássica Fração Volumétrica no Estado Líquido
 Molaridade, ou Molalidade - Solvente:

Composição

	Composição no Equilíbrio	Composição Inicial (Frações Molares)
▶ Etanol (C2H5OH)	0,5000	0,5000
Água (H2O)	0,5000	0,5000

Tarefas

Gerenciar

Total: 1,0000
Status: OK



Introdução ao DWSIM

10) Com um clique em alimentação no fluxograma, altere a temperatura para 353 K e o fluxo molar para 100 mol/s.

The screenshot displays the DWSIM software interface. On the left, the 'Propriedades' (Properties) panel is open, showing the following data:

1. Condições	
[1] Especificação	Temperature_and_Pressure
[2] Temperatura (K)	298,15
[3] Pressão (Pa)	101325
[4] Vazão mássica (kg/s)	3,2042
[5] Vazão molar (mol/s)	100
[6] Vazão volumétrica (m ³ /s)	0,00371
[7] Fração Molar (Fase Vapor)	0
[8] Entalpia Específica (kJ/kg)	-1356,67401
[9] Entropia Específica (kJ/[kg.K])	-4,55031
[A] Editor de composições	(Coleção)
[B] Base da composição	Molar_Fractions

On the right, a process flow diagram is visible on a grid background. It shows a feed stream labeled 'Alimentação' entering a process unit 'A'. A heat stream 'HEAT000' is shown entering the unit from the bottom, and an output stream 'FO' exits to the right. A stream 'EO' is also shown entering the unit from the bottom.



Introdução ao DWSIM

11) Arraste um Vaso Separador G-L para o fluxograma e selecione F0 para a Corrente de Entrada (1), digite V0 para a saída de vapor e L0 para a saída de líquido.

Objeto selecionado

Correntes de Matéria Planilha Fluxograma

Objeto SEP-000
Tipo Vaso Separador G-L
Status Calculado

Propriedades Aparência

1. Conexões

Corrente de entrada (1)	F0
Corrente de entrada (2)	
Corrente de entrada (3)	
Corrente de entrada (4)	
Corrente de entrada (5)	
Corrente de entrada (6)	
Saída de vapor	V0
Saída de líquido	L0
Saída de líquido (2)	
Corrente de Energia	

2. Parâmetros

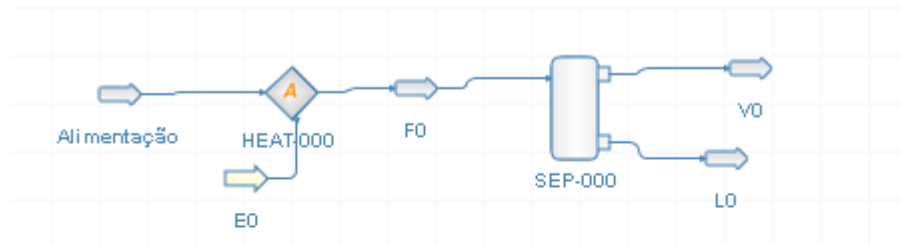
Pressão a jusante	Minimum
Especificação do cálculo Flash	PH
Modo de Operação do Vaso	TwoPhase
Sobrepôr Temperatura de separação	False
Sobrepôr Pressão de separação	False



2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

Introdução ao DWSIM

12) Verifique os resultados obtidos para as correntes de vapor e de líquido, selecionando cada objeto ou clicando na aba Correntes de Matéria ou ainda criando uma Tabela Mestre com os principais resultados.



Objeto	VO	LO	FO	
Temperatura	353,00003	353,00003	353,0	K
Pressão	101325,0	101325,0	101325,0	Pa
Vazão Molar	67,7561	32,2439	100,0	mol/s
Fração Molar (Mistura) - Etanol (C ₂ H ₅ OH)	0,60797	0,27306	0,5	
Fração Molar (Mistura) - Água (H ₂ O)	0,39203	0,72694	0,5	



Introdução ao DWSIM

Operação de Ajuste

Considere a destilação flash 1000 mol/s de uma mistura equimolar de etanol água entrando no separador a 101325 Pa. Deseja-se calcular o valor de temperatura para o qual a fração molar de etanol na corrente de vapor seja igual a 0,60. Para casos desse tipo deve-se utilizar a função ajuste, a fim de evitar o tedioso processo de tentativa e erro utilizado para testar o valor da temperatura que faça com que a fase vapor a 101325 Pa saia com uma fração molar de etanol de 0,60.

A fim de simplificar, vamos partir da última simulação realizada.

1) Abra a última simulação realizada e clique em recalcular tudo.



Introdução ao DWSIM

Operação de Ajuste

2) Arraste a função de ajuste para o fluxograma e configure conforme apresentado na aba Propriedades da figura.

Objeto selecionado

Objeto ADJ-000
Tipo Ajuste
Status -

Propriedades Aparência

1. Configurações

Variável Controlada (...)
Variável Controlada: Clique para selecionar...
Tipo do Objeto Corrente de Matéria
Objeto V0
Propriedade Fração Molar (Mistura) - Etanol (C2H5OH)

Variável Manipulada (...)
Variável Manipulada: Clique para selecionar...
Tipo do Objeto Aquecedor
Objeto HEAT-000
Propriedade Temperatura da Saída
Valor mínimo (o) 0
Valor máximo (o) 0
Usa Objeto como R False

2. Parâmetros
Valor de Ajuste (ou) 0,6
Número Máximo de 10
Tolerância 0,0001
Delta (Step size) 0,0001
Ajuste Simultâneo False
Painel de Controle

Correntes de Matéria Planilha Fluxograma

Tabela Mestre - Corrente de Matéria

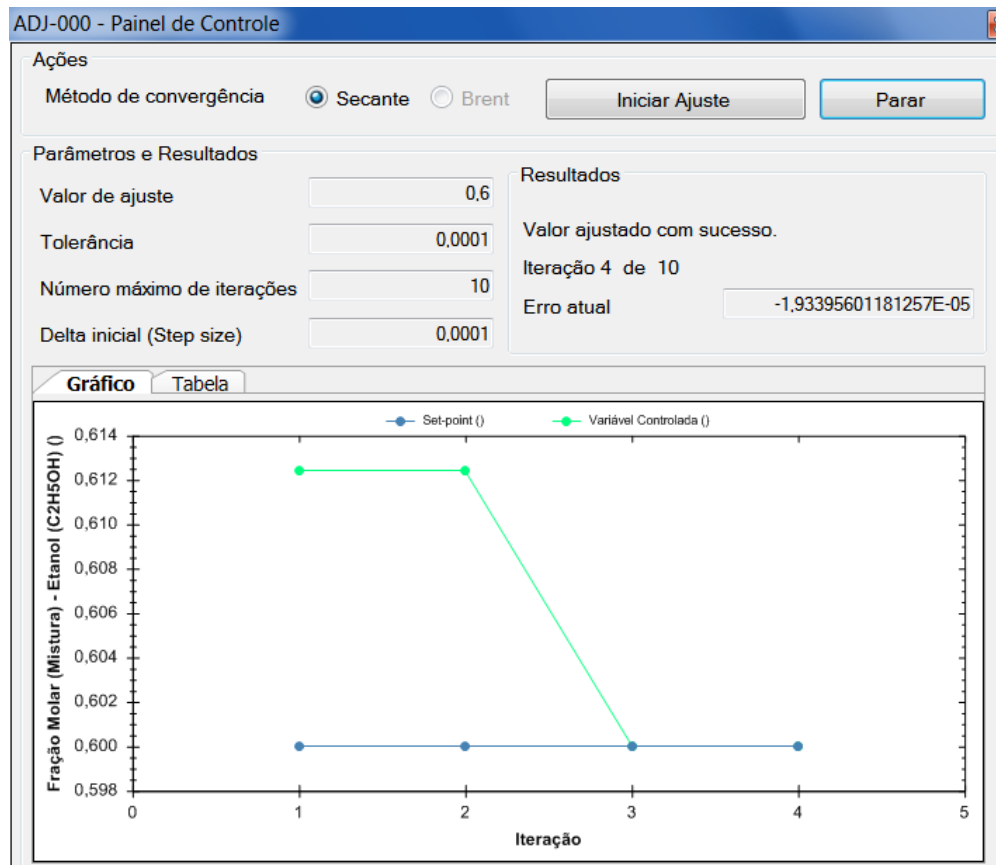
Objeto	V0	L0	F0	
Temperatura	353,00002	353,00002	353,0	K
Pressão	101325,0	101325,0	101325,0	Pa
Vazão Molar	67,75605	32,2439	100,0	mol/s
Fração Molar (Mistura) - Etanol (C2H5OH)	0,60797	0,27306	0,5	
Fração Molar (Mistura) - Água (H2O)	0,39203	0,72694	0,5	



Introdução ao DWSIM

Operação de Ajuste

3) Abra o painel de controle do ajuste e clique em |Iniciar Ajuste|. Caso o ajuste não convirja, clique em |iniciar Ajuste| novamente...

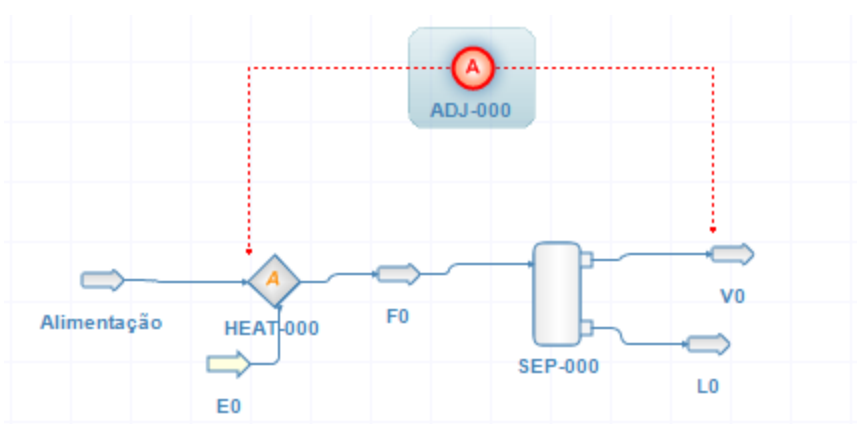




Introdução ao DWSIM

Operação de Ajuste

4) Verifique o resultado.



Objeto	V0	L0	F0	
Temperatura	353,29094	353,29094	353,29092	K
Pressão	101325,0	101325,0	101325,0	Pa
Vazão Molar	70,98329	29,01666	100,0	mol/s
Fração Molar (Mistura) - Etanol (C2H5OH)	0,59998	0,25535	0,5	
Fração Molar (Mistura) - Água (H2O)	0,40002	0,74465	0,5	



Introdução ao DWSIM

Operação de Reciclo

Considere que, na destilação flash de 1000 mol/s de uma mistura equimolar de etanol água entrando no separador a 101325 Pa. Deseja-se aumentar o fluxo de vapor com fração molar de etanol de 0,60 (do exemplo anterior) utilizando um segundo tambor de flash na saída de líquido, a fim de recuperar o etanol contido nessa fase. Existem várias formas de se realizar esse procedimento, sendo uma delas apresentada a seguir.

1) Abra a última simulação realizada e peça para recalcular tudo.



Introdução ao DWSIM

Operação de Reciclo

2) Adicione um aquecedor e configure como na figura (Obs. Regule a temperatura de saída de forma que, no vapor, a fração molar de etanol igual a 0,5 –diagrama temperatura versus composição binário).

Objeto selecionado

Objeto HEAT-001
Tipo Aquecedor
Status Calculado

Propriedades Aparência

1. Conexões

Corrente de entrada	L0
Corrente de saída	L0aq
Corrente de Energia	E1

2. Parâmetros de cálculo

Queda de pressão (Pa)	0,0
Modo de Cálculo	OutletTemperature
Temperatura de Saída (K)	357,0
Eficiência (0-100)	100

3. Resultados

Calor Fornecido (kW)	362,41453
Delta-T (K)	3,70906

4. Miscelânea

Ativo	True
-------	------

Outros

Anotações	
ID	AQ-dc96afc3-cad0-4d91-bfb5-9ac346dc1bca
Último cálculo bem-sucedido em	2015-06-08T23:38:27.2506043-03:00

Pacote de Propriedades

Pacote de Propriedades	PP_1
------------------------	------

Correntes de Matéria Planilha Fluxograma

Tabela Mestre - Corrente de Matéria

Objeto	VO	L0	FO	
Temperatura	353,29094	353,29094	353,29092	K
Pressão	101325,0	101325,0	101325,0	Pa
Vazão Molar	70,98329	29,01666	100,0	mol/s
Fração Molar (Mistura) - Etanol (C2H5OH)	0,59998	0,25535	0,5	
Fração Molar (Mistura) - Água (H2O)	0,40002	0,74465	0,5	



Introdução ao DWSIM

Operação de Reciclo

3) Adicione um segundo separador e configure como na figura.

Objeto selecionado

Objeto SEP-001
Tipo Vaso Separador G-L
Status Calculado

Propriedades Aparência

1. Conexões

Corrente de entrada (1)	L0aq
Corrente de entrada (2)	
Corrente de entrada (3)	
Corrente de entrada (4)	
Corrente de entrada (5)	
Corrente de entrada (6)	
Saída de vapor	V1
Saída de líquido	L1
Saída de líquido (2)	
Corrente de Energia	

Correntes de Matéria Planilha Fluxograma



Introdução ao DWSIM

Operação de Reciclo

4) Adicione outro ajuste ajustando como variável controlada a saída de vapor (V1) uma fração molar de etanol igual a 0,5 e como variável manipulada a temperatura de saída do trocador de calor.

Objeto selecionado

Objeto: ADJ-001
Tipo: Ajuste
Status: Não-Calculado

Propriedades Aparência

1. Configurações

- Variável Controlada: (...)
- Variável Manipulada: (...)
- Usa Objeto como Referência?: False

2. Parâmetros

- Valor de Ajuste (ou Offset) (): 0,5
- Número Máximo de Iterações: 10
- Tolerância: 0,0001
- Delta (Step size): 0,0001
- Ajuste Simultâneo: False
- Painel de Controle: ...

Outros

Anotações

Correntes de Matéria Planilha Fluxograma

Tabela Mestre - Corrente de Matéria

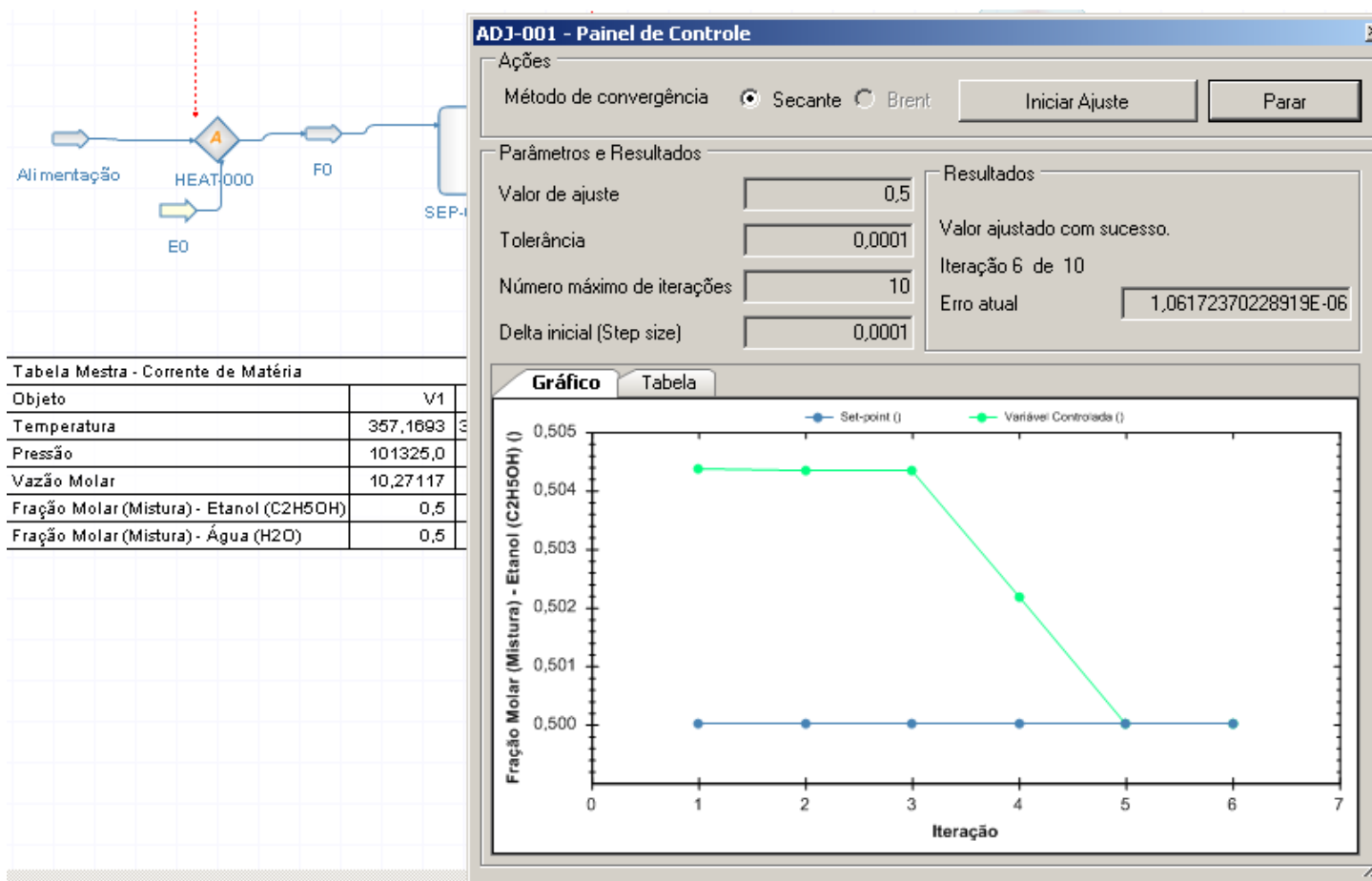
Objeto	V1	V0	L1	L0	F0	
Temperatura	357,00041	353,29094	357,00041	353,29094	353,29092	K
Pressão	101325,0	101325,0	101325,0	101325,0	101325,0	Pa
Vazão Molar	9,98242	70,98329	19,03424	29,01666	100,0	mol/s
Fração Molar (Mistura) - Etanol (C2H5OH)	0,50436	0,59998	0,1247	0,25535	0,5	
Fração Molar (Mistura) - Água (H2O)	0,49564	0,40002	0,8753	0,74465	0,5	



Introdução ao DWSIM

Operação de Reciclo

5) Ajuste utilizando o painel de controle.



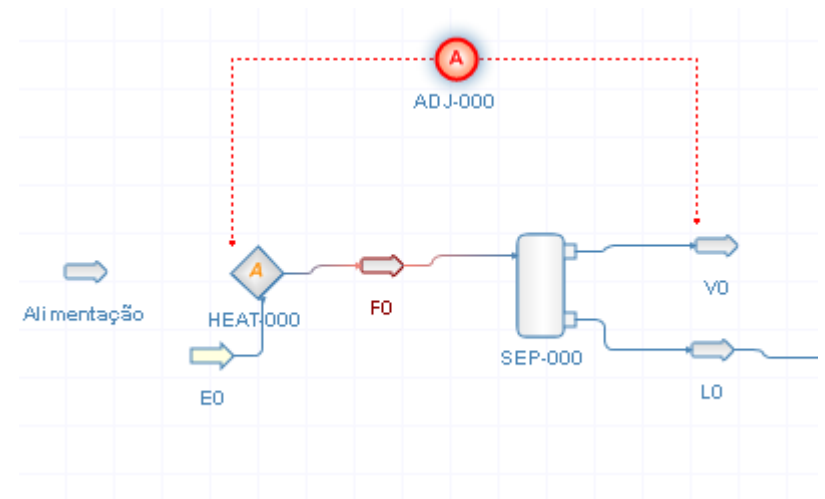


Introdução ao DWSIM

Operação de Reciclo

6) Antes de colocar a função Reciclo você deve adicionar um misturador, o primeiro passo é desconectar o fluxo de entrada do primeiro aquecedor, basta clicar com o botão direito do mouse sobre o fluxo de alimentação e selecionar desconectar de...

HEAT-000		
	393	353,29094
	5,0	101325,0
	549	29,01666
	124	0,25535
	0,87876	0,74465





Introdução ao DWSIM

Operação de Reciclo

7) Adicione um misturador com a configuração da figura.

The screenshot displays the DWSIM software interface. On the left, a properties window for the selected object 'MIX-000' (Misturador) is shown. The status is 'Calculado'. The 'Propriedades' tab is active, showing the following configuration:

1. Conexões	
Corrente de entrada (1)	
Corrente de entrada (2)	Alimentação
Corrente de entrada (3)	
Corrente de entrada (4)	
Corrente de entrada (5)	
Corrente de entrada (6)	
Conectado a (saída)	mistura

2. Parâmetros	
Pressão a jusante	Minimum

4. Miscelânea	
Ativo	True

Outros	
Anotações	
ID	MIST-0072581b-3d06-4290-b5b4-8c2553c58854
Último cálculo bem-sucedido em	2015-06-09T00:07:58.5881156-03:00

Pacote de Propriedades	
Pacote de Propriedades	PP_1

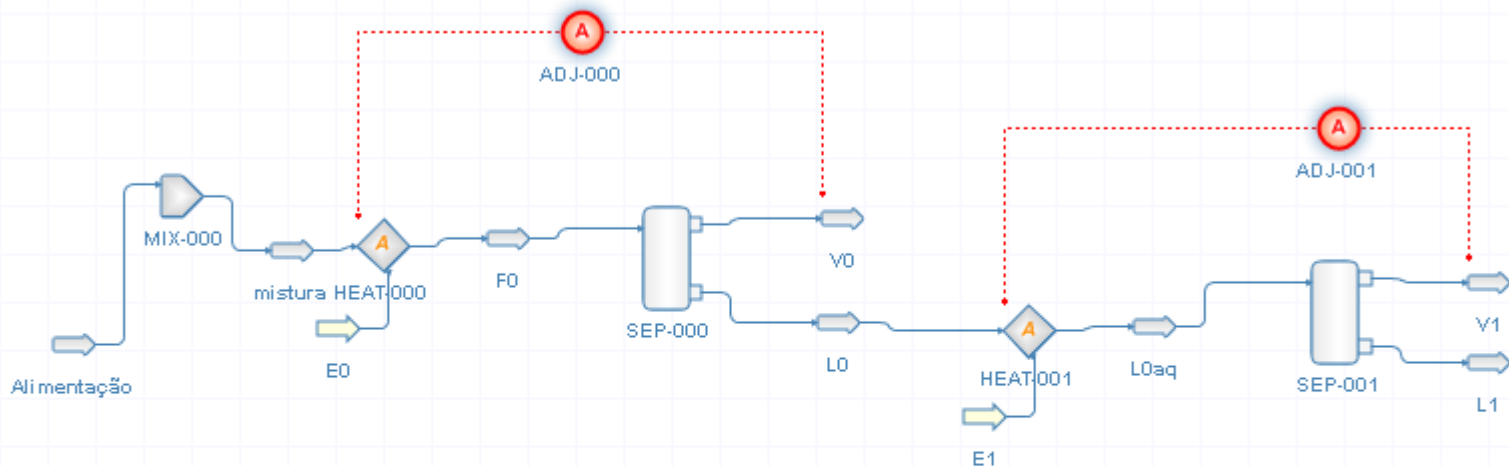
On the right, a process flow diagram is visible. It shows a mixer unit labeled 'MIX-000' with an input stream 'Alimentação' and an output stream 'mistura'. The 'mistura' stream is connected to a heat exchanger unit labeled 'HEAT-000'. A red dashed line indicates a feedback loop from the heat exchanger back to the mixer. The heat exchanger has two streams: 'E0' (cooling water) and 'A' (heating water).



Introdução ao DWSIM

Operação de Reciclo

8) Adicione a saída do misturador (M0) à entrada do primeiro aquecedor.



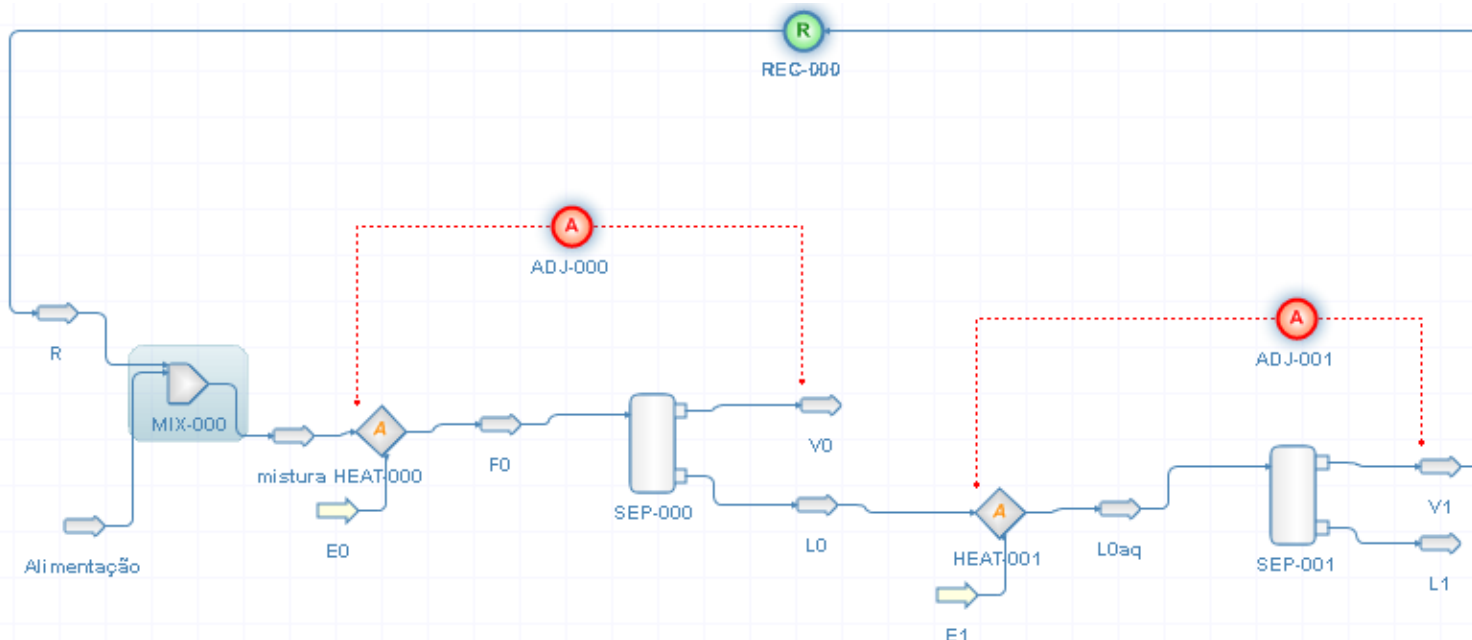
Objeto	V1	V0	L1	L0	FO	
Temperatura	357,1693	353,29096	357,1693	353,29096	353,29092	K
Pressão	101325,0	101325,0	101325,0	101325,0	101325,0	Pa
Vazão Molar	10,27104	70,98345	18,74646	29,0165	99,99996	mol/s
Fração Molar (Mistura) - Etanol (C ₂ H ₅ OH)	0,5	0,59998	0,12124	0,25535	0,5	
Fração Molar (Mistura) - Água (H ₂ O)	0,5	0,40002	0,87876	0,74465	0,5	



Introdução ao DWSIM

Operação de Reciclo

10) Adicione a corrente de reciclado à segunda entrada do misturador e peça para recalcular tudo. Compare com os resultados obtidos para o problema sem reciclo.



Objeto	V1	V0	R	L1	L0	FO	
Temperatura	357,1693	353,29096	357,1693	357,1693	353,29096	353,29092	K
Pressão	101325,0	101325,0	101325,0	101325,0	101325,0	101325,0	Pa
Vazão Molar	11,43434	79,02303	11,43434	20,86857	32,30291	111,32594	mol/s
Fração Molar (Mistura) - Etanol (C2H5OH)	0,5	0,59998	0,5	0,12124	0,25535	0,5	
Fração Molar (Mistura) - Água (H2O)	0,5	0,40002	0,5	0,87876	0,74465	0,5	



2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

Coluna de destilação – projeto (coluna shortcut)

A simulação utilizando a coluna shortcut é útil para obter uma primeira aproximação do comportamento durante o projeto de uma coluna de destilação, tendo em vista que não leva em consideração todos os parâmetros envolvidos nas diferentes colunas de destilação existentes nos processos industriais. Nessa primeira aproximação, é possível obter as primeiras informações sobre, por exemplo, o número de pratos que a coluna deverá ter, ou qual a razão de refluxo mínima que poderá ser imposta.

A seguir está apresentado um exemplo de implementação de uma simulação de uma coluna de destilação (coluna short-cut) no DWSIM.



2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

Coluna de destilação – projeto (coluna shortcut)

Pretende-se utilizar uma coluna de destilação, para separar uma mistura de cinco alcanos (C_2 a C_6). No processo de separação, o propano (C_3H_8) e o n-butano (C_4H_{10}) são os “compostos chave” (“leve” e “pesado”, respectivamente). A alimentação entra na coluna com uma vazão molar de 126 mol/s à pressão de 1,72 MPa e 380 K. Pretende-se obter no destilado no máximo 2% em mol de n-butano (C_4H_{10}) e na corrente de fundo (resíduo), 2% em mol de propano (C_3H_8). Considere uma razão de refluxo igual a 6, condensador tipo “Totalcond”, uma pressão no condensador de 1,71 MPa e no refeedor de 1,74 MPa. Simule:

a) O Refluxo mínimo; b) O número mínimo de estágios; c) o número de estágios para as condições operacionais do problema; d) A carga térmica no condensador e no refeedor; e) A vazão molar do fluxo de topo e de fundo; f) as frações molares de cada componente nos fluxos de topo e de fundo.

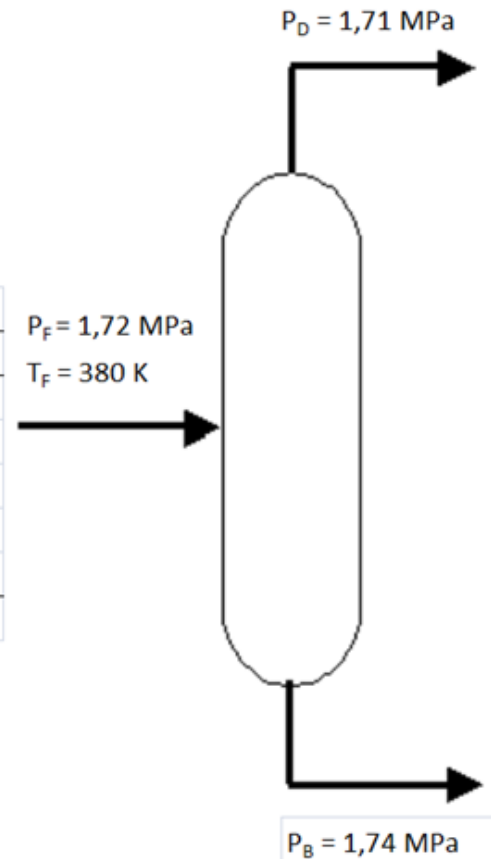


2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

Coluna de destilação – projeto (coluna shortcut)

Representação do problema:

Alimentação, F	
Componente	fluxo (mol/s)
etano	3,8
propano	25,2
n-butano	46,6
n-pentano	44,1
n-hexano	6,3
Total	126



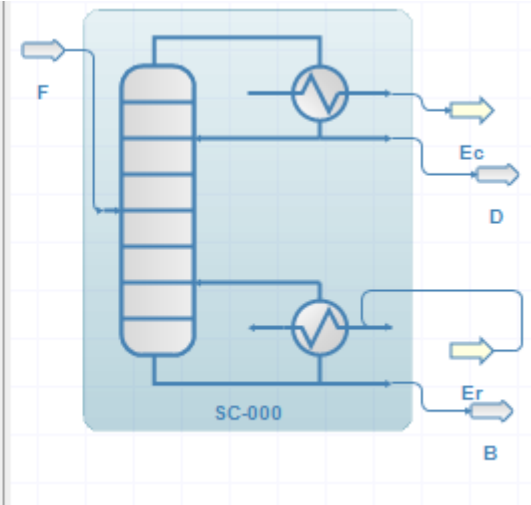


2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

Implementação:

- 1) Adicione todas as espécies químicas envolvidas no sistema em uma nova simulação no DWSIM. Escolha o pacote de fluidos de Soave-Redlich-Kwong) e o sistema inglês de unidades.
- 2) Adicione uma Coluna Shortcut com as configurações da figura. No fluxo F adicione os fluxos molares dos componentes, a temperatura e a pressão. Analise os resultados.

1. Conexões	
Alimentação	F
Produto de Topo	D
Produto de Fundo	B
Carga Térmica do Condensador	Ec
Carga Térmica do Refervedor	Er
2. Parâmetros	
Tipo do Condensador	TotalCond
Razão de Refluxo	6
Comp. Chave Leve	Propano (C3)
Fração Molar do Comp. Chave Pesado n	0,02
Comp. Chave Pesado	n-Butano (nC4)
Fração Molar do Comp. Chave Leve no f	0,02
Pressão do Condensador (Pa)	1710000,0
Pressão do Refervedor (Pa)	1740000,0





2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

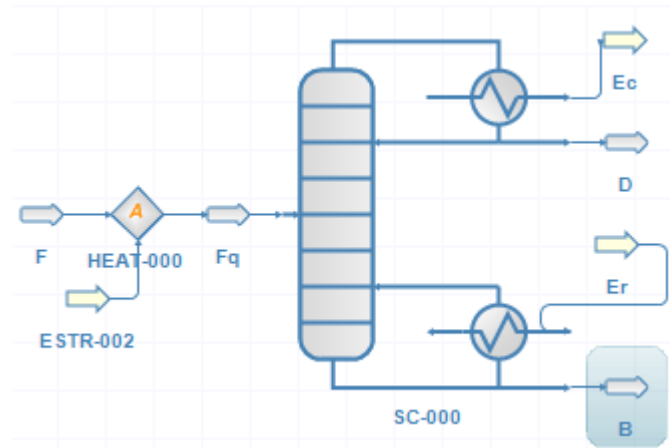
Influência dos parâmetros do processo: Pode-se simular o comportamento da coluna alterando os valores dos parâmetros de entrada, como temperatura da alimentação, pressão no condensador e no refeedor, fração molar na alimentação, diferentes especificações de saída de produtos, entre outros parâmetros de entrada. A seguir serão apresentadas, a título de exemplo a influência da temperatura de alimentação e da razão de refluxo sobre o comportamento da coluna de destilação já utilizada.



2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

Influência da temperatura de alimentação: Para demonstrar a influência da temperatura de alimentação, adicione um trocador de calor na entrada para considerar a energia gasta no caso da necessidade de aquecimento da mistura.

Objeto	F
Tipo	Corrente de Matéria
Status	Calculado
Propriedades Aparência	
1. Condições	
[1] Especificação	Temperature_and_Pressure
[2] Temperatura (K)	300
[3] Pressão (Pa)	1720000
[4] Vazão mássica (kg/s)	7,65877
[5] Vazão molar (mol/s)	126
[6] Vazão volumétrica (m ³ /s)	0,01318
[7] Fração Molar (Fase Vapor)	0
[8] Entalpia Específica (kJ/kg)	-366,35188
[9] Entropia Específica (kJ/[kg.K])	-1,12552
[A] Editor de composições	(Coleção)
[B] Base da composição	Molar_Fractions
2. Composições molares	
[1] Mistura	(...)
n-Hexano (nC6)	0,05
Etano (C2)	0,0301587
Propano (C3)	0,2
n-Butano (nC4)	0,3698413
n-Pentano (nC5)	0,35



Objeto	HEAT-000
Tipo	Aquecedor
Status	Calculado
Propriedades Aparência	
1. Conexões	
Corrente de entrada	F
Corrente de saída	Fq
Corrente de Energia	ESTR-002
2. Parâmetros de cálculo	
Queda de pressão (Pa)	0,0
Modo de Cálculo	OutletTemperature
Temperatura de Saída (K)	300,0
Eficiência (0-100)	100



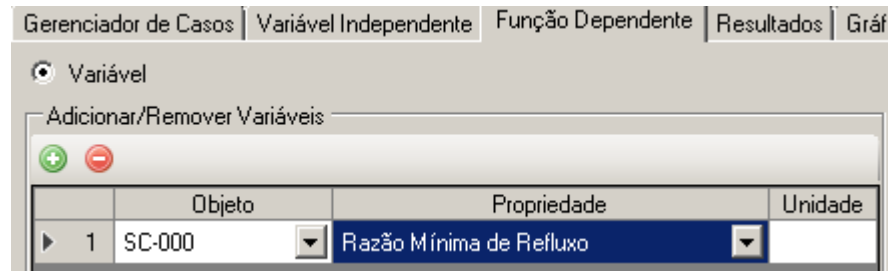
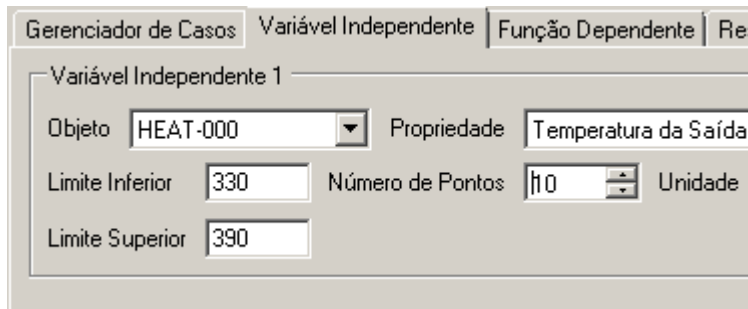
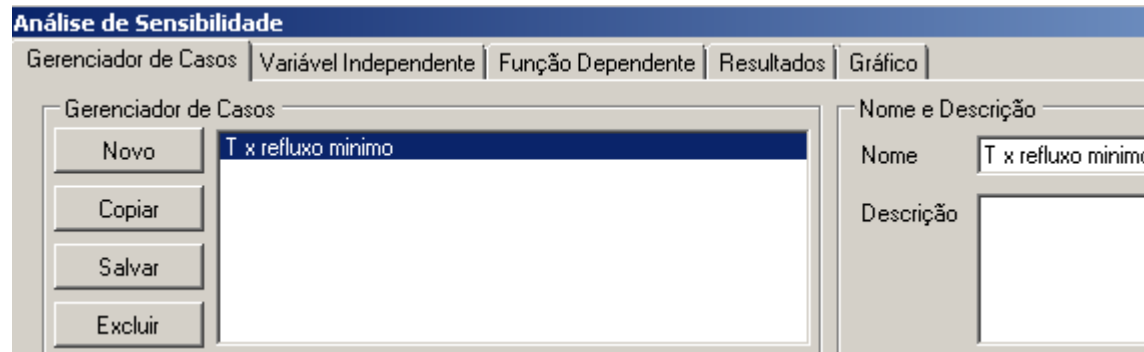
2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

Influência da temperatura de alimentação: Considerando uma mistura entrando a 300 K (taxa de refluxo igual a 6) no trocador de calor simule, para a temperatura no estágio de alimentação (saída do trocador de calor) variando entre 330K e 390K, os seguintes parâmetros: a) refluxo mínimo; b) número mínimo de estágios; c) estágio ótimo de alimentação; d) cargas térmicas do condensador, do refeedor, do trocador de calor da alimentação e total.



2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

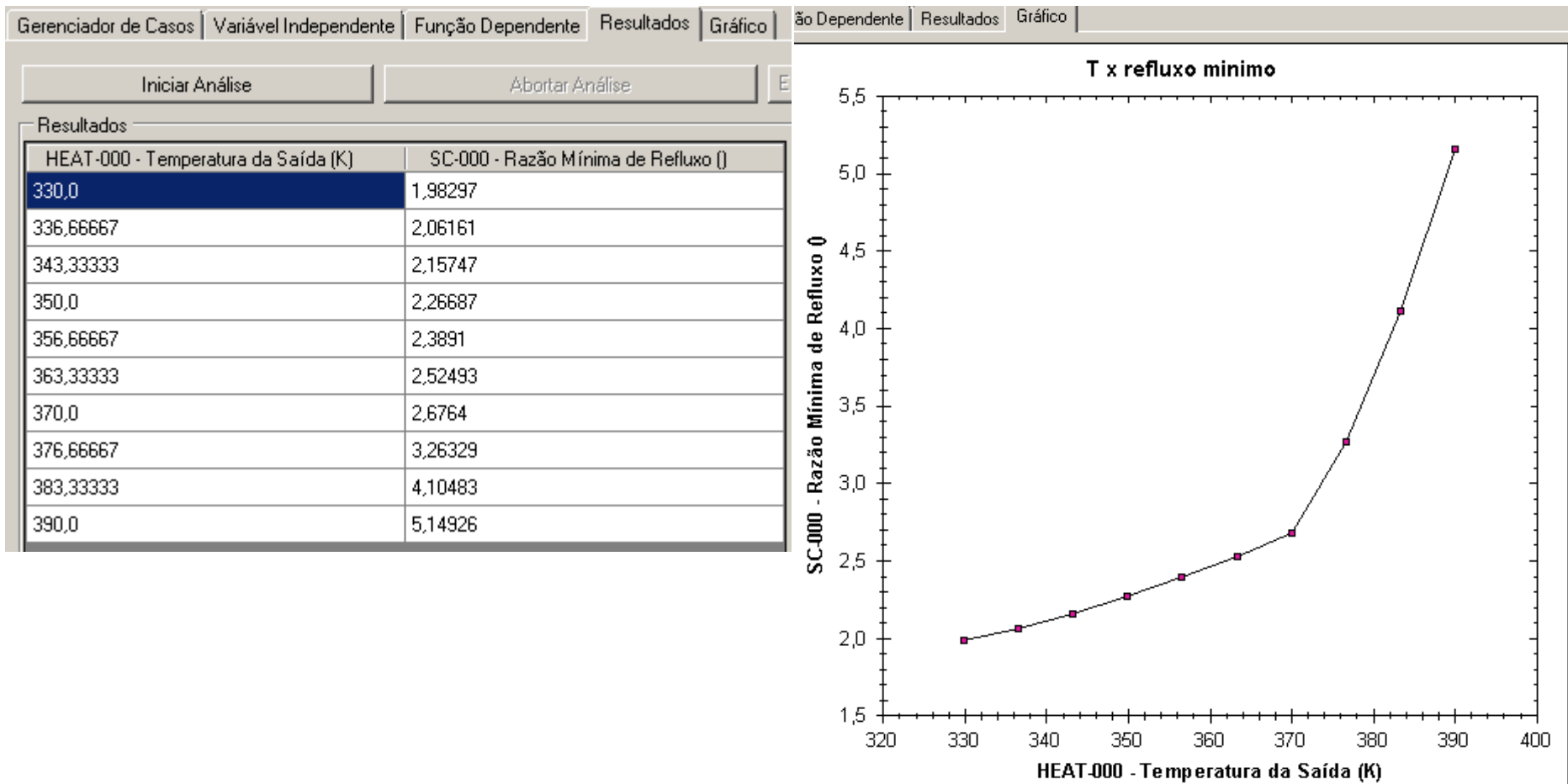
a) Temperatura de alimentação versus refluxo mínimo. No dwsim clique em |Otimização| e selecione |Análise de Sensibilidade|.





2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

a) Temperatura de alimentação versus refluxo mínimo.





2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

b -c) Temperatura de alimentação versus estágios.

Gerenciador de Casos | Variável Independente | Função Dependente | Result

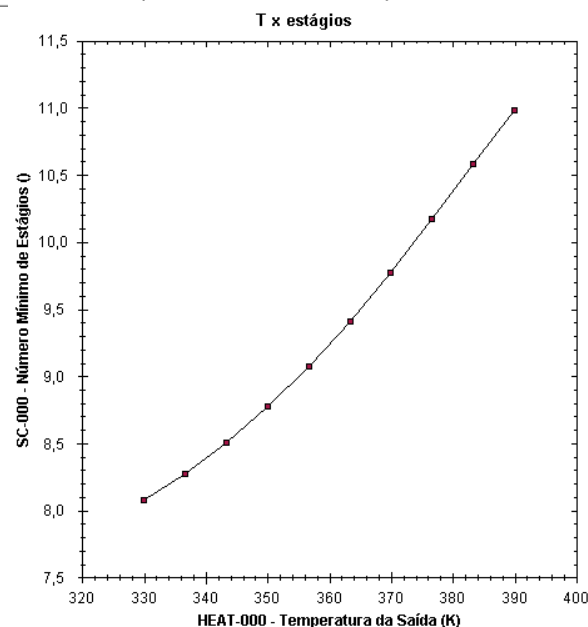
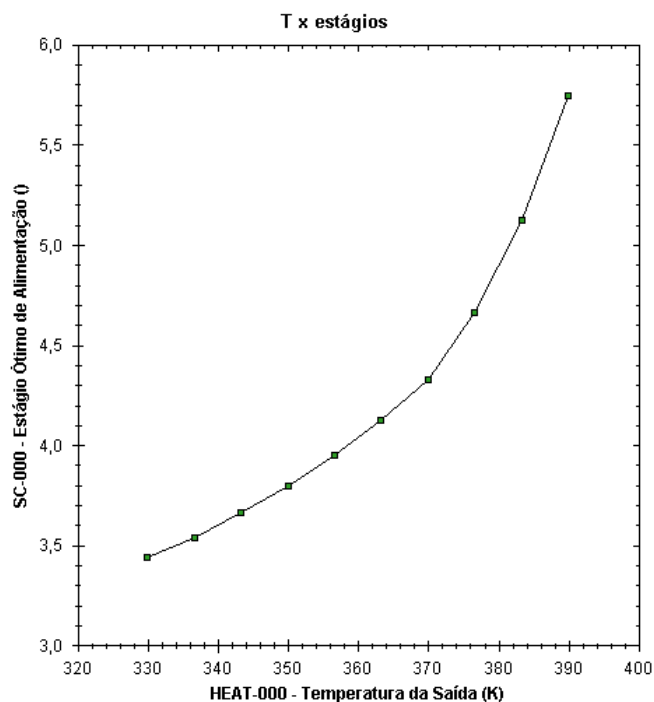
Variável

Adicionar/Remover Variáveis

	Objeto	Propriedade
▶ 1	SC-000	Estágio Ótimo de Alimentação
2	SC-000	Número Mínimo de Estágios

Resultados

HEAT-000 - Temperatura da Saída (K)	SC-000 - Estágio Ótimo de Alimentação ()	SC-000 - Número Mínimo de Estágios ()
330,0	3,44117	8,07275
336,66667	3,53909	8,2689
343,33333	3,65901	8,50658
350,0	3,79678	8,77624
356,66667	3,95198	9,07577
363,33333	4,12624	9,40673
370,0	4,32298	9,77371
376,66667	4,66139	10,17469
383,33333	5,12093	10,57883
390,0	5,74559	10,98144

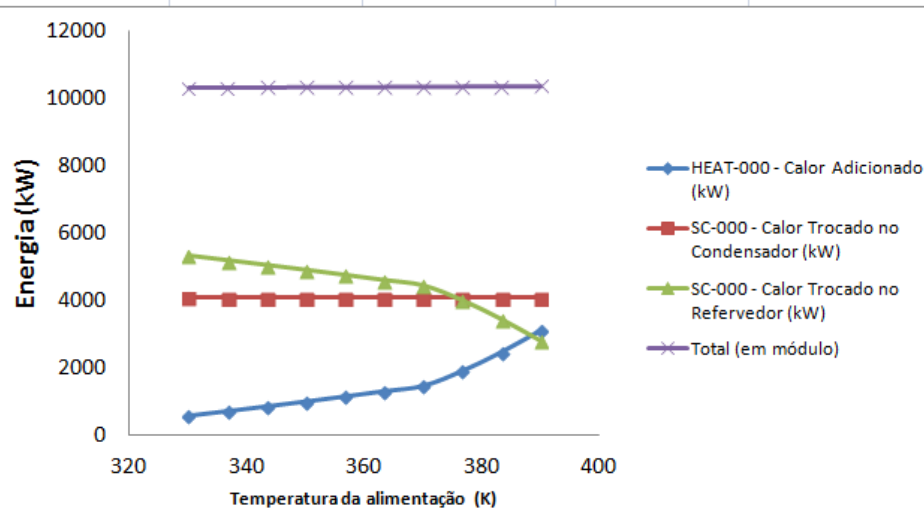




2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

d) Temperatura de alimentação versus energia.

HEAT-000 - Temperatura da Saída (K)	HEAT-000 - Calor Adicionado (kW)	SC-000 - Calor Trocado no Condensador (kW)	SC-000 - Calor Trocado no Refervedor (kW)	Total (em módulo)
330	582,57641	4064,9171	5324,1492	10301,64271
336,66667	719,73599	4064,91503	5186,9878	10308,30549
343,33333	860,15327	4064,91282	5046,56852	10314,96794
350	1004,14363	4064,91039	4902,57594	10321,62996
356,66667	1152,11755	4064,90769	4754,59952	10328,29143
363,33333	1304,62651	4064,90465	4602,08774	10334,95223
370	1462,44188	4064,90122	4444,26916	10341,61226
376,66667	1902,77858	4064,87522	4003,90659	10348,22706
383,33333	2461,01733	4064,84324	3445,63576	10354,82966
390	3096,1697	4064,81316	2810,4527	10361,43556



Análise de Sensibilidade

Gerenciador de Casos | Variável Independente | Função Dependente | Resultados | Gráfico

Variável

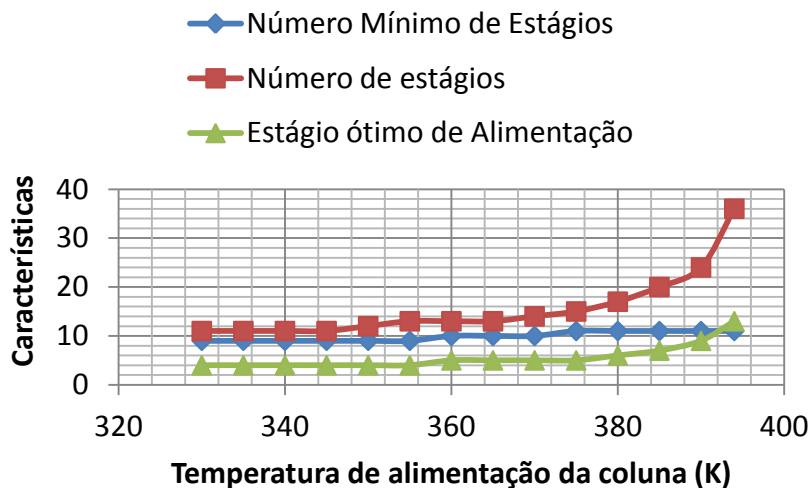
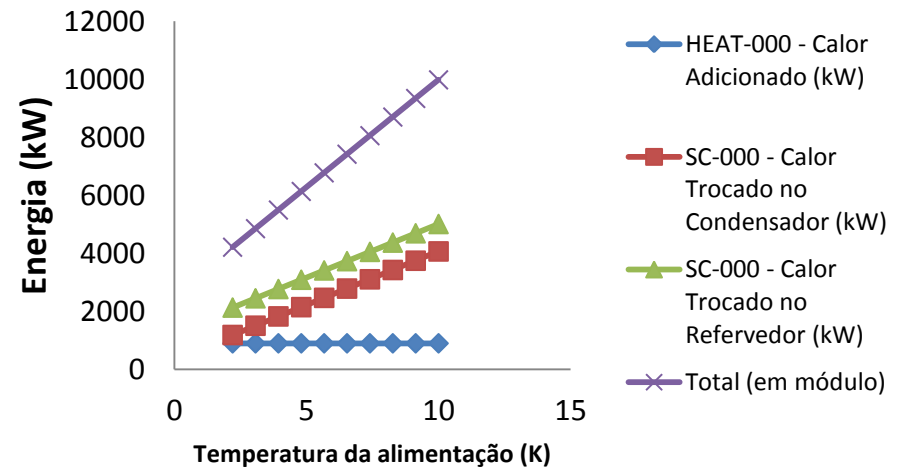
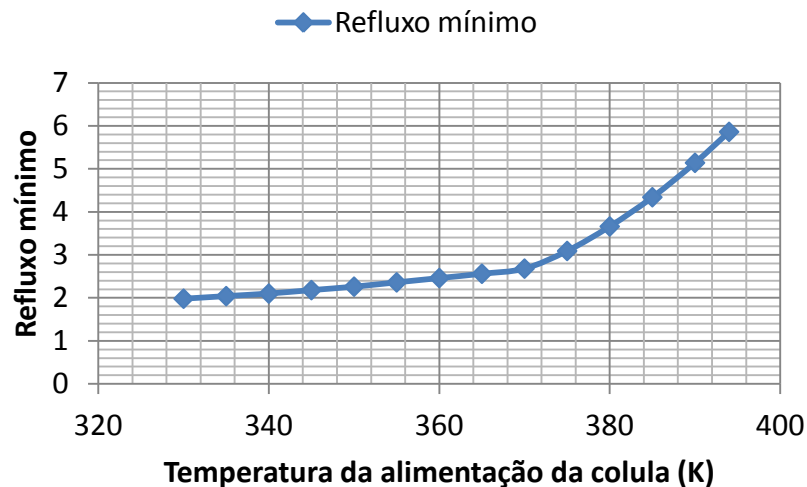
Adicionar/Remover Variáveis

	Objeto	Propriedade	Unidade
1	HEAT-000	Calor Adicionado	kW
2	SC-000	Calor Trocado no Condensador	kW
3	SC-000	Calor Trocado no Refervedor	kW



2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

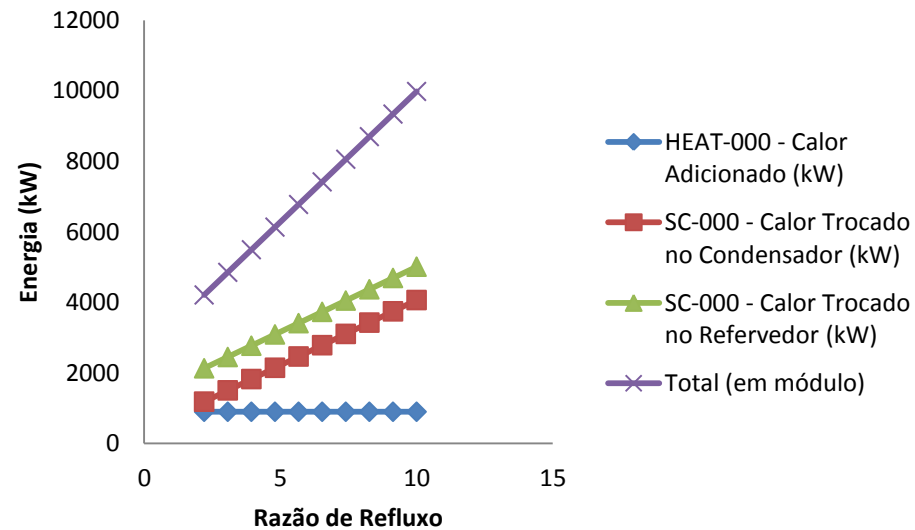
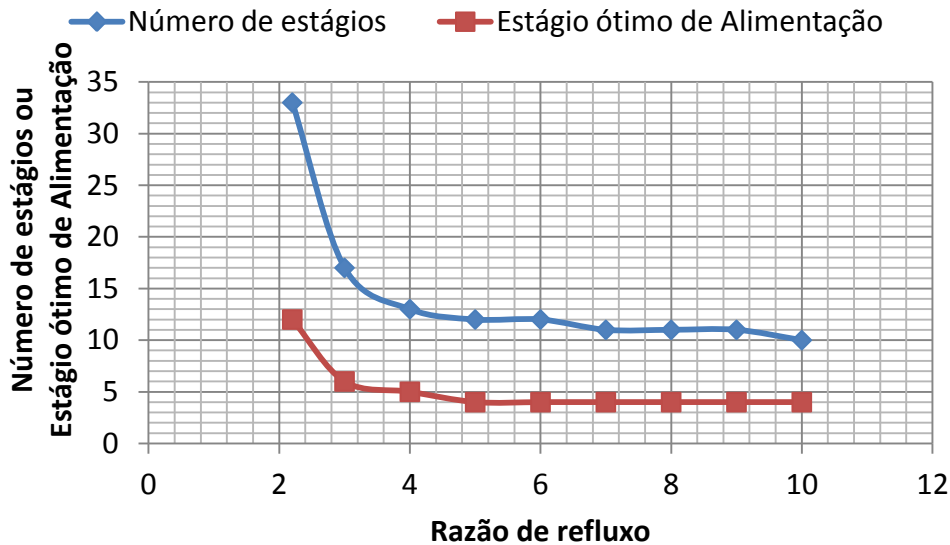
Análise da Influência da temperatura de alimentação (ponto a ponto no excel):





2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

Influência da razão de refluxo: Considerando na entrada uma temperatura de 345 K, vamos alterar a taxa de refluxo entre 2,2 e 10, a fim de avaliar a variação das seguintes respostas: a) Número de estágios, b) Estágio ótimo de alimentação; c) Carga térmica no condensador (E_c), no refeedor (E_r) e total (E_c+E_r).





2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

Resultados para razão de refluxo igual a 4 e temperatura na alimentação de 345K: A otimização do destilador é um processo que pode envolver um planejamento de experimentos no qual todos os parâmetros variem, porém, vamos considerar as condições citadas como uma estimativa inicial para uma coluna de destilação de 14 estágios (12 pratos + refeedor + condensador).

Objeto	F	D	B	
Temperatura	300,0	310,76121	399,23294	K
Pressão	1720000,0	1710000,0	1740000,0	Pa
Vazão Molar	126,0	27,58385	98,41397	mol/s
Fração Molar (Mistura) - Etano (C2)	0,03016	0,13773	0,0	
Fração Molar (Mistura) - Propano (C3)	0,2	0,84216	0,02	
Fração Molar (Mistura) - n-Butano (nC4)	0,36984	0,02	0,4679	
Fração Molar (Mistura) - n-Pentano (nC5)	0,35	0,00003	0,4481	
Fração Molar (Mistura) - n-Hexano (nC6)	0,05	0,0	0,06402	

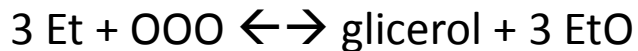
Objeto	SC-000	
Razão de Refluxo	4,0	
Pressão do Condensador	1710000,0	Pa
Pressão do Refeedor	1740000,0	Pa
Razão Mínima de Refluxo	2,18361	
Número Mínimo de Estágios	8,57116	
Estágio Ótimo de Alimentação	4,872	
Calor Trocado no Condensador	1847,68738	kW
Calor Trocado no Refeedor	2793,69465	kW

Objeto	Er	Ec	ESTR002	
Potência	2793,69465	1847,68738	895,80175	kW



Reator CSTR

Para exemplificar a simulação utilizando reatores CSTR, consideremos uma das reações de esterificação utilizadas para a obtenção de biodiesel, a esterificação do ácido oleico (presente no trioleato de glicerol - OOO), utilizando etanol (Et) em meio contendo hidróxido de sódio para a formação do oleato de etila (EtO). Considere a seguinte reação reversível:



A cinética de reação de ordem direta (r) e reversa (r') obedecem às seguintes equações:

$$r = k \cdot [\text{Et}] \cdot [\text{OOO}]$$

$$r' = k' \cdot [\text{glicerol}]$$

Sendo:

$$r = 1,9647 \cdot 10^{-5} \cdot \exp[-34,208509/(RT)] \quad (\text{mol}/\text{m}^3\text{s})$$

$$r' = 2,372 \cdot 10^{-7} \cdot \exp[-6,613448/(RT)] \quad (\text{mol}/\text{m}^3\text{s})$$



2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

Reator CSTR

Considere a composição molar da alimentação a 316,7 K e 1013125 Pa (considerando o pacote de componentes Biodiesel do DWSIM):

Water_BD=0,001; Ethanol_BD=0,829; NaOH_BD=0,031; Glycerol_BD=0,001;
OOO=0,137; EtO=0,001.

Obs. A utilização de quantidades insignificantes dos produtos de reação na alimentação (valores iguais a 0,001, nesse exercício) é necessária para a convergência da simulação no DWSIM.

a) Simule a composição de saída de um CSTR de 1m³ para um fluxo de alimentação de 2 mol/s, considere o reator isotérmico com temperatura de 316,7 K.



2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

Reator CSTR

a) Abra o DWSIM, adicione os componentes (Water_BD, Ethanol_BD, NaOH_BD, Glycerol_BD, OOO e EtO) . Escolha o pacote de propriedades NRTL e o algoritmo flash Loops aninhados ELV.

Clique em Ferramentas e abra o Gerenciador de Reações e configure a reação cinética como na figura.

Editar Reação Cinética

Identificação

Nome

Descrição

Componentes, Estequiometria e Ordens de Reação

Nome	Massa Molar	Incluir	CB	Coef. Esteq.	OD	OR
Water_BD	18,0151	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	0	0	0
Ethanol_BD	46,0699	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	-3	1	0
NaOH_BD	39,997	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	0	0	0
OOO	885,44501	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	-1	1	0
Glycerol_BD	92,095	<input checked="" type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>	1	0	1

Estequiometria Calor de Reação (kJ/kmol_CB) -23610,0

Equação 3Ethanol_BD + OOO <-> Glycerol_BD + 3EtO

Parâmetros da Reação Cinética

Base Fase Tmin (K) Tmax (K)

Componente-Base

Constantes de Velocidade das Reações Direta e Inversa (k e k')

Reação Direta [k = A exp(-E/RT)] A E T em K

Reação Reversa [k' = A' exp(-E'/RT)] A' E' T em K

Unidade de Concentração Unidade de Velocidade



2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

Reator CSTR

a) Crie uma corrente de matéria para a alimentação (F) e configure.

Water_BD=0,001; Ethanol_BD=0,829; NaOH_BD=0,031; Glycerol_BD=0,001;
OOO=0,137; EtO=0,001; T=317,6 K; P=1013125 Pa; F= 2 mol/s.

Adicione o reator CSTR e configure como na Figura. Execute a simulação clicando com o botão direito do mouse sobre o reator escolhendo a opção |Recalcular|.

Objeto selecionado

Objeto CSTR-000
Tipo Reator CSTR
Status Calculado

Propriedades Aparência

1. Conexões

Corrente de entrada	F
Corrente de saída	P
Corrente de Energia	E

2. Parâmetros de cálculo

Conjunto de Reação:	Conjunto Global
Modo de Operação	Isothermic
Temperatura do Rea	316,7
Queda de pressão (F)	0
Volume do Reator (m	1

3. Resultados

Delta-T (K)	0,0
-------------	-----

Correntes de Matéria Plan

F P E

CSTR-000



2º SEMINÁRIO DE RECURSOS NATURAIS, sustentabilidade e tecnologias ambientais

Reator CSTR

b) Mantendo o fluxo molar da alimentação em 2 mol/s , plote um gráfico de fração molar de EtO versus Volume de reator ($V= 1; 2; 3; \dots; 9; 10 \text{ m}^3$).

Reator PFR

Substitua o CSTR da última simulação por um PFR, considere uma variação no volume de 0,05 e refaça os itens a e b

