

## MODELAGEM EM LINGUAGEM PYTHON DE CICLONE E CALDEIRA PARA O SIMULADOR DE PROCESSOS DWSIM

Matheus Souza de Paulo (PIC/UEM), Oswaldo Curty da Motta Lima (Orientador).  
E-mail: ocmlima@uem.br.

Universidade Estadual de Maringá, Centro de Tecnologia, Maringá, PR.

**Engenharia Química / Operações industriais e Equipamentos para Engenharia Química**

**Palavras-chave:** Operações unitárias, Programação e DWSIM.

### RESUMO

A relevância das operações unitárias na engenharia química é enfatizada durante a formação acadêmica. Isso decorre da importância das etapas fundamentais nos processos industriais, que constituem essas operações. Portanto, é crucial que os estudantes que planejam uma carreira nesse campo compreendam essa área. Alguns softwares de simulação, como *Aspen Plus* e *Aspen Hysys*, oferecem ferramentas para calcular e analisar essas operações, auxiliando na compreensão do assunto. No entanto, essas ferramentas exigem investimentos consideráveis devido às suas licenças caras. Em contrapartida, o simulador DWSIM, uma alternativa de código aberto e gratuita, permite aos usuários criar scripts personalizados para conduzir operações, embora não ofereça a mesma amplitude de operações unitárias que outros programas. Este trabalho tem como foco apresentar os resultados da elaboração de scripts em *Python*, desenvolvidos para viabilizar operações de Ciclone e Caldeira no ambiente de simulação do software DWSIM.

### INTRODUÇÃO

A simulação desempenha um papel crucial na Engenharia Química, prevendo comportamentos e analisando dados antes da implementação de processos para evitar erros, reduzir custos e otimizar operações. Embora *Aspen Plus* e *Aspen HYSYS* sejam notáveis, seu alto custo limita o acesso. Nesse cenário, o DWSIM, simulador químico de código aberto compatível com CAPE-OPEN, ganha destaque acadêmico. Apesar de ter menos operações que softwares comerciais, o DWSIM usa Python Script para operações personalizadas.

Integrado ao projeto FOSSEE, o DWSIM promove software aberto em instituições educacionais e de pesquisa, facilitando o compartilhamento de modelos. Este trabalho expande o DWSIM com operações personalizadas, estimulando seu uso em ambientes educacionais e projetos.

Ciclones são amplamente usados para separar partículas de gases em processos industriais via força centrífuga. Operando em altas temperaturas e pressões, o gás com partículas entra no ciclone a 15-25 m/s, movendo-se em espiral. Partículas são impelidas à parede por força centrífuga, coletadas após serem aceleradas até 2500 vezes o peso.

Conforme a NR-13, caldeiras a vapor acumulam vapor sob pressão acima da atmosférica, convertendo energia térmica em vapor, frequentemente pela queima de combustíveis. Caldeiras podem ser flamatubulares ou aquatubulares, diferindo na disposição de produtos gasosos e água.

## MATERIAIS E MÉTODOS

Para o método de cálculo do código de dimensionamento do ciclone usou as equações expressas

$$D' = \sqrt{\frac{9 \cdot \mu \cdot B}{2 \cdot \pi \cdot N \cdot v \cdot (\rho_p - \rho)}} \quad (1) \quad N = \frac{1}{h} \left( L_b + \frac{L_c}{2} \right) \quad (2) \quad v = \frac{Q}{W \cdot H} \quad (3)$$

em que  $D'$  é o diâmetro do ciclone,  $B$  é a largura do duto de entrada,  $N$  é o número de voltas feitas pelo gás dentro do ciclone,  $v$  é a velocidade de entrada do gás,  $\mu$  é a viscosidade do gás,  $\rho$  e  $\rho_p$  são a massa específica do gás e da partícula,  $L_b$  e  $L_c$  são o comprimento do corpo e do cone,  $H$  é a altura do duto de entrada,  $Q$  é a vazão de entrada e  $W$  é largura do duto de entrada.

Para a caldeira foi utilizado o “Método Direto”, que consiste em determinar o rendimento do equipamento a partir de propriedades como condições do vapor (vazão e entalpia), entalpia da água, vazão de combustível e o poder calorífico do combustível (PCS). Conforme a equação a seguir:

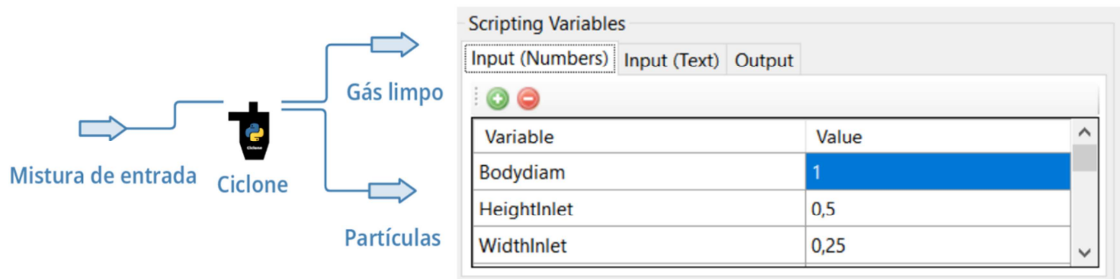
$$n = \frac{\text{vazão de vapor} \cdot (\text{entalpia do vapor} - \text{entalpia da água de alim.})}{\text{vazão de combustível} \cdot \text{PCS}} \quad (4)$$

sendo  $n$  o rendimento, a partir da equação acima é possível calcular a vazão de combustível, conhecendo-se as demais propriedades, entre outras possibilidades.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para o código do ciclone os componentes usados para teste foram o Ar (como gás a ser limpo) e o Cloro (como material particulado). O pacote termodinâmico aplicado foi o Peng-Robinson /Lee-Keesler (PR/LK). Inicialmente, foram criadas as variáveis relacionadas aos componentes das equações 1, 2 e 3 e inicializados os vetores relacionados à pressão, temperatura, entalpia, vazão e fração molar e também o vetor relacionado às correntes de entrada (nominado “Feed1”). Todas essas variáveis podem ser alteradas para a realização do cálculo pelo usuário na área de

“Scripting Variables”. Em seguida o vetor da corrente de alimentação “Feed1” recebe por meio da função “Getprop” os valores contidos nos vetores de pressão, temperatura, entalpia, vazão e fração molar.



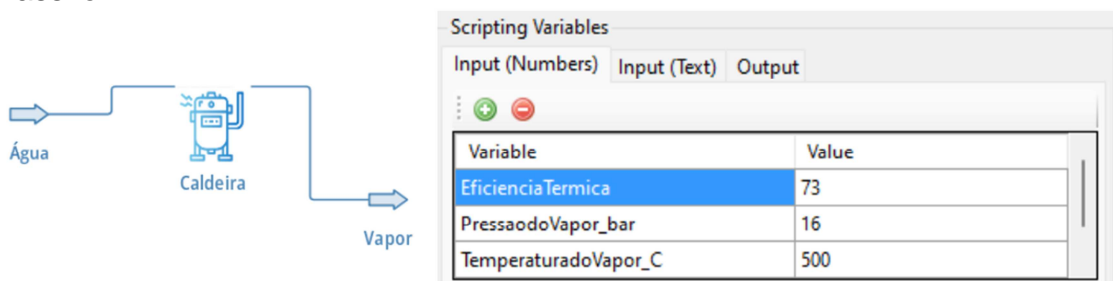
**Figura 1** - Fluxograma da Operação unitária ciclone e aba de alterações de variáveis na interface do DWSIM.

Fonte: Elaborado pelos autores

Em seguida o vetor da corrente de alimentação “Feed1” recebe por meio da função “Getprop” os valores contidos nos vetores de pressão, temperatura, entalpia, vazão e fração molar. Posteriormente, por meio da função “GetPhase” o vetor “Feed1” recebe as propriedades de fase da corrente de alimentação.

Com a parte de variáveis e vetores estruturados são realizados os cálculos, com as equações 1,2 e 3, além dos cálculos pré-estabelecidos pelo software. Por fim, para o retorno dos valores para as correntes de saída, duas variáveis as relacionam (“out” para a corrente de gás limpo e out2 para a corrente das partículas), por meio da função “Set.prop” os valores de massa, temperatura, pressão, fração e vazão molar são retornados, além dos valores desejados para as variáveis de dimensão do ciclone.

Para o código da caldeira o processo utiliza apenas água como componente, devido à sua suficiência para essa operação, e a termodinâmica é baseada na Steam Table (IAPWS-IF97). Variáveis foram criadas para referenciar as correntes no fluxograma (“Água” e “Vapor”), usando funções ims1 e oms1. A eficiência térmica é representada por “n”. A vazão mássica foi equalizada usando “GetPhase ()” até “massflow”.



**Figura 2** - Fluxograma da Operação unitária caldeira e aba de alterações de variáveis na interface do DWSIM.

Fonte: Elaborado pelos autores

As variáveis “mv” (vazão mássica do vapor) e “h1” (entalpia da água) foram criadas. “Pvap” representa a pressão do vapor (convertida para Pascal). O objeto vapor adota essa pressão. Um laço “if” é usado para tratar o vapor saturado (“VapSaturado”). Se verdadeiro, “VF” é ajustado para “VapSaturado”, operando com

fase vapor e calculando equilíbrio via "CalcEquilibrium". Se o condicional não é cumprido, o bloco "else" é ativado. "Tvap" (temperatura do vapor) é obtido de TemperaturadoVapor\_C em Kelvin. A temperatura da corrente de vapor é definida para "Tvap", e "CalcEquilibrium" calcula vazão e composição no equilíbrio.

Foram introduzidos loops condicionados por "TipodeCombustivel". O usuário pode escolher o combustível, ajustando o valor de PCS para cálculos. Finalmente, o output informa a quantidade de combustível necessária em kg/s, calculada via método descrito. Para usar, um bloco Unit Operation é criado, o código é copiado no Script Editor, e as correntes de água e vapor são definidas com os dados apropriados. Inputs são inseridos na interface, como Eficiência Térmica, Pressão de Vapor, etc. Clicar "Solve Flowsheet" calcula os valores desejados na aba Output.

## CONCLUSÕES

Os códigos criados para este projeto, mesmo oferecendo um único método de cálculo para cada operação unitária, demonstraram ser suficientemente eficazes na resolução de problemas. A utilização desses códigos demanda um certo entendimento do software e das especificações do código, o que pode ser um desafio inicial para a execução. No entanto, com prática, eles podem ser empregados, já que envolvem principalmente a manipulação das variáveis para a solução dos cálculos.

Considerando que os principais objetivos deste projeto eram desenvolver modelos de operações unitárias em linguagem Python para um ciclone e uma caldeira no simulador de processos DWSIM, é possível concluir que esses objetivos foram atingidos.

## REFERÊNCIAS

MAJEWSKI, Ryszard. **“PROJETO, CONSTRUÇÃO E AVALIAÇÃO EXPERIMENTAL DE UM LAVADOR DE GASES INDUSTRIAL”**. Tese de Doutorado. São Paulo-SP.

**“SEPARAÇÃO DE SÓLIDOS E LÍQUIDOS”**. Depto De Eng. Química e de Eng. De Alimentos. UFSC – Universidade Federal de Santa Catarina. Disponível em <[https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/4695158/mod\\_resource/content/0/Ciclone.pdf](https://edisciplinas.usp.br/pluginfile.php/4695158/mod_resource/content/0/Ciclone.pdf)>. Acesso em 15 Ago 2023.

DWSIM                      Class                      Library                      Documentation  
<[https://dwsim.org/api\\_help/html/G\\_DWSIM\\_Thermodynamics.htm](https://dwsim.org/api_help/html/G_DWSIM_Thermodynamics.htm)>. Acesso em 17 de Ago de 2023.