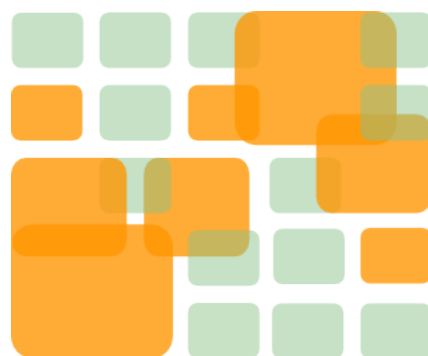

ISE

Integrated Simulation
Environment

Manual do Usuário

www.vrtech.com.br



6 de maio de 2011

Sumário

1	Introdução	1
1.1	Introdução ao ISE	2
1.2	Tecnologia	2
1.2.1	Termodinâmica	2
1.2.2	Resolução orientada a equações	2
1.2.3	Desenvolvido totalmente em Java	3
1.3	Instalação	4
2	Visão Geral	5
2.1	Abrindo o ISE	6
2.2	Iniciando um novo projeto	7
2.3	Visão geral do ambiente de simulação	10
2.3.1	Barra de menus	11
2.3.2	Barra de botões	12
2.3.3	Paleta das bibliotecas	13
2.3.4	Página central	13
2.3.5	Área das variáveis	14
2.3.6	Vista satélite	15
2.3.7	Barra de mensagens	16
2.3.8	Barra de status	17
2.3.9	Barra de andamento	17
2.4	Atalhos de teclado	19
3	Criação de diagramas e simulação	20
3.1	Graus de liberdade de uma simulação	21
3.2	Resolução orientada a equações	22

3.3	Visão geral sobre os equipamentos	23
3.4	Conectando equipamentos	24
3.5	Especificando variáveis	26
3.6	Fechando os graus de liberdade	28
3.7	Resolvendo a simulação	32
3.8	Visualizando os Resultados	33
4	Bibliotecas de processos	35
4.1	Biblioteca de água e vapor	37
4.1.1	Corrente material de água e vapor	37
4.1.2	Corrente energética	38
4.1.3	Equipamentos	38
4.2	Biblioteca de engenharia de processos	49
4.2.1	Corrente material	51
4.2.2	Corrente energética	51
4.2.3	Equipamentos	52

Direitos Autorais

Os direitos autorais deste programa/rotina de computador e documentos associados são propriedade da VRTech Tecnologias Industriais Ltda e são fornecidos mediante um termo de licença que contém restrições de uso.

É proibida a duplicação, distribuição, cópia ou reprodução deste programa/rotina de computador e documentos associados, no todo ou em parte, sob quaisquer formas ou por quaisquer meios (eletrônico, gravação, fotocópia, distribuição na Web e outros), sem permissão expressa da VRTech Tecnologias Industriais Ltda.

(C) 2006-2010 VRTech Tecnologias Industriais Ltda.

Todos os direitos reservados.

ISE é uma marca registrada da VRTech Tecnologias Industriais Ltda. Quaisquer outras marcas, registradas ou não, mencionadas nesta documentação são de propriedade dos seus respectivos titulares. Todos direitos reservados.

Símbolos e Convenções

Comandos ou arquivos: comandos e nomes de arquivos inseridos no texto são enfatizados como `comando` e `arquivo`.



Nota: uma nota, por exemplo: o ISE é um simulador baseado em equações com um elaborado mecanismo para convergência.



Atenção: uma mensagem de cuidado, por exemplo: é muito importante selecionar o modelo termodinâmico adequado.



Dica: uma dica para o usuário, por exemplo: para misturas com gases dissolvidos utilize a regra de mistura UMR ou UGMR.



Linux: uma nota específica para plataformas POSIX (Linux e Unix).



Windows: uma nota específica para plataformas Win32 (Windows 95 e superiores, Windows NT 4 e superiores).



Em desenvolvimento: notifica um assunto ainda em desenvolvimento.

Suporte, Contato e Atualizações

Para a obtenção de suporte entre em contato com a VRTech:

- Na internet www.vrtech.com.br
- Através de correio eletrônico suporte@vrtech.com.br

ISE ainda se encontra contínuo desenvolvimento, porém já se encontra funcional. As versões distribuídas ainda são protótipos da versão final.

1 Introdução

Neste capítulo é apresentado o simulador ISE com suas principais características. Ao final do capítulo são apresentadas as instruções de instalação.

Sumário

1.1	Introdução ao ISE	2
1.2	Tecnologia	2
1.3	Instalação	4

1.1 Introdução ao ISE

ISE é um simulador estacionário de processos industriais, tendo já implementados modelos dos mais importantes equipamentos presentes na indústria química, petroquímica e de geração de energia. Contém um banco de dados com mais de 1200 componentes químicos, além de dados próprios para água e vapor, e os mais modernos métodos de cálculo de propriedades termodinâmicas de misturas entre estes componentes.

ISE é um acrônimo em inglês para Ambiente Integrado de Simulação (*Integrated Simulation Environment*) e é também uma jogada fonética que lembra a palavra *easy*, ou seja, fácil. Isto não é apenas uma coincidência, uma premissa do simulador é ter uma interface amigável para o usuário, permitindo a implementação de simulações complexas com apenas alguns cliques e de maneira intuitiva.

1.2 Tecnologia

O ISE é desenvolvido com as mais modernas tecnologias, a citar:

- As mais novas formulações cálculos termodinâmicos para misturas;
- Método de resolução orientado à equações;
- Desenvolvido totalmente em Java.

1.2.1 Termodinâmica

O ISE utiliza os métodos de cálculo de propriedades termodinâmicas de misturas mais avançados disponíveis hoje. Os métodos utilizam de cálculos rigorosos para a energia livre de Gibbs, sendo assim mais avançados que as regras de misturas clássicas. Como exemplo, podemos citar a utilização da regra de mistura UGMR e da predição da atividade em soluções líquidas. Isto tudo significa que os resultados gerados no ISE serão os melhores possíveis na simulação.

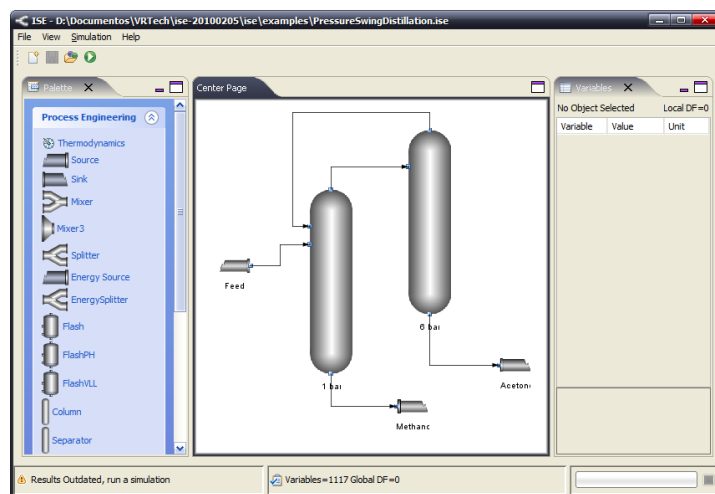
Neste ponto, o ISE está à frente mesmo dos simuladores estacionários consagrados no mercado, que, em geral, estão defasados nestas tecnologias.

1.2.2 Resolução orientada a equações

É comum que softwares com funcionalidades similares ao ISE sejam construídos com modelos desenvolvidos de maneira sequencial-modular. Nesta forma, cada equipamento é calculado de uma

forma específica, limitando as possibilidades de caracterização e de interação com os demais equipamentos presentes em uma mesma simulação. O ISE, por outro lado, utiliza da tecnologia de modelos orientados à equações. Desta forma o usuário não precisa mais se preocupar com informações específicas para o equipamento, mas sim com o número global de graus de liberdade (relação entre o número de equações, variáveis e especificações). Internamente, esta tecnologia também trás vantagens muito importantes, como por exemplo a viabilização do cálculo direto de correntes de reciclo.

Figura 1.1: Exemplo de processo com retro-alimentação.



No exemplo da Figura 1.1 vemos um processo de separação entre metanol e acetona, cuja mistura possui um azeótropo. Para obter produtos puros em ambos os componentes, é feita a operação conjunta de duas colunas sob condições de pressão diferentes, deslocando a composição do azeótropo. O produto de topo de cada coluna (com a composição do respectivo azeótropo) é alimentado na outra.

1.2.3 Desenvolvido totalmente em Java

Java é uma linguagem de programação orientada à objetos, que trás uma série de vantagens para os desenvolvedores e, por consequência, para o usuário final.

Esta linguagem é mantida pela empresa Sun Microsystems, que vem provendo frequentes atualizações das bibliotecas, sempre melhorando as funcionalidades, otimizando os processos computacionais e diminuindo a ocorrência de bugs. Aos desenvolvedores, isto significa uma maior eficiência, focando os esforços nas funcionalidades do software e não na implementação "burocrática"

do software. Para o usuário final, o resultado é um software com uma interface muito amigável e com recursos avançados.

Além disso, a plataforma Java também tem o diferencial da portabilidade, de forma que o software desenvolvido pode ser portado para praticamente qualquer sistema operacional existente, além de aplicação via WEB.

Os demais simuladores existentes no mercado são, em grande maioria, dependentes de códigos em linguagens antigas como FORTRAN ou C. O resultado disto para os desenvolvedores é uma maior dificuldade no mantimento do software, como problemas cada vez maiores de compatibilidade. Os usuários, por outro lado, ficam expostos à interfaces antiquadas e limitadas.

1.3 Instalação



Em desenvolvimento: detalhamento em construção.

2 Visão Geral

Neste capítulo apresentamos uma visão geral da interface gráfica com o usuário do ISE e suas principais características.

Sumário

2.1	Abrindo o ISE	6
2.2	Iniciando um novo projeto	7
2.3	Visão geral do ambiente de simulação	10
2.4	Atalhos de teclado	19

2.1 Abrindo o ISE

Ao abrir o software ISE, é apresentada uma tela inicial, como na Figura 2.1.



Atenção: As figuras aqui apresentadas podem ter diferenças em relação às telas e janelas encontradas pelo usuário, devido às configurações do sistema operacional, alguma configuração do ISE visual alterada e também às constantes atualizações do aplicativo.

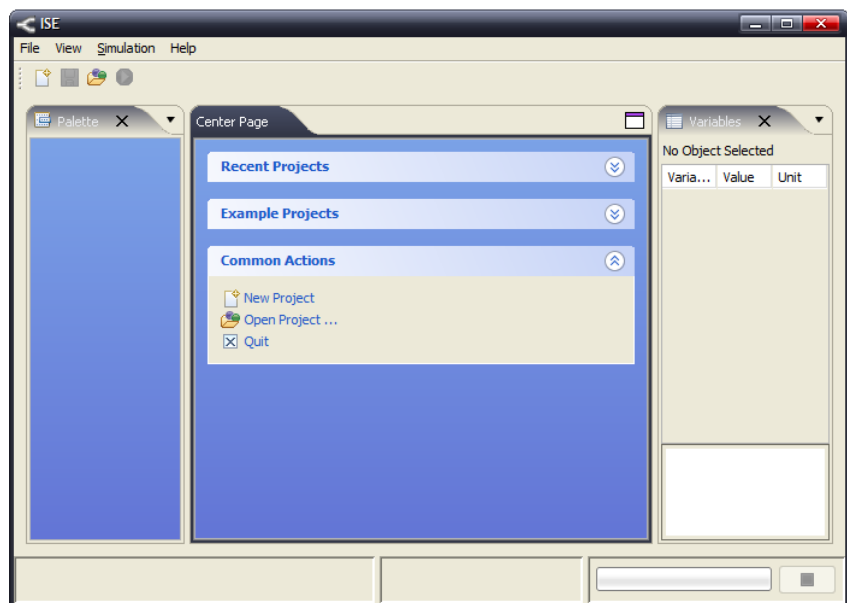


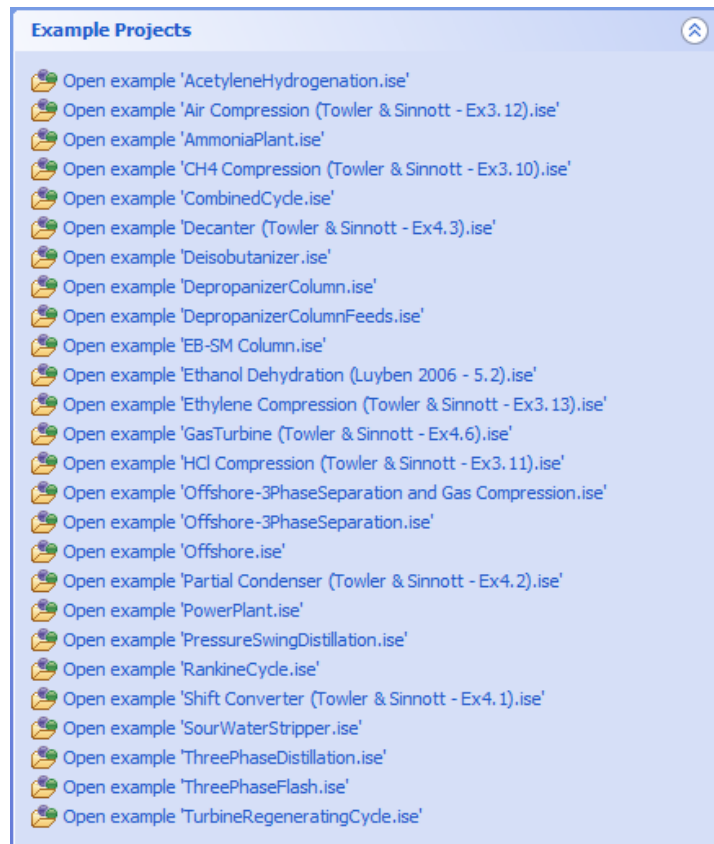
Figura 2.1: Tela inicial.

Nesta tela são oferecidas as seguintes opções:

- **Recent Projects:** lista dos últimos projetos utilizados pelo usuário e a respectiva data e horário.
- **Example Projects:** lista dos exemplos que acompanham o ISE.
- **Common Actions:** criar novo projeto, abrir projeto existente ou fechar o simulador.

Dentre os exemplos já inclusos no ISE, são encontrados problemas clássicos da literatura e também casos especiais de simulações, como, por exemplo, casos envolvendo equilíbrio trifásico ou a integração mássica e energética de processos. A lista de exemplos presentes até maio de 2010 está mostrada na Figura 2.2.

Figura 2.2: Lista de exemplos já implementados no ISE.



Cabe citar que as opções apresentadas na área **Common Actions** também estão disponíveis a partir do menu **File** e da barra de ferramentas.

2.2 Iniciando um novo projeto

Optando por iniciar um novo projeto, será apresentada ao usuário uma janela de seleção das bibliotecas a serem utilizadas, como visto na Figura 2.3.

A biblioteca de vapor (**Water Steam**) de água oferece modelos que permitem o cálculo de ciclos de vapor, incluindo os cálculos de propriedades termodinâmicas de acordo com os dados do IAPWS95.

A biblioteca de engenharia de processos (**Process Engineering Library**) já oferece a maioria dos modelos necessários para se representar um processo industrial: diversas colunas de separação, vasos de equilíbrio, reatores, trocadores de calor, bombas, compressores, válvulas, etc.

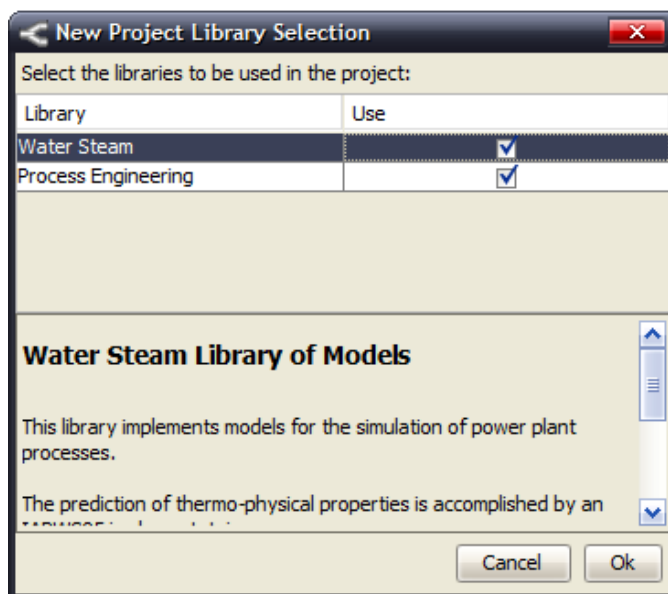


Figura 2.3: Tela de seleção de bibliotecas.



Atenção: Após esta etapa inicial da seleção das bibliotecas não é mais possível retornar e alterar as bibliotecas utilizadas no projeto.

Mais detalhes a respeito das bibliotecas são encontrados no Capítulo 4

Optando pela biblioteca de engenharia de processos, é necessário primeiramente informar ao simulador os componentes envolvidos na simulação (Figura 2.4) e quais os modelos termodinâmicos (Figura 2.5) a serem utilizados. Neste aspecto o ISE oferece o que há de mais avançado atualmente, estando à frente da maioria dos demais simuladores existentes.

O banco de dados do ISE contempla mais de 1200 componentes e os mais modernos modelos termodinâmicos. Mais detalhes a respeito destes modelos podem ser encontrados na ??.

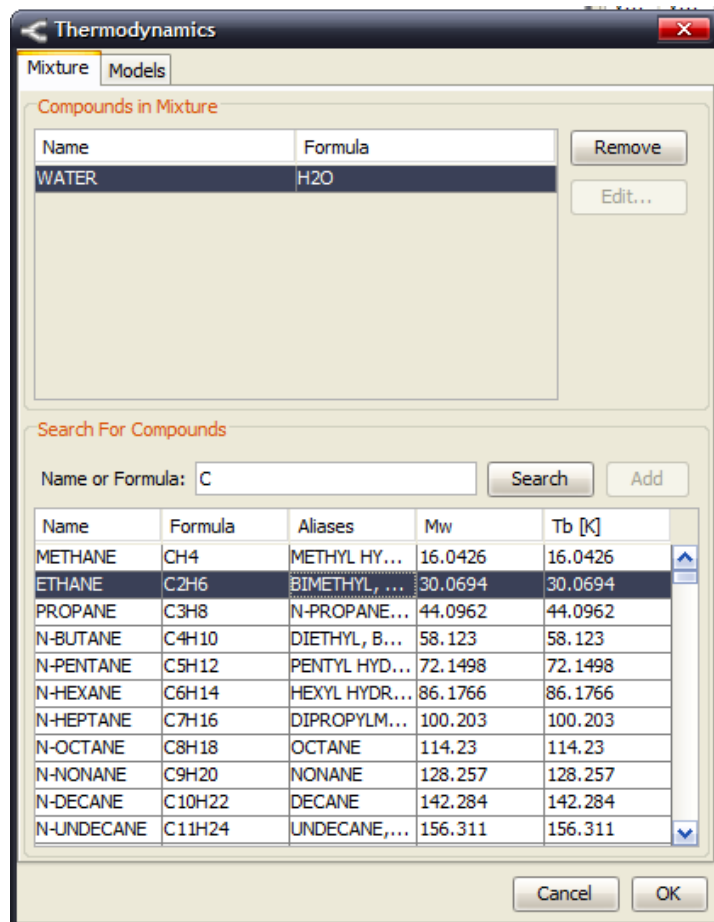


Figura 2.4: Configuração dos componentes da simulação

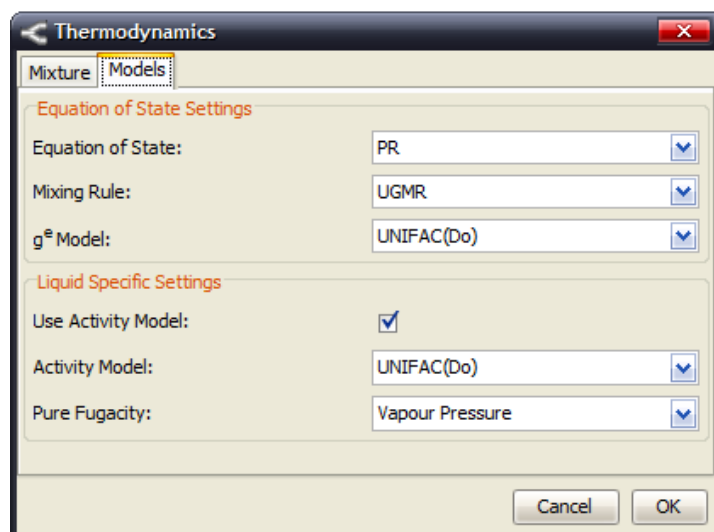


Figura 2.5: Configuração dos componentes da simulação



Dica: Ao contrário da configuração das bibliotecas utilizadas no projeto, uma vez tendo escolhido a biblioteca de engenharia de processos o usuário pode retomar a configuração dos componentes e da termodinâmica utilizada a qualquer momento durante a edição do projeto.

2.3 Visão geral do ambiente de simulação

Após as configurações preliminares do projeto (bibliotecas, componentes e modelos termodinâmicos), é apresentada ao usuário uma interface como a da Figura 2.6. No centro da tela, um diagrama em branco e outras áreas funcionais em torno deste.

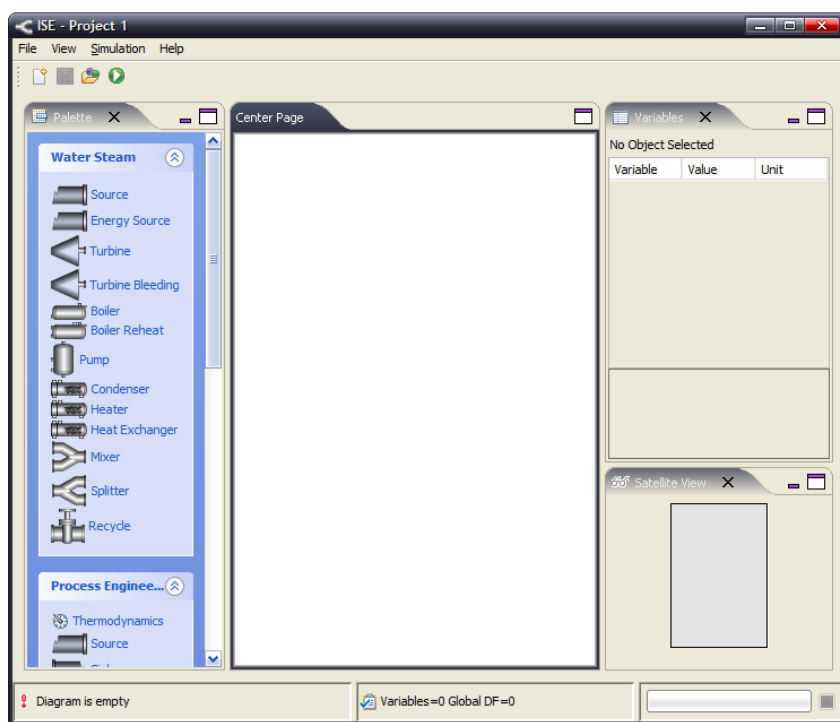


Figura 2.6: Diagrama em branco

Nesta figura podemos identificar as seguintes áreas:

1. Barra de menus;
2. Barra de botões;
3. Paleta das bibliotecas;
4. Página central;
5. Área das variáveis;

6. Vista satélite;
7. Barra de mensagens;
8. Barra de status;
9. Barra de andamento.

2.3.1 Barra de menus

Na barra de menus se encontram os menus de acesso às operações e funções básicas do simulador.



Atenção: Os arquivos utilizados para os projetos do ISE tem a extensão **.ise**

No menu **File** se encontram as seguintes operações:

- **New Project:** Inicia um novo projeto, passando pelas etapas conforme a Seção 2.2. Se já houver um projeto em execução e este conter alterações não salvas, o ISE perguntará ao usuário se ele deseja salvar o projeto atual antes de iniciar um novo, ou cancelar a operação.
- **Save:** Salva o projeto atualmente aberto. Se o mesmo ainda não foi salvo, será apresentada ao usuário uma janela para que seja escolhido o local e o nome do arquivo a ser salvo.
- **Open Project ...:** Abre um projeto existente, previamente salvo. Ao acionar . Se houver um projeto em execução e este não estiver salvo, o ISE perguntará se o usuário quer salvar o projeto atual (ou cancelar) a operação e fechará o projeto atual (ou voltará ao projeto atual).
- **Save as ...:** Salva o projeto atual com um caminho e/ou nome do arquivo diferentes do atual. Após isto, qualquer alteração salva pelo comando **Save** modificará este último arquivo.
- **Close Project:** Fecha o projeto atualmente aberto. Se este não estiver salvo, o ISE perguntará se o usuário quer salvar o projeto atual ou cancelar a operação. Em seguida, a interface retorna à tela inicial (Seção 2.3).
- **Quit:** Fecha o simulador. Da mesma forma como nos ítems anteriores, o ISE irá perguntar se o usuário deseja salvar as alterações no projeto atual, se for o caso.

No menu **View** é possível gerenciar a interface do simulador, podendo ativar ou desativar a presença dos seguintes itens:

- **Palette**;
- **Satellite View**;
- **Variables**.

Além de mostrar ou não estes itens, o usuário também pode manipular a disposição de diversas maneiras. Mais detalhes a respeito disso na ??.

No menu **Simulation** estão as ações referentes à simulação:

- **Run**: Executa os procedimentos de resolução numérica da simulação.
- **Report**: Exibe uma janela com os resultados de um equipamento.
- **Cancel**: Cancela a resolução numérica.

É importante salientar que para executar a simulação, é necessário que o diagrama tenha seus graus de liberdade fechados, o que só é obtido após inseridos equipamentos e especificações. Maiores detalhes sobre isto na A opção **Report** apenas estará disponível após a simulação tenha sido executada pelo menos uma vez. A opção de cancelamento da resolução numérica pode ser útil se a simulação estiver tomando muito tempo, ou houver alguma instabilidade numérica.

No menu **Help**, o usuário tem acesso à janela **About**, que contém informações sobre a versão atual do ISE, bem como informações para contato com a VRTech.

2.3.2 Barra de botões

A barra de botões do ISE contém atalhos rápidos para as funcionalidades mais comuns:

Figura 2.7: Barra de botões.



1. Criar novo projeto;
2. Salvar projeto;
3. Abrir outro projeto;

4. Rodar simulação.

Estas funcionalidades são as mesmas presentes a partir dos menus discutidos na subseção anterior.

2.3.3 Paleta das bibliotecas

A paleta das bibliotecas é mostrada, por padrão, à esquerda da página central. É através dela que o usuário acessa os itens das bibliotecas selecionadas, ao criar um novo projeto.

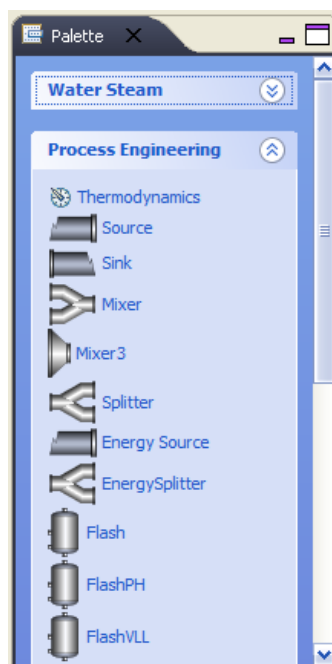


Figura 2.8: Paleta das bibliotecas.

Para cada biblioteca selecionada, aparece na paleta uma lista dos equipamentos disponíveis e itens de configuração. Ainda é possível contrair ou expandir uma biblioteca, clicando no ícone à direita do nome da biblioteca. Na Figura 2.8, onde a biblioteca **Water Steam** foi colapsada e a biblioteca **Process Engineering** mostra a opção de abrir as configurações de termodinâmica e lista os seus equipamentos disponíveis, para adicionar ao diagrama.

Mais detalhes sobre as bibliotecas no Capítulo 4.

2.3.4 Página central

A página central é o espaço onde é construído o diagrama da simulação, contendo os equipamentos utilizados e as correntes que ligam estes.

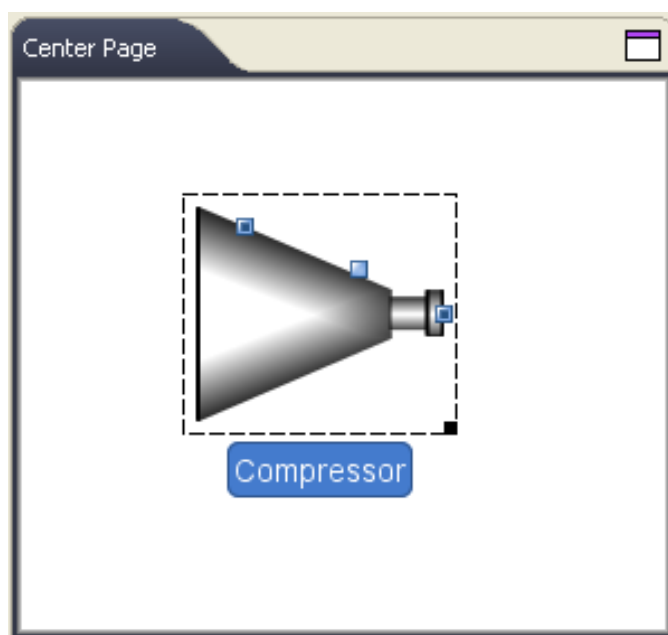


Figura 2.9: Página central com uma instância de um compressor.

Para adicionar instâncias de equipamentos ao diagrama, basta clicar no respectivo ítem da paleta de bibliotecas. Uma instância do equipamento deve aparecer no diagrama, como na Figura 2.9. O nome do equipamento é arbitrário. A princípio, o usuário pode movê-lo dentro do diagrama, redimensioná-lo (utilizando o pequeno quadrado no canto inferior direito do equipamento selecionado), renomeá-lo (clcando duas vezes sobre o nome do equipamento) e conectar portas de saída de equipamentos em portas de entrada. Mais detalhes sobre a criação de diagramas na

Também é possível alterar o tamanho do diagrama, alterando o nível de *zoom*. Para isto, basta clicar com o botão direito sobre uma área vazia do diagrama que será apresentado um menu com as opções de mostrar tudo, *zoom* 100%, afastar e aproximar.

2.3.5 Área das variáveis

Aqui são apresentadas diversas informações a respeito de um equipamento selecionado no diagrama:

- Tabela das variáveis do modelo do equipamento, seus valores e unidades;
- Breve descrição e limites inferior e superior de cada variável;
- Graus de liberdade locais (**Local DF**);
- Situação dos resultados.

Variable	Value	Unit
F	10,018	kgmole/h
T	25,3564	C
P	1,0018	atm
z	[1,0008]	
ΔP	0	atm
φ_{iso}	0,9501	
W_{in}	1,0012E-4	kW

Molar Flow
Valid range=[0, 1E6] kgmole/h

Figura 2.10: Área das variáveis, selecionado um compressor.

É na tabela de variáveis que o usuário deve entrar com as especificações da simulação, a fim de fechar os graus de liberdade. Mais detalhes sobre o procedimento da definição da simulação na Os modelos dos equipamentos são descritos na

Enquanto não for selecionado algum equipamento, a área das variáveis mostra a mensagem **No Object Selected**. A mensagem **Results outdated** significa que os valores mostrados para as variáveis podem não estar atualizados, pois há mudanças no diagrama desde a última vez que a simulação foi resolvida ou esta ainda não foi resolvida nenhuma vez. Logo após resolvida a simulação e enquanto não houverem mudanças nas especificações ou equipamentos, a mensagem é **Results Available**.

2.3.6 Vista satélite

A vista satélite serve como uma reprodução em escala pequena do diagrama. Se mostra muito útil quando o diagrama tem vários equipamentos, permitindo uma visão geral do diagrama. Também oferece uma maneira simples de navegar através do diagrama, bastando clicar sobre a localização desejada ou arrastar o quadro respectivo à visão da página central.

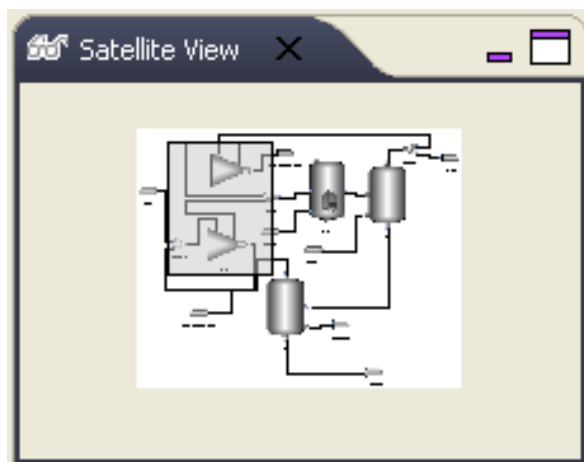


Figura 2.11: Visão geral de um diagrama com a vista satélite.

2.3.7 Barra de mensagens

A barra de mensagens mostra o estado corrente do diagrama de simulação. As mensagens mostradas são as seguintes:

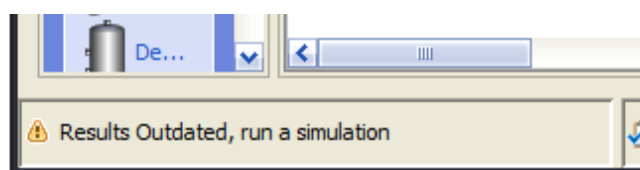


Figura 2.12: Barra de mensagens da interface.

Ao iniciar a construção de um diagrama, é apresentada a mensagem

- **Diagram is Empty.** Esta mensagem aparece ao se criar um projeto novo ou quando se remove todos os equipamentos de um diagrama.
- **Add/remove specs to close the DF.** Esta mensagem aparece logo ao se inserir algum equipamento no diagrama. A mensagem permanece enquanto se monta o diagrama, inserindo equipamentos e especificações, até que o número de graus de liberdade global seja zero. Mais detalhes sobre graus de liberdade na Seção 3.1 e na Seção 3.6.
- **Results Outdated, run a simulation.** Uma vez fechados os graus de liberdade do diagrama, a simulação pode ser executada. A mesma mensagem é mostrada quando se altera algum equipamento ou especificação de um diagrama já simulado. A mensagem indica que os valores atualmente

presentes na tabela de variáveis ou reportados precisam ser atualizados rodando uma simulação.

- **Results available.** Os valores mostrados na tabela de variáveis e nas reportagens está atualizado. Esta reportagem sempre aparece logo após que uma simulação tenha sido resolvida com sucesso.

2.3.8 Barra de status

A barra de status do simulador sempre mostra o balanço de graus de liberdade global, indicando o número de variáveis total no diagrama e o número de graus de liberdade. Em geral, na medida em que se adicionam novos equipamentos no diagrama, aumentamos o número de graus de liberdade global.

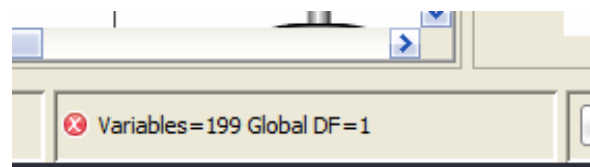


Figura 2.13: Balanço de graus de liberdade global.

2.3.9 Barra de andamento

A barra de andamento tem por finalidade permitir o acompanhamento pelo usuário da resolução da simulação. Diagramas com poucos equipamentos podem ser resolvidos quase que instantaneamente, mas, na medida que a complexidade do diagrama aumenta, a simulação toma mais tempo para ser resolvida.

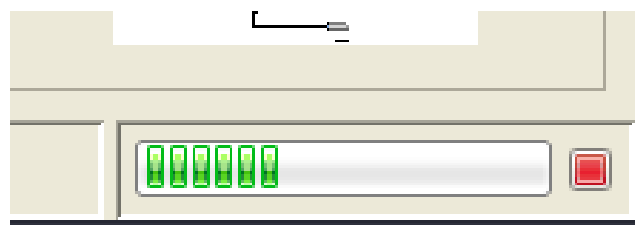


Figura 2.14: Barra de andamento durante a resolução da simulação.

Os métodos numéricos de resolução da simulação dividem o problema global do diagrama em subproblemas menores, na medida do possível, e o progresso da barra dá ao usuário uma idéia do andamento da resolução da simulação.

Cabe ressaltar que simulações simples podem ser resolvidas tão rapidamente que o usuário nem percebe o progresso na barra de andamento.

2.4 Atalhos de teclado

Para tornar tarefas usuais mais ágeis, o usuário dispõe dos seguintes atalhos de teclado:

Ação	Atalho
Salvar projeto atual	ctrl + S
Rodar a simulação	ctrl + R
Cancelar a simulação	ctrl + bckspc
Fechar o ISE	alt + F4

Tabela 2.1: Atalhos de teclado.

3 Criação de diagramas e simulação

Neste capítulo são abordados os conceitos necessários para o pleno entendimento do funcionamento do ISE: graus de liberdade, resolução orientada à equações e redundância. Em paralelo, são mostrados os procedimentos para a criação de diagramas, apresentando as entidades envolvidas, e para a resolução da simulação e visualização dos resultados.

Sumário

3.1	Graus de liberdade de uma simulação	21
3.2	Resolução orientada a equações	22
3.3	Visão geral sobre os equipamentos	23
3.4	Conectando equipamentos	24
3.5	Especificando variáveis	26
3.6	Fechando os graus de liberdade	28
3.7	Resolvendo a simulação	32
3.8	Visualizando os Resultados	33

Seguindo o que foi discutido até o capítulo anterior, o usuário já iniciou o simulador, abriu algum exemplo pronto, criou um novo projeto e reconheceu todas as áreas da interface gráfica do simulador.

Uma breve descrição de como se adicionam equipamentos ao diagrama já foi dada na Seção 2.3 mas o procedimento será retomado aqui, indo mais além na configuração do diagrama de simulação.

Cabe lembrar também que o ISE funciona com a tecnologia de resolução orientada a equações. Cada modelo de equipamento presente nas bibliotecas contém variáveis e equações, relacionando elas. Assim, a cada instância de equipamento que adicionamos ao diagrama de simulação, adicionamos mais variáveis e equações ao problema global. Ao resolver a simulação, o ISE monta sistemas de equações envolvendo os modelos dos equipamentos presentes no diagrama, conforme as correntes materiais e de energia interligam eles. Estes sistemas são então resolvidos, desde que os graus de liberdade estejam fechados.

3.1 Graus de liberdade de uma simulação

Até então, sempre salientamos que os graus de liberdade de uma simulação devem ser fechados para que seja possível resolver a simulação, mas não entramos no mérito de definir este conceito.

De maneira qualitativa, podemos dizer que os graus de liberdade de uma simulação são uma medida das possibilidades que o sistema tem para resolver o problema. Naturalmente, como estamos buscando uma solução única para o problema, precisamos fazer com que o número de graus de liberdade seja nulo.

Matematicamente, graus de liberdade de um sistema de equações são definidos em função do número de variáveis envolvidas, do número de equações relacionando elas, do número de parâmetros e do número de especificações, da seguinte forma:

Cada equipamento da biblioteca possui equações e variáveis. Na medida que estes são inseridos no diagrama, são adicionadas as respectivas equações e variáveis ao sistema de equações global, alterando o balanço de graus de liberdade global.

$$GL = N_{Var} - N_{eqs} - N_{par} - N_{spec} \quad (3.1)$$

Onde:

GL : Graus de liberdade

N_{Var} : Número de Variáveis

N_{eqs} : Número de Equações

N_{Par} : Número de Parâmetros

N_{Spec} : Número de Especificações

No caso do ISE, cada modelo já faz a distinção entre variáveis, parâmetros e especificações intrínsecas. Temos assim a seguinte simplificação:

$$GL = N_{Var} - N_{eqs} \quad (3.2)$$

Esta é a informação mostrada na barra de status, como visto na Seção 2.3.

Cada equipamento presente nas bibliotecas contém suas próprias variáveis, equações e, conforme a definição anterior, seus próprios graus de liberdade. O usuário deve buscar fechar estes graus de liberdade locais, mas também é possível que um equipamento ainda tenha graus de liberdade quando outros equipamentos relacionados estejam superespecificados (com graus de liberdade negativos).

Porém, para garantir a convergência da simulação, deve haver uma relação de dependência entre as variáveis dos diferentes equipamentos, como por exemplo as condições de operação de um equipamento e o calor de uma corrente de energia que entra nesse equipamento. Mais detalhes sobre as especificações nos equipamentos serão tratadas nas respectivas seções do Capítulo 4.

3.2 Resolução orientada a equações

Como vimos, o ISE monta um sistemas de equações a partir dos modelos dos equipamentos presentes no diagrama. Desta forma, em geral, o processo de resolução da simulação pode ser um procedimento numérico ou analítico de resolução de um sistema de equações lineares ou não-lineares. No caso do ISE, estão implementados métodos que resolvem numericamente um sistema de equações algébrico não-linear, ou NLA (*non-linear algebraic system of equations*):

$$\begin{cases} F(x_n) = 0 \\ \text{sujeito a} \\ Limite_{inferior} \geq x_n \geq Limite_{superior} \end{cases} \quad (3.3)$$

Esta é a caracterização da tecnologia de resolução orientada a equações. Ela traz muitas vantagens frente à tecnologia clássica (sequencial-modular), presente na maioria dos simuladores comerciais. Nestes, o método de resolução é dependente de quais as especificações utilizadas, o que limita as opções para o usuário final. Além disso, também é menos versátil quando se busca construir diagramas com grande integração energética e ciclos de correntes mássicas.

3.3 Visão geral sobre os equipamentos

O ISE provém os mais distintos equipamentos em suas bibliotecas, porém todos eles tem algumas características em comum que permitem que estes interajam.

Basicamente, todo equipamento contém um modelo matemático (isto é, variáveis e equações) e portas de entrada e/ou de saída. As portas podem ser do tipo material e energéticas. As portas se caracterizam no diagrama por pequenos quadrados azuis na borda dos equipamentos. As portas de entrada são quadrados azuis sem marcas e as portas de saída são quadrados azuis com um ponto escuro no centro.

A Figura 3.1 mostra uma instância de um compressor. Note que ele tem 2 entradas e uma saída.

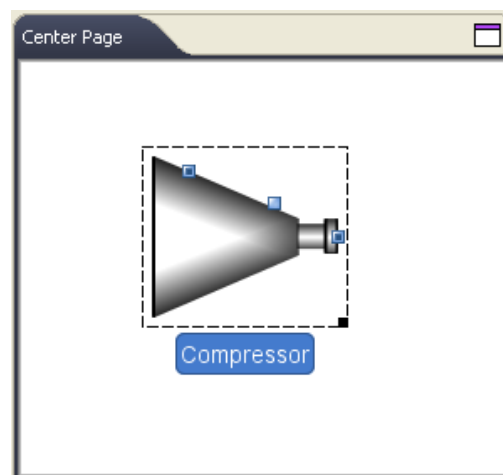
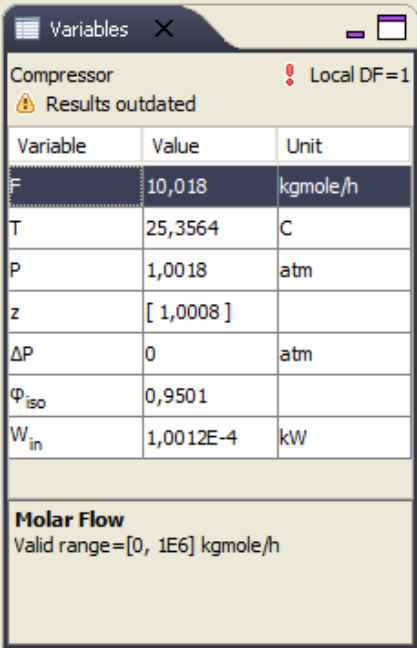


Figura 3.1: Uma instância de compressor.

Selecionando um equipamento presente no diagrama, a área de variáveis irá apresentar uma tabela com as variáveis do respectivo modelo, incluindo os seus valores atuais e unidades. Clicando sobre uma linha, temos abaixo da tabela uma descrição da variável e os limites nos quais ela é válida. No canto superior direito temos a indicação dos graus de liberdade locais do equipamento.

Um tipo especial de equipamentos são as fontes e sumidouros. Estes servem para se definir as correntes de entrada e saída do diagrama de simulação. Estes equipamentos contém apenas uma porta e apenas as variáveis necessárias para descrever as correntes materiais ou energéticas. As fontes contém apenas uma porta de saída e contém especificações (uma especificação para portas de energia, três para portas materiais), ou seja, adicionam graus de liberdade ao problema total. Os sumidouros contém apenas uma



Variable	Value	Unit
F	10,018	kgmole/h
T	25,3564	C
P	1,0018	atm
z	[1,0008]	
ΔP	0	atm
φ_{iso}	0,9501	
W_{in}	1,0012E-4	kW

Molar Flow
Valid range=[0, 1E6] kgmole/h

Figura 3.2: Variáveis do modelo de turbina.

porta de entrada e nenhum grau de liberdade, de forma que a sua adição ao diagrama não altera o problema. Para exemplificar, a Figura 3.3 mostra uma fonte conectada a uma saída.

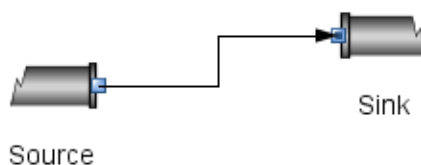


Figura 3.3: Fonte e sumidouro.

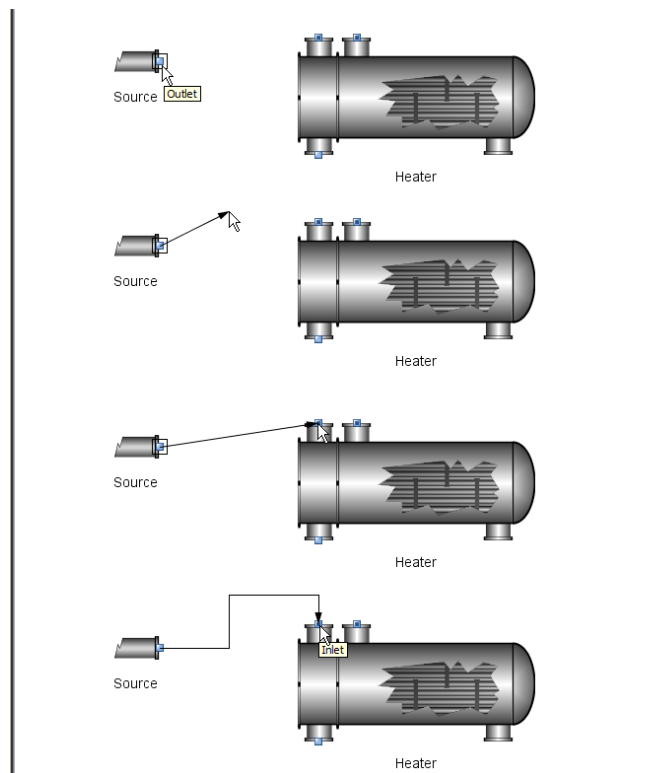
Os detalhes específicos sobre cada equipamento serão apresentados no Capítulo 4.

3.4 Conectando equipamentos

Apenas é possível conectar portas materiais de equipamentos de uma mesma biblioteca, porém é possível conectar portas de energia livremente entre os equipamentos, possibilitando estudos de integração energética.

Para conectar equipamentos presentes no diagrama de simulação, basta clicar com o botão direito do mouse sobre a porta de saída de um deles e carregar até a porta de entrada do outro, como visto na Figura 3.4. É criada então uma corrente, cuja rota entre as duas portas é calculada automaticamente, visando o desvio dos outros elementos presentes no diagrama. Ainda assim, é possível mover as quebras da linha, uma vez selecionada a corrente.

Figura 3.4: Conectando uma porta de saída (de uma fonte) a uma entrada (de um trocador de calor).



Atenção: O ISE não permite a conexão de correntes entre portas que não são compatíveis.



Dica: Enquanto carregando a conexão de uma corrente com o mouse, o cursores ignora portas incompatíveis e "se agarra" a portas do mesmo tipo.

3.5 Especificando variáveis

Como vimos na Seção 3.1, cada equipamento adicionado ao diagrama contribui com variáveis e equações para o problema global e, para viabilizar a resolução deste problema, é necessário especificar exatamente um certo número de variáveis: o número de graus de liberdade globais.

Especificar variáveis significa fixar os seus valores. Ou seja, o ISE vai utilizar destes valores fixados pelo usuário para calcular as demais variáveis. Em geral, os graus de liberdade locais dos equipamentos correspondem às suas condições de operação, são características do processo conhecidas de ante-mão. Completando o número de graus de liberdade global, temos as condições das alimentações do processo (vazão, temperatura, pressão, composição), que também geralmente são conhecidas quando definimos um problema de simulação.

Para especificar uma variável de um equipamento, basta:

- selecionar o equipamento;
- localizar a variável na tabela da área de variáveis;
- verificar a unidade desejada para a variável a especificar;
- clicar sobre o valor da variável, na tabela da área de variáveis;
- digitar o valor da especificação;
- confirmar digitando *Enter*.

Após especificada a variável, o seu valor fica destacado em azul. O processo de especificação pode ser visualizado na Figura 3.5. É importante ressaltar que os valores especificados às variáveis devem estar dentro da faixa de validade das mesmas, que é sempre mostrada na descrição da variável, abaixo da tabela das variáveis.



Dica: O ISE efetua a conversão de unidades automaticamente. Basta clicar sobre a unidade atual e selecionar outra na lista.

Algumas variáveis, como a composição de uma corrente material, são vetoriais. Nestes casos, ao clicar sobre o valor a célula da tabela que contem os valores da composição, é aberta uma nova janela listando os componentes, como na Figura 3.6. Basta então entrar com os valores na tabela, sabendo que a composição é normalizada em base 1.

Figura 3.5: Especificando a condição de temperatura em um vaso de flash.

Variable	Value	Unit
Q_{in}	0	kW
T	25,2425	C
P	1,0019	atm
L	10,0138	kgmole/h
V	10,0125	kgmole/h
Φ_v	0,5002	
P_{ratio}	1,0013	
ΔP	0	atm

Variable	Value	Unit
Q_{in}	0	kW
T	25,2425	C
P	1,0019	atm
L	10,0138	kgmole/h
V	10,0125	kgmole/h
Φ_v	0,5002	
P_{ratio}	1,0013	
ΔP	0	atm

Variable	Value	Unit
Q_{in}	0	kW
T	30	C
P	1,0019	atm
L	10,0138	kgmole/h
V	10,0125	kgmole/h
Φ_v	0,5002	
P_{ratio}	1,0013	
ΔP	0	atm

Temperature
Valid range=[-250, 2000] C

Figura 3.6: Especificando a composição molar z de uma corrente contendo 6 componentes.

Variable	Value	Unit
F	100	kgmole/h
F_w	9775,092	kg/h
F_{vol}	13,3633	m^3/h
T	160	C
P	330	kPa
h	-14051,6427	J/gmole
Φ_v	0	
z	Edit...	
w	[0,1598 0,1885 0,2172 ...	
M	67,7500	g/gmole

Index	Value
BENZENE	0.2
TOLUENE	0.2
ETHYLBENZENE	0.2
P-XYLENE	0.2
O-XYLENE	0.2



Em desenvolvimento: Em breve, será implementada a normalização automática da composição, de forma que o usuário não precise mais se preocupar com este detalhe.

3.6 Fechando os graus de liberdade

A resolução orientada a equações permite uma grande flexibilidade na construção de diagramas com grande integração mássica e/ou energética.

Outro conceito importante que o usuário deve estar ciente é o de **redundância**. Como vimos neste capítulo até aqui, o simulador ISE funciona através da construção de sistema de equações envolvendo as variáveis e equações dos diversos modelos disponíveis nas bibliotecas. Porém, cabe ao usuário a responsabilidade de fazer especificações corretas, fechando os graus de liberdade.

Geralmente (e obrigatoriamente, em simuladores não orientados a equações), as variáveis que são especificadas são condições de operação dos equipamentos e as correntes de alimentação do diagrama. Porém, em processos complexos, outros perfis de especificações podem ser necessários, e neste caso o usuário deve tomar algum cuidado ao buscar fechar os graus de liberdade, para que não cometa alguma redundância na especificação das variáveis.



Atenção: Redundâncias ocorrerão sempre que uma variável que já pode ser calculada a partir das especificações existentes for também especificada.

Para exemplificar, vamos mostrar um exemplo de um diagrama simples, mas que contém integração mássica e energética, na Figura 3.7.

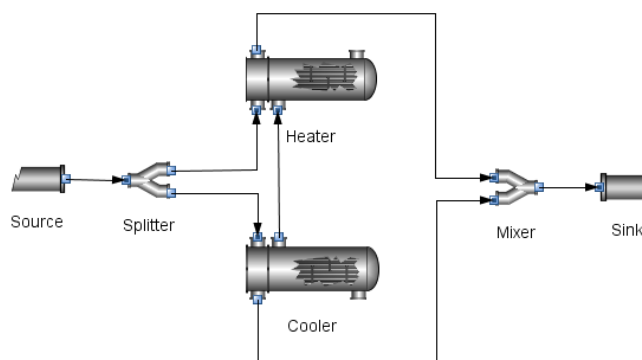


Figura 3.7: Exemplo para estudo de redundância.

Neste caso temos uma alimentação material que se divide em duas. Cada parcela passa por um caminho diferente no diagrama, uma passando por resfriador e a outra passando por um aquecedor. Após estes processos intermediários, as duas correntes voltam a se encontrar. Além disso, há a integração energética entre os dois processos térmicos: o calor utilizado no aquecedor é o calor removido no resfriador — a corrente que liga o resfriador ao aquecedor é uma corrente energética.

Ao montar um diagrama de simulação como este, podemos perceber que o número de graus de liberdade locais são:

- $3 + N$ na alimentação.
- 1 no divisor;
- 1 no aquecedor;
- 2 no resfriador;
- 0 no misturador;
- 0 no sumidouro.

Ou seja, são $7 + N$ graus de liberdade globais, onde N é o número de componentes considerados na simulação.

A princípio podemos listar as variáveis que são mais indicadas a serem especificadas nesta simulação:

- Na alimentação, especificar a condição da corrente, ou seja, sua vazão, temperatura, pressão e a composição dos N componentes da simulação.
- No divisor, há um grau de liberdade, relativo à fração de divisão da corrente que entra, então se especificaria uma das vazões de saída.
- No aquecedor é necessário informar apenas uma condição de operação, como a temperatura ou a pressão, uma vez que a informação do calor adicionado provém de uma porta de energia.
- No resfriador é necessário informar duas condições de operação, dentre temperatura, pressão e calor removido.
- No misturador e no sumidouro não existem graus de liberdade.

A redundância de um diagrama deve ser evitada quando estamos tratando de uma pura simulação.

Porém, a mesma ainda pode ser necessária em outros tipos de problemas, como o de reconciliação de dados, no qual buscamos minimizar a discrepância entre os valores especificados.

Apesar destas indicações de variáveis a especificar, o usuário é livre para inserir especificações no diagrama, não ficando preso aos graus de liberdade locais de cada equipamento. Isto significa que, neste exemplo, o usuário poderia manter o resfriador com graus de liberdade e superespecificar o aquecedor, uma vez que as condições de saída dos dois equipamentos estão relacionadas pela corrente de energia entre elas.

Porém o usuário deve ser coerente nas especificações. Neste exemplo, fazendo uma análise sobre o balanço de massa do diagrama, fica claro que a vazão através do aquecedor e a vazão através do resfriador estão amarradas pela vazão da alimentação,

da seguinte forma:

$$F_{aquecedor} + F_{resfriador} = F_{alimentacao}$$

Ou seja, não podemos especificar as três vazões, mas sim apenas duas delas. Ao especificarmos as três, poderemos estar cometendo uma discrepância e esta é chamada de **redundância**.

O mesmo raciocínio pode ser feito com o balanço de energia no processo. A quantidade de calor nos dois processos está amarrada da seguinte forma:

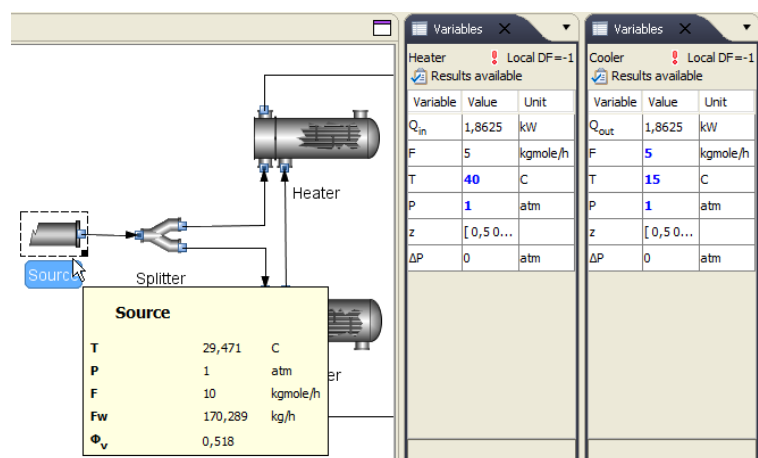
$$Q_{aquecedor} = -Q_{resfriador}$$

Ou seja, para uma condição fixa de vazões, não poderemos fixar totalmente as condições de operação de ambos equipamentos. Se especificarmos a condição de entrada e saída de ambos os equipamentos, eles provavelmente demandarão diferentes quantidades de calor e o balanço de energia não será satisfeito, caracterizando outra situação de **redundância**.

O método de resolução orientada a equações garante ao usuário uma grande liberdade de *quais* variáveis serão especificadas e *quais* serão calculadas. Porém é importante a atenção do usuário quanto as relações de dependência entre as variáveis do processo para evitar a redundância.

Ainda assim, o exemplo mostrado na Figura 3.7, com suas integrações mássica e energética, oferece um grande leque de possibilidades de especificações. Por exemplo, é possível superespecificar o aquecedor e o resfriador, fixando temperatura e pressão das correntes de saída de ambos equipamentos. Porém, neste caso, o número de graus de liberdade global se torna negativo, o que significa que alguma outra variável do processo deve deixar de ser especificada. Duas candidatas são a vazão que passa através do resfriador e a temperatura da corrente de alimentação.

Figura 3.8: Alterando as especificações no diagrama do exemplo.



Para ilustrar, na Figura 3.8 temos ambos aquecedor e resfriador superespecificados, resultando em -2 graus de liberdade.

Note que um destes graus de liberdade negativos se refere à vazão de entrada do resfriador, que é um resultado do modelo matemático do divisor. Portanto, não especificamos a fração de divisão no divisor. Ao invés disso, estamos especificando através do resfriador como $5 \text{ kgmol}/h$. Como a vazão da alimentação também é especificada, em $10 \text{ kgmol}/h$, estamos impondo que a fração de divisão seja 50%.

O outro grau de liberdade é devido à inserção de mais de uma condição de operação dos equipamentos térmicos e, para atingir esta superespecificação, deixamos livre a temperatura da alimentação. Esta foi calculada pelo ISE como sendo 29,5, como mostrado no *tooltip* sobre o diagrama.

O mesmo exercício poderia ser feito mantendo a temperatura da corrente de alimentação e deixando de especificar uma das vazões. Neste caso, o ISE nos calcularia a vazão sobre cada um dos equipamentos térmicos. Note que, se quiséssemos especificar a temperatura da alimentação (ou a fração de divisão no divisor, como sugerido agora) mantendo a superespecificação do processo, estaríamos cometendo redundância.

O exemplo apresentado aqui ainda é simples, mas, na medida que o diagrama aumenta, aumentam as possibilidades de se cometer a redundância de especificações. Diagramas com diversas integrações mássicas e energéticas podem estar redundantes em alguma região, enquanto que em outra ainda não estejam completamente especificados. Neste caso é possível que o número de graus de liberdade global seja nulo, porém a simulação não poderá ser resolvida. O ISE apresentará uma mensagem dizendo que a simulação não pode ser resolvida para todas as variáveis.

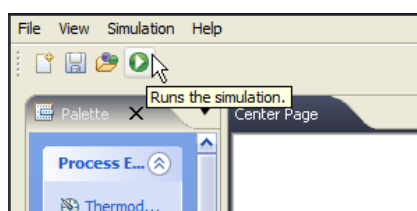


Dica: Uma maneira sistemática de se evitar problemas com a redundância em diagramas grandes é inserir especificações na medida que se adicionam novos equipamentos, tentando manter os graus de liberdade globais fechados e resolvendo a simulação sempre que possível. Depois que se tem um diagrama grande com os graus de liberdade fechados e sem redundância, é mais fácil inserir integrações mássicas e energéticas sem problemas.

3.7 Resolvendo a simulação

Uma vez que o diagrama de processo esteja com todos os graus de liberdade fechados, a barra de mensagens deve mostrar a mensagem "**Results Outdated, run a simulation**". Isto significa que o diagrama está pronto para ser simulado. Para isso, basta clicar no botão **Run** (Figura 3.9) ou na opção **Run** do menu **Simulation**.

Figura 3.9: Iniciando a resolução da simulação.



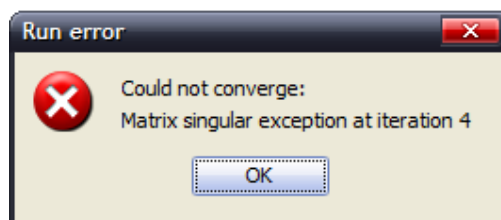
O progresso da resolução da simulação é mostrado na barra de andamento, no canto inferior direito da interface gráfica do ISE.

Figura 3.10: Barra de andamento durante a resolução da simulação.



Em situações que a convergência da simulação não é alcançada, o ISE apresenta uma mensagem de erro como a mostrada na Figura 3.11.

Figura 3.11: Um erro numérico na resolução da simulação.



Em desenvolvimento: Como o ISE ainda se encontra em desenvolvimento, podem ocorrer erros durante a simulação. Neste caso, sugere-se ao usuário que contate a VRTech a fim de informar o problema observado.

3.8 Visualizando os Resultados

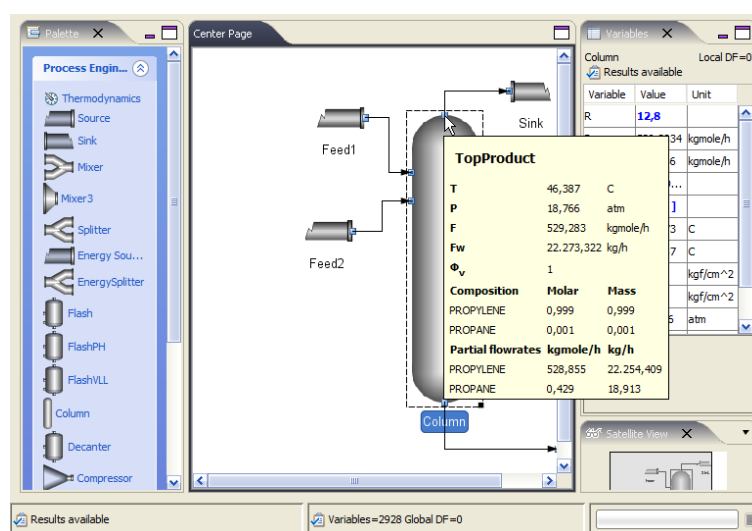
No seu estado atual de desenvolvimento, o ISE provém as seguintes maneiras para acompanhar os resultados:

- Na área *Variables*, são atualizados os valores das variáveis que não foram especificadas;
- *Tooltips* sobre qualquer porta de saída de um equipamento mostra o estado da corrente associada.
- *Reports* particulares de cada equipamento (ainda não implementado para todos os equipamentos).

Após executada uma simulação, é mostrada a mensagem "**Results Available**", o que significa que todos os valores mostrados na tabela de variáveis, ao selecionar um equipamento, são resultados da simulação do diagrama.

Outra forma para se acompanhar os resultados da simulação é através das *tooltips* sobre as portas dos equipamentos e as correntes, como visto na Figura 3.12.

Figura 3.12: Visualização dos resultados do produto de topo de uma coluna de despropenização.



Para a obtenção de resultados mais detalhados, há a opção de exibir um **report**, que pode conter resultados internos do equipamento, como a conversão de um reator, os perfis de temperatura, pressão e composição de uma coluna de separação, a carga térmica de um refeedor, etc. Um exemplo de *report* para uma coluna de destilação é mostrado na Figura 3.13.

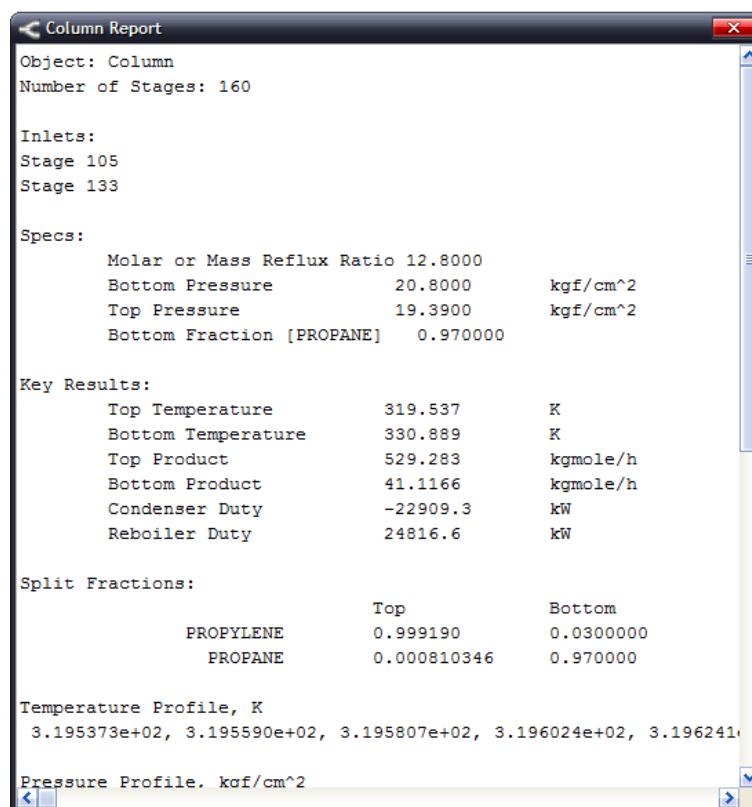


Figura 3.13: Resultados detalhados de uma coluna de despropanização.



Em desenvolvimento: A implementação dos *reports* dos equipamentos ainda está sendo desenvolvida. Mais funcionalidades (melhor apresentação, gráficos) ainda serão adicionadas. Além disso, ainda não são todos os equipamentos que contêm esta funcionalidade.



Em desenvolvimento: Também planeja-se desenvolver outras formas de visualização de resultados, até a versão final do ISE.

4 Bibliotecas de processos

Neste capítulo entraremos em detalhes acerca das bibliotecas disponíveis no ISE. Cada biblioteca oferece um conjunto de equipamentos que podem ser usados para construir diagramas de simulação, além de configurações específicas.

Atualmente, temos disponíveis duas bibliotecas: a biblioteca de água e vapor e a biblioteca de engenharia de processos.

Sumário

4.1	Biblioteca de água e vapor	37
4.2	Biblioteca de engenharia de processos	49

As bibliotecas são escolhidas pelo usuário ao criar um projeto novo, como visto na Seção 2.2.

O usuário pode utilizar uma ou mais bibliotecas em um projeto, porém as correntes materiais conectadas a equipamentos de uma biblioteca somente serão compatíveis com equipamentos da mesma biblioteca. As correntes de energia, por outro lado, podem ser ligadas entre equipamentos de quaisquer biblioteca, permitindo a integração energética entre diferentes processos.

Por exemplo, o usuário não pode conectar uma corrente de vapor d'água, proveniente de uma turbina da biblioteca de água e vapor, diretamente a uma entrada de um trocador de calor da biblioteca de engenharia de processos, pois a corrente é de um tipo diferente da porta de entrada. Em compensação, correntes de energia são compatíveis entre as bibliotecas, de forma que o usuário pode ligar uma corrente de energia, da saída de calor de um condensar da biblioteca de água e vapor, a uma porta de entrada de calor de um aquecedor da biblioteca de engenharia de processos.



Atenção: Ao realizar a integração energética de um diagrama de simulação, tenha em mente que esta é uma aplicação do primeiro princípio da termodinâmica. Este diz que energia pode ser encontrada na forma de calor e trabalho (entre outras) e estas podem ser livremente convertidas entre si. Porém, o segundo princípio da termodinâmica nos impõe limitações práticas, como por exemplo, que não é possível converter totalmente calor em trabalho.

Diagramas inspirados em processos reais irão sempre obedecer o segundo princípio da termodinâmica, mas o usuário deve estar ciente disto ao experimentar diferentes integrações em um diagrama de simulação.

Neste capítulo são listados os equipamentos presentes em cada biblioteca até então. Cada equipamento caracteriza-se por um modelo matemático que contém variáveis e equações. A diferença entre o número de variáveis do modelo e o número de equações é o número de *graus de liberdade locais*, como definido na Seção 3.1.

Fontes e sumidouros também são listados juntos aos equipamentos, pois da mesma forma adicionam variáveis ao diagrama e também se encontram na paleta de cada biblioteca.

4.1 Biblioteca de água e vapor

A biblioteca de água e vapor (*Water Steam Library*) oferece modelos dos principais equipamentos dos processos de geração de energia envolvendo o uso de vapor d'água. Estes equipamentos são encontrados na paleta, como na Figura 4.1.

Os cálculos termodinâmicos das propriedades da água e do vapor são baseados nos dados do *International Association for the Properties of Water and Steam* (IAPWS).

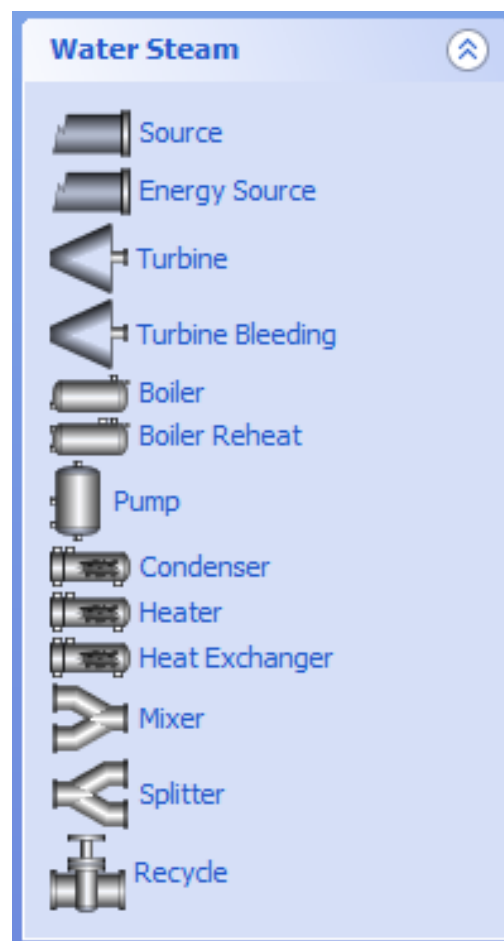


Figura 4.1: Paleta de equipamentos da biblioteca de água e vapor.

4.1.1 Corrente material de água e vapor

As correntes materiais que passam através dos equipamentos da biblioteca de água e vapor são caracterizadas por 5 variáveis:

- Vazão mássica [kg/s];
- Temperatura [$^{\circ}C$];
- Pressão [Pa];

- Massa específica [kg/m^3];
- Vazão volumétrica [m^3/s].

Estas variáveis estão amarradas pelas correlações termodinâmicas de forma que, ao se especificar uma corrente, basta ao usuário entrar com o valor de três delas.

A corrente pode ser líquida, vapor ou uma mistura de ambos, mas o usuário não precisa se preocupar com isso. Esta informação está amarrada ao banco de dados termodinâmico.

4.1.2 Corrente energética

As correntes energéticas são mais simples que as correntes materiais pois carregam apenas uma informação:

- Potência (ou taxa de energia) [MW];

Note que esta corrente carrega a informação de energia, que pode ser tanto calor quanto trabalho. Ao conectar equipamentos, é importante estar ciente do significado da conexão: se os equipamentos trocam calor, trabalho, ou se há a conversão de trabalho em calor ou de calor em trabalho. As conversões entre diferentes formas de energia nunca é totalmente eficaz.

4.1.3 Equipamentos

Estão presentes na biblioteca de água e vapor os equipamentos detalhados a seguir.

Source

Figura 4.2: Ícone de fonte da biblioteca de água e vapor.



Source

Este modelo representa uma fonte de água ou vapor. Ele contém apenas uma porta de saída de corrente material, cujas propriedades devem ser especificadas pelo usuário. Contem uma porta de saída, **Outlet**.

O modelo contém 5 variáveis e 3 graus de liberdade locais. Geralmente são especificadas uma das vazões, a temperatura e a pressão. Note que não faria sentido especificar as duas vazões e a massa específica, pois possivelmente estaríamos comentendo alguma redundância, além destas variáveis não serem independentes.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
F	Vazão mássica	0	10000	kg/s
T	Temperatura	0	1300	$^{\circ}C$
P	Pressão	$5 \cdot 10^{-4}$	20	MPa
Rho	Massa específica	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^6$	kg/m^3
$Fvol$	Vazão volumétrica	0	10000	m^3/s

Tabela 4.1: Variáveis do modelo **Source**.

Energy Source

Figura 4.3: Ícone de fonte de energia da biblioteca de água e vapor.



Energy Source

Este equipamento representa uma fonte de energia, ou seja, a adição de calor ou trabalho a um equipamento. Contem uma porta de saída, **Outlet**.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
$Outlet$	Potência	-500	500	MW

Tabela 4.2: Variáveis do modelo **Energy Source**.

Este modelo contém apenas uma variável e um grau de liberdade local. Significa que temos que especificar o valor da taxa de energia adicionada pela fonte, ou deixá-la em aberto se o equipamento ao qual esta fonte está conectada esteja superespecificado.

Esta fonte serve tanto como uma fonte de trabalho como uma fonte de calor. Para processos que operam adiabaticamente, se especifica o valor da taxa de energia adicionada como 0.

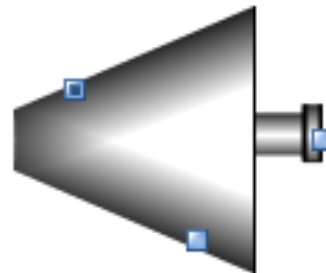
Turbine

Este equipamento representa uma turbina de vapor, equipamento comumente usado para a geração de energia em ciclos de vapor.

Portas de entrada:

- **Inlet:** Corrente material de alimentação de vapor.

Portas de saída:



Turbine

Figura 4.4: Ícone de turbina da biblioteca de água e vapor.

- **Outlet:** Corrente material de descarga de vapor.
- W_{out} : Trabalho de eixo gerado na turbina.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
F	Vazão mássica	0	10000	kg/s
T	Temperatura	0	1300	$^{\circ}C$
P	Pressão	$5 \cdot 10^{-4}$	20	MPa
ϕ_{iso}	Eficiência isoentrópica	0	1	
W_{out}	Trabalho de eixo da turbina	-500	500	MW

Tabela 4.3: Variáveis do modelo **Turbine**.

Nele, geralmente é alimentada uma corrente de vapor a uma alta pressão e descarregado vapor nas condições de operação da turbina, uma pressão menor. A perda de energia da corrente de vapor é transformada em trabalho de eixo, com uma eficiência dada pela variável ϕ_{iso} .

O modelo matemático contém 2 graus de liberdade locais. Geralmente são especificadas a pressão de descarga e a eficiência da conversão energética.

Turbine Bleeding

Este modelo representa uma turbina de vapor com sangria, ou seja, uma turbina em que ocorre a condensação de parte da corrente de vapor.

Portas de entrada:

- **Inlet:** corrente material de alimentação de vapor.

Portas de saída:

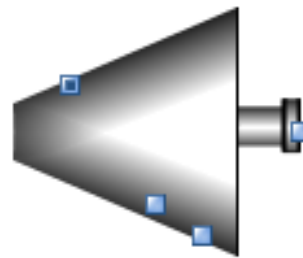


Figura 4.5: Ícone de turbina com sangria da biblioteca de água e vapor.

Turbine Bleeding

- **Outlet:** Corrente material de descarga de vapor.
- **Bleeding:** Sangria.
- W_{out} : Trabalho de eixo gerado na turbina.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
F	Vazão mássica	0	10000	kg/s
T	Temperatura	0	1300	$^{\circ}C$
P	Pressão	$5 \cdot 10^{-4}$	20	MPa
eff	Eficiência isoentrópica	0	1	
$bleedingFrac$	Fração mássica de sangria	0	1	
W_{out}	Trabalho de eixo da turbina	-500	500	MW

Tabela 4.4: Variáveis do modelo **Turbine Bleeding**.

Como em uma turbina simples, geralmente é alimentada uma corrente de vapor a uma alta pressão e descarregado vapor nas condições de operação da turbina, uma pressão menor. Este equipamento também considera a condensação de uma parte da corrente de vapor, chamada de sangria. A parcela condensada sai pela respectiva porta de sangramento. A perda de energia da corrente de vapor é transformada em trabalho de eixo, com uma eficiência dada pela variável eff .

Este modelo contém 3 graus de liberdade, sendo geralmente especificadas a pressão de descarga, a eficiência energética e a fração de sangria na turbina.

Boiler

Este equipamento representa uma caldeira de vapor, geralmente utilizada em ciclos térmicos de vapor para a obtenção de vapor em

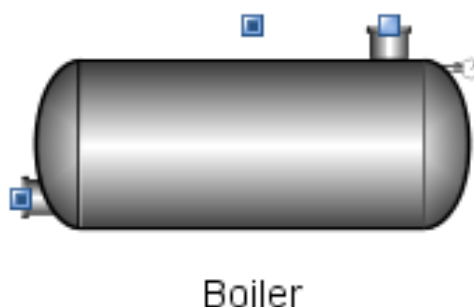


Figura 4.6: Ícone de caldeira da biblioteca de água e vapor.

altas pressões mediante a adição de calor.

Portas de entrada:

- **Inlet:** Corrente material de água ou vapor.
- **Q :** Corrente energética, calor adicionado à caldeira.

Porta de saída:

- **Outlet:** Corrente material de vapor.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
Q	Carga térmica da caldeira			MW
P	Pressão	$5 \cdot 10^{-4}$	20	MPa
T	Temperatura	0	1300	$^{\circ}C$

Tabela 4.5: Variáveis do modelo **Boiler**.

A caldeira geralmente opera a uma pressão fixa, sendo alimentado água líquida e descarregando vapor supersaturado numa pressão mais alta.

O modelo matemático tem 1 grau de liberdade. Geralmente se especifica a pressão de operação da caldeira, mas uma especificação da temperatura também (fazendo um número de graus de liberdade locais de -1) poderia permitir o cálculo da carga térmica proveniente de uma fonte de energia, por exemplo.

Boiler Reheat

Este equipamento representa uma caldeira de vapor com 2 estágios de aquecimento, fornecendo vapor em duas pressões diferentes. A alimentação principal é, em geral, líquido numa alta pressão e o vapor gerado na maior pressão de operação pode ser

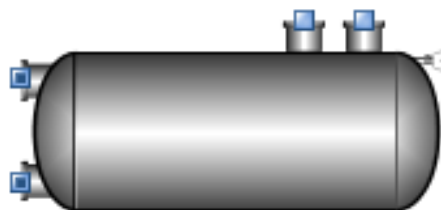


Figura 4.7: Ícone de caldeira com reaquecimento da biblioteca de água e vapor.

Boiler Reheat

utilizado em demais processos e então retornar à caldeira para um reaquecimento, voltando ao processo numa pressão intermediária.

Portas de entrada:

- **Inlet:** Corrente material de água ou vapor que alimenta a caldeira.
- **InletReheat:** Corrente material de alimentação do estágio de reaquecimento.

Portas de saída:

- **Outlet:** Corrente material para a descarga de vapor na pressão de operação da caldeira.
- **OutletReheat:** Corrente material de saída para o estágio de reaquecimento.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
Q	Carga térmica total	-500	500	MW
Qh	Carga térmica na caldeira	-500	500	MW
$Qh0$	Carga térmica no reaquecimento	-500	500	MW
$OutletF$	Vazão mássica da descarga	0	10000	kg/s
$OutletT$	Temperatura da descarga	0	1300	$^{\circ}C$
$OutletP$	Pressão da descarga	$5 \cdot 10^{-4}$	20	MPa
$OutletT0$	Vazão mássica para o reaquecimento	0	10000	kg/s
$ReheatedT$	Temperatura de reaquecimento	0	1300	$^{\circ}C$
$ReheatedP$	Pressão de reaquecimento	$5 \cdot 10^{-4}$	20	MPa

Tabela 4.6: Variáveis do modelo **Boiler Reheat**.

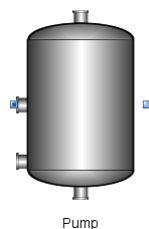
A corrente de líquido que é alimentada na primeira entrada da caldeira é aquecida até virar vapor superaquecido na pressão de operação mais alta. Após passar por um ciclo primário de geração térmica, é realimentado na entrada secundária da caldeira,

gerando vapor numa pressão intermediária. Esta corrente então pode ser utilizada em um ciclo térmico secundário e retorna à caldeira pela primeira alimentação, fechando o ciclo dos dois estágios.

O modelo matemático tem 4 graus de liberdade. Especificando temperatura e pressão de ambos os estágios, o modelo calcula as cargas térmicas parciais e a carga térmica total. A vazão da corrente de reaquecimento geralmente é calculada ou especificada de acordo com as necessidades dos processos que utilizam esta corrente.

Pump

Figura 4.8: Ícone provisório de uma bomba da biblioteca de água e vapor.



Este equipamento representa uma bomba, que adiciona energia mecânica a uma corrente material aumentando a sua pressão.

Porta de entrada:

- **Inlet:** Alimentação de corrente material.

Porta de saída:

- **Outlet:** Descarga de corrente material com maior pressão.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
eff	Eficiência	0	10000	kg/s
ρ	Massa específica	$1 \cdot 10^{-3}$	$1 \cdot 10^6$	kg/m^3
F	Vazão mássica	0	10000	kg/s
P	Pressão	$5 \cdot 10^{-4}$	20	MPa
T	Temperatura	0	1300	$^{\circ}C$
h_{is}	Entalpia isoentrópica	0	5300	kJ/kg
Pot	Potência mecânica	-500	500	MW

Tabela 4.7: Variáveis do modelo **Pump**.

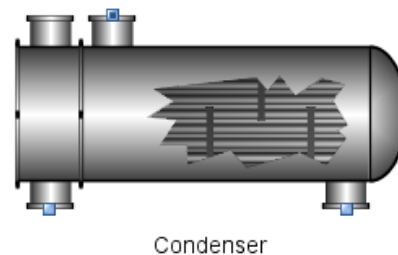
A alimentação da bomba geralmente é uma corrente de água líquida. O modelo considera uma elevação da entalpia da corrente

de maneira isoentrópica (máxima), e uma variável de eficiência eff que considera o desvio da idealidade.

O modelo matemático tem 2 graus de liberdade. Geralmente se especifica a pressão de descarga ou a potência mecânica e a eficiência da bomba.

Condenser

Figura 4.9: Ícone de condensador da biblioteca de água e vapor.



Condenser

Este equipamento representa um condensador total, que é alimentado por uma corrente de vapor e descarrega uma corrente líquida mediante a remoção de calor.

Portas de entrada:

- **Inlet:** Alimentação de uma corrente material de vapor.

Portas de saída:

- **Outlet:** Descarga de uma corrente material líquida.
- **Q:** Calor removido da corrente de entrada.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
T	Temperatura	0	1300	$^{\circ}\text{C}$
P	Pressão	$5 \cdot 10^{-4}$	20	MPa
h	Entalpia	0	5300	kJ/kg
Q	Calor removido	-500	500	MW3
T_{sat}	Temperatura de saturação	0	1300	
ΔT_{sub}	Grau de subresfriamento	-200	200	

Tabela 4.8: Variáveis do modelo **Condenser**.

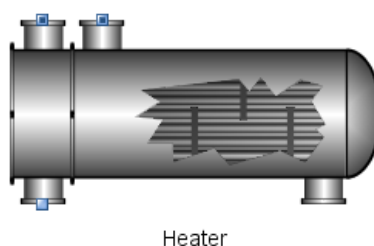
A alimentação geralmente é composta de vapor. No condensador é removido calor até que se condense o vapor, podendo atingir condições subresfriadas.

O modelo contém apenas um grau de liberdade uma vez que na condição de equilíbrio líquido-vapor de substâncias puras T

e P são dependentes. É possível especificar qualquer variável aqui, mas em geral é recomendado especificar uma temperatura, no máximo igual à temperatura da alimentação do vapor, ou o próprio grau de subresfriamento, definido como a diferença de temperatura entre a temperatura do líquido e o ponto de bolha da água na dada pressão. As especificar a pressão ou o calor removido é necessário cuidado para que haja a condensação total ($\Delta T_{sub} \geq 0$).

Heater

Figura 4.10: Ícone de aquecedor da biblioteca de água e vapor.



Este equipamento corresponde a um aquecedor no qual uma corrente material é aquecida através da adição de calor por uma corrente energética. Este equipamento pode atuar também como um resfriador se o calor adicionado for negativo.

Portas de entrada:

- **Inlet:** Entrada da corrente material a ser aquecida.
- **Q:** Entrada de calor.

Portas de saída:

- **Outlet:** Saída da corrente material resfriada.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
Q	Calor adicionado			MW
F	Vazão mássica	0	10000	kg/s
T	Temperatura	0	1300	$^{\circ}C$
P	Pressão	$5 \cdot 10^{-4}$	20	MPa

Tabela 4.9: Variáveis do modelo **Heater**.

Este modelo pode ser usado em qualquer processo no qual se adiciona (ou remove) um calor de uma corrente material de água ou vapor.

Ele tem 1 grau de liberdade, que corresponde a uma condição de operação, temperatura ou pressão, além da alimentação de calor através da respectiva porta. Se a alimentação não for especificada, é possível especificar as duas condições de operação no aquecedor.

Mixer

Figura 4.11: Ícone de misturador da biblioteca de água e vapor.



Este equipamento representa um simples misturador, que tem por finalidade transformar duas correntes materiais em uma só, sem considerar equilíbrio termodinâmico, apenas efeitos de diluição.

Portas de entrada:

- **Inlet:** Primeira alimentação de corrente material.
- **Inlet2:** Segunda alimentação de corrente material.

Portas de saída:

- **Outlet:** Corrente material resultante da junção das alimentações.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
F	Vazão mássica	0	10000	kg/s
T	Temperatura	0	1300	$^{\circ}C$
P	Pressão	$5 \cdot 10^{-4}$	20	MPa

Tabela 4.10: Variáveis do modelo **Mixer**.

Este equipamento pode ser usado em qualquer processo. Se deve ter em mente que ele não considera cálculo de equilíbrio, porém o mesmo pode ser associado a um vaso de flash, por exemplo.

Ele não tem nenhum grau de liberdade.

Splitter

Este equipamento representa um simples divisor de correntes materiais. É utilizado quando uma corrente material se divide em duas correntes de mesmo estado.

Figura 4.12: Ícone de divisor de corrente da biblioteca de água e vapor.



Splitter

Portas de entrada:

- **Inlet:** Corrente material.

Portas de saída:

- **Outlet1:** Primeira saída de corrente material dividida.
- **Outlet2:** Segunda saída da corrente material dividida.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
ϕ_1	Fração de divisão para a primeira saída	0	1	
F_1	Vazão mássica na primeira saída	0	10000	kg/s
F_2	Vazão mássica na segunda saída	0	10000	kg/s
T	Temperatura	0	1300	$^{\circ}C$
P	Pressão	$5 \cdot 10^{-4}$	20	MPa
F_{vol}	Vazão volumétrica	0	10000	m^3/s

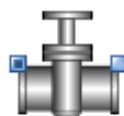
Tabela 4.11: Variáveis do modelo **Splitter**.

Este equipamento pode ser usado para qualquer corrente material que se deseje dividir em duas, para passar por diferentes processos ou para reciclo.

O modelo contém um grau de liberdade. É necessário especificar a fração de divisão da corrente material, ou alguma das vazões. Também é possível deixar este modelo não especificado, superespecificando um processo seguinte para que o mesmo demande uma vazão calculada.

Recycle

Figura 4.13: Ícone de reciclo da biblioteca de água e vapor.



Recycle

Este equipamento serve para se determinar uma corrente material de refluxo, agindo como um sistema de controle de vazão.

Portas de entrada:

- **Inlet:** Entrada da corrente material.

Portas de saída:

- **Outlet:** Saída da corrente material.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
F	Vazão mássica	0	10000	kg/s
T	Temperatura	0	1300	$^{\circ}C$
P	Pressão	$5 \cdot 10^{-4}$	20	MPa

Tabela 4.12: Variáveis do modelo **Recycle**.

Este equipamento deve ser utilizado em linhas de reciclo, para se determinar a vazão que passa através deste.

O modelo adiciona 1 grau de liberdade ao diagrama, de forma que se faz necessária a especificação da vazão através dele, ou a superespecificação num equipamento posterior que resulte numa demanda de vazão.

4.2 Biblioteca de engenharia de processos

A biblioteca de engenharia de processos (*Process Engineering Library*) oferece modelos de vários equipamentos de processos industriais, baseados em rigorosos cálculos termodinâmicos. Estes equipamentos são encontrados na paleta, como na Figura 4.14.

O usuário pode escolher os componentes químicos utilizados na simulação a partir de um banco de dados com mais de 1200 componentes. Para cada um destes, estão disponíveis os parâmetros necessários para a predição de propriedades termodinâmicas de diversas equações de estado, além das mais modernas regras de mistura. Além disso, existem várias correlações para a predição de propriedades físicas.

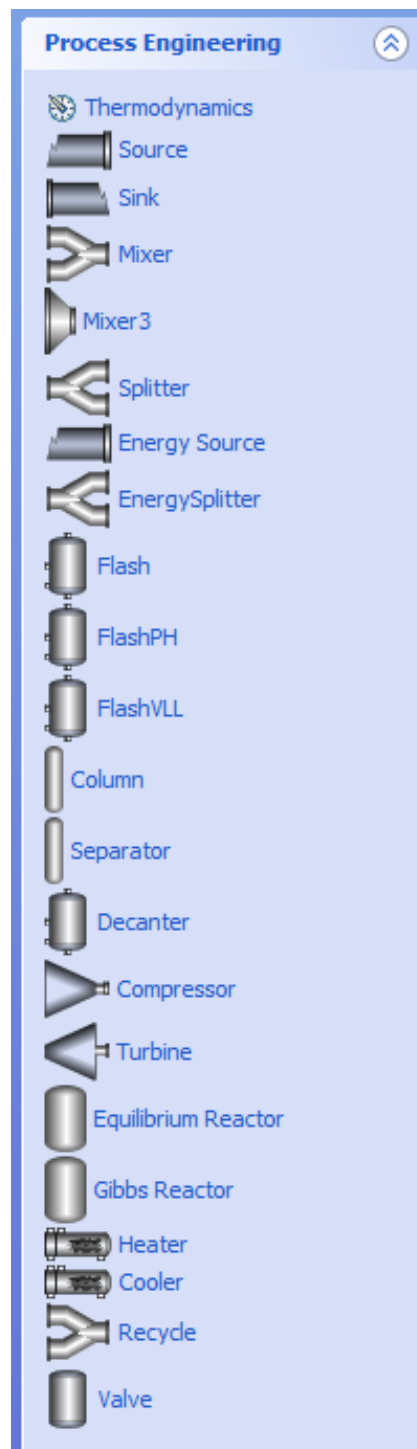


Figura 4.14: Paleta de equipamentos da biblioteca de engenharia de processos.

4.2.1 Corrente material

As correntes materiais que passam através dos equipamentos da biblioteca de engenharia de processos se caracterizam por uma mistura de todos os componentes selecionados do banco de dados. Esta mistura pode estar em estado líquido, gasoso ou uma mistura de ambos. No caso de uma mistura de ambos, as propriedades globais dependerão da combinação das propriedades de cada fase.

- Vazão molar [$kgmol/s$];
- Temperatura [K];
- Pressão [Pa];
- Entalpia [$kJ/kgmol$];
- Fração de vapor na mistura;
- Composição global;
- Composição da fase líquida;
- Composição da fase vapor;
- Volume molar global [$m^3/gmol$];

Estas variáveis estão amarradas pela termodinâmica de forma que, ao se especificar uma corrente, basta ao usuário entrar com o valor de três delas (vazão molar, temperatura e pressão) e mais a composição global de $N - 1$ componentes, onde N é o número de componentes considerados. Mas note que estas especificações são geralmente feitas nos equipamentos, ao especificar fontes de alimentação e condições de operação de equipamentos.

Desta forma, uma vez rodada a simulação, é sempre possível consultar os valores das variáveis de uma corrente para obter diretamente estes resultados, como por exemplo, as informações a respeito da composição de fases da corrente.

4.2.2 Corrente energética

As correntes energéticas são mais simples que as correntes materiais pois carregam apenas uma informação, da mesma forma que nos equipamentos da biblioteca de água e vapor:

- Potência (ou taxa de energia) [MW];

Note que esta corrente carrega a informação de energia, que pode ser tanto calor quanto trabalho. Ao conectar equipamentos, é importante estar ciente do significado da conexão: se os equipamentos trocam calor, trabalho, ou se há a conversão de trabalho

em calor ou de calor em trabalho. As conversões entre diferentes formas de energia nunca é totalmente eficaz.

4.2.3 Equipamentos

Estão presentes na biblioteca de engenharia de processos os equipamentos detalhados a seguir.

Source

Figura 4.15: Ícone de fonte de corrente material da biblioteca de engenharia de processos.



Source

Este equipamento corresponde a uma fonte de alimentação de corrente material.

Este modelo contém apenas uma porta de saída.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
F	Vazão molar	0	10000	$kgmol/h$
F_W	Vazão mássica	0	10000	kg/h
F_{vol}	Vazão mássica	0	10000	m^3/h
T	Temperatura	-250	2000	$^{\circ}C$
P	Pressão	0,01	600	atm
h	Entalpia	$-1 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-7}$	$kJ/kgmol$
ϕ_V	Fração de vapor	$-1 \cdot 10^{-5}$	1	
z	Composição molar	0	1	
w	Composição mássica	0	1	
M_W	peso molecular médio	0	$1 \cdot 10^{10}$	$g/gmol$

Tabela 4.13: Variáveis do modelo **Mixer**.

Em geral as propriedades desta fonte são conhecidas no problema a ser simulado, mas o ISE permite que, superespecificando o diagrama, se calcule as condições da alimentação.

O modelo possui $3 + N$ graus de liberdade, onde N é o número de componentes considerados na simulação. Para se especificar uma alimentação, é necessário entrar com uma vazão, temperatura, pressão e a composição dos N componentes. Fechados

estes graus de liberdade locais, o ISE calcula o equilíbrio termodinâmico da mistura. As variáveis h e M_W são protegidas para especificação, pois o seu cálculo é.

Sink

Figura 4.16: Ícone de um sumidouro de corrente material.



Sink

Este equipamento se refere a um sumidouro de corrente material. Contém apenas uma entrada.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
F	Vazão molar	0	10000	$kgmol/h$
F_W	Vazão mássica	0	10000	kg/h
T	Temperatura	-250	2000	$^{\circ}C$
P	Pressão	0,01	600	atm
h	Entalpia	$-1 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^{-7}$	$kJ/kgmol$
ϕ_V	Fração de vapor	$-1 \cdot 10^{-5}$	1	
w	Composição mássica	0	1	
M_W	peso molecular médio	0	$1 \cdot 10^{10}$	$g/gmol$

Tabela 4.14: Variáveis do modelo **Mixer**.

Permite que sejam conectadas a si as saídas do diagrama de processo.

Este modelo não contém nenhum grau de liberdade, mas permite que sejam especificadas variáveis finais de um processo, se houverem ainda graus de liberdade presentes no diagrama de processos.

Mixer

Figura 4.17: Ícone de misturador de engenharia de processos.



Mixer

Este equipamento se refere a um simples misturador de correntes materiais, sem considerar nenhum equilíbrio termodinâmico, apenas o efeito de diluição entre as correntes.

Portas de entrada:

- **Inlet 1:** Primeira entrada de corrente material.
- **Inlet 2:** Segunda entrada de corrente material.

Portas de saída:

- **Outlet:** Corrente material resultante.

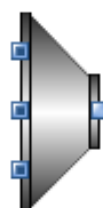
Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
F	Vazão molar	0	10000	$kgmol/h$
T	Temperatura	-250	2000	$^{\circ}C$
P	Pressão	0,01	600	atm

Tabela 4.15: Variáveis do modelo **Mixer**.

Este equipamento pode ser utilizado em qualquer situação que duas correntes se unam, ou se deseja alimentar duas correntes a um mesmo equipamento. Ele não considera nenhum equilíbrio termodinâmico entre as correntes, porém o mesmo pode ser associado a um flash em sequência, por exemplo.

Este equipamento não contém graus de liberdade.

Mixer3



Mixer3

Figura 4.18: Ícone de misturador de 3 entradas.

Este equipamento é um simples misturador de correntes, utilizado para unir 3 correntes em uma só. Não há nenhum cálculo de equilíbrio termodinâmico, apenas o efeito de diluição entre as correntes.

Portas de entrada:

- **Inlet 1:** Primeira entrada de corrente material.
- **Inlet 2:** Segunda entrada de corrente material.
- **Inlet 3:** Terceira entrada de corrente material.

Portas de saída:

- **Outlet:** Corrente material resultante.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
F	Vazão molar	0	10000	$kgmol/h$
T	Temperatura	-250	2000	$^{\circ}C$
P	Pressão	0,01	600	atm

Tabela 4.16: Variáveis do modelo **Mixer3**.

Este equipamento é análogo ao misturador simples, apenas com uma entrada a mais.

Não contém graus de liberdade.

Splitter

Figura 4.19: Ícone de um divisor de corrente material.



Este equipamento é referente a um divisor de corrente material, que resulta em duas correntes materiais de estado igual ao da alimentação.

Portas de entrada:

- **Inlet1:** Alimentação de corrente material a ser separada.

Portas de saída:

- **Outlet1:** Primeira saída de corrente material.
- **Outlet2:** Segunda saída de corrente material.

Este equipamento pode ser utilizado sempre que uma corrente material se dividir em duas regiões diferentes do diagrama de processo, ou quando uma parcela da corrente material retorna por reciclo.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
T	Temperatura	-250	2000	°C
P	Pressão	0,01	600	atm
ϕ_1	Fração na primeira saída	-10^{-5}	1	
F_1	Vazão molar na primeira saída	0	10^6	kgmol/h
F_2	Vazão molar na segunda saída	0	10^6	kgmol/h
F_{w1}	Vazão mássica na primeira saída	0	10^6	kgmol/h
F_{w2}	Vazão mássica na segunda saída	0	10^6	kgmol/h
M_w	Peso molecular médio	0	10^{10}	kgmol/h

Tabela 4.17: Variáveis do modelo **Splitter**.

O modelo contém 1 grau de liberdade, de forma que é necessário especificar uma das vazões de saída do divisor ou a fração de divisão.

Energy Source

Figura 4.20: Ícone de uma fonte de energia de engenharia de processos.



Energy Source

Este equipamento se refere a uma fonte de calor ou de trabalho. Este equipamento contém apenas uma porta de saída.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
Q_{out}	Potência	$-1 \cdot 10^8$	$1 \cdot 10^8$	kW

Tabela 4.18: Variáveis do modelo **Energy Source**.

Este modelo contém apenas uma variável e um grau de liberdade, a taxa de energia (potência).

Se é desejado calcular a quantidade de energia necessária em um processo, este deve ser superespecificado, deixando este modelo com 1 grau de liberdade. Para caracterizar processos que requerem uma alimentação de calor como adiabáticos, basta especificar a alimentação de energia como 0.

EnergySplitter

Este equipamento representa um divisor de corrente de energia.

Figura 4.21: Ícone de um separador de corrente de energia.



Portas de entrada:

- **Inlet1:** Corrente de energia a ser dividida.

Portas de saída:

- **W1:** Corrente de energia.
- **W2:** Corrente de energia.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
$Inlet1$	Potência			kW
W_1	Potência	$-1 \cdot 10^8$	$1 \cdot 10^8$	kW
W_2	Potência	$-1 \cdot 10^8$	$1 \cdot 10^8$	kW
ϕ_1	fração na primeira saída	$-1 \cdot 10^{-5}$	1	
ϕ_2	fração na segunda saída	$-1 \cdot 10^{-5}$	1	

Tabela 4.19: Variáveis do modelo **Energy Splitter**.

Este equipamento pode ser utilizado sempre que se deseja alimentar o calor proveniente de alguma fonte ou equipamento a mais de um equipamento. Porém, é importante que seja respeitada a primeira lei da termodinâmica e a natureza da energia da corrente de energia original seja mantida nas correntes resultantes.

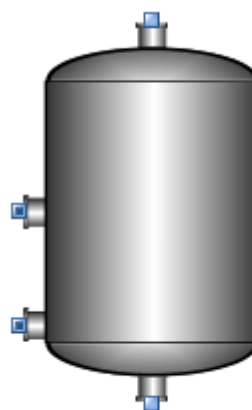
Este modelo contém um grau de liberdade, sendo necessário especificar alguma das correntes energéticas ou a fração de divisão. Ainda, pode-se manter este grau de liberdade em aberto e se superespecificar um equipamento que é alimentado pelas correntes resultantes, a fim de calcular a respectiva demanda de calor.

Flash

Este equipamento se refere a um vaso de equilíbrio termodinâmico, ou seja, um vaso de *Flash*.

Portas de entrada:

- **Inlet:** Alimentação de uma corrente material a ser separada.
- Q_{in} : Calor adicionado ao vaso de flash.



Flash

Figura 4.22: Ícone de um vaso de equilíbrio (*Flash*).

Portas de saída:

- **OutletV:** Saída de vapor proveniente do estado de equilíbrio.
- **OutletL:** Saída de líquido proveniente do estado de equilíbrio.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
Q_{in}	Entrada de calor	0	10000	kg/s
T	Temperatura	-250	2000	$^{\circ}C$
P	Pressão	0,01	600	atm
L	Vazão molar de líquido	0	10^6	$kgmole/h$
V	Vazão molar de vapor	0	10^6	$kgmole/h$
ϕ_V	Fração vaporizada	-10^{-5}	1	
P_{ratio}	Razão da queda de pressão em relação à pressão de alimentação.	0	10^{30}	atm
ΔP	Queda de pressão em relação à pressão de alimentação	0,01	600	atm

Tabela 4.20: Variáveis do modelo **Flash**.

Vasos de flash são utilizados como um estágio de separação, quando ocorre a formação de duas fases. Dadas as condições de temperatura e pressão alcançadas, são obtidas diferentes composições nas fases vapor e líquida.

Este modelo contém um grau de liberdade, além da porta de entrada de energia. Geralmente se especifica uma (ou duas, caso a alimentação de calor não esteja especificada) condição de opera-

ção do vaso. Para vasos operando adiabaticamente, se adiciona uma fonte de energia com a especificação $Q_{in} = 0$.

FlashPH



Figura 4.23: Ícone de um vaso de equilíbrio tipo PH.

Este equipamento se refere a um vaso de equilíbrio termodinâmico, cujas variáveis de entrada da rotina termodinâmica são a pressão e a entalpia da corrente de entrada.

Portas de entrada:

- **Inlet:** Alimentação de uma corrente material a ser separada.
- Q_{in} : Calor adicionado ao vaso de flash.

Portas de saída:

- **OutletV:** Saída de vapor proveniente do estado de equilíbrio.
- **OutletL:** Saída de líquido proveniente do estado de equilíbrio.

O modelo de vaso de flash especificando pressão e entalpia geralmente é utilizado quando se faz um balanço de energia em termos de entalpia, e não de temperatura.

Este modelo contém um grau de liberdade, além da porta de entrada de energia.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
$InletQ$	Entrada de calor	0	10000	kg/s
T	Temperatura	-250	2000	$^{\circ}C$
P	Pressão	0,01	600	atm
F	Vazão molar de líquido	0	$1 \cdot 10^6$	$kgmole/h$
$F0$	Vazão molar de vapor	0	$1 \cdot 10^6$	$kgmole/h$
v	Fração vaporizada	$-1 \cdot 10^{-5}$	1	
$Pratio$	Razão da queda de pressão em relação à pressão de alimentação.	0	$1 \cdot 10^{30}$	atm
$Pdrop$	Queda de pressão em relação à pressão de alimentação	0,01	600	atm
h	Entalpia	$-1 \cdot 10^{-7}$	$1 \cdot 10^7$	$kJ/kgmol$

Tabela 4.21: Variáveis do modelo FlashPH.

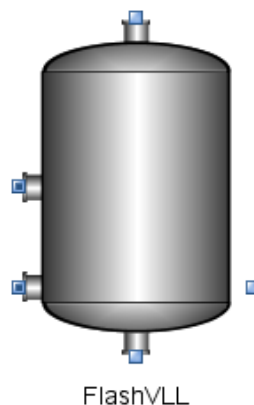


Figura 4.24: Ícone de um vaso de equilíbrio trifásico.

FlashVLL

Este equipamento representa um vaso de equilíbrio termodinâmico onde há a formação de 3 fases: 1 fase vapor e 2 fases líquidas.

Portas de entrada:

- **Inlet:** Alimentação de uma corrente material a ser separada.
- Q_{in} : Calor adicionado ao vaso de flash.

Portas de saída:

- **OutletV:** Saída de vapor proveniente do estado de equilíbrio.
- **OutletL:** Saída do líquido mais leve, proveniente do estado de equilíbrio.

- **OutletL2:** Saída do líquido mais pesado, proveniente do estado de equilíbrio.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
Q_{in}	Entrada de calor	0	10000	kg/s
T	Temperatura	-250	2000	°C
P	Pressão	0,01	600	atm
V	Vazão molar de vapor	0	$1 \cdot 10^6$	kgmol/h
L_1	Vazão molar do líquido mais leve	0	$1 \cdot 10^6$	kgmol/h
L_2	Vazão molar do líquido mais pesado	0	$1 \cdot 10^6$	kgmol/h
ϕ_V	Fração vaporizada	$-1 \cdot 10^{-5}$	1	
ϕ_{l1}	Fração de componentes leves no líquido leve	$-1 \cdot 10^{-5}$	1	
ϕ_{l2}	Fração de compentes leves no líquido pesado	$-1 \cdot 10^{-5}$	1	

Tabela 4.22: Variáveis do modelo **FlashVLL**.

Este equipamento pode ser utilizado quando, no estágio de equilíbrio, se formam duas fases líquidas.

Este modelo contém um grau de liberdade, além da porta de entrada de energia. Geralmente se especifica uma (ou duas, caso a alimentação de calor não esteja especificada) condição de operação do vaso. Para vasos operando adiabaticamente, se adiciona uma fonte de energia com a especificação $Q_{in} = 0$.

Column



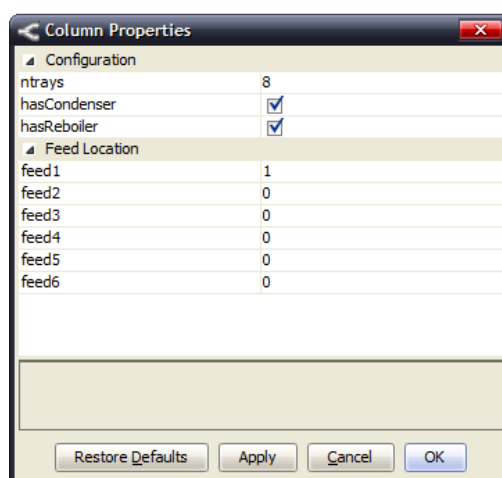
Figura 4.25: Ícone de uma coluna de separação.

O modelo de coluna de separação é composto por um número de estágios de equilíbrio e pode ser utilizado para colunas de pratos ou para colunas recheadas, uma vez conhecido o número de estágios teóricos.

Além disso o modelo ainda dá a opção de incorporar acessórios à coluna: um refeedor no fundo e um condensador no topo da coluna. Caracteriza-se assim uma coluna retificadora se essa tiver apenas um refeedor e uma coluna absorvedora se tiver apenas um condensador.

Ao adicionar uma instância de coluna de destilação ao diagrama, o usuário deve informar algumas informações: o número de estágios da coluna, as posições das alimentações e se ela tem incorporado um condensador e um refeedor. A janela de configuração é mostrada na Figura 4.26. O modelo atualmente contempla até 6 alimentações e estas são utilizadas de acordo com a especificação do estágio de localização pelo usuário: se a localização for 0, a alimentação é desconsiderada.

Figura 4.26: Configuração de uma instância de coluna de destilação.



Portas de entrada:

- F_i , onde i vai de 1 ao número especificado de alimentações.

Portas de saída:

- **TopProduct**: Retirada de topo da coluna.
- **BottomProduct**: Retirada de fundo da coluna.

O número de graus de liberdade do modelo de coluna é dependente do número de componentes da simulação e se a coluna contém refeedor e condensador. Cada um dos acessórios adiciona um grau de liberdade local, que se refere às condições de

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
R	Razão de refluxo, molar ou mássica	0	10^{30}	
D	Vazão molar do destilado	-250	2000	$kgmole/h$
B	Vazão molar do produto de fundo	0,01	600	$kgmole/h$
T_{top}	Temperatura do destilado	-250	2000	$^{\circ}C$
T_{bot}	Temperatura do fundo da coluna	-250	2000	$^{\circ}C$
P_{top}	Pressão no topo da coluna	0,01	600	atm
P_{bot}	Pressão no fundo da coluna	0,01	600	atm
ΔP_{tray}	Queda de pressão por estágio	-600	600	atm
Q_{cond}	Carga térmica no condensador	-10^8	10^8	kg/s
Q_{reb}	Carga térmica no refeedor	-10^8	10^8	kg/s
y	Composição molar do destilado	0	1	
x	Composição molar do produto de fundo	0	1	

Tabela 4.23: Variáveis do modelo **Column**, incluindo refeedor e condensador.

operação no fundo ou no topo da coluna. Além disso a coluna por si necessita mais 2 graus de liberdade, nos quais o usuário pode especificar a pureza de um ou dois componentes nas correntes de topo ou fundo, ou alguma outra variável de operação, como a razão de refluxo.

Separator



Separator

Figura 4.27: Ícone de um separador.

Modelo de um simples separador onde não se considera o equilíbrio termodinâmico na separação.

Portas de entrada:

- Inlet1:

Portas de saída:

- Outlet1:

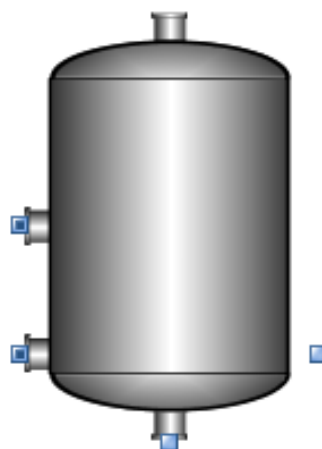
- Outlet2:

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
T	Temperatura	-250	2000	°C
P	Pressão	0,01	600	atm
ϕ_{i1}	Fração molar na outlet1	$-1 \cdot 10^{-5}$	1	
F_1	Vazão molar na Outlet1	0	$1 \cdot 10^6$	kgmol/h
F_2	Vazão molar na Outlet2	0	$1 \cdot 10^6$	kgmol/h
z_1	composição molar na Outlet1			
z_2	composição molar na Outlet1			
F_{w1}	Vazão mássica na Outlet1	0	$1 \cdot 10^6$	kg/h
F_{w2}	Vazão mássica na Outlet2	0	$1 \cdot 10^6$	kg/h

Tabela 4.24: Variáveis do modelo **Separator**.

O modelo contém N graus de liberdade, onde N é o número de componentes considerados na simulação. A fim de fechar os graus de liberdade locais, o usuário pode especificar as vazões de uma das retiradas ou composições das retiradas.

Decanter



Decanter

Figura 4.28: Ícone de um decantador.

Este equipamento representa um decantador onde duas fases líquidas são separadas conforme cálculos rigorosos de equilíbrio termodinâmico.

Portas de entrada:

- **Inlet**: Entrada material de uma corrente líquida.
- **InletQ**: Entrada de calor através de uma corrente de energia.

Portas de saída:

- **OutletL**: Saída de líquido, correspondente à fase mais leve.
- **OutletL2**: Saída de líquido, correspondente à fase mais pesada.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
$InletQ$	Entrada de calor			
T	Temperatura	-250	2000	°C
P	Pressão	0,01	600	atm
L_1	Vazão molar do líquido mais leve	0	10^6	kgmol/h
L_2	Vazão molar do líquido mais pesado	0	10^6	kgmol/h
ϕ_1	Fração de componentes leves no líquido leve	-10^{-5}	1	
ϕ_2	Fração de compentes leves no líquido pesado	-10^{-5}	1	

Tabela 4.25: Variáveis do modelo **Decanter**.

O modelo contém 1 grau de liberdade, além da entrada de calor pela respectiva porta. O usuário pode especificar uma condição de operação ou ainda a composição de um dos componentes em uma das fases líquidas formadas.

Compressor

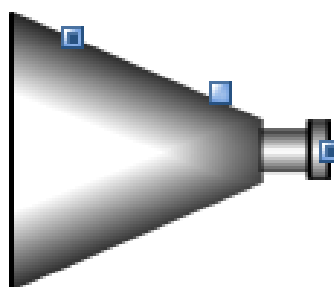
Este equipamento representa um compressor, que

Portas de entrada:

- **Inlet**: Entrada material de uma corrente gasosa de baixa pressão.
- W_{in} : Corrente energética de trabalho adicionada à turbina.

Portas de saída:

- **OutletV**: Saída de material de corrente gasosa de alta pressão.



Compressor

Figura 4.29: Ícone de um compressor de engenharia de processos.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
F	Vazão mássica	0	10000	kg/s
T	Temperatura	0	1300	$^{\circ}C$
P	Pressão	$5 \cdot 10^{-4}$	20	MPa
z	Composição molar			
ΔP	Ganho de pressão	0,01	600	atm
ϕ_{iso}	Eficiência isoentrópica	$-1 \cdot 10^{-5}$	1	
W_{in}	Carga de trabalho no compressor			kW

Tabela 4.26: Variáveis do modelo **Compressor**.

Nele, geralmente é alimentada uma corrente de vapor a uma dada pressão e descarregado vapor em uma condição de pressão maior. O ganho de energia da corrente de vapor é devido à carga de trabalho alimentada ao compressor, com uma eficiência dada pela variável ϕ_{iso} .

O modelo matemático contém 1 grau de liberdade locais. Geralmente, se especificar a eficiência isoentrópica ou a pressão de descarga, ou ambos se a entrada de energia não for especificada.

Turbine

Este equipamento representa uma turbina, onde é gerada energia a partir de uma corrente de vapor de alta pressão.

Portas de entrada:

- **Inlet:** Corrente material de alimentação de vapor de alta pressão.

Portas de saída:

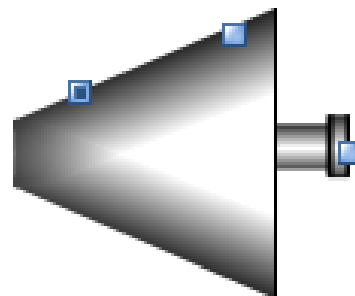


Figura 4.30: Ícone de uma turbina de engenharia de processos.

Turbine

- **OutletV:** Corrente material de descarga de vapor de menor pressão.
- W_{out} : Trabalho de eixo gerado na turbina.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
F	Vazão mássica	0	10000	kg/s
T	Temperatura	0	1300	$^{\circ}C$
P	Pressão	$5 \cdot 10^{-4}$	20	MPa
z	Composição molar			
ΔP	Ganho de pressão	0,01	600	atm
ϕ_{iso}	Eficiência isoentrópica	0	1	
W_{out}	Trabalho de eixo da turbina	-500	500	MW

Tabela 4.27: Variáveis do modelo **Turbine**.

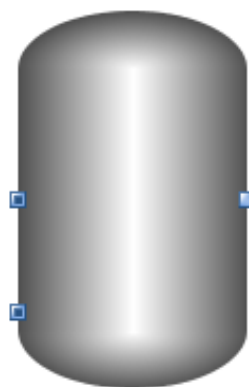
Neste equipamento, geralmente é alimentada uma corrente de vapor a uma alta pressão e descarregado vapor nas condições de operação da turbina, uma pressão menor. A perda de energia da corrente de vapor é transformada em trabalho de eixo, com uma eficiência dada pela variável ϕ_{iso} .

O modelo matemático contém 2 graus de liberdade locais. Geralmente são especificadas a pressão de descarga e a eficiência da conversão energética.

Equilibrium Reactor

Este equipamento representa um reator no qual a reação se dá conforme cálculos de equilíbrio termodinâmico.

Portas de entrada:



Equilibrium Reactor

Figura 4.31: Ícone de um reator de equilíbrio.

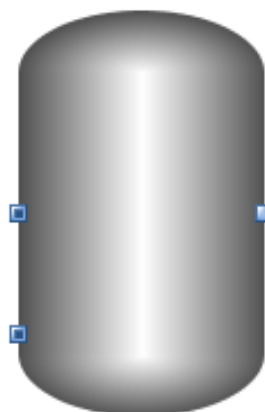
- **Inlet:** Alimentação material dos reagentes.
- **InletQ:** Entrada de calor no reator.

Portas de saída:

- **Outlet:** Saída material contendo o resultado da reação.

Este modelo contém $1 + N$ graus de liberdade, onde N é o número de componentes considerados na simulação.

Gibbs Reactor



Gibbs Reactor

Figura 4.32: Ícone de um reator do tipo Gibbs.

Este equipamento representa um reator onde a reação se dá pela minimização da energia livre Gibbs.

- **Inlet:** Alimentação material dos reagentes.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
$InletQ$	Entrada de calor			
$\Delta H_{0, reac}(T)$	Calor de reação na temperatura da reação	-10^7	10^7	$J/gmol$
F	Vazão molar	0	10^6	$kgmol/h$
T	Temperatura	-250	2000	$^{\circ}C$
P	Pressão	0,01	600	atm
z	Composição molar da corrente resultante			
ϕ	Coeficiente de fugacidade dos componentes na mistura			
v	Estequiometria da reação			
K	Constante de equilíbrio da reação	0	10^{30}	
$G_0(T)$	Energia livre de Gibbs de formação na condição de gás ideal		$J/gmol$	
$H_0(T)$	Entalpia de formação na condição de gás ideal		$J/gmol$	
ϵ	Grau de avanço da reação	$-3,6 \cdot 10^6$	10^6	$kgmol/h$

Tabela 4.28: Variáveis do modelo **Equilibrium Reactor**.

- **InletQ**: Entrada de calor no reator.

Portas de saída:

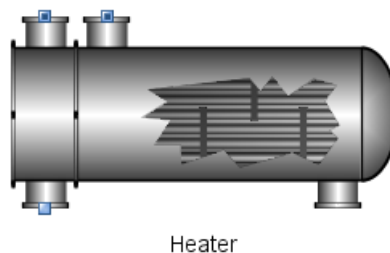
- **Outlet**: Saída material contendo o resultado da reação.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
Q_{in}	Entrada de calor			
ΔH_{rxn}	Calor de reação total na temperatura da reação	-10^8	10^8	kW
F	Vazão molar	0	10^6	$kgmol/h$
T	Temperatura	-250	2000	$^{\circ}C$
P	Pressão	0,01	600	atm
z	Composição molar da corrente resultante			

Tabela 4.29: Variáveis do modelo **Gibbs Reactor**.

Este modelo contém 1 grau de liberdade. Geralmente se especifica uma das condições de operação (temperatura e pressão), ou ambas se a alimentação energética não estiver especificada.

Figura 4.33: Ícone de um aquecedor de correntes materiais de engenharia de processos.



Heater

Este equipamento representa um aquecedor, onde uma corrente material é aquecida através da adição de calor proveniente de uma alimentação energética. Se o calor adicionado ao equipamento for negativo, o mesmo irá se comportar como um resfriador.

Portas de entrada:

- **Inlet:** Entrada de corrente material fria.
- Q_{in} : Entrada de calor.

Portas de saída:

- **Outlet:** Saída da corrente material aquecida.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
Q_{in}	Entrada de calor			
F	Vazão molar	0	$1 \cdot 10^6$	$kgmole/h$
T	Temperatura de saída	-250	2000	$^{\circ}C$
P	Pressão de saída	0,01	600	atm
z	Composição molar			
ΔP	Queda de pressão	-600	600	atm

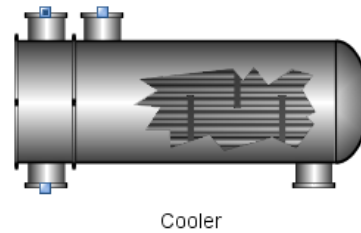
Tabela 4.30: Variáveis do modelo **Heater**.

Este modelo contém 1 grau de liberdade, além da porta de alimentação de calor. Em geral, se especifica alguma condição de operação, ou duas se a corrente de energia da entrada de calor não estiver especificada.

Cooler

Este equipamento representa um resfriador, onde uma corrente material é resfriada através da retirada de calor pela porta de

Figura 4.34: Ícone de um resfriador de correntes materiais de engenharia de processos.



Cooler

saída energética. O equipamento também pode se comportar como um aquecedor se o calor retirado for negativo.

Portas de entrada:

- **Inlet:** Entrada de corrente material quente.

Portas de saída:

- **Outlet:** Saída da corrente material resfriada.
- Q_{out} : Retirada de calor.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
Q_{out}	Calor retirado			
F	Vazão molar	0	$1 \cdot 10^6$	$kgmole/h$
T	Temperatura de saída	-250	2000	$^{\circ}C$
P	Pressão de saída	0,01	600	atm
z	Composição molar			
ΔP	Queda de pressão	-600	600	atm

Tabela 4.31: Variáveis do modelo **Cooler**.

Este modelo contém 2 graus de liberdade. Em geral, são especificadas as condições de operação e/ou o calor retirado.

Recycle

Figura 4.35: Ícone de um sistema de reciclo de engenharia de processos.



Recycle

Este equipamento é utilizado quando há alguma corrente de recirculação no diagrama.

Portas de entrada:

- **Inlet:**

Portas de saída:

- **Outlet:**

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
F	Vazão molar	0	10^6	$kgmole/h$
T	Temperatura de saída	-250	2000	$^{\circ}C$
P	Pressão de saída	0,01	600	atm
z	Composição molar			

Tabela 4.32: Variáveis do modelo **Recycle**.

Este modelo não contém graus de liberdade.

Valve

Figura 4.36: Ícone provisório para uma válvula engenharia de processos.



Valve

Este equipamento representa o modelo de uma válvula de processo.

Portas de entrada:

- **Inlet:**

Portas de saída:

- **Outlet:**

Este modelo contém 2 graus de liberdade.

Variável	Descrição	Lim Inf	Lim Sup	Unidade
P_{drop}	Queda de pressão na válvula	0,01	600	<i>atm</i>
P_{ratio}	Razão entre a pressão de descarga e a pressão de alimentação	-10^{-5}	1	
Q_v	Vazão volumétrica	0	10000	<i>kg/s</i>
f_c	Vazão mássica	0	10000	<i>kg/s</i>
cv	Coefficiente de descarga	0	1^{30}	
G_f	?	0	10^{30}	
ρ	Massa específica da corrente material	0	10000	<i>kg/m³</i>
ρ	Massa específica da corrente material	0	10000	<i>kg/m³</i>
x	Abertura da válvula	-10^{-5}	1	

Tabela 4.33: Variáveis do modelo Valve.

Índice Remissivo

- Atalhos de teclado, 19
- Atualizações do RecoVR, vi
- Biblioteca de água e vapor
 - Corrente de energia, 38
 - Corrente material, 37
 - Equipamentos, 38
 - Boiler, 41
 - Boiler Reheat, 42
 - Condenser, 45
 - Energy Source, 39
 - Heater, 46
 - Mixer, 47
 - Pump, 44
 - Recycle, 48
 - Source, 38
 - Splitter, 47
 - Turbine, 39
 - Turbine Bleeding, 40
- Biblioteca de Engenharia de Processos, 49
 - Corrente de energia, 51
 - Corrente material, 51
 - Equipamentos, 52
 - Column, 61
 - Compressor, 65
 - Cooler, 70
 - Decanter, 64
 - Energy Source, 56
 - Energy Splitter, 56
 - Equilibrium Reactor, 67
 - Flash, 57
 - FlashPH, 59
 - FlashVLL, 60
 - Gibbs Reactor, 68
 - Heater, 70
 - Mixer, 53
 - Mixer3, 54
 - Recycle, 71
 - Separator, 63
 - Sink, 53
 - Source, 52
 - Splitter, 55
 - Turbine, 66
 - Valve, 72
- Configurações
 - Componentes, 8
 - Termodinâmica, 8
- Diagrama
 - Conectando equipamentos, 25
 - Especificando variáveis, 26
 - Graus de liberdade, 28
 - Visualizando os resultados, 33
- Direitos autorais, iv
- Graus de liberdade, 21
 - Definição matemática, 21
- Instalação, 4
- Interface
 - Área das variáveis, 14
 - Barra de andamento, 17
 - Barra de mensagens, 16
 - Barra de Status, 17
 - Menus, 11
 - Página Central, 13
 - Paleta, 13
 - Vista Satélite, 15
- ISE
 - instalação, 4
 - Introdução, 2
 - Visão Geral, 10
- Projeto
 - Criando novo, 7
- RecoVR
 - direitos autorais, iv
 - Tecnologia, 2
- Redundância, 28
- Símbolos e Convenções, v
- Simulação

- Resolvendo a simulação, 32
- Visualizando os resultados, 33
- Suporte, vi

- Tecnologia, 2
 - Java, 3
 - Orientação a equações, 2
 - Termodinâmica, 2

- VRTech
 - suporte, vi