

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO
ESCOLA DE QUÍMICA

João Gabriel Franco da Silva



SIMULAÇÃO DE UMA PLANTA PILOTO DE DESIDRATAÇÃO DE
GÁS NATURAL POR ADSORÇÃO UTILIZANDO ASPEN HYSYS

RIO DE JANEIRO

2023

João Gabriel Franco da Silva

SIMULAÇÃO DE UMA PLANTA PILOTO DE DESIDRATAÇÃO DE GÁS NATURAL
POR ADSORÇÃO UTILIZANDO ASPEN HYSYS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à Escola de Química da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Orientador(es): Prof. Amaro Gomes Barreto Júnior, D.Sc
Iuri Soter Viana Segtovich, D.Sc
Felipe Coelho Cunha, D.Sc

Rio de Janeiro

2023

CIP - Catalogação na Publicação

S586s Silva, João Gabriel Franco da
Simulação de uma Planta Piloto de Desidratação de
Gás Natural por Adsorção utilizando Aspen HYSYS /
João Gabriel Franco da Silva. -- Rio de Janeiro,
2023.

117 f.

Orientador: Amaro Gomes Barreto Júnior.

Coorientador: Iuri Soter Viana Segtovich.

Trabalho de conclusão de curso (graduação) -
Universidade Federal do Rio de Janeiro, Escola de
Química, Bacharel em Engenharia Química, 2023.

1. Gás natural. 2. Desidratação. 3. Simulação.
4. Aspen HYSYS. I. Barreto Júnior, Amaro Gomes,
orient. II. Segtovich, Iuri Soter Viana, coorient.
III. Título.

João Gabriel Franco da Silva

SIMULAÇÃO DE UMA PLANTA PILOTO DE DESIDRATAÇÃO DE GÁS NATURAL
POR ADSORÇÃO UTILIZANDO ASPEN HYSYS

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado à
Escola de Química da Universidade Federal do Rio
de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à
obtenção do grau de Engenheiro Químico.

Aprovado em 01 de agosto de 2023.

Prof. Amaro Gomes Barreto Júnior, D.Sc., EQ/UFRJ

Iuri Soter Viana Segtovich, D.Sc. COPPE/UFRJ

Felipe Coelho Cunha, D.Sc. COPPE/UFRJ

Prof.^a. Ingrid Azevedo de Oliveira Young, D.Sc., EQ/UFRJ

Felipe Rocha Pinto, M.Sc., EQ/UFRJ

Rio de Janeiro
2023

AGRADECIMENTOS

Agradeço primeiramente à Deus, por se sentar ao meu lado nessa montanha russa que é a vida, mostrando que para todo medo existe coragem, que para todo erro existe aprendizado, e que para toda paciência existe recompensa.

A fé não costuma falhar, mas eventualmente falhamos em ter fé. Nesses momentos, é crucial que estejamos rodeados de pessoas que acreditem em nós. Agradeço à minha família, principalmente à minha mãe, por todo o suporte, emocional e financeiro, por manterem a fé em mim ao longo desses anos, e por me ajudarem a reencontrar a fé, todas as vezes que eu não sabia mais onde procurar.

Agradeço aos meus orientadores, Prof. Dr. Amaro Gomes Barreto Júnior, Dr. Iuri Soter Viana Segtovich e Dr. Felipe Coelho Cunha, por todos os conselhos dados nesses últimos meses, não somente para o TCC, mas também conselhos de carreira e de vida.

Agradeço também à toda a equipe do grupo ATOMS[®], que foi super prestativa e me acolheu de braços abertos, algo que presenciei poucas vezes durante minha jornada na UFRJ. Em especial, gostaria de mencionar o Leonardo Tourasse Galdino, que me ajudou com uma miscelânea de erros que surgiram ao longo das simulações, além de sempre me atentar a não virar “Piloto de HYSYS”, e a Prof.^a. Dra. Ingrid Azevedo de Oliveira Young, por ter me apresentado ao grupo ATOMS[®].

E para essa seção caber em uma página, gostaria de finalizar com uma reflexão: Talvez o diploma de graduação não seja somente um pedaço de papel. Talvez ele também seja os amigos que fizemos ao longo do caminho: amigos da escola, amigos da graduação, da iniciação científica e do intercâmbio. Amigos dos “Alunos Contadores de Histórias”, amigos do ATOMS[®], amigos que também são família, e familiares que também são amigos. Amigos que vêm e que vão, lá e de volta outra vez. Amigos que vemos toda semana, ou que só encontramos duas vezes na vida; presença e relevância não se contabilizam na calculadora. Obrigado, amigos! Vocês são uns amigos!!!

“Oxi!

Nem todos os dias são os melhores, campeão.

Mas a gente dá o melhor!”

(Lucas Almeida de Brito)

RESUMO

SILVA, João Gabriel Franco da. **Simulação de uma Planta Piloto de Desidratação de Gás Natural por Adsorção utilizando Aspen HYSYS**. Rio de Janeiro, 2023. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Química) - Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2023.

Para que o transporte e comercialização do gás natural sejam possíveis, unidades de processamento utilizam de processos para remover componentes indesejados do gás, como hidrocarbonetos pesados, gases ácidos e água. A presença de água no gás natural traz uma preocupação a mais devido à corrosão e à chance de formação de hidratos de metano em condições de baixa temperatura e alta pressão. De modo a remover o teor de água absorvido pelo gás natural, alguns processos podem ser escolhidos para a desidratação. Em um projeto conjunto com a Petrobras, o grupo ATOMS[®] realizou a instalação de uma planta piloto de desidratação de gás natural, usando colunas de adsorção por modulação de temperatura (“*Temperature Swing Adsorption*”), para o estudo desse processo. Neste trabalho, foi feito o desenvolvimento de um arquivo de simulação para reproduzir o funcionamento em regime estacionário da planta piloto, de modo a auxiliar no planejamento dos experimentos e avaliar condições operacionais. A simulação foi feita com o simulador Aspen HYSYS v10 e usando o modelo termodinâmico Peng-Robinson. Foram analisadas a influência que alterações na composição da corrente de alimentação tem na quantidade de água absorvida pelo gás e na temperatura de orvalho da corrente de gás recirculado, e a possibilidade de condensação em correntes que antecedam equipamentos sensíveis à presença de fase líquida (compressores e leitos de adsorção). Foram desenvolvidos scripts em Python para auxiliar na validação do modelo termodinâmico em comparação a dados experimentais disponíveis na literatura. Este trabalho descreve a coleta de informações sobre a planta piloto, a escolha do simulador de processos a ser usado, a escolha e validação de um modelo termodinâmico adequado, o desenvolvimento do arquivo de simulação, e a interpretação dos resultados de 9 simulações realizadas com diferentes composições da corrente de alimentação. O arquivo de simulação é atualmente capaz de simular o comportamento da planta piloto, gerando maior previsibilidade tanto para a segurança quanto o direcionamento dos experimentos. Simulações mais precisas podem ser alcançadas através de ajustes baseados em dados experimentais.

Palavras-chave: Gás natural; Desidratação; Simulação; Aspen HYSYS.

ABSTRACT

SILVA, João Gabriel Franco da. **Simulation of a Natural Gas Dehydration Pilot Plant by Adsorption using Aspen HYSYS**. Rio de Janeiro, 2023. Course's Final Paper (Bachelor in Chemical Engineering) - Escola de Química, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2023.

In order to make natural gas transport and commercialization possible, processing units use processes to remove unwanted components from the gas, such as heavy hydrocarbons, acid gases and water as heavier hydrocarbons, hydrogen sulfide, carbon dioxide and water. The presence of water in natural gas is of additional concern due to corrosion and the risk of methane hydrates formation under low temperature and high pressure conditions. In order to remove the water content absorbed by natural gas, some processes can be chosen for dehydration. In a joint project with Petrobras, the ATOMS[®] group installed a pilot natural gas dehydration plant using Temperature Swing Adsorption columns to study this process. In this work, a simulation file was developed to reproduce the steady-state operation of the pilot plant, in order to assist in the planning of experiments and to evaluate operational conditions. The simulation was performed with the Aspen HYSYS v10 simulator and using the Peng-Robinson thermodynamic model. Analyses were made in order to investigate the influence that changes in the composition of the supply stream have on the amount of water absorbed by the gas and on the dew temperature of the recirculated gas stream, as well as the possibility of condensation in streams before equipment sensitive to the presence of liquid phase (compressors and adsorption beds). Python scripts were developed to help validate the thermodynamic model against experimental data available in the literature. This work describes the collection of information about the pilot plant, the choice of process simulator to be used, the choice and validation of an adequate thermodynamic model, the development of the simulation file, and the interpretation of the results of 9 simulations carried out with different gas inlet compositions. The simulation file is currently capable of simulating the pilot plant behavior, generating greater predictability for both safety and the direction of the experiments. More accurate simulations can be achieved through adjustments based on experimental data.

Keywords: Natural gas; Dehydration; Simulation; Aspen HYSYS.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2-1 - Visão lateral da planta piloto dentro de sua capela.	17
Figura 2-2 - Diagramas de Tubulação e Instrumentação (P&ID) da planta piloto.....	18
Figura 2-3 - Diagrama simplificado para desenvolvimento da planta piloto.	19
Figura 2-4 - Fluxograma desenvolvido no HYSYS para demonstrar planta piloto.	20
Figura 2-5 - Captura de tela do software de controle da planta piloto - Tela da direita.....	21
Figura 2-6 - Captura de tela do software de controle da planta piloto - Tela da esquerda.....	22
Figura 2-7 – (A): Válvulas e transdutores. (B): Manômetros.	23
Figura 2-8 – (A): Filtros, controladores de vazão e válvulas de retenção. (B): Gas Booster...	24
Figura 2-9 - Compressor de gás de alta pressão.	25
Figura 2-10 – Da esquerda para a direita: Vaso de saturação (maior), tanque de água, tanque de etanol, injetores de etanol e de C5+, e tanque de C5+.....	26
Figura 2-11 – Painel com manômetros dos tanques presentes na seção de saturação.....	27
Figura 2-12 - Controladores de vazão de gás, analisador de teor de água e cromatógrafo gasoso.	28
Figura 2-13 – (A): Visão de dentro do forno (colunas TSA, camisas de aquecimento e filtro coalescente). (B): Tanque de Knockout.	29
Figura 3-1 - Captura de tela do Aspen Properties Desktop V10, mostrando os dados do NIST ThermoData para a mistura binária H ₂ O + CO ₂	41
Figura 3-2 - Captura de tela do fluxograma de validação do modelo de Peng-Robinson.....	44
Figura 3-3 - Fração de H ₂ O na fase líquida da mistura binária H ₂ O + CH ₄	45
Figura 3-4 - Fração de H ₂ O na fase vapor da mistura binária H ₂ O + CH ₄	46
Figura 3-5 - Fração de H ₂ O na fase líquida da mistura binária H ₂ O + N ₂	46
Figura 3-6 - Fração de H ₂ O na fase vapor da mistura binária H ₂ O + N ₂	47
Figura 3-7 - Fração de H ₂ O na fase líquida da mistura binária H ₂ O + CO ₂	48
Figura 3-8 - Fração de H ₂ O na fase vapor da mistura binária H ₂ O + CO ₂	48
Figura 3-9 - Fração de CH ₄ na fase líquida da mistura binária CH ₄ + CO ₂	49
Figura 3-10 - Fração de CH ₄ na fase vapor da mistura binária CH ₄ + CO ₂	49

Figura 3-11 - Fração de N ₂ na fase líquida da mistura binária N ₂ + CO ₂	50
Figura 3-12 - Fração de N ₂ na fase vapor da mistura binária N ₂ + CO ₂	50
Figura 3-13 - Fração de CH ₄ na fase líquida da mistura binária CH ₄ + N ₂	51
Figura 3-14 - Fração de CH ₄ na fase vapor da mistura binária CH ₄ + N ₂	51
Figura 4-1 – Captura de tela de fluxograma teste para criação de recírculos.	53
Figura 4-2 - Captura de tela de fluxograma teste para saturação de corrente gasosa.....	55
Figura 4-3 - Captura de tela de esboço da seção de alimentação/make-up.	56
Figura 4-4 - Captura de tela de uma versão inicial do fluxograma.	56
Figura 4-5 - Fluxograma rearranjado da seção de alimentação/make-up.....	58
Figura 4-6 – Fluxograma rearranjado da seção de saturação.	59
Figura 4-7 - Fluxograma rearranjado da seção de desidratação.	61
Figura 4-8 - Spreadsheets e suas tabelas no fluxograma.	65
Figura 4-9 – Planilha “Material Balance”.	66
Figura 4-10 – Planilha “Condensation”.....	66
Figura 4-11 – Planilha “CO ₂ _Analysis”.	67
Figura 4-12 – Planilha “MakeUp_&_VOID”.....	67
Figura 4-13 - Fluxograma finalizado para simulações iniciais deste trabalho.	68
Figura 5-1 - Variação de capacidade de absorção de água da mistura.	74
Figura 5-2 - Variação da temperatura do ponto de orvalho da corrente 4.....	78

LISTA DE TABELAS

Tabela 2-1 - Composição do gás natural a ser usado na planta piloto e na simulação.....	31
Tabela 3-1 - Fontes de dados das misturas binárias, condições usadas e n° de pontos.....	42
Tabela 5-1 - Parâmetros de entrada nas simulações. Cada linha representa uma simulação. ..	69
Tabela 5-2 - Variáveis extraídas do HYSYS com o script	70
Tabela 5-3 - Vazões de água e correntes de fundo de tanques de separação, em kgmol/h.	72
Tabela 5-4 – Fração molar de água nas correntes 10 a 14.....	73
Tabela 5-5 - Temperatura e pressão, de operação e ponto de orvalho, da corrente 2.	76
Tabela 5-6 - Temperatura e pressão, de operação e ponto de orvalho, da corrente 4.	77
Tabela 5-7 - Temperatura e pressão, de operação e ponto de orvalho, da corrente 14.	79
Tabela B-1 - Nitrogênio 20% - Condições das correntes.	92
Tabela B-2 - Nitrogênio 20% - Frações de vapor e Composições	93
Tabela B-3 - Nitrogênio 80% - Condições das correntes.	95
Tabela B-4 - Nitrogênio 80% - Frações de vapor e Composições	96
Tabela B-5 - Nitrogênio 100% - Condições das correntes.	98
Tabela B-6 - Nitrogênio 100% - Frações de vapor e Composições	99
Tabela B-7 - Metano 20% - Condições das correntes.	101
Tabela B-8 - Metano 20% - Frações de vapor e Composições	102
Tabela B-9 - Metano 80% - Condições das correntes.	104
Tabela B-10 - Metano 80% - Frações de vapor e Composições	105
Tabela B-11 - Metano 100% - Condições das correntes.	107
Tabela B-12 - Metano 100% - Frações de vapor e Composições	108
Tabela B-13 - Gás Natural 20% - Condições das correntes.	110
Tabela B-14 - Gás Natural 20% - Frações de vapor e Composições	111
Tabela B-15 - Gás Natural 80% - Condições das correntes.	113
Tabela B-16 - Gás Natural 80% - Frações de vapor e Composições	114
Tabela B-17 - Gás Natural 100% - Condições das correntes.	116
Tabela B-18 - Gás Natural 100% - Frações de vapor e Composições	117

SUMÁRIO

1. Introdução.....	13
1.1. Objetivos.....	14
1.2. Estrutura do texto.....	15
2. Informações sobre o processo e metodologia do estudo	16
2.1. Sobre a planta piloto	17
2.2. Sobre os componentes presentes no processo.....	31
2.3. Sobre o simulador de processos.....	32
2.4. Sobre o pacote de fluidos.....	36
3. Validação do modelo termodinâmico.....	41
3.1. Diagramas de fases	44
3.2. Considerações finais da seção.....	52
4. Desenvolvimento do fluxograma	53
4.1. Familiarização com o Aspen HYSYS	53
4.2. Criando o fluxograma	56
4.3. Fluxograma completo	68
5. Simulações com diferentes concentrações na alimentação	69
5.1. Água absorvida pela mistura gasosa.....	71
5.2. Possibilidade de condensação nas correntes	74
6. Conclusão e sugestões para trabalhos futuros	80
7. Referências Bibliográficas.....	81
APÊNDICE A. Scripts em python usados no trabalho.....	83
A.1. Script para pegar os dados de validação do modelo termodinâmico	83
A.2. Script para criar os gráficos	86
A.3. Script para pegar os dados ao final da simulação e construir as tabelas.....	88
APÊNDICE B. Tabelas detalhadas contendo dados das simulações	92

1. Introdução

Dentre os diversos projetos desenvolvidos no grupo ATOMS[®] (*Applied Thermodynamics and Molecular Simulation*), são estudados processos de desidratação de gás natural, que se utilizam tanto de estudos teóricos quanto experimentais e coleta de dados, a fim de comparar diferentes operações e suas viabilidades.

Em um desses projetos, foi desenvolvida em parceria com a Petrobras a montagem e implementação de uma planta piloto de desidratação de gás natural utilizando um sistema de colunas TSA (*Temperature Swing Adsorption*). Com o uso dessa planta, experimentos podem ser realizados com diversas condições de operação e amostras de gás natural com diferentes composições, e diferentes tipos de adsorventes, de modo a encontrar as melhores condições de operação para determinada composição, coletar dados reais de desidratação a uma fração do custo de operação de uma planta industrial, e posteriormente usar esses dados para otimizar modelos matemáticos de simulação do processo.

Temperature Swing Adsorption, abreviado como TSA, é o nome dado a um processo de adsorção em colunas recheadas com material adsorvente, atrelado a uma etapa de regeneração do recheio dessa coluna, em que a adsorção e a regeneração são definidas por modulações da temperatura de cada operação. Quando as etapas de adsorção e regeneração são diferenciadas por uma variação na pressão de operação, o processo conjunto é chamado de *Pressure Swing Adsorption*, abreviado como PSA. O processo PSA é comumente utilizado na indústria para separação de gases, já o TSA é mais usado para a desidratação de gases, embora também possa ser usado na separação de gases, como na remoção de CO₂ e H₂S em pequenas concentrações durante o adoçamento do gás natural. (BERG et al., 2019)

O material adsorvente a ser utilizado para esses processos, comumente chamado de peneira molecular, irá depender das condições de operação possíveis e viabilidade econômica. Para a purificação de gás natural, adsorventes óxidos polares, como zeólitas, sílica gel, géis de sílica-alumina e óxidos de alumínio, são frequentemente usados devido à sua boa capacidade de regeneração. (BERG et al., 2019)

Por meio da planta piloto, será possível realizar estudos mais aprofundados quanto a desidratação de gases por adsorção e compará-la com outras formas de desidratação, como por uso de soluções de glicóis, por membranas ou por refrigeração. Sistemas aprimorados de regeneração utilizando TEG (trietilenoglicol) podem começar a competir com processos de adsorção usando peneiras moleculares, mas as peneiras moleculares ainda são a única tecnologia comprovada de longo prazo disponível nos casos em que o gás precisar estar seco

para recuperação de líquidos criogênicos. Além disso, existe uma grande preocupação ambiental na desidratação com soluções de glicol devido às emissões de BTEX (sigla para “Benzeno, Tolueno, Etilbenzeno e Xilenos”). (KIDNAY; PARRISH; MCCARTNEY, 2020)

Apesar de seu custo de construção e operação ser muito mais baixo que o de uma planta industrial, o custo total de uma planta piloto também é alto, sua operação deve ser estudada e seus usuários capacitados, de forma que os experimentos a serem realizados ocorram com segurança, planejamento e eficiência. Com o uso de ferramentas de simulação de processos, é possível realizar estudos que visam prever necessidades de equipamentos de uma planta futura, quando usado em estágio de desenvolvimento, necessidade de matérias primas, condições a serem esperadas das correntes e equipamentos, caracterização dos produtos e viabilidade econômica.

Os simuladores de processos contínuos são *softwares* que agregam modelos termodinâmicos e modelos matemáticos que representem o funcionamento de equipamentos. A partir da criação de um caso e inserção dos parâmetros desejados pelo usuário, esses simuladores realizam cálculos numéricos baseados na solução recursiva do sistema de equações, com o objetivo de encontrar o equilíbrio termodinâmico entre as fases de cada corrente e os balanços de massa e energia dos equipamentos presentes no sistema.

O desenvolvimento desse trabalho ocorre de modo a desenvolver simulações que possa auxiliar no planejamento de experimentos da planta piloto, mas que também futuramente seja usado concomitantemente aos experimentos na planta, aprimorando os parâmetros de simulação para gerar resultados cada vez mais precisos.

1.1. Objetivos

O objetivo geral deste trabalho é a simulação do processo de desidratação de gás natural por adsorção em uma planta piloto, utilizando um software de simulação de processos, para avaliar suas condições operacionais. Com isso, foram definidos os seguintes objetivos específicos:

- Compreender o processo de desidratação do gás natural por adsorção e o funcionamento da planta piloto;
- Selecionar um simulador de processos e analisar a capacidade dos seus modelos termodinâmicos de representar condições de equilíbrio de fases das substâncias importantes ao processo de desidratação;

- Elaborar scripts de Python para auxiliar nas tarefas de intercâmbio de dados entre o Microsoft Excel e o simulador de processos, e para gerar os gráficos de validação de um pacote termodinâmico;
- Elaborar um fluxograma para simular o funcionamento da planta piloto em regime estacionário;
- Implementar com sucesso os ciclos, de modo a atingir a convergência do processo recursivo;
- Simular a desidratação de uma corrente gasosa saturada em água, utilizando diferentes composições na corrente de alimentação. Os gases de alimentação são: metano, nitrogênio e uma mistura modelo de gás natural, cada um com diferentes teores de CO₂;
- Avaliar a influência da composição da corrente de alimentação na quantidade de água absorvida pela corrente gasosa;
- Investigar a possibilidade de condensação nas correntes que antecedem as colunas TSA e os compressores, nas diferentes simulações realizadas.

1.2. Estrutura do texto

No capítulo 2, são apresentados detalhes do processo na planta piloto, e é apresentada a definição da metodologia do estudo, a escolha do software para simulação e o modelo termodinâmico escolhido para representar o sistema.

No capítulo 3, o modelo termodinâmico é validado de modo a averiguar a confiabilidade dos dados simulados.

No capítulo 4 é descrito o desenvolvimento do fluxograma no simulador, assim como empecilhos e peculiaridades ao longo do desenvolvimento.

No capítulo 5 são apresentados os resultados obtidos através da simulação da planta piloto e é feita a discussão desses resultados.

No capítulo 6 é feita uma discussão final, concluindo o trabalho e fazendo sugestões para trabalhos futuros que deem continuidade ao projeto.

Em seguida, são apresentadas as referências bibliográficas usadas neste documento.

E por fim, temos os apêndices A e B. No Apêndice A são fornecidos os scripts em Python criados para serem usados ao longo do trabalho. No Apêndice B constam as tabelas geradas pelas simulações, contendo em detalhes as condições e as composições das correntes.

2. Informações sobre o processo e metodologia do estudo

A implementação de uma planta industrial requer um alto investimento inicial, tanto devido ao custo de construção da planta quanto ao custo operacional, fazendo com que o ROI (*Return of Investment*) possa levar até uma década. Por isso, é importante que se tenha certeza tanto da efetividade dos processos envolvidos quanto da viabilidade econômica. Nesse sentido, a alocação de verba para pesquisa e desenvolvimento é de grande relevância durante a etapa de desenvolvimento do projeto, e a criação de plantas piloto e simulação de processos são as ferramentas ideais para a pesquisa.

Uma planta piloto é desenvolvida para ser capaz de reproduzir em menor escala o comportamento de uma planta industrial, sendo possível realizar experimentos a uma fração do custo operacional, ao mesmo tempo que esses dados são coletados sem interromper o funcionamento da planta de produção.

Já um simulador leva esta ideia uma etapa adiante, prevendo o funcionamento dos processos através de cálculos termodinâmicos, de balanço de massa, balanço de energia e equilíbrio químicos a um custo ainda menor. Simulações, entretanto, possuem um ponto negativo se comparado a dados experimentais: os resultados da simulação são somente tão bons quanto a capacidade dos modelos termodinâmicos e dos métodos numéricos escolhidos de representar com fidelidade o sistema alvo nas condições de operação do processo.

No projeto em que este TCC se insere, experimento e simulação foram escolhidos para serem usados em conjunto. Uma planta piloto foi projetada de modo a ser capaz de reproduzir as condições de operação de uma planta de desidratação de gás natural utilizando colunas de adsorção. Mesmo sendo considerada uma alternativa de menor custo quando comparada a uma planta industrial, uma planta piloto não é necessariamente um equipamento de baixo custo, nem para projetar e nem para operá-la. Por isso, é importante que os experimentos sejam escolhidos de modo a aproveitar ao máximo os dados obtidos com a planta. Simultaneamente, através dos dados obtidos com os experimentos é possível realizar alterações nos modelos matemáticos existentes da simulação, de modo a representar a planta com maior fidelidade, e com isso prever predizer o seu comportamento ao extrapolá-lo para outras condições.

Neste capítulo, serão apresentados dados em detalhes sobre a planta simulada, incluindo suas condições de operação e os componentes que se espera usar nos experimentos. Será abordada também a escolha do simulador de processos, e ao final a escolha do modelo termodinâmico para representar o sistema.

2.1. Sobre a planta piloto

Nesta seção, será feito um panorama geral da planta piloto, mostrando dados obtidos tanto no relatório de especificações da planta piloto, como também através de visitas à planta piloto e consultas aos profissionais envolvidos no projeto. Uma foto mais ampla da planta piloto pode ser vista na Figura 2-1.

Figura 2-1 - Visão lateral da planta piloto dentro de sua capela.



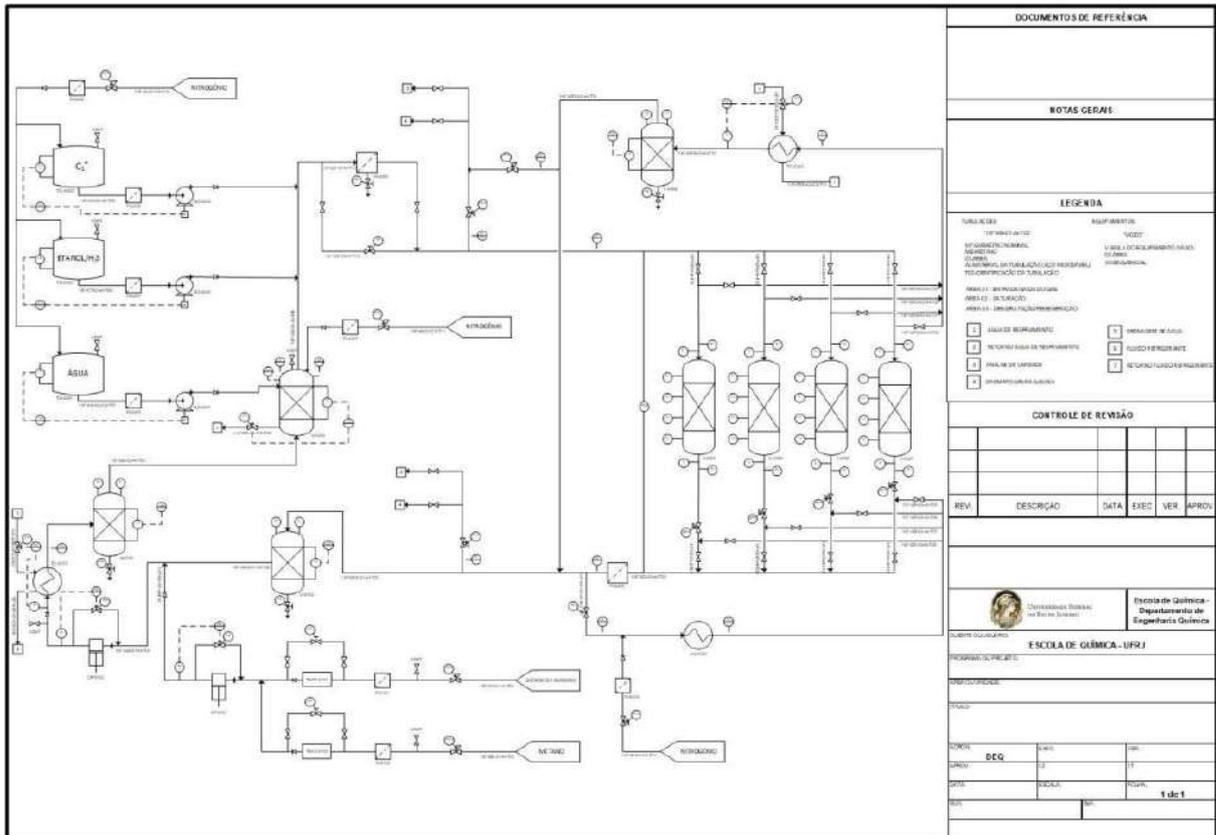
Fonte: Fotografado pelo autor (2023).

As especificações da planta piloto foram definidas em março de 2019 pelos professores Amaro Gomes Barreto Júnior e Frederico Wanderley Tavares a partir de parâmetros e

padronizações em um Termo de Compromisso (TC) com a Petrobrás, e então reunidas em um relatório interno de especificações técnicas do projeto (BARRETO JR; TAVARES, 2019).

Na Figura 2-2 podemos ver o Diagrama de Tubulação e Instrumentação (P&ID) desenvolvido para a criação da planta piloto.

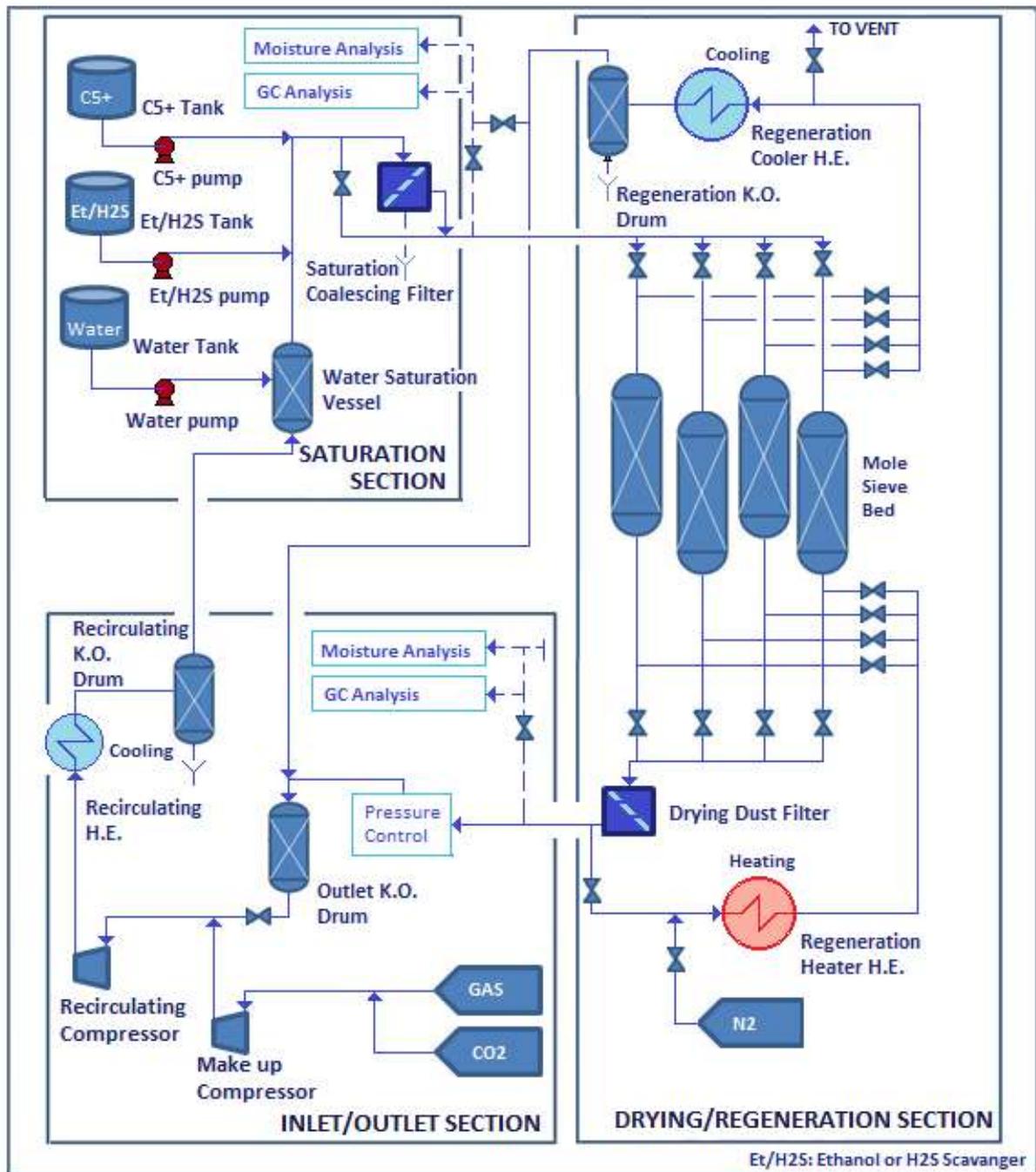
Figura 2-2 - Diagramas de Tubulação e Instrumentação (P&ID) da planta piloto.



Fonte: Relatório interno ATOMS/PETROBRÁS (BARRETO JR; TAVARES, 2019).

O processo de desidratação da planta piloto pode ser dividido em três seções principais: a seção de Alimentação/Make-up, onde as correntes de saída das colunas TSA são misturadas e os gases de entrada (gás natural, metano, dióxido de carbono e/ou nitrogênio) removidos no ciclo são compensados; a seção de Saturação, onde o gás é saturado com água e são inseridos outros componentes (hidrocarbonetos com 5 a 10 carbonos na cadeia, etanol e/ou sulfeto de hidrogênio) para prepará-lo para os testes de desidratação; e a seção de desidratação, onde o gás saturado é desidratado nas colunas TSA. Na Figura 2-3 vemos o diagrama simplificado com o esquema geral da unidade.

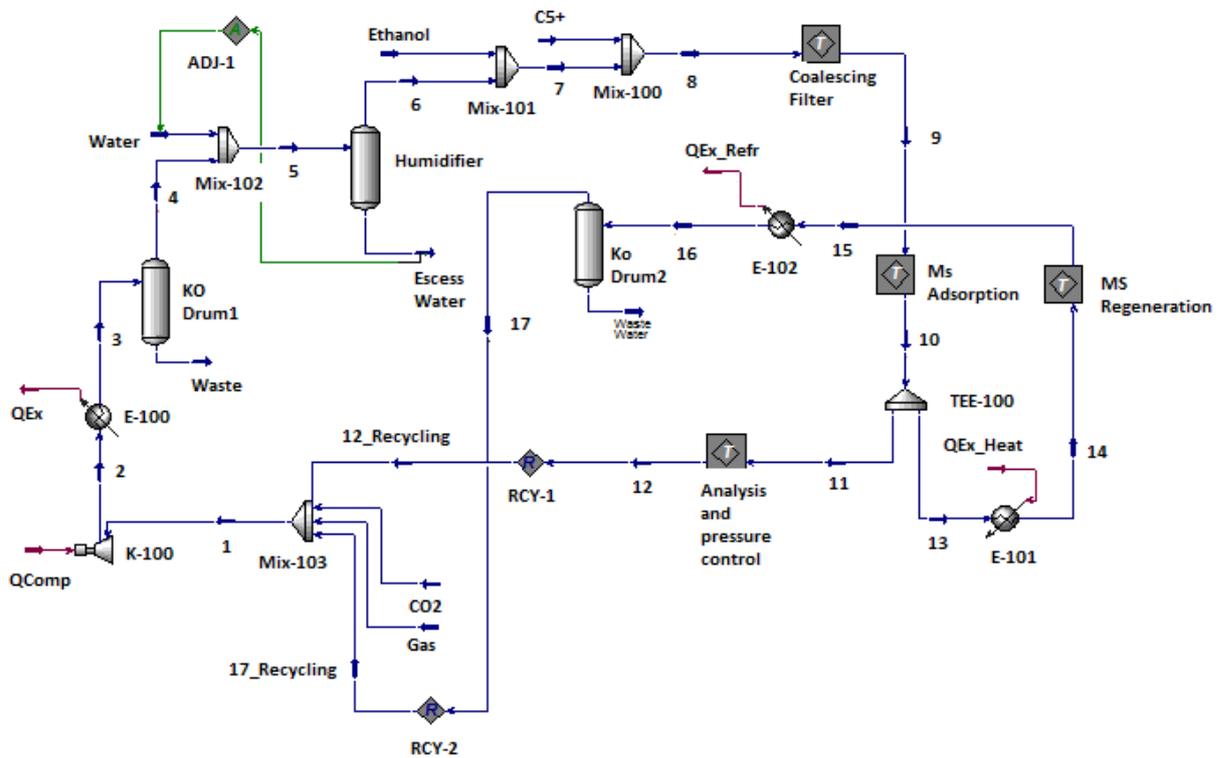
Figura 2-3 - Diagrama simplificado para desenvolvimento da planta piloto.



Fonte: Relatório interno ATOMS/PETROBRAS (BARRETO JR; TAVARES, 2019).

Além destes diagramas, também foi desenvolvido um fluxograma no Aspen HYSYS para demonstrar o funcionamento da planta piloto e ajudar a especificar e dimensionar os equipamentos. Uma imagem do fluxograma usado no documento de especificações pode ser vista na Figura 2-4.

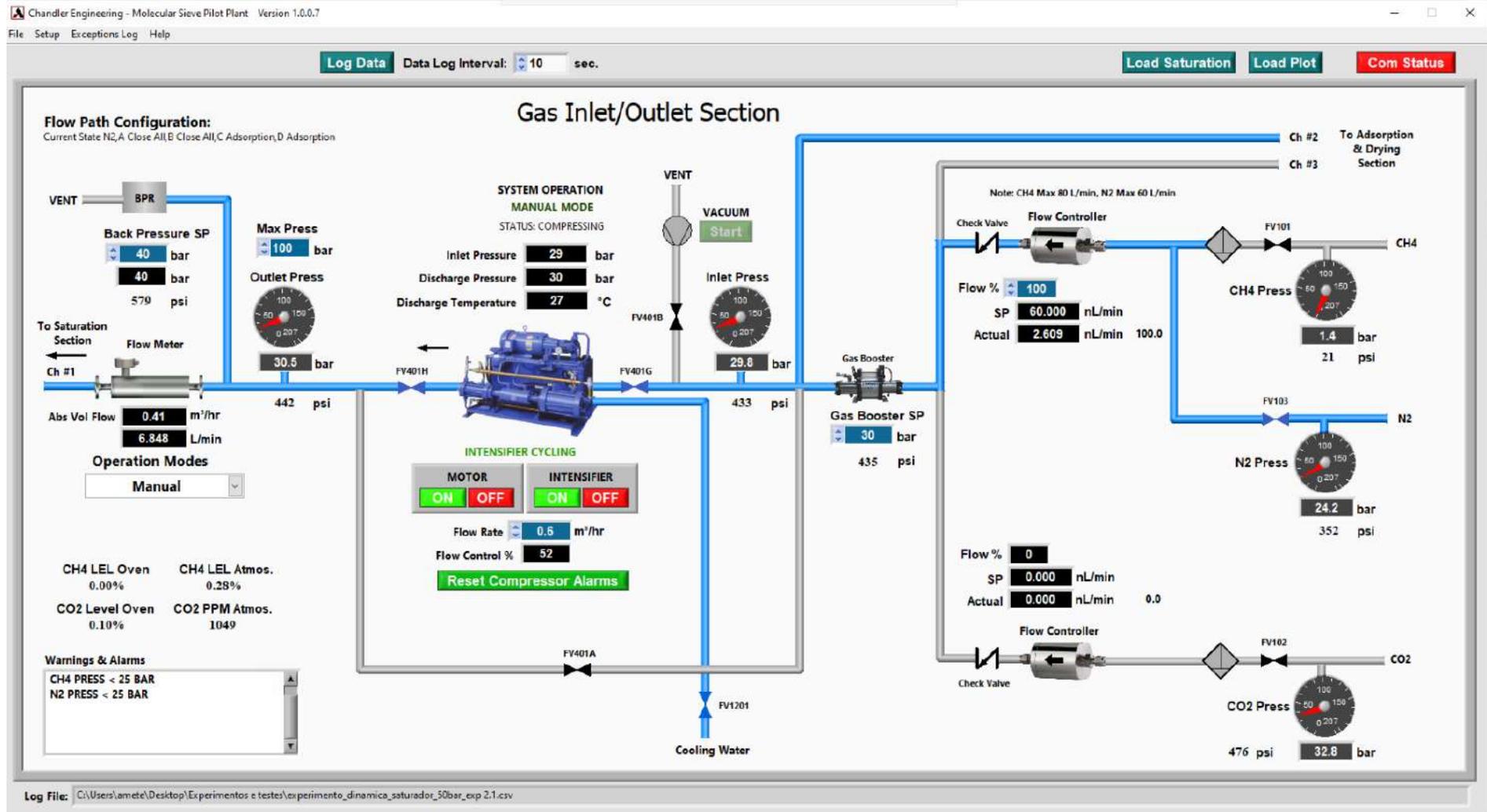
Figura 2-4 - Fluxograma desenvolvido no HYSYS para demonstrar planta piloto.



Fonte: Relatório interno ATOMS/PETROBRAS (BARRETO JR; TAVARES, 2019).

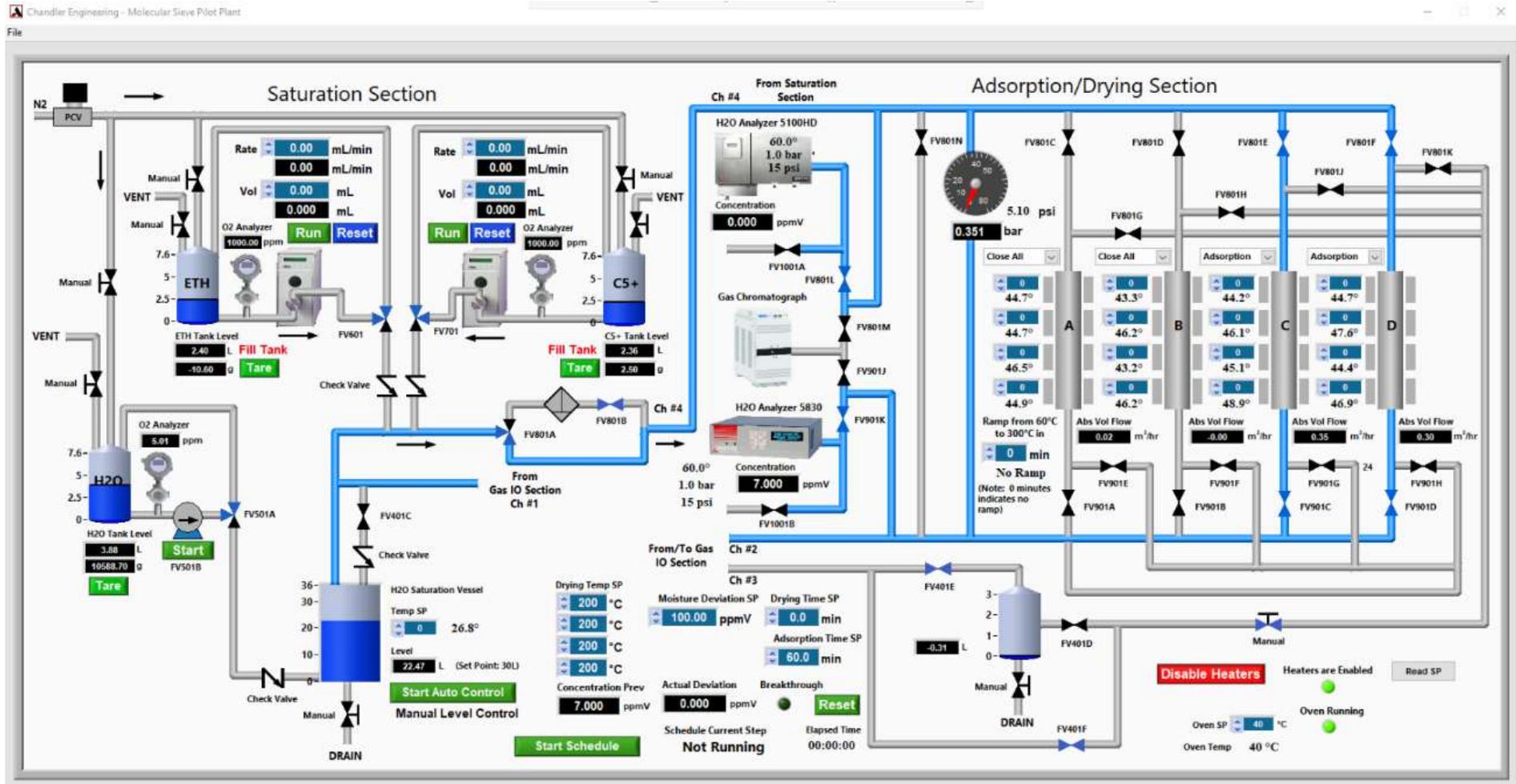
No software usado para a supervisão da planta piloto (Figura 2-5 e Figura 2-6), a seção de Alimentação/Make-up é chamada de **Gas Inlet/Outlet Section**; a seção de Saturação é chamada de **Saturation Section**; e a seção de Desidratação é chamada de **Adsorption/Drying Section**. Para fins de uniformidade, a mesma nomenclatura do software de controle será usada no fluxograma.

Figura 2-5 - Captura de tela do software de controle da planta piloto - Tela da direita.



Fonte: Captura de tela do software Chandler Engineering – Molecular Sieve Pilot Plant.

Figura 2-6 - Captura de tela do software de controle da planta piloto - Tela da esquerda.

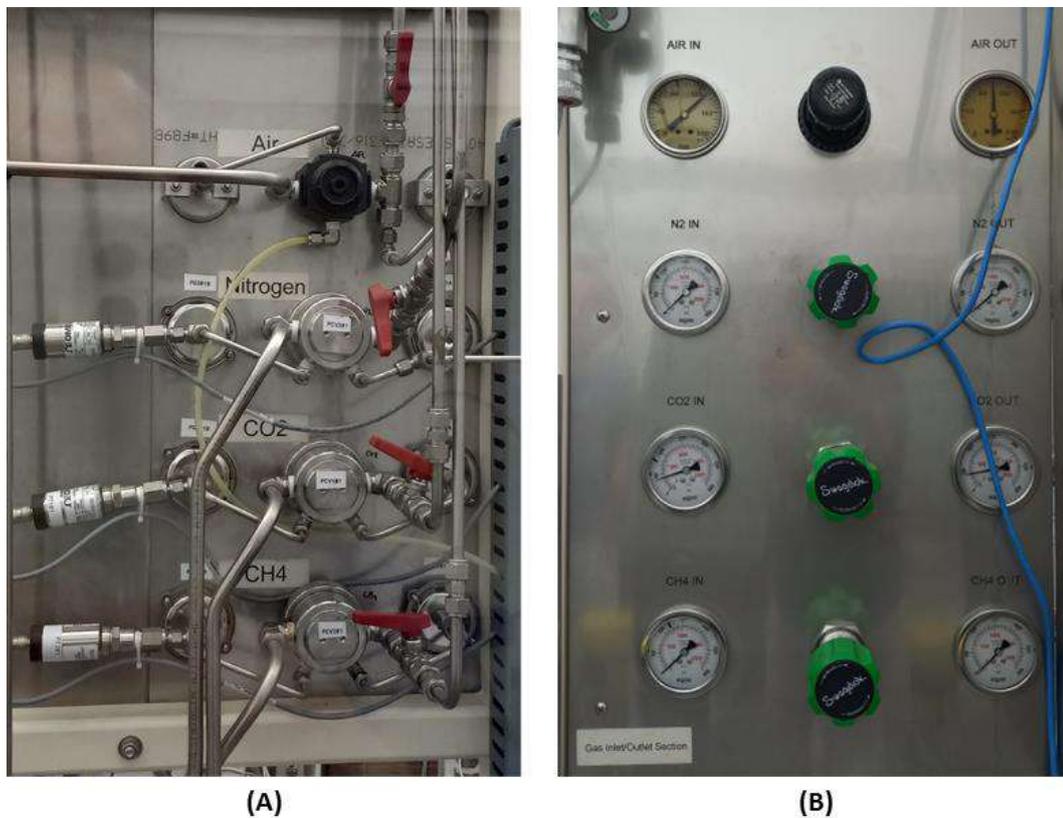


Fonte: Captura de tela do software Chandler Engineering – Molecular Sieve Pilot Plant.

2.1.1. Seção de alimentação/make-up

A seção de Alimentação/Make-up é onde ocorrem a mistura e o condicionamento dos gases para serem usados nas seções seguintes da planta piloto. Como pode ser notado nas fotos da Figura 2-7, existe a medição e controle de uma corrente de ar comprimido que não aparece nas imagens apresentadas. Essa corrente é omitida por não participar como reagente no processo, estando presente para que haja o funcionamento dos equipamentos pneumáticos presentes na planta. Essa corrente de ar não será mencionada novamente neste trabalho.

Figura 2-7 – (A): Válvulas e transdutores. (B): Manômetros.



Fonte: Fotografado pelo autor (2023).

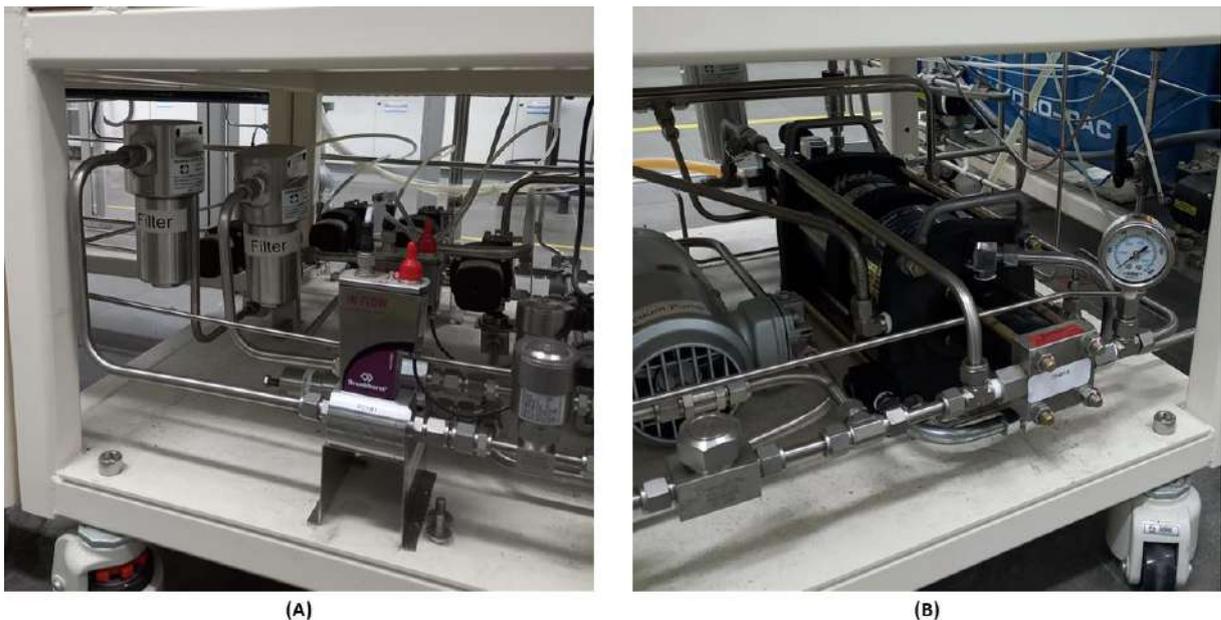
O produto da etapa de adsorção das colunas TSA vem por meio da corrente chamada de “Ch #2” nas Figuras Figura 2-5 e Figura 2-6, e o produto da etapa de regeneração vem após o tanque de Knock-Out através da corrente chamada “Ch #3”. Também existe outra corrente chamada “Ch #1”, que será abordada mais à frente. Essas nomenclaturas serão aproveitadas durante a confecção do fluxograma para simulação.

Além dessas correntes, também podemos ver as correntes de make-up de metano (CH₄), nitrogênio (N₂) e dióxido de carbono (CO₂). Essas três correntes possuem válvulas para controlar a vazão de entrada e manômetros para medir a pressão antes e depois das válvulas.

Ao final dessas correntes, existem dois filtros coalescentes, para garantir a pureza dos gases ao entrar na planta. A captura de tela do software (Figuras Figura 2-5 e Figura 2-6) representa esses filtros coalescentes como um losango cinza após as válvulas de **CH₄** e de **CO₂**, mas diverge da planta piloto ao representar o segundo filtro existente antes do ponto de mistura das correntes **CH₄** e **N₂**, quando na verdade ele se situa após o ponto de mistura, para servir de filtro em ambas as correntes.

Antes dos pontos de mistura, essas três correntes também passam por controladores de vazão e válvulas de retenção (Figura 2-8). As correntes **CH₄** e **N₂** compartilham do mesmo controlador de vazão (“*Flow Controller*”) e da mesma válvula de retenção (“*Check Valve*”) pois não serão usadas ao mesmo tempo. Já a corrente **CO₂** possui controlador e válvula próprios. A corrente de **N₂** será usada para experimentos iniciais de adequação da planta, e para inundar a planta antes dos experimentos, de modo a acelerar o início da operação.

Figura 2-8 – (A): Filtros, controladores de vazão e válvulas de retenção. (B): Gas Booster.



Fonte: Fotografado pelo autor (2023).

Como pode ser visto na Figura 2-5, as correntes de make-up **CH₄**, **N₂** e **CO₂** são misturadas quando necessário à corrente **Ch #3** em um ponto de mistura anterior a um *Gas Booster*, onde são pressurizadas antes de serem misturadas com a corrente **Ch #2**. Essa mistura é feita por partes, pois a corrente **Ch #2** sai da etapa de adsorção com pressão bem mais alta que as outras correntes, além de ser a corrente de maior vazão. A mistura da corrente **Ch #2** com as outras correntes a pressões consideravelmente mais baixas representaria um aumento

na complexidade operacional, desde um aumento na dificuldade de misturar os gases de maneira contínua a uma queda de pressão que daria mais trabalho para compensar mais à frente o condicionamento da corrente, e a possibilidade de condensação de parte da água absorvida na corrente **Ch #3**.

Após a passagem pelo *Gas Booster*, a corrente **Ch #2** é então adicionada à mistura, passando em seguida por um compressor de gás de alta pressão (Figura 2-9), que condicionará esta nova corrente para ser usada nas próximas seções. Esta corrente pode ser identificada nas figuras Figura 2-5 e Figura 2-6 pelo nome “**Ch #1**”.

Figura 2-9 - Compressor de gás de alta pressão.



Fonte: Fotografado pelo autor (2023).

2.1.2. Seção de saturação

Nesta seção da planta piloto, a corrente **Ch #1** vinda da seção anterior é direcionada para um vaso de saturação contendo água a um nível constante, onde a corrente gasosa é soprada sobre a superfície de líquido presente no vaso, e sai com a umidade relativa próxima a 100%. Na entrada deste vaso existe uma corrente de by-pass usada para controlar o teor de umidade desejado na corrente gasosa. Uma foto desta seção pode ser vista na Figura 2-10.

Figura 2-10 – Da esquerda para a direita: Vaso de saturação (maior), tanque de água, tanque de etanol, injetores de etanol e de C5+, e tanque de C5+.



Fonte: Fotografado pelo autor (2023).

Além do vaso de saturação, a seção de saturação também contém três tanques reservatórios sobre balanças e dois injetores com bombas HPLC. São eles: um tanque de água para alimentar o vaso de saturação, tanques de etanol e C5+, um injetor de etanol e um injetor de C5+. De modo a evitar formação de vácuo dentro dos tanques, correntes de nitrogênio a baixa pressão são conectados, mantendo a pressão do tanque estabilizada. A pressão do tanque é acompanhada nos manômetros em um painel na planta, como visto na Figura 2-11.

Figura 2-11 – Painel com manômetros dos tanques presentes na seção de saturação.



Fonte: Fotografado pelo autor (2023).

2.1.3. Seção de desidratação

Nesta seção são abordadas em mais detalhes as colunas TSA, que são colunas recheadas com um material adsorvente a ser escolhido de acordo com a necessidade do processo. Esse material adsorvente costuma ser sílica gel, sílica-alumina gel, óxidos de alumínio ou zeólitas. Essas colunas são operadas em regime de modulação de pressão ou temperatura, de modo a alterar o modo como as espécies presentes interagem entre si e com o material adsorvente.

Após passar pela seção de saturação, uma pequena amostra é encaminhada para as análises de cromatografia gasosa e teor de água, enquanto a corrente gasosa vai para a etapa de desidratação no forno onde se encontram as colunas TSA. Os controladores de vazão de gás, assim como o analisador de teor de água e o cromatógrafo gasoso, podem ser vistos na Figura 2-12.

Figura 2-12 - Controladores de vazão de gás, analisador de teor de água e cromatógrafo gasoso.



Fonte: Fotografado pelo autor (2023).

Na etapa de desidratação as colunas são usadas para desidratar o gás úmido de entrada através do uso de material adsorvente. Entretanto, a adsorção nestas colunas não é um processo contínuo, levando a inevitável saturação do material adsorvente com a água retirada do gás. Portanto, os processos PSA e TSA acoplam a adsorção com uma etapa de dessorção, também

chamada de “regeneração”, onde o material adsorvente é regenerado por meio do reciclo de uma fração da corrente de produto da etapa de adsorção. A etapa de regeneração é feita utilizando novas condições de temperatura (TSA) ou pressão (PSA), de modo a favorecer uma afinidade maior do material adsorvido com a corrente reciclada.

As quatro colunas TSA se encontram dentro de um forno isolado (Figura 2-13 A), e cada coluna possui aquecimento individual e quatro sensores de temperatura ao longo de seu comprimento. O forno é usado de modo a evitar troca de calor com o ambiente externo. As colunas operam em batelada, mas podem ser combinadas entre si de modo semi-contínuo, ou seja, enquanto algumas das colunas atuam na etapa de adsorção da umidade no gás, as colunas restantes operam na etapa de regeneração.

Após a passagem pelas etapas de adsorção e regeneração, a corrente gasosa utilizada no reciclo é resfriada em um trocador de calor casco e tubo e em seguida passa por um tanque de Knock-Out para retirar o excesso de água (Figura 2-13 B). A corrente de todo deste tanque então está pronta para retornar à seção de alimentação/make-up, com o nome “Ch #3”.

Figura 2-13 – (A): Visão de dentro do forno (colunas TSA, camisas de aquecimento e filtro coalescente).

(B): Tanque de Knockout.



(A)



(B)

Fonte: Fotografado pelo autor (2023).

Em um sistema composto de duas colunas, para uma operação semi-contínua, uma coluna irá operar na etapa de adsorção enquanto a outra é regenerada. Entretanto, com o uso de duas colunas, caso uma etapa seja mais lenta que a outra, pode haver um grande intervalo de tempo ocioso em uma das colunas, o que diminui a produtividade da operação. Por isso, é comum que seja indicado o uso de no mínimo três colunas, de modo que mais colunas podem ser alocadas para o processo mais lento.

Durante a definição da planta piloto, foi escolhida a compra de quatro colunas. Essa escolha visou uma maior flexibilidade da planta, que pode ter seu modo de operação modificado de acordo com a necessidade de cada experimento ou o envelhecimento do material adsorvente

2.1.4. Condições de operação da planta piloto

As condições de temperatura e pressão da planta piloto foram definidas a partir das mesmas condições encontradas na indústria. A pressão de operação para a planta piloto foi definida usando como exemplo a pressão do gás natural vinda de um gasoduto: 90 barg (aproximadamente 1300 psig).

As correntes de alimentação vêm de tubulações conectadas a cilindros de gás presentes fora do prédio onde a planta se situa, e a pressão desses gases ao chegar à planta apresenta leves variações. As correntes de metano/gás natural, e CO₂ chegam com aproximadamente 40 barg, já o gás nitrogênio chega por duas correntes distintas, a depender de seu uso. A corrente de alta pressão é usada na alimentação e para inundar a planta, e chega a uma pressão de aproximadamente 140 barg. Já a corrente de baixa pressão, usada por exemplo na sessão de saturação, chega a uma pressão aproximada de 8 barg. Os reservatórios de água, etanol e C5+ são mantidos em pressão atmosférica. Os compressores e válvulas presentes na sessão de make-up são os responsáveis por condicionar essas correntes para que atinjam a pressão de operação. Já a temperatura dessas correntes e reservatórios também sofre leves variações, a depender de suas respectivas localizações na planta, ficando entre 25 °C e 40 °C (BARRETO JR; TAVARES, 2019).

Após a mistura da corrente **Ch #3** com as correntes de make-up, a nova corrente formada passa por um *Gas Booster* que eleva a pressão até aproximadamente 80 barg, que é a pressão aproximada da corrente de saída da seção de adsorção, **Ch #2**. A corrente recém pressurizada é então misturada à corrente **Ch #2** para logo em seguida serem encaminhadas ao compressor principal, de alta pressão, que pressuriza a corrente de saída a 90 barg, para finalmente ser usada nos ciclos de saturação, adsorção e regeneração.

Durante as sucessivas pressurizações e misturas que ocorrem na planta, as correntes passam por diversas variações na temperatura. Entretanto, as correntes perdem bastante calor para as tubulações metálicas que as conectam aos equipamentos, e tanto a sala quanto os reagentes são mantidos a temperaturas relativamente constantes. Com isso, as correntes se mantêm relativamente estáveis. Os equipamentos mais sensíveis a variações na temperatura, e objetos de estudo da planta são as colunas TSA, e por isso a temperatura do forno onde elas se encontram é mantida constante, em aproximadamente 40°C, para a operação durante a seção de adsorção. Para a seção de regeneração, as camisas de aquecimento das colunas são aquecidas a valores entre 280 e 300°C, visto que 290°C é uma temperatura comumente recomendada na literatura para ciclos de regeneração utilizando peneiras moleculares (NETUSIL; DITL, 2011).

2.2. Sobre os componentes presentes no processo

A planta piloto tem como intuito a realização de experimentos em menor escala que uma planta industrial, sendo capaz de coletar dados a uma fração do custo operacional e de ter um controle melhor do processo, podendo avaliar o processo de desidratação com diferentes frações de componentes e entender melhor como eles interferem nos resultados. Tendo isso em mente, a planta piloto foi desenvolvida para lidar com diversos componentes, e o fluxograma no simulador precisa estar igualmente preparado.

Os primeiros testes envolvem a desidratação dos gases metano e nitrogênio, contendo diferentes concentrações de gás carbônico na alimentação. No futuro, serão feitos testes com gás natural e com adição de etanol, sulfeto de hidrogênio e hidrocarbonetos contendo 5 a 10 carbonos em sua cadeia. A composição do gás natural usada na simulação (Tabela 2-1) vem de valor que consta no relatório de especificações técnicas da planta piloto.

Tabela 2-1 - Composição do gás natural a ser usado na planta piloto e na simulação.

Componente	Fração Molar
Metano	0,7598
Etano	0,1191
Propano	0,0801
i-Butano	0,0120
n-Butano	0,0290

Fonte: Relatório interno ATOMS/PETROBRÁS (BARRETO JR; TAVARES, 2019).

Os componentes que devem constar na simulação então são: Nitrogênio, Água, Dióxido de Carbono, Metano, Etano, Propano, n-Butano, i-Butano, i-Pentano, n-Pentano, n-Hexano, n-Heptano, n-Octano, n-Nonano, n-Decano, Etanol e Sulfeto de Hidrogênio. Entretanto, embora o fluxograma tenha sido desenvolvido já pensando nos testes futuros, as simulações deste trabalho focam nos testes de desidratação com os sistemas modelo de gás natural, metano e nitrogênio contendo diferentes concentrações de gás carbônico. Alguns dos componentes, portanto, não aparecerão nas tabelas de resultado, como: Etanol, i-Pentano, n-Pentano, n-Hexano, n-Heptano, n-Octano, n-Nonano, n-Decano, e Sulfeto de Hidrogênio. Algumas das correntes presentes no fluxograma para a alimentação destes componentes também não aparecerão nas tabelas, como Ethanol, C5+ e H₂S.

2.3. Sobre o simulador de processos

O uso de um simulador de processos é de grande valia para avaliar as condições de operação, pela análise dos balanços de massa, de pontos com risco de condensação na unidade, e observação do que precisa e do que não precisa ser revisto na planta piloto, em termos operacionais. Para que a simulação seja relevante para o projeto, os parâmetros da planta piloto precisam ser adicionados e abstrações precisam ser elaboradas, de modo a representar equipamentos não modelados no software. Nesta seção será apresentada uma visão geral sobre o princípio teórico de funcionamento de um simulador de processos, a escolha do software para a simulação, e um pouco sobre o funcionamento do software escolhido.

2.3.1. Princípio teórico para um cálculo de simulação

Ao usarmos um software para simular um ou mais processos químicos é importante que sejamos capazes de entender o que de fato está acontecendo naquele software. Independente do software escolhido o funcionamento deste se dará de modo similar. A simulação de um processo químico visando a condição do estado estacionário irá realizar cálculos buscando o equilíbrio termodinâmico das fases no sistema e os balanços de massa e energia das correntes, equipamentos, e da planta como um todo.

As condições de equilíbrio termodinâmico são derivadas do isolamento do termo de entropia na relação fundamental da termodinâmica (TAVARES; SEGTOVICH; MEDEIROS, 2023), e estabelecem que o equilíbrio termodinâmico de duas fases quaisquer é atingido nas seguintes condições, sendo j a fase e i o componente:

$$\begin{aligned}
 T^1 &= T^j: \text{Equilíbrio térmico,} & \text{para } j &= [2 \dots \pi] \\
 P^1 &= P^j: \text{Equilíbrio mecânico,} & \text{para } j &= [2 \dots \pi] \\
 \mu_i^1 &= \mu_i^j: \text{Equilíbrio químico,} & \text{para } j &= [2 \dots \pi] \text{ e } i = [1 \dots C]
 \end{aligned}$$

Entretanto, o cálculo do potencial químico pode ser feito a partir de dados de fugacidade, que pode ser obtida a partir de propriedades PVT de misturas. TAVARES et al. Demonstram no capítulo 6 de seu livro como a igualdade de potenciais químicos de um componente i em duas fases, ao ser expressa pela soma do potencial químico para a mesmas condições supondo gás ideal com as propriedades residuais, implica também na igualdade de fugacidade desse mesmo componente entre essas duas fases (TAVARES; SEGTOVICH; MEDEIROS, 2023). Desse modo, a terceira condição de equilíbrio pode ser substituída por:

$$\hat{f}_i^1 = \hat{f}_i^j: \text{Equilíbrio químico,} \quad \text{para } j = [2 \dots \pi] \text{ e } i = [1 \dots C]$$

A simulação de um processo químico em estado estacionário pode ser feita a partir do cálculo de condições de equilíbrio entre as fases presentes no sistema. Para a realização desses cálculos de equilíbrio, faz-se necessária a escolha de um modelo termodinâmico que seja capaz de representar bem a mistura dos componentes escolhidos nas condições de temperatura e pressão do sistema.

O modelo termodinâmico a ser usado para a simulação geralmente é escolhido a partir de uma lista de modelos pré-programados presente dentro do software de simulação, mas em alguns casos, o software pode permitir a inserção de modelos customizados. A escolha do modelo termodinâmico para a simulação da planta piloto será abordada em mais detalhes na Seção “2.4.3 - Escolhendo o modelo termodinâmico”. Entendendo melhor como funcionam os cálculos de equilíbrio em um software de simulação, a atenção agora pode ser voltada para a escolha do software.

2.3.2. Escolha do software para a simulação

Ao realizar o levantamento de possíveis softwares que poderiam ser usados na simulação da planta piloto, quatro opções foram cogitadas: **DWSIM**, **EMSO**, **Aspen HYSYS** e **Aspen Plus**.

DWSIM é um simulador gráfico de processos químicos de origem nacional, desenvolvido por Daniel Wagner Oliveira de Medeiros, engenheiro de processos da Petrobras. O DWSIM pode ser encontrado em duas versões: de código aberto, sob licença GPLv3; e a versão DWSIM Pro, uma versão paga e desenvolvida em conjunto com a empresa “CGC Capital-Gain Consultants GmbH”. A versão Pro tem desenvolvimento proprietário independente e apresenta algumas funcionalidades a mais, além de suporte privado e de funcionar como SaaS (*Software as a Service*) (MEDEIROS, 2023).

EMSO (*Environment for Modeling, Simulation, and Optimization*) é um simulador de processos orientado a equações, também de origem nacional, criado por Rafael de Pelegrini Soares na UFRGS (FIRMINO, 2010) e atualmente desenvolvido no projeto ALSOC, sigla para “Ambiente Livre para Simulação, Otimização e Controle de Processos”, objetivando o aprimoramento do software através da contribuição de diversos usuários. As simulações são realizadas através de uma linguagem de modelagem própria (SOARES, 2023).

Aspen HYSYS é um software proprietário de simulação de processos criado em 1996 pela Hyprotech, uma startup criada por pesquisadores da Universidade de Calgary (Canadá). A Hyprotech foi adquirida em 2002 pela AspenTech (*Aspen Technologies Inc.*), mas o HYSYS foi adquirido pela Honeywell em 2004 após uma decisão da Comissão Federal de Comércio dos Estados Unidos da América devido a uma investigação antitruste. Como parte da negociação, a AspenTech poderia continuar a comercializar e desenvolver o HYSYS livre de royalties, e a Honeywell poderia desenvolver outro produto independente, que foi então chamado de UniSim (GÁMEZ, 2023). Quando o nome HYSYS for abordado neste trabalho daqui em diante, a abordagem irá se referir ao produto desenvolvido pela AspenTech. O Aspen HYSYS “é o principal software de simulação de processos do setor de energia usado pelos principais produtores de petróleo e gás, refinarias e empresas de engenharia para otimização de processos em projetos e operações” (ASPENTECH, 2023a).

Aspen Plus é “o Software de Simulação de Processo Líder na Indústria Química” (ASPENTECH, 2023b). Ele foi lançado em 1982 pela AspenTech, uma empresa recém-criada com o intuito de comercializar o simulador desenvolvido a partir do projeto ASPEN (*Advanced System for Process Engineering*), um projeto de pesquisa conjunta entre o MIT (*Massachusetts*

Institute of Technology) (ASPENTECH, 2023c) e o Departamento de Energia dos Estados Unidos da América. O Aspen Plus foi desenvolvido para ser um sistema de simulação de processos de propósito geral, sendo capaz de simular em estado estacionário processos grandes e complexos, mas com o passar do tempo, sua utilização se disseminou pela indústria e seu objetivo original foi direcionado para um foco na otimização de processos (ASPENTECH, 2023d).

A partir das especificações usadas para a construção da planta piloto, foi definida a utilização do software **Aspen HYSYS** neste trabalho. A escolha do programa foi feita baseada na aplicação a ser usada, indústria de petróleo, onde o HYSYS é o software líder no mercado. Além disso, também foram levados em conta o design do programa, que é mais intuitivo e amigável para novos usuários, a atualização instantânea dos cálculos a cada mudança de parâmetros, e a familiaridade de outros membros do laboratório com o software.

2.3.3. Funcionamento do Aspen HYSYS

Assim como em outros simuladores de processos, no HYSYS é necessário selecionar um pacote termodinâmico para realizar cálculos termodinâmicos precisos. O pacote termodinâmico contém os modelos matemáticos e dados necessários para calcular as propriedades termodinâmicas das substâncias envolvidas no processo, como pressão, temperatura, composição, entalpia, entre outras. Isso será discutido na seção a seguir.

O HYSYS funciona usando uma abordagem de resolução sequencial de operações unitárias. Isso significa que as operações unitárias são definidas e interconectadas em um fluxograma, representando o fluxo de materiais e energia em um processo. Cada operação unitária é tratada individualmente e, em seguida, os resultados são passados para as etapas seguintes do processo. Nas versões mais recentes, também existe a opção de resolução simultânea, também chamado de “*Equation Oriented Mode*”, em que o usuário define um conjunto de equações que formarão o conjunto de equações algébricas não-lineares a serem resolvidas simultaneamente. Esta opção, entretanto, não está disponível para o fluxograma completo, sendo necessária a criação de um sub fluxograma específico onde ocorrerá esse cálculo. Além disso, até a Versão 10, usada para este trabalho, o modo simultâneo não é compatível com todos os modelos matemáticos de operações, nem com todos os pacotes de fluidos. Por esta razão, o modo sequencial foi escolhido para ser usado neste trabalho.

Ademais, o HYSYS utiliza uma estratégia iterativa para lidar com fluxogramas que envolvem reciclo. Após a definição do fluxograma e especificação inicial das variáveis de

processo, o software realiza cálculos de balanço de massa e energia, verificando a convergência. Enquanto a convergência não for alcançada, as variáveis são reajustadas e um novo cálculo é feito até que a convergência seja alcançada. Internamente são utilizados métodos numéricos de substituição sucessiva (ponto-fixa): *Wegstein* ou *Dominant Eigenvalue*. Existem unidades lógicas que podem ser colocadas no fluxograma, que não correspondem a um equipamento real, para ajustar parâmetros dessa convergência.

2.4. Sobre o pacote de fluidos

É necessária a escolha do Pacote de Fluidos na sessão de Propriedades antes de iniciar a construção do fluxograma, que será responsável pelo cálculo de propriedades termodinâmicas como densidade e entalpia de correntes monofásicas, e pelo cálculo de fugacidades e resolução da condição de equilíbrio de fases em correntes bifásicas (Vapor + Líquido), ou trifásicas (Vapor + Líquido orgânico + Líquido aquoso)

O *Aspen HYSYS User Guide* define como Pacote de Fluidos o conjunto de “pacote de propriedades, componentes (biblioteca, pseudo ou hipotético), pacote de reação e propriedades do usuário usadas para cálculos de fluxograma. Os pacotes de fluidos podem ser importados e exportados” (“HYSYS® 2004.2 User Guide”, 2005). Em simulações mais simples, onde não haja propriedades de usuário e reação química, um pacote de fluidos então é definido pela escolha da lista de componentes a serem usados (*Component List*) e do pacote de propriedades (*Property Package*). Ao acessar a sessão de Propriedades, seis abas podem ser vistas:

- *Component List*;
- *Fluid Packages*;
- *Petroleum Assays*;
- *Reactions*;
- *Component Maps*;
- *User Properties*.

Apenas as duas primeiras abas serão utilizadas para as simulações realizadas nesse trabalho. Na primeira aba, é feita a escolha dos componentes a serem usados na simulação. Essa etapa é de grande importância, pois antes de selecionar os componentes, é necessário escolher o banco de dados de componentes, e o banco de dados usado define quais pacotes de propriedades e modos de simulação estarão disponíveis.

O Aspen HYSYS oferece duas possibilidades de fonte de dados: “*HYSYS Databanks*” e “*Aspen Properties Databanks*”. A primeira fonte de dados é usada pelo HYSYS desde antes de

sua aquisição pela AspenTech; já a segunda foi adicionada posteriormente pela AspenTech, e seus dados também podem ser acessados diretamente pelo programa *Aspen Properties* (disponível na “*AspenTech Engineering Software Suite*”). Caso o usuário não escolha a fonte de dados, “*HYSYS Databanks*” é definida como fonte por padrão.

Em simulações de estado estacionário, todos os cálculos são feitos de modo sequencial (*Sequential Modular*) no fluxograma principal, mas o HYSYS dá a opção de criar fluxogramas indentados (*Sub-Flowsheets*) em que pode ser usado tanto o modo sequencial quanto o modo simultâneo (*Equation Oriented*). Para situações em que o modo simultâneo venha a ser usado em *Sub-Flowsheets*, é necessário que o fluxograma esteja usando como fonte de dados o “*Aspen Properties Databanks*”.

Após a definição do banco de dados a ser usado, são escolhidos os componentes que farão parte do fluxograma. Os componentes podem ser escolhidos através de listas, ou tendo seu nome digitado. No segundo caso, o HYSYS consegue identificar algumas variações de nomenclatura para um mesmo componente, mas ao selecionar, define um nome padronizado de acordo com o banco de dados selecionado na etapa anterior. Além disso, o nome padronizado para um componente pode ser diferente de um banco de dados para outro. Na grande maioria das situações, essa diferença de nomenclatura não é relevante, mas pode vir a ser um empecilho futuro caso o usuário decida criar variáveis de usuário ou códigos personalizados, e precisar fazer referência a um componente especificamente pelo nome.

Em seguida, na aba “*Fluid Packages*” será escolhido o Pacote de Propriedades para definir o Pacote de Fluidos. O Aspen HYSYS disponibiliza diversos Pacotes de Propriedades diferentes, mas separa eles em três tipos: *HYSYS*, *Aspen Properties* e *COMThermo*. O primeiro e o segundo tipo refletem os pacotes de propriedades já existentes no HYSYS que foram selecionados para serem usados com as listas de componentes de seus respectivos bancos de dados. Já *COMThermo* é definido pelo *Aspen HYSYS User Guide* como “*um framework de cálculo termodinâmico que torna possível desenvolver módulos de cálculo independentes, extensíveis e encapsulados para reutilização dentro do ciclo de vida da engenharia. Os benefícios imediatos são escolhas termodinâmicas mais flexíveis e a fácil integração de métodos internos e de terceiros.*” (“*HYSYS® 2004.2 User Guide*”, 2005). Para usar os pacotes disponíveis pelo *framework COMThermo* é necessário associá-lo a uma lista de componentes do tipo *HYSYS Databanks*.

Entre esses 3 tipos mencionados, o HYSYS disponibiliza diversos modelos termodinâmicos diferentes para definir o pacote de propriedades. Dentre esses modelos, encontramos Equações de Estado, modelos de Coeficiente de Atividade, modelos de Pressão

de Vapor, modelos Semiempíricos e modelos especiais, que não se encaixam em nenhum dos grupos anteriores. A escolha do modelo termodinâmico ideal para a simulação a ser realizada pode gerar grande interferência na confiabilidade dos dados obtidos na simulação. Por isso, é imprescindível que o usuário conheça bem a planta que será simulada, que o modelo escolhido seja adequado para o tipo de processo, e se possível, que sejam feitos testes de validação para verificar a confiabilidade do modelo em descrever a realidade. De modo a auxiliar o usuário na escolha do modelo, o HYSYS disponibiliza, tanto em seus manuais quanto na guia de Ajuda do programa, tutoriais e assistentes de como escolher o melhor pacote para a simulação.

Ao entrar na guia de ajuda e buscando por “*Property Packages*”, o primeiro resultado da busca nos leva a uma página com explicações gerais sobre os pacotes de propriedades, e nele vemos novamente a definição comentada anteriormente nesse subcapítulo: “*Property Package + Component List = Fluid Package*”. Nesta página, também se encontram diversos links que direcionam para novas páginas que explicam em detalhes cada modelo termodinâmico disponível, além de um link para o “*Aspen HYSYS Property Package Selection Assistant*”. Através deste assistente, podemos navegar por diversas opções que filtram os modelos termodinâmicos indicados ao especificarmos o tipo de componentes usados ou o tipo de processo. Na seção 2.4.1 são mostradas as sugestões do assistente ao especificarmos nossa planta por tipo de componente, e na seção 2.4.2 são mostradas as sugestões ao especificarmos por tipo de processo. Na seção 2.4.3, as sugestões do assistente são avaliadas de modo a escolher um pacote de fluídos para a simulação.

2.4.1. Especificando por tipo de componente

Ao optar por especificar o tipo de componente, surge uma lista com 3 opções:

- “*Chemical system*”.
- “*Hydrocarbon system*”.
- “*Special (water only, amines, Sour water, electrolyte, aromatics only, thiols and hydrocarbons)*”.

Como o processo é de desidratação de gás natural, estamos lidando primordialmente com um sistema de hidrocarbonetos, logo escolhemos a segunda opção. Em seguida, o assistente pergunta:

“*Does the mixture contain petroleum assays or hypocomponents?*” (Yes/No)

Como o processo lida a princípio apenas com gás natural, não são considerados ensaios de petróleo. “*Hypocomponent*” é uma nomenclatura usada pelo HYSYS equivalente a

pseudocomponente. Por estarmos tratando apenas de frações leves de gás natural, o uso de pseudocomponentes não é necessário. Resposta: “No”. O assistente então nos fornece as seguintes sugestões:

*“Use **Peng-Robinson, Lee-Kesler-Plocker, or SRK** (if no MeOH or Glycols).”*

*“If water solubility in the hydrocarbon phase or hydrocarbon solubility in the water phase is important, use **Kabadi-Danner**.”*

*“If there is only a single component of Select Gases (Ar, CH₄, C₂H₄, C₂H₆, C₃H₈, iC₄, nC₄, CO, CO₂, D₂, H₂, o-H₂, p-H₂, He, N₂, O₂, Xe) and Light hydrocarbons, use **MBWR**.”*

*“For Petroleum Fluid downstream of the Well, use **Neotec Black Oil or Infochem Multiflash**.”*

*“For TEG Dehydration systems, use **Peng-Robinson**.”*

2.4.2. Especificando por tipo de processo

Ao optar por especificar o tipo de processo, surge uma lista com 8 opções:

- *Chemical;*
- *Electrolyte;*
- *Environmental;*
- *Oil and Gas processing;*
- *Mineral and metallurgical;*
- *Petrochemical;*
- *Power;*
- *Refining.*

Como a planta piloto tem como objetivo a desidratação de gás natural, é escolhida a opção “Oil and Gas processing”. O assistente nos dá então a seguinte sugestão: *“In general, a cubic equation of state-based property package is appropriate, such as **Peng-Robinson, CPA or SRK**.”*

2.4.3. Escolhendo o modelo termodinâmico

A partir das duas seções anteriores, foram sugeridos os modelos de Peng-Robinson, Lee-Kesler-Plöcker, e SRK, ao especificar o tipo de componente; e os modelos de Peng-Robinson, CPA ou SRK, ao especificar o tipo de processo. Como tanto Peng-Robinson quanto SRK (Soave-Redlich-Kwong) foram indicados em ambos os caminhos de especificação, a escolha ficou limitada a esses dois.

Também na guia de ajuda, Peng-Robinson é definido como um “modelo ideal para cálculos de ELV para sistemas de hidrocarbonetos”. O pacote de propriedades presente no HYSYS é dito ser capaz de “resolver rigorosamente qualquer sistema monofásico, bifásico ou trifásico com alto grau de eficiência e confiabilidade e ser aplicável em uma ampla gama de condições”, de temperaturas acima de -271 °C e pressões até 1000 bar. Entretanto, em situações em que sistemas altamente não ideais são encontrados, o uso de modelos de atividade, ou de modelos de Equações de Estado avançadas, como CPA ou PC-SAFT, é recomendado.

Já o modelo de SRK é definido na guia de ajuda como um modelo capaz de fornecer resultados comparáveis aos de Peng-Robinson, mas em uma faixa de aplicações significativamente mais limitada, com temperaturas a partir de -143 °C e pressões até 350 bar. O modelo de SRK não é aconselhado de ser usado em situações em que haja componentes químicos polares, como álcoois e ácidos, sendo eles mais precisamente simulados com o uso de modelos de atividade, ou de modelos de Equações de Estado mais avançadas, como CPA ou PC-SAFT,

Além disso, a guia de ajuda também indica que para aplicações de petróleo, gás ou petroquímica, o pacote de propriedades Peng-Robinson é geralmente recomendado. O único problema que essa escolha de modelo pode acarretar é caso haja o uso de etanol na corrente, de modo a evitar a formação de hidratos.

Como o modelo de Peng-Robinson considera que as moléculas sejam esferas apolares como simplificação, ele não é capaz de representar bem o etanol, que é uma molécula polar. A princípio, não serão feitos testes contendo etanol, sendo mais importante a caracterização da maneira mais fiel possível do processo, então **Peng-Robinson** foi escolhido como modelo termodinâmico.

3. Validação do modelo termodinâmico

De modo a utilizar o modelo de Peng-Robinson na simulação, é necessário que o modelo seja validado para os componentes que serão usados a princípio na simulação. Na Suíte da AspenTech é disponibilizado um programa chamado Aspen Properties Desktop. Neste programa, é possível ter acesso aos bancos de dados do NIST ThermoData Engine e do DECHEMA. Esses dados também podem ser acessados pelo Aspen Plus. A planta piloto simulada usa a princípio 4 componentes, mas o NIST ThermoData Engine só oferece dados experimentais de propriedades de componentes puros ou de misturas binárias na versão 10 da Suíte Aspen (Figura 3-1). Então, para avaliar o modelo usado no HYSYS, foram coletados dados de ELV (Equilíbrio Líquido-Vapor) de misturas binárias do NIST para os 4 componentes, ou seja, 6 misturas binárias. As fontes de dados para a validação, as condições de temperatura e pressão, e o número de pontos experimentais podem ser conferidos na Tabela 3-1.

$$C(4,2) = \frac{4!}{2!(4-2)!} = \frac{24}{4} = 6$$

Figura 3-1 - Captura de tela do Aspen Properties Desktop V10, mostrando os dados do NIST ThermoData para a mistura binária H₂O + CO₂.

The screenshot displays the Aspen Properties Desktop V10 interface. On the left, a tree view shows the data structure for 'Data for WATER(1) and CO2(2)', including categories like Binary diffusion coefficient, Binary LLE, Binary VLE, Critical density, Critical pressure, Critical temperature, Density, Excess enthalpy, Lower consolute temperature, Surface tension, and Viscosity. The central dialog box, titled 'NIST ThermoData Engine', is open, showing 'Property data type' set to 'Binary mixture' and 'Component(s) to evaluate' set to 'WATER' and 'CO2'. Below the dialog, a table lists experimental data points:

No.	Name	Points	Year	Temp. ranges (K)
			1981	
			1963	
			1964	
			1981	
			1985	
			1963	
			1964	
			2000	
			2000	
			2000	
			1997	
			2000	
			2016	
			2016	
			2004	
			1989	
			2000	
			2016	
			2016	
			1992	
			2000	
			2016	
22	Density 015	77	2016	
23	Density 017	11	2016	
24	Density 018	5	2000	
25	Density 019	22	2016	
26	Density 020	5	2016	
27	Density 021	102	1959	
28	Density 022	77	1992	

Fonte: Capturado pelo autor (2023).

Tabela 3-1 - Fontes de dados das misturas binárias, condições usadas e n° de pontos.

Mistura	Temperatura (°C)	Pressão (bar)	N° Pontos	Fonte
H₂O-CH₄	10,74	47,8 - 74,1	6	(FROST et al., 2014)
	24,99	25 - 125	5	(YARYMAGAEV et al., 1985)
	39,99	25 - 125	5	
	64,98	25 - 125	5	
H₂O-N₂ (x_i H₂O)	19,85	1,00 - 200,00	10	(BARANENKO et al., 1990)
	39,85	1,00 - 200,00	10	
	59,85	1,00 - 200,00	10	
	79,85	1,00 - 200,00	10	
	99,85	5,00 - 200,00	9	
	119,85	5,00 - 200,00	9	
	139,85	5,00 - 200,00	9	
H₂O-N₂ (y_i H₂O)	37,74	3,45 - 137,90	6	(GILLESPIE; WILSON, 1980)
	93,31	13,79 - 137,90	4	(RIGBY; PRAUSNITZ, 1968)
	24,99	22,49 - 38,70	3	
	49,98	21,09 - 77,00	4	
	74,98	42,21 - 89,72	3	
	99,97	57,17- 101,52	3	
	99,92	50,66 - 405,30	8	(SIDOROV et al., 1952)
H₂O-CO₂	109,98	100,00 -1.000,00	10	(TAKENOUCI; KENNEDY, 1964)
	149,98	100,00 -1.000,00	10	
	200,00	100,00 -1.000,00	10	
	250,02	100,00 -1.000,00	10	
	260,02	200,00 -1.000,00	10	
	270,03	200,00 -1.000,00	10	
	275,03	100,00 - 800,00	10	
	300,03	100,00 - 550,00	10	
	325,04	150,00 - 400,00	6	
268,08	300,00 - 900,00	6	(TOEDHEIDE; FRANCK, 1963)	
CH₄-CO₂	-63,84	51,23 - 55,50	6	(DONNELLY; KATZ, 1954)
	-53,85	45,44 - 64,26	5	
	-49,41	14,82 - 65,43	10	
	-31,64	23,92 - 79,01	10	
	-13,32	31,92 - 70,81	10	
	-1,67	50,54 - 76,39	7	
N₂-CO₂	-20,08	36,98 - 127,37	6	(KAMINISHI; TORIUMI, 1966)
	-0,05	74,17 - 113,79	4	

	14,94	60,80 - 103,35	6	(KRICHEVSKY et al., 1962)
	19,94	60,80 - 98,79	5	
	24,94	70,93 - 92,21	4	
	27,93	70,93 - 87,14	4	
	-3,15	34,25 - 121,96	37	(SOMAIT; KIDNAY, 1978)
	-54,96	12,77 - 131,62	9	(ZENNER; DANA, 1963)
	-40,27	17,63 - 138,92	11	
	-0,05	48,33 - 118,55	9	
CH₄_N₂	-162,24	1,72 - 13,79	14	(CINES et al., 1953)
	-151,15	3,45 - 27,58	14	
	-139,95	4,83 - 34,47	14	
	-128,84	8,62 - 41,37	12	
	-117,73	13,79 - 44,82	10	

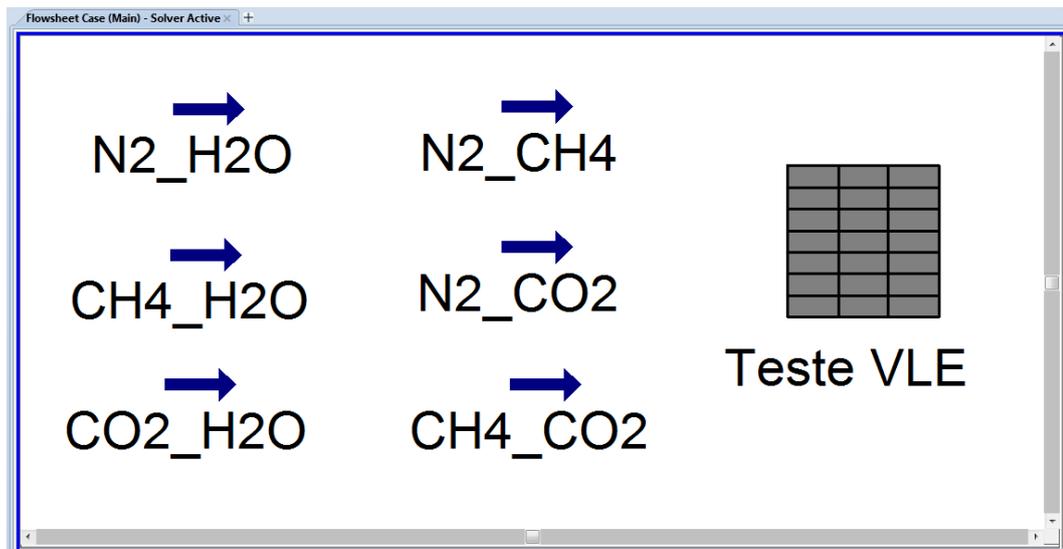
Fonte: Elaborado pelo autor (2023).

Os dados experimentais de ELV selecionados se referem a isotermas, de modo que ao final teremos gráficos do tipo P_{xi} , para fração do componente i na fase líquida, e P_{yi} , para fração do componente i na fase vapor. Na Tabela 3-1, constam as fontes de dados escolhidas para cada mistura, bem como suas respectivas isotermas e faixas de pressão, quantidade de pontos experimentais e a fonte usada. A escolha da quantidade de fontes para cada mistura varia bastante devido à disponibilidade de pontos experimentais para cada mistura e condição.

Os dados experimentais foram então adicionados em uma pasta de trabalho do Microsoft Excel, com cada mistura em uma planilha, e tratados para serem processados pelo script em Python. A fim de comparar estes dados, foi criada uma *flowsheet* simples no Aspen HYSYS para simular 6 correntes, uma para cada mistura binária, e expor as frações dos componentes em cada fase em um objeto *SPREADSHEET*.

O HYSYS possui um interpretador de Visual Basic que pode ser usado para criação de variáveis e operações customizados, além de comunicar com o Microsoft Excel. Essa mesma linguagem de programação foi aproveitada para a comunicação com o script em Python. Através desse dialeto, é possível realizar a entrada e saída de diversos tipos de dados do HYSYS, mas ao procurar as sintaxes possíveis, não foi possível encontrar uma maneira direta de extrair os dados de fração molar de cada fase das correntes. Com isso, foi criado o objeto *SPREADSHEET* de nome "Teste VLE" para pegar esses dados, visto que foi encontrada sintaxe para comunicação externa com a *SPREADSHEET*. Na Figura 3-2 pode ser vista uma captura de tela do fluxograma criada para esse fim:

Figura 3-2 - Captura de tela do fluxograma de validação do modelo de Peng-Robinson.



Fonte: Elaborado e capturado pelo autor (2023).

Com isso, o script em Python foi usado para pegar os dados de temperatura, pressão e composição média de cada linha dos valores experimentais, alimentar esses dados no HYSYS, copiar da *SPREADSHEET* os valores de fração molar por componente em cada fase e inserir na mesma linha da planilha do Excel usada para consulta. A partir desses dados, foram criados 12 gráficos com a biblioteca Matplotlib, sendo 2 gráficos para cada mistura binária: um para a fração molar na fase vapor e outro para a fração molar na fase líquida.

3.1. Diagramas de fases

Para a elaboração dos gráficos a seguir, foi priorizada a escolha de conjuntos de dados que estivessem em condições próximas às condições de temperatura e pressão usadas na planta piloto. Entretanto, nem sempre as faixas desejadas estavam disponíveis no NIST ThermoData. Nestes casos, optou-se por pegar os dados com condições mais próximas e com maior quantidade de pontos em um mesmo experimento.

Nas próximas subseções, os gráficos renderizados serão comentados quanto a discrepância entre os dados experimentais e os dados calculados. Também serão informadas nas respectivas legendas os desvios calculados para cada caso. São eles: o Desvio Relativo Absoluto Médio (DRAM%) e a Raiz do Desvio Quadrático Médio (RQM).

O Desvio Relativo Absoluto Médio (em inglês: *Average Absolute Relative Deviation*, ou AARD%) será calculado fazendo a média do módulo dos desvios percentuais relativos entre os valores experimentais e os valores calculados. Já a Raiz do Desvio Quadrático Médio (em inglês: *Root Mean Squared Error*, ou RMSE) será calculada fazendo a raiz da média do

quadrado da diferença entre os valores experimentais e os valores calculados. Podemos então calcular DRAM% e RQM através das seguintes equações:

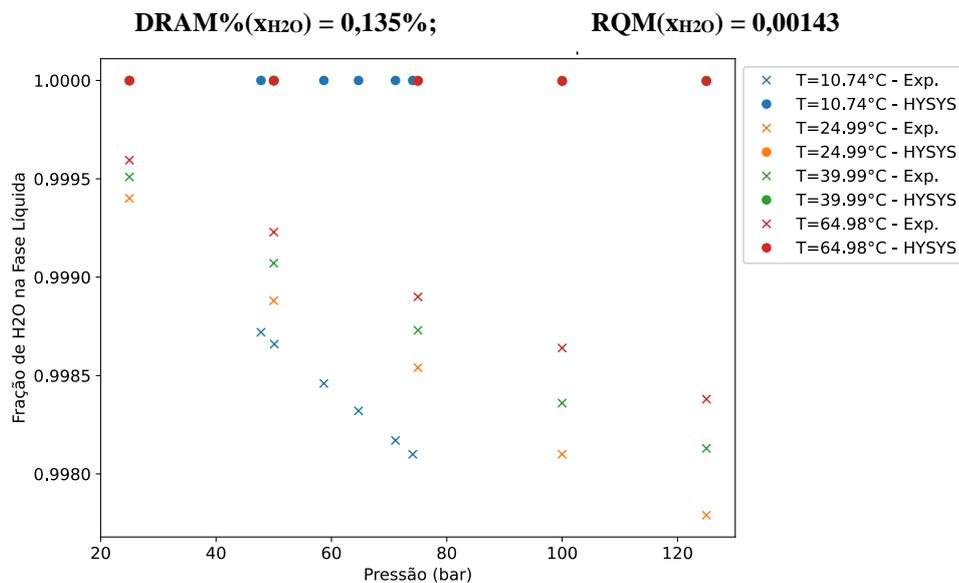
$$DRAM\%(x_i) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left| \frac{x_{i,exp} - x_{i,calc}}{x_{i,exp}} \right| \times 100 \quad ; \quad RQM(x_i) = \sqrt{\frac{\sum_{i=1}^n (x_{i,calc} - x_{i,exp})^2}{n}}$$

Onde “n” é o número total de amostras, “i” é o componente da mistura cujo desvio será calculado, “ $x_{i,calc}$ ” é a fração molar calculada do componente i, e “ $x_{i,exp}$ ” é a fração molar experimental do componente i. A letra “x” costuma é usada para a fração molar na fase líquida, mas para o mesmo cálculo referente à fase vapor, “x” pode ser substituído por “y”.

3.1.1. Mistura binária H₂O + CH₄

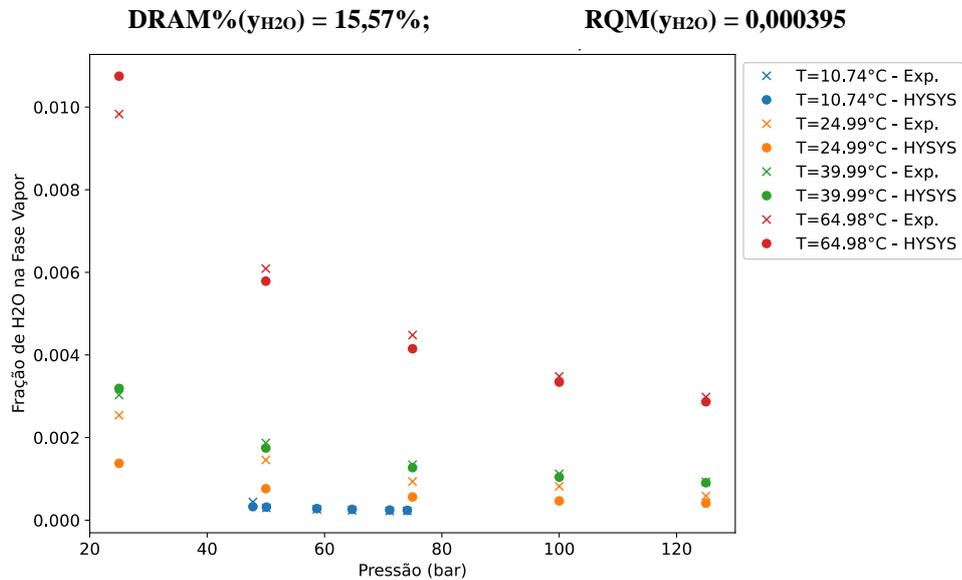
Na mistura binária H₂O + CH₄, pode-se notar pelas Figuras Figura 3-3 e Figura 3-4 que os pontos que representam os valores calculados de fração molar de H₂O ficaram muito mais próximos dos valores experimentais retirados do NIST na fração vapor do que na fase líquida. Essa diferença pode representar uma limitação do modelo de Peng-Robinson implementado no HYSYS. Entretanto, analisando os eixos dos gráficos, vemos que os dados de fração molar apresentam uma diferença pequena, mas que é graficamente ampliada devido à escala do eixo vertical.

Figura 3-3 - Fração de H₂O na fase líquida da mistura binária H₂O + CH₄.



Fonte: Elaborado pelo autor (2023).

Figura 3-4 - Fração de H₂O na fase vapor da mistura binária H₂O + CH₄.



3.1.2. Mistura binária H₂O + N₂

Para a mistura H₂O + N₂, os dados calculados estão tão próximos dos dados experimentais no gráfico de fração de H₂O na fase líquida (Figura 3-5) que os pontos acabam por se sobrepor. O mesmo já não acontece para a fase vapor (Figura 3-6), onde as discrepâncias são mais evidentes à medida que a temperatura e a pressão aumentam.

Figura 3-5 - Fração de H₂O na fase líquida da mistura binária H₂O + N₂.

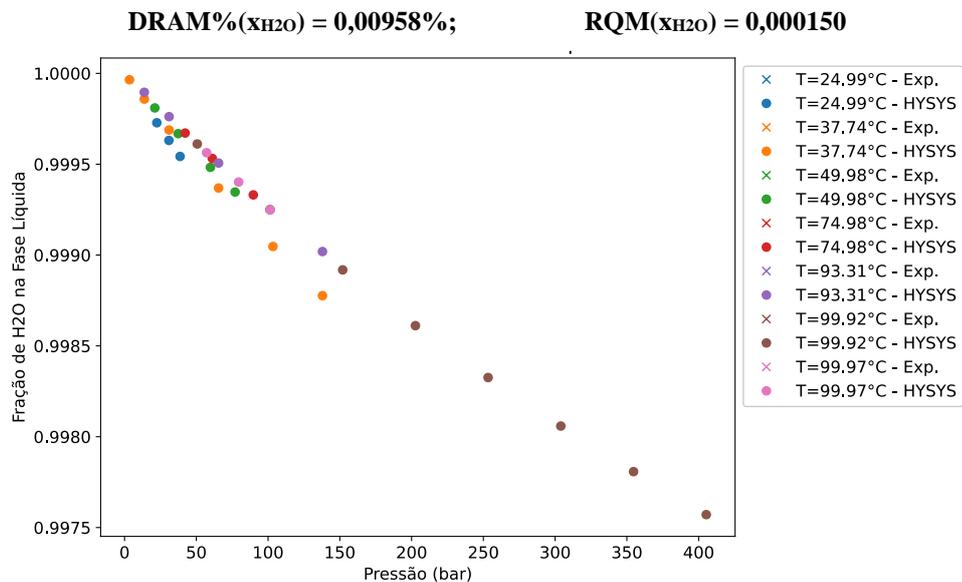
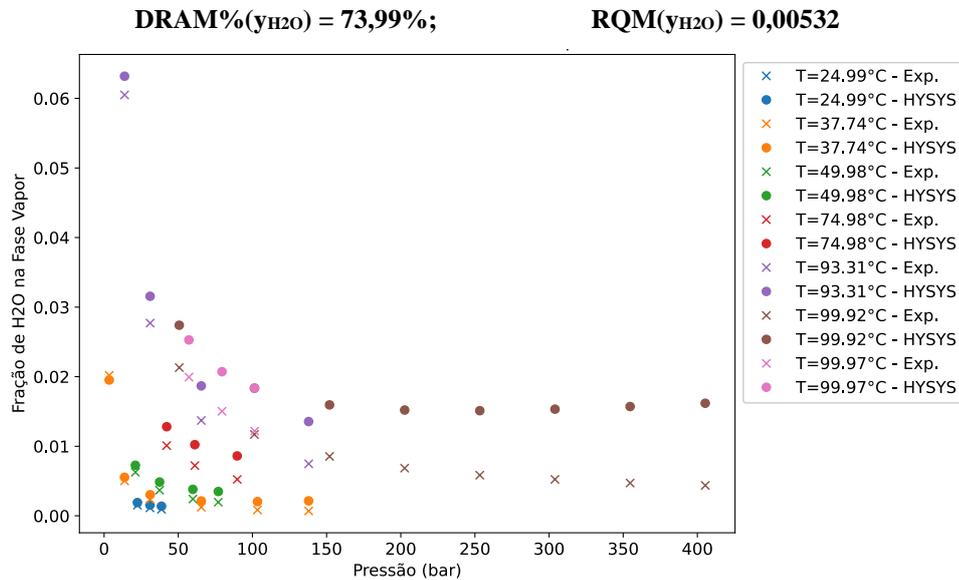


Figura 3-6 - Fração de H₂O na fase vapor da mistura binária H₂O + N₂.

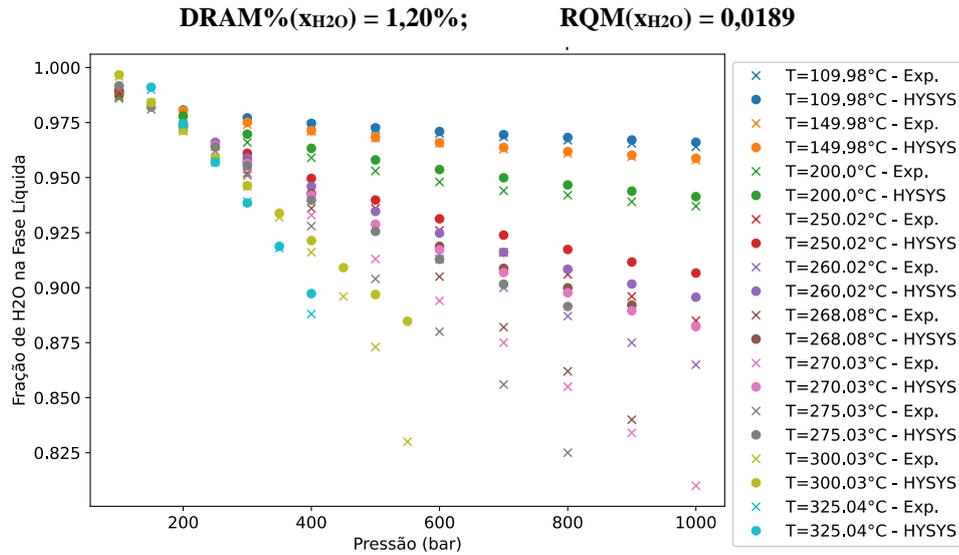


Fonte: Elaborado pelo autor (2023).

3.1.3. Mistura binária H₂O + CO₂

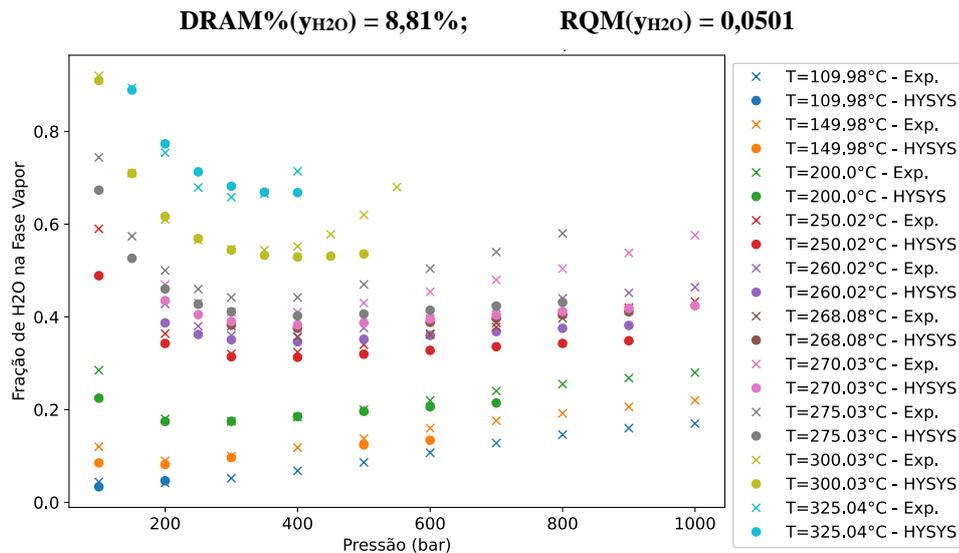
Para a mistura H₂O + CO₂, podemos ver o mesmo comportamento de discrepância entre os dados experimentais e os calculados de fração de H₂O na fase líquida (Figura 3-7) à medida em que a pressão e a temperatura aumentam. Na fase vapor (Figura 3-8) essa discrepância se torna ainda mais aparente. Um possível motivo para essa discrepância pode ter relação com a característica polar de ambas as moléculas, que não é contabilizada nos cálculos do modelo termodinâmico selecionado. Entretanto, como a planta piloto irá operar a menos de 300 bar, a maior parte das discrepâncias vistas nessa mistura binária são de menor relevância.

Figura 3-7 - Fração de H₂O na fase líquida da mistura binária H₂O + CO₂.



Fonte: Elaborado pelo autor (2023).

Figura 3-8 - Fração de H₂O na fase vapor da mistura binária H₂O + CO₂.



Fonte: Elaborado pelo autor (2023).

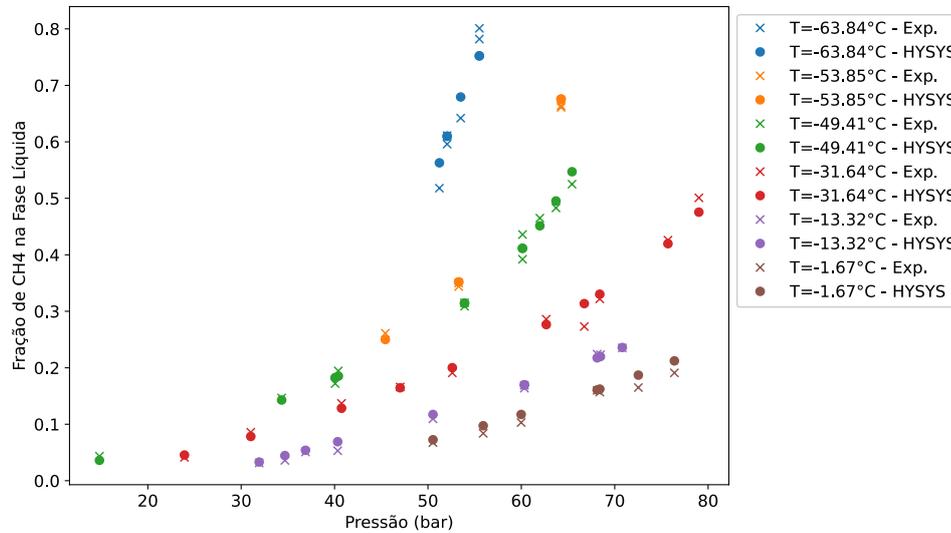
3.1.4. Mistura binária CH₄ + CO₂

A mistura CH₄ + CO₂ já apresentou uma consonância maior entre dados calculados e experimentais, apesar de as faixas de temperatura disponíveis no NIST estarem bem distantes das faixas de operação da planta piloto. Frações de CH₄ na fase líquida podem ser vistos na Figura 3-9 e frações da fase vapor na Figura 3-10.

Figura 3-9 - Fração de CH₄ na fase líquida da mistura binária CH₄ + CO₂.

DRAM%(x_{CH4}) = 6,03%;

RQM(x_{CH4}) = 0,0170

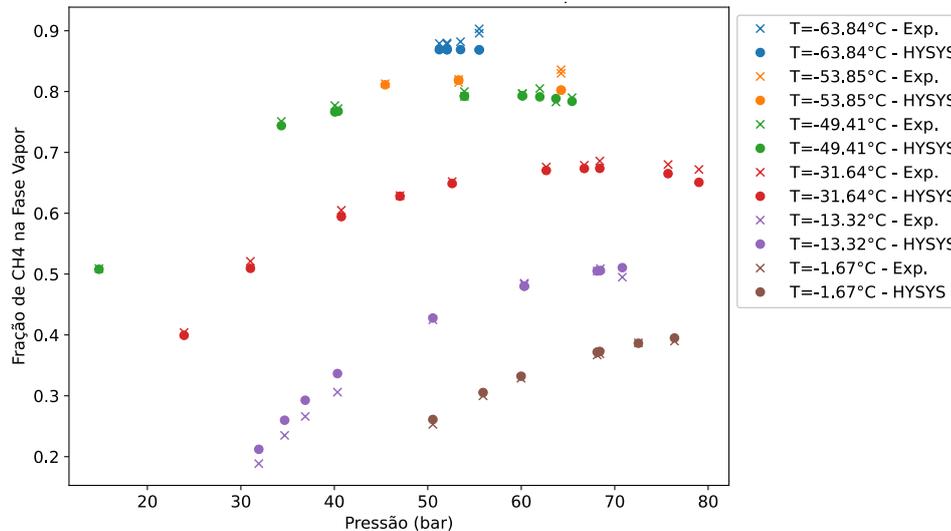


Fonte: Elaborado pelo autor (2023).

Figura 3-10 - Fração de CH₄ na fase vapor da mistura binária CH₄ + CO₂.

DRAM%(y_{CH4}) = 2,07%;

RQM(y_{CH4}) = 0,0138



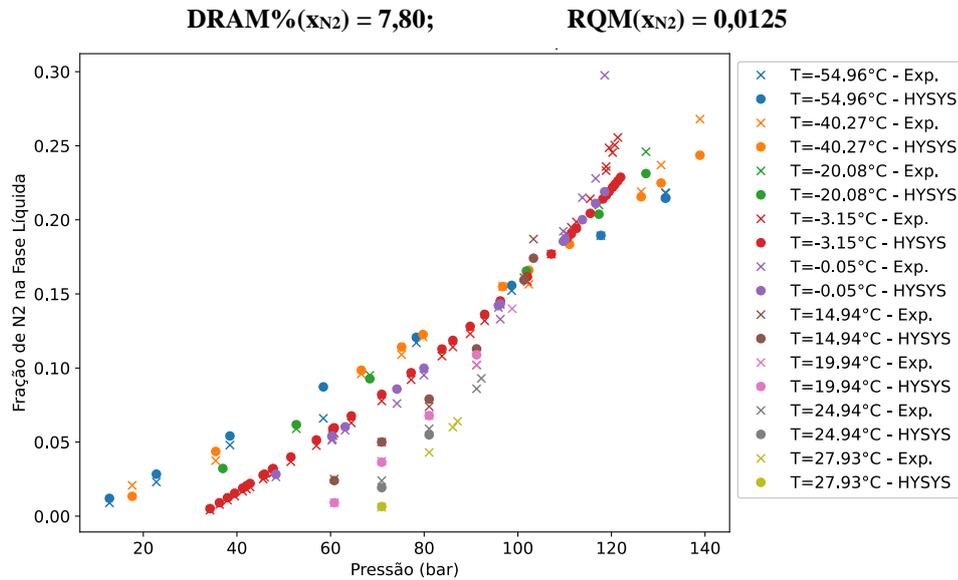
Fonte: Elaborado pelo autor (2023).

3.1.5. Mistura binária N₂ + CO₂

A mistura N₂+CO₂ obteve resultados melhores para a fase vapor (Figura 3-12) do que para a fase líquida (Figura 3-11), além de ser mais fácil de visualizar. Devido à pequena quantidade de pontos por experimento, dados de diversas temperaturas foram utilizados. Muitos pontos então ficaram próximos demais entre si no gráfico da fase líquida, dificultando a visualização. Também pode-se perceber uma divergência entre os pontos em pressões mais

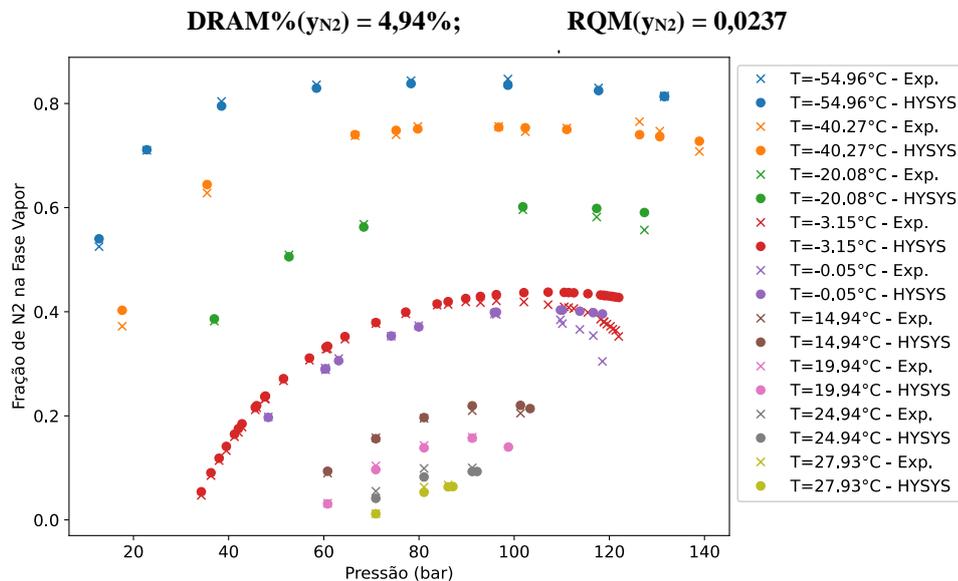
altas. Esse mesmo comportamento foi visto em outras misturas binárias, e pode estar relacionada ao desvio do comportamento ideal com o aumento da pressão, que não é tão bem retratado pelo modelo de Peng-Robinson.

Figura 3-11 - Fração de N₂ na fase líquida da mistura binária N₂ + CO₂.



Fonte: Elaborado pelo autor (2023).

Figura 3-12 - Fração de N₂ na fase vapor da mistura binária N₂ + CO₂.



Fonte: Elaborado pelo autor (2023).

3.1.6. Mistura binária CH₄ + N₂

Temos por fim a mistura CH₄ + N₂, que apesar de ter diversos pontos disponíveis na literatura, esses pontos só foram encontrados a temperaturas abaixo de -115 °C e pressões abaixo de 50 bar. Nas condições em que os experimentos foram realizados, o modelo de Peng-Robinson foi perfeitamente capaz de simular o comportamento da mistura. Na Figura 3-13 vemos as frações de CH₄ na fase líquida e na Figura 3-14 as frações na fase vapor.

Figura 3-13 - Fração de CH₄ na fase líquida da mistura binária CH₄ + N₂.

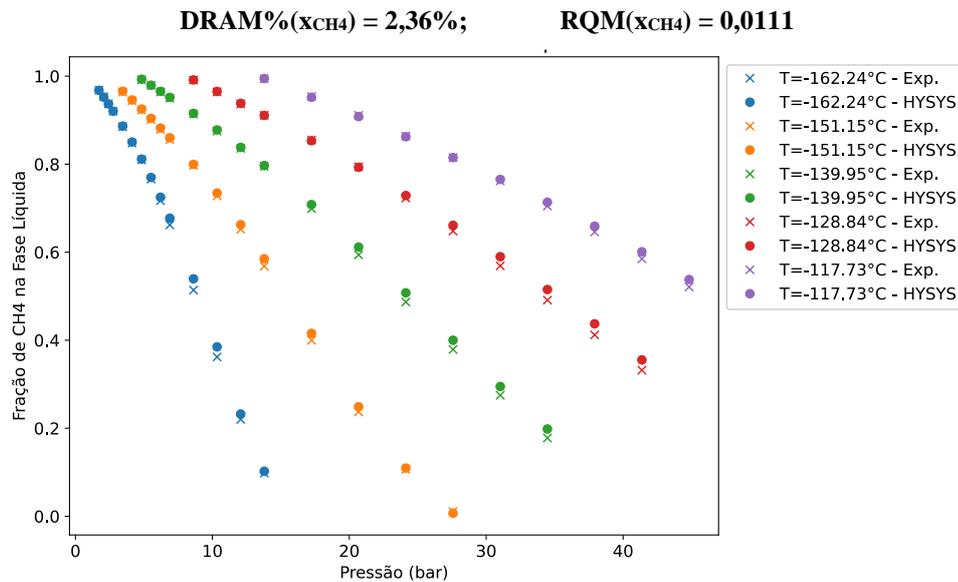
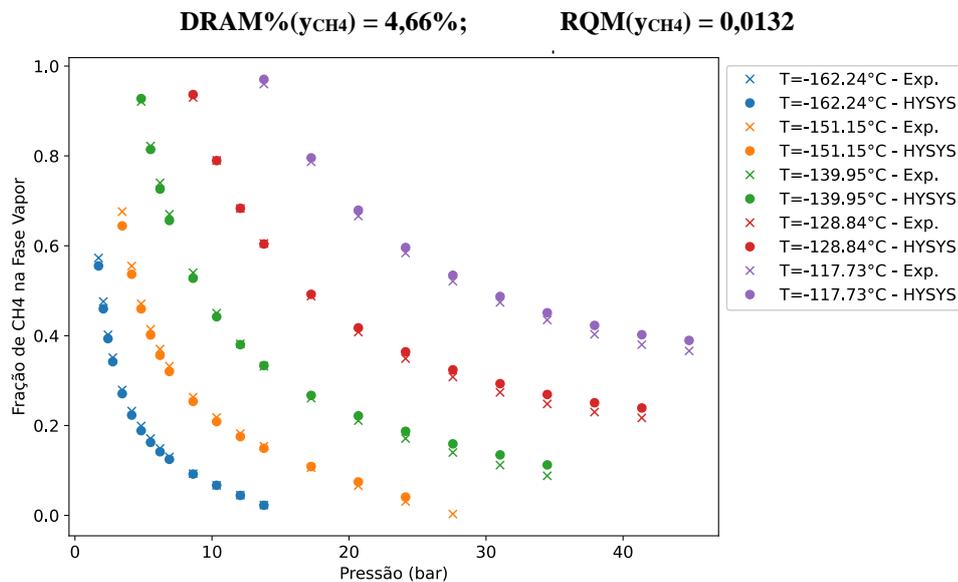


Figura 3-14 - Fração de CH₄ na fase vapor da mistura binária CH₄ + N₂.



3.2. Considerações finais da seção

O modelo de Peng-Robinson provou ser capaz de calcular valores bem próximos aos valores experimentais para diversas misturas binárias, a depender das faixas de pressão e temperatura escolhidos. Dada a falta de dados experimentais para faixas de temperatura e pressão mais altas, os dados de simulação a serem calculados neste trabalho podem ser comparados com os dados experimentais a serem coletados na planta piloto, de modo a confirmar o nível de confiabilidade do modelo usado, e caso necessário, ajudar na escolha de um novo modelo termodinâmico.

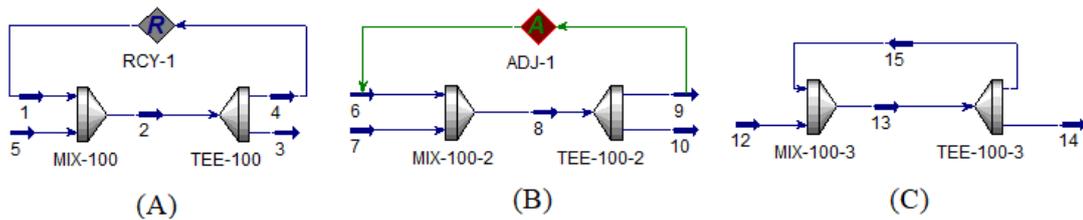
4. Desenvolvimento do fluxograma

Após o levantamento de dados sobre a planta piloto, a definição dos parâmetros para simulação e a validação do modelo termodinâmico de Peng-Robinson, iniciou-se a criação do fluxograma para as simulações. O fluxograma finalizado pode ser visto na Seção 4.3.

4.1. Familiarização com o Aspen HYSYS

Antes do desenvolvimento do fluxograma, porém, foi necessário um pequeno período para familiarização com a interface do Aspen HYSYS e com suas funcionalidades. Durante essa etapa, foram criados fluxogramas temporários com o intuito de entender o funcionamento dos diversos modelos matemáticos fornecidos pelo software para representar equipamentos, simplificações de operações e formas de controle dos processos. Dois exemplos podem ser vistos abaixo, na Figura 4-1 e na Figura 4-2.

Figura 4-1 – Captura de tela de fluxograma teste para criação de reciclos.



Fonte: Elaborado e capturado pelo autor (2023).

Na Figura 4-1, foi feito um teste onde se observa o comportamento do HYSYS ao se criar correntes de reciclo. Em alguns simuladores, como o Aspen Plus, a criação de um reciclo é um tanto quanto direta, bastando criar uma corrente e conectá-la a dois pontos diferentes do fluxograma, e o reciclo está feito. Essa conexão é similar à vista na Figura 4-1.C

No exemplo da Figura 4-1.A pode ser vista a lógica empregada no HYSYS, onde além da criação dessa corrente, é necessário o uso de um objeto de reciclo e de uma nova corrente que será posicionada em seguida. Esse objeto de reciclo, chamado de “Recycle” na paleta de modelos, é responsável por monitorar as correntes anterior e posterior, de modo a ativar ciclos de cálculos iterativos até que ambas as correntes tenham valores similares ou que o número limite de iterações definido seja atingido. A similaridade das correntes é definida através de valores de sensibilidade para as diferenças de composições e de condições termodinâmicas. O painel de edição desses valores é encontrado na janela de configurações de parâmetros do objeto de reciclo. Nessa mesma janela podem ser definidos detalhes do modo de cálculo do reciclo,

como o tipo de método numérico iterativo e o limite máximo de iterações para tentar atingir convergência.

No exemplo da Figura 4-1.B foi realizado um teste para averiguar se um objeto de ajuste poderia ser usado em substituição a um objeto de reciclo. Um objeto “Adjust”, como é chamado no HYSYS, é usado quando se tem por intuito que determinada variável atinja um valor objetivo de maneira indireta, através do ajuste de outra variável. Exemplo hipotético: Duas correntes de temperaturas diferentes podem ser misturadas, e a vazão de uma dessas correntes pode ser ajustada de modo a controlar a temperatura da corrente de saída do misturador.

Em um momento anterior, foi realizada uma tentativa de reproduzir o fluxograma gerado para o relatório de construção da planta piloto (Figura 2-4), mas como este possui diversos sub-fluxogramas, alguns dos detalhes de seu funcionamento não estão visíveis, não tendo sido possível atingir uma convergência nas tentativas de simulação. Ao fazer o levantamento de possíveis causas e soluções, foi sugerido que poderia haver algum erro no modo como o reciclo foi implementado e que, em alguns casos, um objeto de reciclo pode ser satisfatoriamente substituído por um objeto de ajuste.

No fluxograma desta figura, entretanto, foi notado que para este caso talvez essa alternativa não fosse possível. Ao avaliar o funcionamento deste objeto, foi notado que ao fazer a conexão, o ajuste era completado, mas apenas para a variável escolhida, que nesse caso foi a vazão mássica. Ainda assim, esse ajuste só funcionava caso outras variáveis, como temperatura, pressão e composição, fossem adicionadas manualmente na corrente 6 além de serem necessariamente iguais às da corrente 7. Para esse caso simples, tal alternativa para o reciclo consegue convergir, mas invalida o propósito de simular um reciclo, que é justamente de fazer o cálculo destas variáveis. Então ficou definido que seria usado o objeto de reciclo, tentando entender seu funcionamento e situações comuns que possam interferir em sua convergência.

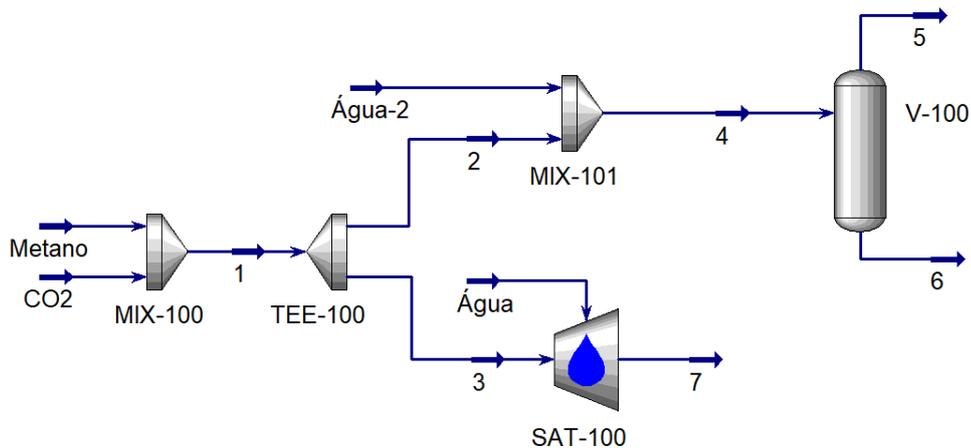
Durante a familiarização com o Aspen HYSYS, foi realizado um teste para verificar duas maneiras diferentes de saturar com água uma corrente gasosa e comparar se os resultados seriam similares. Neste teste, uma corrente modelo de mistura de metano com dióxido de carbono, a corrente “1”, é separada em duas correntes com propriedades idênticas, as correntes “2” e “3”, de modo que cada corrente segue um caminho distinto para sua saturação.

A corrente “3” (Figura 4-2) entra em um objeto que representa um modelo de saturador de corrente. Neste modelo, é necessária a conexão de três correntes para seu funcionamento: Uma corrente de alimentação, que precisa ser completamente especificada; uma corrente de produto, que não deve ser especificada, e uma corrente de água, onde somente temperatura e pressão precisam ser especificadas. Neste modelo, as especificações de temperatura e pressão

da corrente de produto são herdadas da corrente de alimentação, a vazão de água necessária para saturar a corrente de alimentação é calculada e a partir disso são definidas as vazões da corrente de água e da corrente de produto. Essa alternativa é simples e eficaz para criar uma corrente saturada no fluxograma utilizando o mínimo de objetos, mas em virtude de sua simplicidade também apresenta limitações, como a necessidade de a corrente de água usada ser necessariamente pura, de não haver interferências das condições de temperatura e pressão da água, e de não contabilizar por possíveis gases que possam dissolver na água, caso ela esteja em excesso em um caso real.

A corrente “2” (Figura 4-2) é misturada a uma corrente de água que pode ou não ter vazão suficiente para saturar a corrente gasosa, e em seguida a corrente produto da mistura passa por um tanque de separação, onde o gás saturado sai pela corrente de topo e o líquido em excesso sai pela corrente de fundo. Essa alternativa utiliza mais correntes e modelos de equipamentos no fluxograma que a alternativa anterior, mas ao mesmo tempo ela fornece um controle maior da interferência das condições de temperatura e pressão da água, permite a visualização de situações em que a corrente de água não é perfeitamente pura, como por exemplo a água não tratada vinda diretamente de uma fonte mineral ou vinda de uma corrente de reciclo que contenha traços de CO₂, e mostra a influência da interação da água com a corrente gasosa na solubilização de parte dos gases caso a vazão de água seja muito maior que o necessário. Por esses motivos, a segunda alternativa foi escolhida como preferencial para ser usada na formação do gás úmido a ser usado na simulação da planta piloto.

Figura 4-2 - Captura de tela de fluxograma teste para saturação de corrente gasosa.

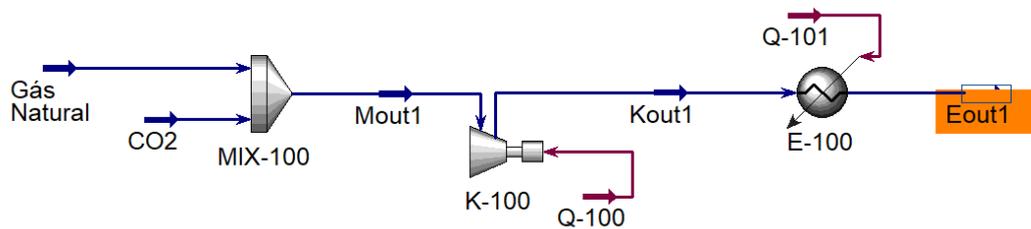


Fonte: Elaborado e capturado pelo autor (2023).

4.2. Criando o fluxograma

Os primeiros esboços do fluxograma criado nesse trabalho se iniciaram a partir da construção da seção de alimentação/make-up. Um desses esboços pode ser visto na Figura 4-3. Inicialmente foram criadas apenas correntes de CO₂ e de Gás Natural, que se misturavam em um objeto “*Mixer*”, e a corrente de saída passava por um modelo de compressor, e em seguida por um modelo de aquecedor.

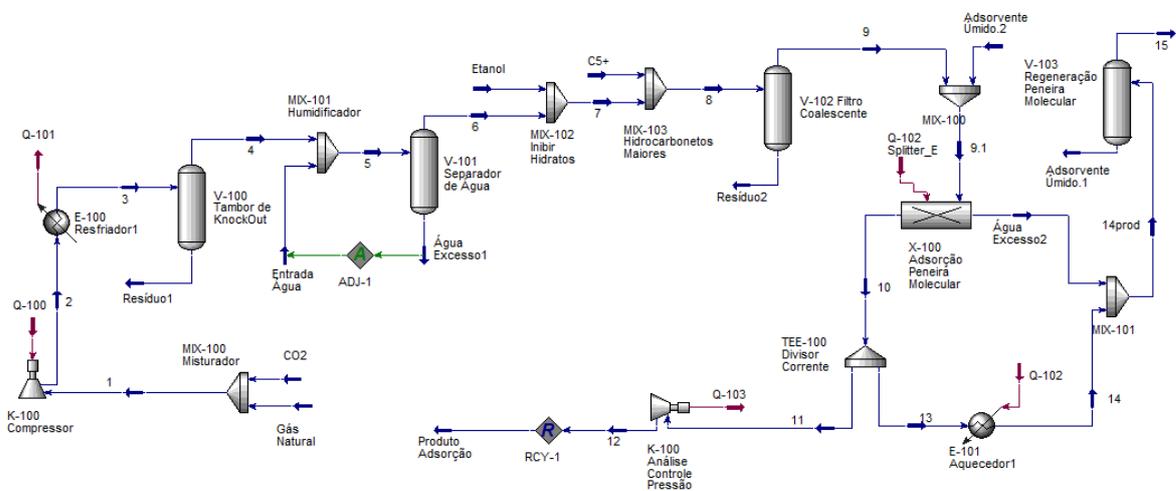
Figura 4-3 - Captura de tela de esboço da seção de alimentação/make-up.



Fonte: Elaborado e capturado pelo autor (2023).

Em ocasiões futuras neste texto, os modelos matemáticos que representam equipamentos no software de simulação serão referenciados apenas pelo nome do equipamento, para fins de simplificação. Poderá ocorrer exceção nos casos em que os modelos não representem necessariamente nenhum equipamento real, como por exemplo em objetos dos tipos “*Adjust*”, “*Recycle*”, “*Set*”, “*Spreadsheet*” e “*Component Splitter*”.

Figura 4-4 - Captura de tela de uma versão inicial do fluxograma.



Fonte: Elaborado e capturado pelo autor (2023).

Na Figura 4-4 é mostrada uma versão posterior do fluxograma, com as três seções sendo desenvolvidas, mas ainda bem distante da finalização. A essa altura, ainda estavam sendo cogitadas as melhores formas de implementar o reciclo, a vazão de água no saturador, de representar as colunas TSA e a melhor maneira de nomear as correntes e equipamentos.

O fluxograma foi desenvolvido de modo a ficar o mais similar possível à planta piloto, com exceção a alguns modelos adicionados para fins de controle, de abstração ou de extração de dados. Devido ao tamanho do fluxograma e a quantidade de equipamentos nele, a visualização da imagem fica prejudicada. Por isso, a versão final do fluxograma será mostrada na seção 4.3, em orientação de paisagem. Além disso, poderão ser vistas nas próximas subseções figuras rearranjadas de cada seção (Figuras Figura 4-5, Figura 4-6 e Figura 4-7), contendo as correntes, os equipamentos e as nomenclaturas finais.

De modo geral, foi adotada uma nomenclatura numérica ascendente para as correntes da simulação, a começar pela seção de alimentação. Essa nomenclatura, entretanto, não é homogênea, pois em alguns casos uma nomenclatura distinta tornaria a compreensão do fluxograma mais clara, como exemplos as correntes de gases de alimentação e as correntes de saída para análise. Em casos de divisores de corrente, ou equipamentos com mais de uma corrente de saída, foi dada preferência na nomenclatura numérica para a corrente que desse continuidade ao ciclo.

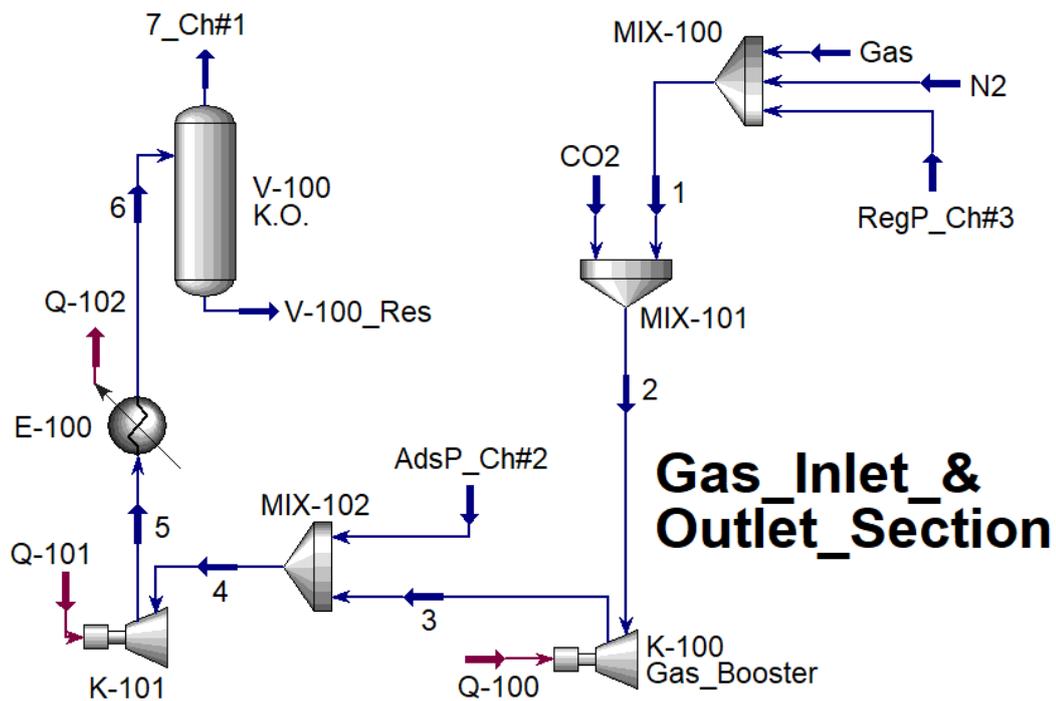
Para os modelos de equipamentos, a nomenclatura foi feita de acordo com o tipo de equipamento e com sua posição no fluxograma. Seguem abaixo os tipos de nomenclaturas dos equipamentos, onde “y” representa um valor numérico começando por “0”:

- MIX-10y → Misturadores;
- K-10y → Compressores e Expansores/Turbinas;
- E-10y → Aquecedores e Resfriadores;
- V-10y → Tanques de Separação;
- TEE-10y → Divisores de Corrente;
- VLV-10y → Válvulas;
- X-10y → Component Splitters (mais detalhes na seção 4.2.3);
- SET-y → Objetos do tipo “Set”;
- RCY-y → Objetos do tipo “Recycle”;
- ADJ-y → Objetos do tipo “Adjust”;
- Q-10y → Correntes de Energia;

4.2.1. Seção de alimentação/make-up

Na figura abaixo, o misturador “MIX-100” foi adicionado para fazer a mistura inicial das correntes de Gás Natural, de gás Nitrogênio e da corrente “RegP_Ch#3”, vinda da regeneração das colunas TSA. A corrente “Gas” é a mesma tanto para experimentos com metano quanto para experimentos com gás natural, sendo necessário que sua composição seja ajustada.

Figura 4-5 - Fluxograma rearranjado da seção de alimentação/make-up.



Fonte: Capturado e elaborado pelo autor (2023).

Quando comparado à captura de tela do software de controle da planta piloto, o fluxograma não mostra alguns dos equipamentos presentes na seção de alimentação, como as válvulas de retenção, manômetros e os filtros coalescentes. Essa decisão foi tomada pois, além de não haver modelos que representem esses equipamentos diretamente no HYSYS, a maior parte do controle das condições das entradas pode ser feita diretamente no painel de cada corrente. Algumas abstrações de simplificação similares a esta foram feitas em todo o fluxograma, de modo a mantê-lo legível e de fácil operação.

A corrente de saída de “MIX-100” é então misturada à corrente de CO₂ no “MIX-101” e só então é pressurizada até 80 bar em “K-100 Gas_Booster”. A pressurização é necessária pois esta corrente será misturada em seguida à corrente “AdsP_Ch#2”, que chega da etapa de adsorção em alta pressão (aproximadamente 85 bar). Após essa nova mistura em “MIX-102”,

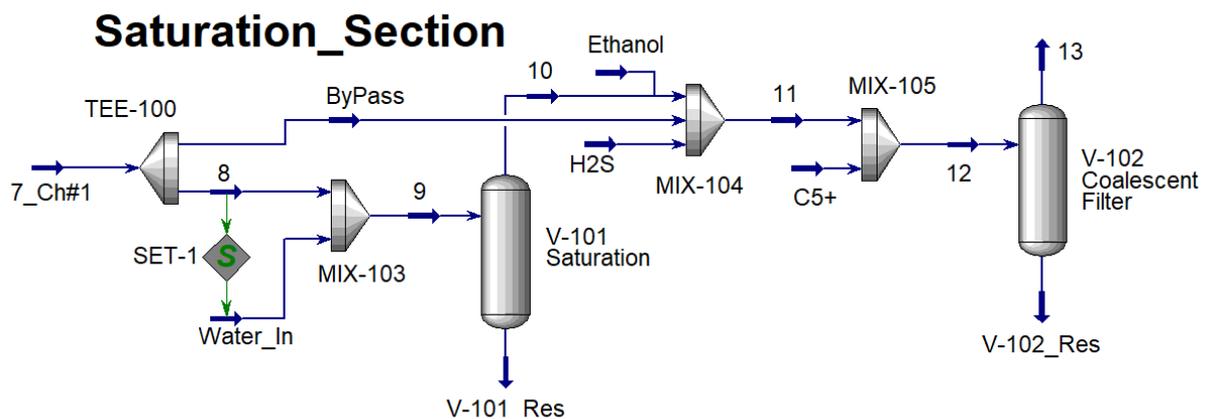
a corrente de alimentação será condicionada para as etapas seguintes: primeiramente comprimida a 90 bar em “K-101”; em seguida resfriada a 40°C em “E-100”.

Por fim, para que quaisquer indícios de condensação sejam removidos antes de chegarem à seção de Saturação, a corrente gasosa condicionada passa na simulação pelo tanque de separação “V-100 K.O.”. Esse equipamento não existe de fato na planta piloto, tendo sido adicionado ao fluxograma por precaução, como forma de prever possíveis condensações durante as simulações. Na Figura 4-13 pode ser visto que as vazões das correntes de fundo de todos os tanques são exibidas diretamente no fluxograma, em uma pequena tabela, de modo a facilitar a visualização de possível formação de fase líquida.

4.2.2. Seção de saturação

Após passar por “V-100 K.O.”, a corrente gasosa recém condicionada, conhecida na planta piloto como “Ch #1”, entra na seção de saturação, onde é dividida em “TEE-100” para que uma fração da corrente seja saturada com água, e a outra fração sirva de By-pass para impedir a condensação no caminho adiante. A fração de cada corrente pode ser definida por valores percentuais na janela de parâmetros do equipamento no HYSYS, mas na planta piloto, essa divisão é controlada por uma válvula manual, que é ajustada de acordo com o feedback de um analisador de teor de água presente na planta. Uma versão rearranjada do fluxograma da seção de saturação pode ser vista na Figura 4-6.

Figura 4-6 – Fluxograma rearranjado da seção de saturação.



Fonte: Capturado e elaborado pelo autor (2023).

Inicialmente, a vazão da corrente “Water_In” foi definida através de um objeto “Adjust”, que era controlada a partir da vazão da corrente “V-101_Res” (vide Figura 4-4). Entretanto,

através desse método, perdia-se um dos motivos mencionados para a escolha de um misturador acoplado a um tanque de separação ao invés de um saturador, que é de avaliar a influência da solubilização de parte do gás na água. Além disso, objetos “Adjust” funcionam realizando cálculos iterativos para se aproximar das condições ideais que satisfaçam os parâmetros de entrada. A adição de apenas um desses objetos não interfere tanto no tempo de cálculo do HYSYS, mas quanto maior a quantidade desses objetos, maior e mais perceptível é esse tempo. O mesmo acontece à medida que o fluxograma se torna mais complexo, e quando existem tanto objetos “Adjust” quanto “Recycle”. Por esse motivo, optou-se por substituí-lo por um objeto “Set”, que funciona usando uma equação do tipo “ $f(x) = a*x + b$ ”, onde “ $f(x)$ ” representa a variável objetivo, “ x ” representa a variável usada como base, e as constantes “ a ” e “ b ” são parâmetros definidos pelo usuário, chamadas no HYSYS de “Multiplier” e “Offset”, respectivamente. A partir de testes iniciais de convergência usando metano puro na corrente de alimentação, a vazão molar da corrente “Water_In” foi definida como 0,2% da vazão molar da corrente “8”. Esse valor é facilmente alterável e de tempo computacional irrisório.

Após misturar a corrente gasosa com “Water_In”, a nova corrente formada entra em “V-101 Saturation”, onde o excesso de água é removido em “V-101_Res” e a corrente saturada sai no topo do tanque em “10”. A corrente gasosa é então misturada com etanol e H₂S em “MIX-104”, e em seguida com hidrocarbonetos de 5 a 10 carbonos em sua cadeia, aqui chamados de “C5+”, em “Mix-105”. Como mencionado anteriormente, as simulações iniciais não levam em consideração essas adições. Por isso, apesar de estas correntes já terem sido incluídas e definidas no fluxograma, suas vazões molares por enquanto permanecem zeradas.

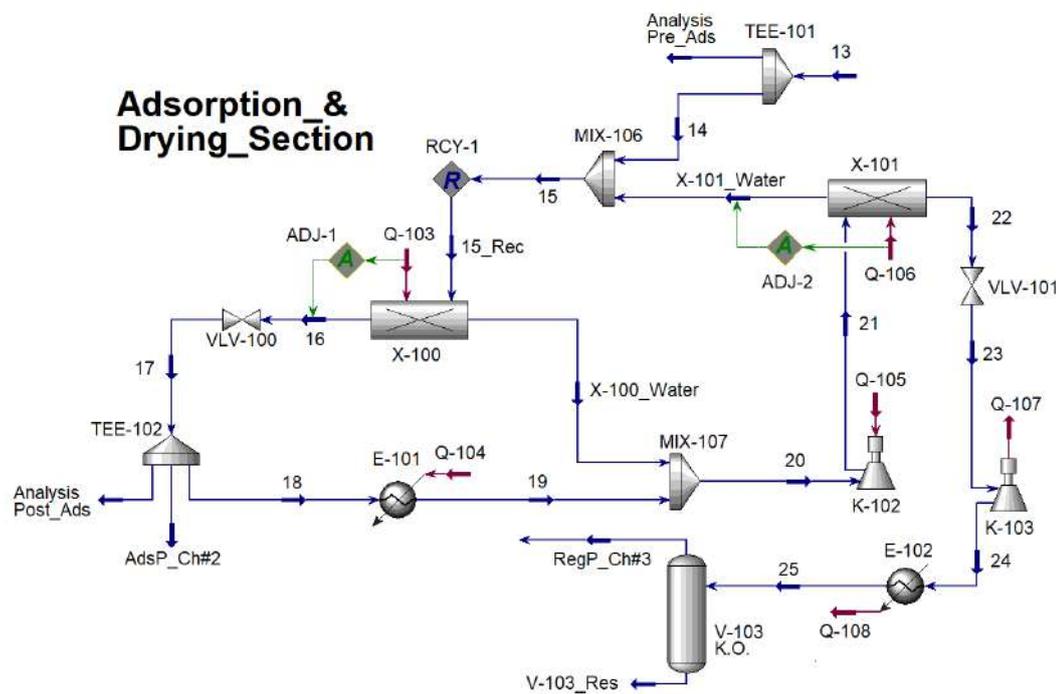
Por fim, a corrente gasosa então passa por um filtro coalescente V-102 de modo a garantir que nenhuma fase líquida ou impurezas entrem nas colunas TSA. A corrente de saída do filtro, “13” está pronta para seguir para a seção de desidratação.

4.2.3. Seção de desidratação

Na Seção de Desidratação, a corrente “13” passa por um divisor de corrente “TEE-101”, que tem por intuito representar a retirada de amostras da corrente antes desta entrar nas colunas TSA, para analisar a composição da corrente, principalmente seu teor de água. A corrente principal é nomeada como “14” e a corrente para análise como “Analysis Pre_Ads”. Algo similar acontece com a corrente de gás seca após a etapa de adsorção, no divisor “TEE-102”, e a corrente de análise é nomeada como “Analysis Post_Ads”. Segundo o relatório de especificações técnicas da planta piloto, a vazão volumétrica máxima a ser usada na corrente

de entrada das colunas é de 0,5 m³/h, ou 500 L/h. De acordo com consultas com os profissionais responsáveis pelo uso da planta piloto, cada corrente de análise remove aproximadamente 500 mL/h de suas respectivas correntes. Então, as correntes de análise na simulação foram definidas como sendo 0,1% da vazão volumétrica de cada corrente da qual elas se dividem, nos equipamentos TEE-101 e TEE-102. Após a coleta de amostra para análise, a corrente 14 segue então para o começo da abstração das colunas TSA. Uma versão rearranjada do fluxograma da seção de desidratação pode ser vista na Figura 4-7.

Figura 4-7 - Fluxograma rearranjado da seção de desidratação.



Fonte: Capturado e elaborado pelo autor (2023).

Por serem processos bateladas ou semi-contínuos, existe um desafio em simular a adsorção e a regeneração em uma situação de estado estacionário. Pelo fato de a planta piloto ter quatro colunas disponíveis, suas atuações podem ser alternadas de modo a otimizar o tempo de desidratação e tornar o processo o mais próximo possível de um processo contínuo.

Para simular as colunas, foram usados dois objetos representativos no HYSYS chamados “Component Splitters”. Esse objeto foi desenvolvido justamente para ser usado em situações em que se faz necessária a separação de uma corrente, mas as composições das duas saídas são determinadas. O Component Splitter então calcula os balanços de massa e energia das correntes de saída, baseando-se nos dados de composição inseridos. Esse objeto, portanto, é de grande utilidade quando é preciso descrever de maneira simplificada um separador que ainda não tenha

sido incluído no HYSYS, mas justamente devido à essa simplicidade, as composições das correntes não são capazes de variar com outros parâmetros, como temperatura e pressão. Uma corrente de energia também precisa ser adicionada a este modelo de equipamento, de modo a respeitar o balanço de energia.

No primeiro Component Splitters, X-100, a corrente “X-100_Water” é usada para representar toda a água transferida da corrente gasosa para o recheio da coluna. Para a seção de adsorção, ficou definida a princípio uma remoção de 100% da água presente na corrente gasosa para a simulação, sem nenhuma retenção de gás na coluna, mas isso pode ser facilmente alterado para simulações posteriores. Então, toda a água presente na corrente 14 (e conseqüentemente nas correntes 15 e 15_Rec, que serão abordadas na próxima seção) foi para a corrente “X-100_Water”, e o gás seco sai pela corrente 16.

Para essa separação, ficou determinado que a corrente de energia Q-103 seria mantida igual a zero, representando que não haveria ganho nem perda de energia do material durante as separações. Essa decisão implica que, a depender da entalpia de mistura da corrente, as correntes de saída podem sair mais frias ou mais quentes que a corrente de entrada. No geral, este equipamento é programado para realizar esse cálculo automaticamente; entretanto, notou-se durante a construção do fluxograma que nem sempre isso ocorre: Por vezes, ao tentar calcular a temperatura final das correntes, ocorrem falhas no cálculo de entalpia molar que levam a erros de consistência. Esses erros parecem ser mais comuns quando valores menores de vazão molar são usados, sugerindo que um ajuste de precisão nos cálculos seja capaz de resolver esse problema, mas ao procurar no software, nos manuais, na guia de ajuda e em fóruns de simulação, não encontrei como alterar a precisão dos cálculos deste equipamento. Por meio de tentativa e erro, notou-se que era possível utilizar um objeto “Adjust” para calcular as temperaturas de saída, que os erros de convergência desapareciam, com a penalidade de um tempo maior para convergir a simulação do fluxograma. Foi então adicionado o objeto ADJ-1 para auxiliar o funcionamento de X-100, ajustando a temperatura da corrente 16 até que a corrente de energia Q-103 zerasse. Outro objeto de ajuste, ADJ-2, foi adicionado para auxiliar o funcionamento de X-101, o Component Splitter usado para simular o funcionamento da etapa de regeneração das colunas.

No fluxograma, a corrente 16 então passa pela válvula VLV-100 para representar a queda de pressão da corrente gasosa ao passar pela coluna recheada. A partir de observações em testes iniciais na planta piloto, a queda de pressão em VLV-100 foi definida como 5 bar. Em seguida, essa corrente foi dividida por TEE-102 em 3 partes: 0,1% para “Analysis Post_Ads”, 15% para a corrente 18, e o restante para a corrente “AdsP_Ch#2”.

A corrente 18 representa a fração da corrente de gás seco que retorna às colunas para a seção de regeneração. Essa corrente de reciclo é necessária pois a etapa de regeneração é feita com o arraste de uma corrente de gás seco a altas temperaturas, e o uso de uma corrente gasosa exclusiva para a regeneração causaria um aumento na complexidade e no custo de matéria prima da planta. Estimou-se que 15% da corrente principal seja suficiente para a regeneração das colunas, mas essa porcentagem pode ser alterada a depender dos experimentos programados para a planta. Já a corrente “AdsP_Ch#2” é enviada para a seção de alimentação/make-up.

Devido ao funcionamento de um processo TSA, a temperatura de operação na etapa de regeneração da coluna é muito maior que da etapa de adsorção. Por isso, a corrente 18 precisa ser aquecida antes de retornar para as colunas, passando de uma temperatura aproximada de 40°C para 280°C. Em seguida, a corrente aquecida pode adentrar a coluna a ser regenerada. No caso desta simulação, essa corrente é misturada em MIX-107 com a corrente “X-100_Water” para representar a água adsorvida que será removida.

O compressor K-102 presente na simulação não representa nenhum equipamento existente na planta piloto, mas dada a queda de pressão em VLV-100, a repressurização é necessária para que o reciclo funcione propriamente, já que pontos de mistura no fluxograma dependem da pressão mais baixa entre as correntes de entrada conectadas. K-102 então eleva a pressão de 85 bar para 90 bar. A corrente de saída do compressor então está pronta para entrar no X-101, onde ficou inicialmente definido que 80% da água adsorvida seria removida com sucesso usando a corrente de gás quente, e os 20% restantes permanecem na coluna. Esses 20% são representados pela corrente “X-101_Water”, que é novamente misturada à corrente 14 para completar o reciclo na região das colunas TSA. O gás saturado que sai da etapa de regeneração é representado pela corrente 22.

De modo a representar a queda de pressão na etapa de regeneração, foi adicionada uma válvula VLV-101 à simulação. A queda de pressão é de aproximadamente 10 bar. Em seguida, essa corrente passa por um longo caminho na planta que inclui um trocador de calor casco tubo. Esse caminho reduz tanto a pressão quanto a temperatura da corrente gasosa, e foi representado na simulação pelo uso de uma turbina e um resfriador. K-103 reduz então a pressão para 30 bar, reduzindo simultaneamente a temperatura em 100°C. Para representar a real queda de temperatura, E-102 foi configurado para que a temperatura da corrente de saída, corrente 25, fosse reduzida para 25°C.

A corrente 25 então entra em um tanque de Knock-out para remover a fase líquida formada na corrente durante seu resfriamento e despressurização, de modo que a corrente de topo do tanque possa ser reutilizada no reciclo. No caso do fluxograma, a corrente 25 entra em

V-103 K.O., separando a fase líquida na corrente V-103_Res e a fase gasosa na corrente RegP_Ch#3, que então é encaminhada para a seção de alimentação/make-up, onde será misturada com as correntes N2 e Gas.

4.2.4. Reciclo

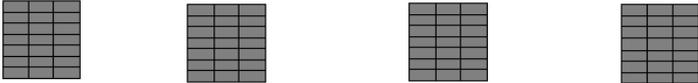
Nos primeiros testes de funcionamento do fluxograma, 3 objetos de reciclo foram adicionados: Após a corrente de reciclo da adsorção, após a corrente de reciclo da regeneração e após a corrente de saída de água da etapa de regeneração. Entretanto, mesmo com o fluxograma em um estágio inicial simplificado, o tempo de convergência era alto, pois cada objeto de reciclo esperava que os outros objetos calculassem suas iterações para poder realizar a nova etapa de iteração. Durante o desenvolvimento do fluxograma, entretanto, foi notado que o HYSYS disponibiliza uma ferramenta chamada “Recycle Advisor”, que analisa e sugere a melhor posição para colocar um reciclo, de modo que ele sirva para a maior quantidade possível de reciclos dentro do fluxograma. Utilizando essa ferramenta, foi possível descobrir a posição ideal para que fosse necessário o uso de apenas um objeto de reciclo. RCY foi então posicionado após a corrente 15, e para reconectar RCY-1 foi criada a corrente 15_Rec, que é uma corrente praticamente idêntica à corrente 15, sendo as duas usadas para que o objeto de reciclo compare os dados de cada iteração até ser capaz de convergir as duas correntes a tolerâncias menores que as definidas pelo usuário.

Os objetos de reciclo permitem que o usuário faça algumas alterações no seu funcionamento. As configurações padronizadas desses objetos costumam ser de modo de cálculo aninhado (em inglês “Nested”), utilizando o método numérico para aceleração de cálculo de Wegstein, com limite de 10 iterações e Flash do tipo PT. Para o objeto RCY-1, método numérico foi alterado para Dominant Eigenvalue, o limite máximo de iterações foi aumentado para 500 e a sensibilidade aos componentes e condições da corrente foi ajustada, de modo a tornar o reciclo mais sensível a variações. Os valores padrão de sensibilidade são de magnitude “10”, e foram alterados para “5”, com exceção da Temperatura, foi alterada para “1,00e-02” e os valores de composição molar, que foram alterados para “1,00e-03”. Essa mudança aumenta consideravelmente o tempo necessário para convergência do reciclo, mas em compensação leva a valores mais exatos de concentrações nas correntes, visto que o Reciclo não pode simplesmente aproveitar os mesmos valores de iterações anteriores quando um dado possui pequena variação.

4.2.5. Spreadsheets

Ao observar a Figura 4-13 e compará-la com as figuras anteriores dessa seção, pode-se perceber que alguns objetos foram ocultados das imagens anteriores para diminuir o número de itens aparentes e facilitar a visualização. Esses objetos são as planilhas, ou “Spreadsheets”, e suas respectivas tabelas, que podem ser vistos na Figura 4-8. Ao todo foram criadas 4 planilhas. São elas: “Material Balance”, “Condensation”, “CO2_Analysis” e “MakeUp_&_VOID”.

Figura 4-8 - Spreadsheets e suas tabelas no fluxograma.



Material Balance CO2_Analysis MakeUp_&_VOID Condensation

V-100_Res	0,0000	kg/h
V-101_Res	2,214e-002	kg/h
V-102_Res	0,0000	kg/h
V-103_Res	3,183e-002	kg/h

Lowest Vap. Fraction
1,000

Fonte: Elaborado e capturado pelo autor (2023).

A planilha “Material Balance” (Figura 4-9) foi inicialmente criada em estágio inicial da construção do fluxograma, de modo a acompanhar o balanço de massa das correntes e dos componentes, auxiliando na resolução do reciclo. Esta planilha não contabiliza outros componentes que possam ser inseridos no futuro, mas ainda funciona para acompanhar o balanço de massa, e pode ser editada para acrescentar mais componentes.

A planilha “Condensation” (Figura 4-10) foi criada com o intuito de coletar os dados de fração de vapor das correntes, e em seguida compará-los, de modo a mostrar diretamente no fluxograma se alguma corrente está apresentando formação de líquido. Como algumas correntes terão fase líquida em seu comportamento usual, elas não foram adicionadas a essa planilha.

De modo a complementar os dados de “Material Balance”, foi criada a planilha “CO2_Analysis” (Figura 4-11). Nela podem ser vistos dados de algumas correntes de maior interesse, e compreender melhor as relações e interferências entre elas.

Figura 4-9 – Planilha “Material Balance”.

	A	B	C	D	E
1	Streams	Mass Balance	H2O	Methane	CO2
2	CO2	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h
3	Water_In	5,402e-002 kg/h	0,0540 kg/h	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h
4	Gas	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h
5	Total Inlets	<i>5,402e-002 kg/h</i>	<i>0,0540 kg/h</i>	<i>0,0000 kg/h</i>	<i>0,0000 kg/h</i>
6					
7	V-100_Res	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h
8	V-101_Res	2,214e-002 kg/h	0,0221 kg/h	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h
9	V-102_Res	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h
10	V-103_Res	3,183e-002 kg/h	0,0318 kg/h	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h
11	Analysis Pre_Ads	4,203e-002 kg/h	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h
12	Analysis Post_Ads	4,195e-002 kg/h	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h	0,0000 kg/h
13	Total Outlets	<i>0,1380 kg/h</i>	<i>0,0540 kg/h</i>	<i>0,0000 kg/h</i>	<i>0,0000 kg/h</i>
14					
15		Mass Balance	H2O	Methane	CO2
16	Final	<i>-8,394e-002 kg/h</i>	<i>0,0000 kg/h</i>	<i>0,0000 kg/h</i>	<i>0,0000 kg/h</i>

Fonte: Elaborado e capturado pelo autor (2023).

Figura 4-10 – Planilha “Condensation”.

	A	B	C	D
1	Stream	Vapour Fraction	Lowest Vap. Fraction	<i>1,0000</i>
2	S1	1,0000		
3	S2	1,0000		
4	S3	1,0000	Water_In	5,402e-002 kg/h
5	S4	1,0000	V-101_Res	2,214e-002 kg/h
6	S5	1,0000	Difference	<i>3,187e-002 kg/h</i>
7	S6	1,0000	V-103_Res	3,183e-002 kg/h
8	S7_Ch#1	1,0000	New Diff.	<i>3,897e-005 kg/h</i>
9	S8	1,0000		
10	S10	1,0000		
11	S11	1,0000		
12	S12	1,0000		
13	S13	1,0000		
14	S14	1,0000		
15	S16	1,0000		
16	S17	1,0000		

Fonte: Elaborado e capturado pelo autor (2023).

Figura 4-11 – Planilha “CO2_Analysis”.

	A	B	C	D	E	F
1	Stream	Molar Flow	CO2 Molar Fraction	% Molar Flow (Sum)	Actual Volume Flow	% Volume Flow (S...
2	CO2	0,0000 kgmole/h	1,0000	<empty>	0,0000 m3/h	<empty>
3	Gas	0,0000 kgmole/h	0,0000	<empty>	0,0000 m3/h	<empty>
4	SUM Molar Flow	<i>0,0000 kgmole/h</i>		SUM Volume Flow	<i>0,0000 m3/h</i>	
5						
6		Molar Flow	CO2 Molar Fraction	% Molar Flow (Sum)	Actual Volume Flow	% Volume Flow (S...
7	Analysis Pre_Ads	1,501e-003 kgmole/h	0,0000	50,06	4,301e-004 m3/h	48,54
8	Analysis Post_Ads	1,497e-003 kgmole/h	0,0000	49,94	4,561e-004 m3/h	51,46
9	SUM Molar Flow	<i>2,998e-003 kgmole/h</i>		SUM Volume Flow	<i>8,862e-004 m3/h</i>	
10						
11		Molar Flow	CO2 Molar Fraction	% Molar Flow (Sum)	Actual Volume Flow	% Volume Flow (S...
12	AdsP_Ch#2	1,271 kgmole/h	0,0000	84,97	0,3872 m3/h	67,79
13	RegP_Ch#3	0,2249 kgmole/h	0,0000	15,03	0,1840 m3/h	32,21
14	SUM Molar Flow	<i>1,496 kgmole/h</i>		SUM Volume Flow	<i>0,5712 m3/h</i>	
15						
16		Molar Flow	CO2 Molar Fraction	% Molar Flow (Sum)	Actual Volume Flow	% Volume Flow (S...
17	Recycle (Ads+Reg)	1,496 kgmole/h	0,0000	100,0	0,5712 m3/h	100,0
18	MakeUp (CO2+Gas)	0,0000 kgmole/h	<empty>	0,0000	0,0000 m3/h	0,0000
19	SUM Molar Flow	<i>1,496 kgmole/h</i>		SUM Volume Flow	<i>0,5712 m3/h</i>	
20						
21		Molar Flow	CO2 Molar Fraction	Actual Volume Flow	Fração	0,10
22	Stream 4	1,499 kgmole/h	0,0000	0,5135 m3/h	CO2	3,593e-004
23	Stream 15	1,500 kgmole/h	0,0000	0,4300 m3/h	Gas	3,234e-003
24					Total	<i>3,593e-003</i>

Fonte: Elaborado e capturado pelo autor (2023).

Também foi criada a planilha “MakeUp_&_VOID” (Figura 4-12), usada no controle das composições e vazões molares das correntes de alimentação/make-up, além do valor desejado para a vazão molar na corrente “15_Rec” (parâmetro para convergência do objeto de reciclo).

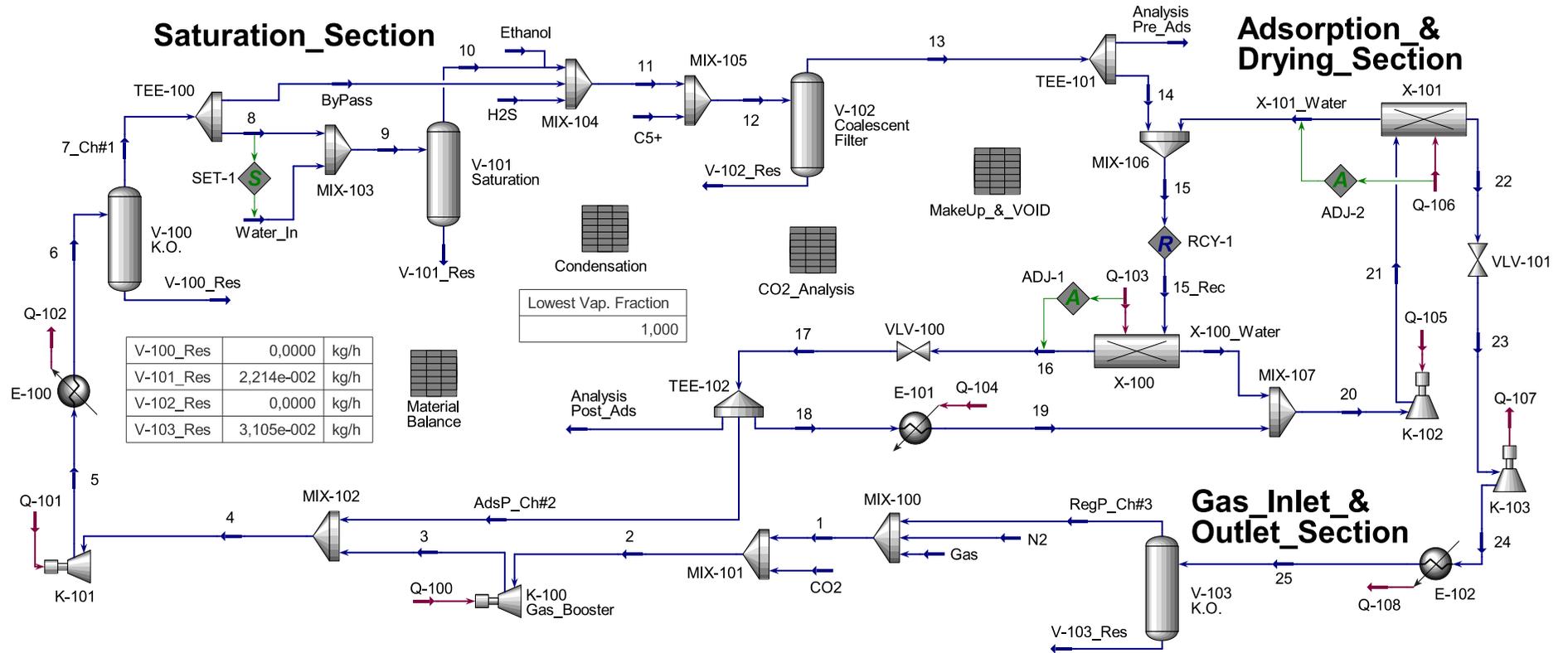
Figura 4-12 – Planilha “MakeUp_&_VOID”.

	A	B	C
1	MakeUp		
2	Total	3,000e-003 kgmol...	Fraction
3	CO2	0,0000 kgmole/h	0,0000
4	N2	3,000e-003 kgmole/h	1,000
5	Gas	0,0000 kgmole/h	0,0000
6	15_Rec	1,500 kgmole/h	
7	Analysis Pre_Ads	1,501e-003 kgmole/h	
8	Analysis Post_Ads	1,497e-003 kgmole/h	

Fonte: Elaborado e capturado pelo autor (2023).

4.3. Fluxograma completo

Figura 4-13 - Fluxograma finalizado para simulações iniciais deste trabalho.



Fonte: Elaborado e capturado pelo autor (2023).

5. Simulações com diferentes concentrações na alimentação

A planta piloto será fundamental para a extração de dados de diversos experimentos, variando composições do gás de entrada, presença de moléculas indesejadas, também diferentes níveis de umidade. De modo a atestar a segurança da planta e o correto funcionamento dos equipamentos, serão realizados alguns testes utilizando Nitrogênio como gás de alimentação.

Tendo isso em mente, optou-se por fazer simulações utilizando misturas diferentes na corrente de alimentação: N₂, CH₄ e Gás Natural. Como serão feitos experimentos utilizando esses componentes juntamente com diferentes concentrações de CO₂, para cada componente de alimentação serão feitas 3 simulações com diferentes concentrações de CO₂: 0%, 20% e 80%. Esses experimentos servirão para avaliar o impacto da presença de CO₂ no sistema, tanto na capacidade de absorção de umidade pelo gás quanto na remoção de parte do CO₂ juntamente da água na coluna de adsorção. Como queremos avaliar simulações com 3 misturas diferentes na alimentação, e para cada mistura queremos 3 concentrações diferentes de CO₂, será necessária a coleta total de dados de 9 simulações diferentes.

Após finalizar a criação do fluxograma no Aspen HYSYS, foram então criados dois arquivos: Um script em Python para inserir os parâmetros de cada simulação no HYSYS e extrair os dados calculados; e uma pasta de trabalho do Excel, tanto para conter esses parâmetros quanto para armazenar os dados da simulação. O script pode ser visto na seção A.3 do APÊNDICE A,. Por conterem muitos dados, as tabelas geradas pelas simulações foram adicionadas no APÊNDICE B. Focaremos na apresentação dos parâmetros iniciais das simulações (Tabela 5-1) e na interpretação dos dados obtidos.

Tabela 5-1 - Parâmetros de entrada nas simulações. Cada linha representa uma simulação.

Simulação	Composição do gás natural na simulação						Proporção de mistura		
	Methane	Ethane	Propane	i-Butane	n-Butane	Soma GN	N2	GN	CO2
N2 20%	-	-	-	-	-	-	0,2	0	0,8
N2 80%	-	-	-	-	-	-	0,8	0	0,2
N2 100%	-	-	-	-	-	-	1	0	0
CH4 20%	1	0	0	0	0	1	0	0,2	0,8
CH4 80%	1	0	0	0	0	1	0	0,8	0,2
CH4 100%	1	0	0	0	0	1	0	1	0
Gas 20%	0,7598	0,1191	0,0801	0,012	0,029	1	0	0,2	0,8
Gas 80%	0,7598	0,1191	0,0801	0,012	0,029	1	0	0,8	0,2
Gas 100%	0,7598	0,1191	0,0801	0,012	0,029	1	0	1	0

Fonte: elaborado pelo autor (2023).

A primeira coluna representa a situação escolhida para a simulação. Da segunda à sexta coluna estão os dados de composição da corrente de gás natural para cada simulação. E por fim, as colunas 8, 9 e 10 definem a fração de cada gás na alimentação. Os dados dessas colunas são adicionados à SPREADSHEET “MakeUp_&_VOID” do HYSYS que faz o controle de vazão molar dessas correntes, dado um valor total fixo de vazão molar.

O HYSYS possui uma ferramenta própria para exportar os dados de simulação para uma pasta de trabalho do Excel. Porém, os dados exportados não são escolhidos pelo usuário, o que gera uma enorme quantidade de dados que quase sempre não serão usados (exemplo: a possível vazão volumétrica supondo que o fluido seja um líquido ideal padronizado), e pode não conter alguns dados que sejam desejáveis para a análise (exemplos: a vazão volumétrica real do fluido e os dados de ponto de orvalho das correntes). Usando o script em Python, foi definida uma lista personalizada das variáveis calculadas a serem extraídas para o trabalho. Alguns dos nomes das variáveis foram alterados para representar os nomes usados nas tabelas do APÊNDICE B. As variáveis extraídas podem ser vistas na Tabela 5-2.

Tabela 5-2 - Variáveis extraídas do HYSYS com o script

Variável	Descrição
Stream	Corrente
Temperature (°C)	Temperatura da corrente
Dew Point Temp. (°C)	Temperatura do P.O. para a pressão usada
Pressure (bar)	Pressão da corrente
Dew Point Press. (bar)	Pressão do P.O. para a temperatura usada
Molar Flow (kgmole/h)	Vazão molar da corrente
Mass Flow (kg/h)	Vazão mássica da corrente
Act. Volume Flow (m3/h)	Vazão volumétrica real da corrente
Heat Flow (kcal/h)	Vazão de calor da corrente
Vapor Fraction	Fração de vapor na corrente
zi N2	Fração molar de Gás Nitrogênio
zi H2O	Fração molar de Água
zi CO2	Fração molar de Dióxido de Carbono
zi Methane	Fração molar de Metano
zi Ethane	Fração molar de Etano
zi Propane	Fração molar de Propano
zi i-Butane	Fração molar de Isobutano
zi n-Butane	Fração molar de n-Butano

Fonte: elaborado pelo autor (2023).

A pressão e a temperatura do ponto de bolha não permitem que se escolha a unidade a ser extraída. Suas unidades são, respectivamente, “kPa” e “°C”. Como a temperatura já estava sendo usada em “°C”, não foi necessário convertê-la, mas para a pressão do ponto de bolha, foi adotada uma conversão de “kPa” para “bar” durante a extração dos dados. As variáveis “Delta Temp. (°C)” e “Delta Press. (bar)” foram criadas nas planilhas após a extração dos dados, de modo a facilitar o encontro de correntes próximas ao Ponto de Orvalho.

A interpretação dos dados obtidos nas simulações possui dois intuitos principais (relembrando o que foi visto em “Objetivos”): a avaliação das mudanças no processo como um todo ao alterar a composição dos gases de alimentação; e a investigação de possibilidade de condensação nas correntes que antecedem os compressores e a coluna TSA nas condições estabelecidas. No segundo caso, as principais correntes a serem vigiadas são: 2, 4 e 14. As correntes 20 e 23 também antecedem compressores/turbinas no fluxograma, mas como foi comentado no capítulo anterior, o uso desses modelos de equipamento foi feito para auxiliar na representação abstrata das colunas TSA.

5.1. Água absorvida pela mistura gasosa

Na simulação, uma corrente de água é misturada à corrente de gás já condicionada na seção de saturação. A vazão molar da corrente de água é definida pela vazão molar da corrente de gás, através do objeto “SET”, no qual é usado um fator multiplicativo. Como a vazão molar da corrente gasosa de make-up é fixada e o processo é simulado em estado estacionário, as correntes de reciclo também estão constantes.

O modelo de tanque de separação “**V-100 K.O.**” não representa um equipamento real da planta piloto, tendo sido adicionado ao fluxograma para fim de controle, de modo a analisar a presença de líquidos no reciclo em simulações futuras, onde o número de componentes usados é maior. Nas simulações deste trabalho, a corrente de fundo em “**V-100**” sai sempre zerada, o que faz com que então a vazão molar da saída da seção de alimentação/make-up seja igual à vazão molar da corrente gasosa que se mistura à corrente de água. Após a mistura, a corrente supersaturada passa por outro modelo de tanque de separação, “**V-101 Saturation**”, onde o excesso de água é removido, e sai na corrente “**V-101_Res**”.

Essa informação é relevante pois ao subtrairmos a vazão de água de entrada na corrente “**Water_In**” pela vazão de saída de água da corrente “**V-101_Res**”, temos a vazão de água absorvida pelo gás naquela simulação. Importante ressaltar que essa subtração simples só pode ser realizada caso a vazão em “**V-101_Res**” seja de água pura. Na Tabela 5-3 isso pode ser feito

pois foi constatado que apenas água é encontrada nessa corrente. Esse dado pode ser visto nas tabelas completas, no APÊNDICE B.

Tabela 5-3 - Vazões de água e correntes de fundo de tanques de separação, em kgmol/h.

Simulação	Water_In	V-100_Res	V-101_Res	Água Absorvida	V-102_Res	V-103_Res
N2 20%	3,00E-03	0,00E+00	0,00E+00	3,00E-03	0,00E+00	2,99E-03
N2 80%	3,00E-03	0,00E+00	1,01E-03	1,98E-03	0,00E+00	1,98E-03
N2 100%	3,00E-03	0,00E+00	1,23E-03	1,77E-03	0,00E+00	1,77E-03
CH4 20%	3,00E-03	0,00E+00	0,00E+00	3,00E-03	0,00E+00	2,99E-03
CH4 80%	3,00E-03	0,00E+00	2,66E-04	2,73E-03	0,00E+00	2,73E-03
CH4 100%	3,00E-03	0,00E+00	4,30E-04	2,57E-03	0,00E+00	2,56E-03
Gas 20%	3,00E-03	0,00E+00	0,00E+00	3,00E-03	0,00E+00	2,99E-03
Gas 80%	3,00E-03	0,00E+00	0,00E+00	3,00E-03	0,00E+00	2,99E-03
Gas 100%	3,00E-03	0,00E+00	0,00E+00	3,00E-03	0,00E+00	2,99E-03

Fonte: elaborado pelo autor (2023).

Nesta tabela é possível notar algumas informações importantes:

- Não existe formação de fase líquida na corrente de saída da seção de alimentação/make-up em nenhuma das simulações. Essa informação é importante pois a corrente de reciclo que vem das colunas na etapa de regeneração, mesmo tendo boa parte de sua umidade removida, está saturada em água.
- Nas simulações com N₂ e CH₄, é possível notar que quanto maior a quantidade de CO₂ na corrente gasosa, maior a capacidade da mistura gasosa de absorver água.
- Não há remoção de fração líquida no modelo de tanque V-102. Apesar de este modelo de equipamento não parecer ter sentido em estar presente neste momento, ele será de grande avalia em simulações futuras, quando houver adição de etanol e C5+, pois apenas podem entrar nas colunas TSA correntes gasosas.
- Nas simulações com Gás Natural, a quantidade de CO₂ na mistura gasosa não foi relevante para a absorção de água, dada a vazão de água fornecida para a hidratação. Em novos experimentos com gás natural, devem ser empregadas quantidades maiores de água para garantir a saturação do gás.
- A mistura presente no gás natural possui uma capacidade maior de absorção de água que o nitrogênio e o metano puros.
- A quase totalidade da água absorvida pelo gás é removida no tanque V-103 K.O. e sai na corrente V-103_Res, após a etapa de regeneração.

De modo a analisar graficamente a absorção de água pela corrente gasosa, podemos usar diretamente os dados de fração molar de água das correntes 10 a 14, que nas simulações realizadas neste trabalho têm a mesma composição, que por serem variáveis intensivas, representam melhor a saturação das correntes que as vazões molares de água absorvida, calculadas anteriormente, que não contabilizam pequenas variações nas vazões molares totais das correntes 10 a 14.

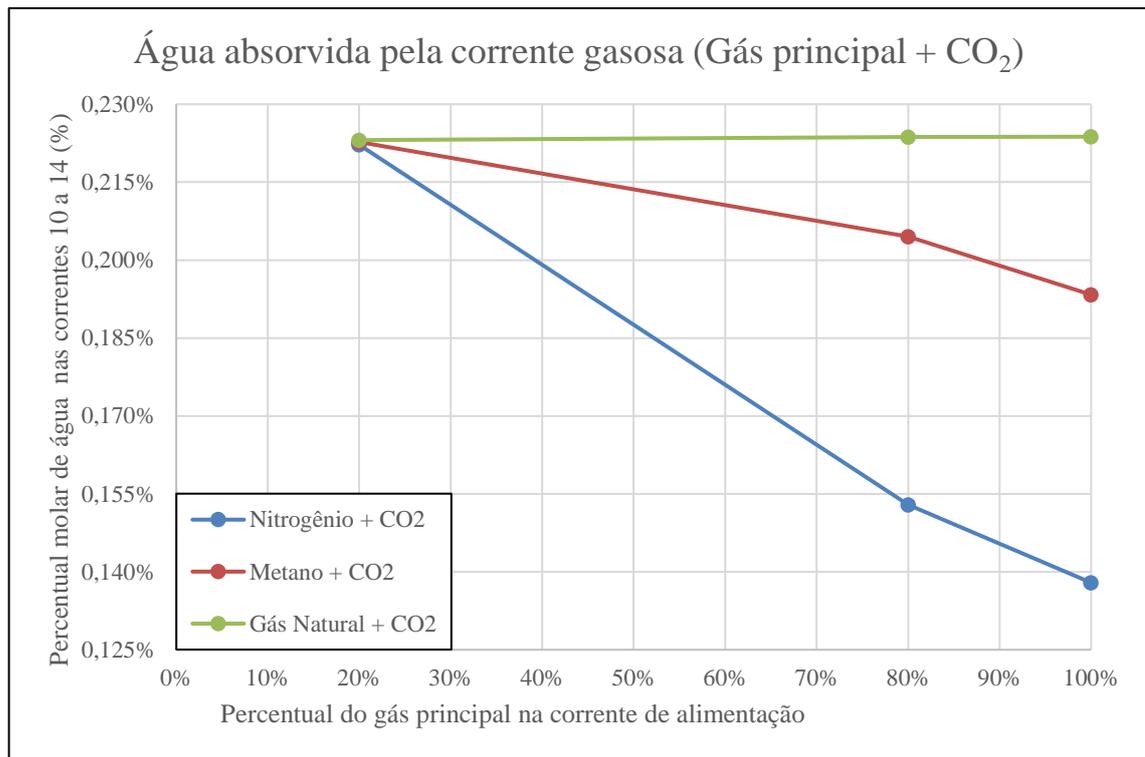
Na Tabela 5-4 são repetidos os dados de água absorvida da tabela anterior, em kgmol/h, e mostrados os valores de fração molar de água nas correntes 10 a 14, assim como o mesmo valor em formato percentual, para ser usado no gráfico da Figura 5-1.

Tabela 5-4 – Fração molar de água nas correntes 10 a 14.

Simulação	Água Absorvida	zi H₂O	Zi H₂O (%)
N2 20%	3,00E-03	2,22E-03	0,222%
N2 80%	1,98E-03	1,53E-03	0,153%
N2 100%	1,77E-03	1,38E-03	0,138%
CH4 20%	3,00E-03	2,23E-03	0,223%
CH4 80%	2,73E-03	2,05E-03	0,205%
CH4 100%	2,57E-03	1,93E-03	0,193%
Gas 20%	3,00E-03	2,23E-03	0,223%
Gas 80%	3,00E-03	2,24E-03	0,224%
Gas 100%	3,00E-03	2,24E-03	0,224%

Fonte: elaborado pelo autor (2023).

Como pode ser visto tanto na tabela quanto no gráfico (Figura 5-1), leves variações podem ser vistas nos valores de fração molar de água das simulações onde toda a água fornecida foi absorvida. Essas variações, entretanto, podem ser fruto das flutuações de vazão molar devido aos cálculos iterativos do objeto de reciclo, logo não necessariamente indicam variações na saturação de água em gás ao variar as composições de CO₂, mas provavelmente um nível de incerteza associado ao ajuste dos parâmetros de sensibilidade do objeto de Reciclo.

Figura 5-1 - Variação de capacidade de absorção de água da mistura.

Fonte: elaborado pelo autor (2023).

Com essas informações, podemos ver que o metano é capaz de absorver mais água que o gás nitrogênio; que ambos têm sua capacidade de absorção aumentada na presença de CO₂, um componente comum de ser encontrado no gás natural recém extraído dos poços; e que o gás natural consegue absorver ainda mais água que o metano e o nitrogênio, chegando a absorver toda a vazão de água fornecida, logo novos valores de vazão de água podem ser usados em simulações futuras para estimar a quantidade de água que pode ser absorvida.

5.2. Possibilidade de condensação nas correntes

Como o intuito da planta simulada é o de desidratar um gás, a situação limite a ser considerada é aquela em que o gás está totalmente saturado com água. Nessa situação, é esperado que possa ocorrer condensação parcial da água dissolvida em algum momento na planta. Entretanto, além de a condensação sem controle ser indesejada, em alguns casos ela pode ser prejudicial para o funcionamento da planta, seja por diminuir a vazão de gás, ou pela corrosão que pode gerar nas tubulações e nos equipamentos. Nessa seção, o foco principal é o de avaliar a possibilidade de ocorrer condensação antes de dois tipos de equipamentos especialmente sensíveis a essa mudança de fase: os compressores e as colunas TSA.

Antes de entrar em detalhes sobre as correntes, é relevante falar sobre um dos parâmetros escolhidos na extração de dados para ajudar na análise de condensação, que são os dados de ponto de orvalho calculados pelo HYSYS.

A cada iteração dos cálculos no fluxograma, o HYSYS também faz o cálculo de temperatura do ponto de orvalho para a corrente na pressão fornecida, e de pressão do ponto de orvalho na temperatura fornecida. O HYSYS também realiza esses mesmos cálculos para ponto de bolha, mas estes não foram adicionados neste trabalho pois não teriam relevância prática. Esses dados são interessantes pois podem nos mostrar quando uma corrente está próxima de apresentar condensação, enquanto os tanques de separação só nos mostram quando a condensação já ocorre.

Apesar da relevância, esses dados não aparecem abertamente nas janelas de condições e propriedades das correntes (somente a pressão do ponto de bolha), e por vezes o cálculo dessas propriedades não é realizado para certas correntes, acredita-se que por limitações do modelo de cálculo escolhido naquelas condições de temperatura, pressão e composição. Por isso, mesmo tendo acesso a esses dados, a presença dos modelos de tanques de separação é indispensável, dada sua maior confiabilidade.

Ao analisarmos uma corrente próxima ao ponto de orvalho, poderemos ver que sua temperatura estará um pouco acima da temperatura de ponto de orvalho calculada, e/ou sua pressão estará um pouco abaixo da pressão de ponto de orvalho calculada. De modo a facilitar o encontro desses dados próximos de temperatura e pressão, foram adicionadas às tabelas colunas e deltas de pressão e de temperatura; assim podemos encontrar com mais facilidade as correntes próximas ao ponto de orvalho quando os valores de delta ficam próximos de zero.

Entretanto, ao observar as tabelas (APÊNDICE B), percebe-se que diversas correntes estarão com deltas próximos de zero, mas nem sempre eles são relevantes para a análise nesta seção. A escolha das correntes de interesse e o motivo dessa escolha é explicado em mais detalhes nos próximos parágrafos.

Como mencionado no início deste capítulo, serão vigiadas as correntes “2”, “4” e “14”. O mesmo não acontecerá com as correntes “20” e “23” pois os equipamentos modelos dos equipamentos usados após essas correntes servem apenas como abstrações. Também vale mencionar que algumas das correntes da planta mostrarão necessariamente condensação de água ou estado de gás saturado, devido à função dos equipamentos que elas conectam. As correntes onde obrigatoriamente existirá alguma fração líquida são:

- “V-100_Res”: Excesso de líquido da corrente “6”, caso exista;
- “Water_In”: Corrente de entrada de água para saturação da corrente gasosa.
- “9”: Corrente supersaturada, que passará por um tanque de separação “V-101”;
- “V-101_Res”: Excesso de líquido da corrente “9”, caso exista;
- “V-102_Res”: Excesso de líquido da corrente “12”, caso exista;
- “X-101_Water”: Representa água na coluna após etapa de regeneração;
- “15”: Mistura da corrente saturada “14” com a corrente “X-101_Water”;
- “15_Rec”: Igual a “15”, necessária para o funcionamento de ”RCY-1”;
- “X-100_Water”: Representa água na coluna após etapa de adsorção;
- “25”: Corrente de saída da etapa de regeneração, após ser resfriada;
- “V-102_Res”: Excesso de líquido da corrente “25”, caso exista;

Além delas, algumas correntes estarão quase sempre próximas a seu valor máximo de saturação, e por isso os dados calculados de temperatura e pressão para ponto de orvalho estão muito próximos dos valores de temperatura e pressão da corrente. São elas: “10”, “11”, “12”, “13”, “Analysis Pre_Ads” e “RegP_Ch#3”.

A seguir, os dados de temperatura e pressão de operação e ponto de orvalho das 9 simulações serão compilados em tabelas simplificadas, para as correntes “2”, “4” e “14”.

Como pode ser visto na Tabela 5-5, os valores de delta de temperatura e de pressão da corrente 2 estão muito próximos de zero; tão próximos que podem vir a ser menores que a margem de erro de sensores de temperatura e de pressão. Além disso, essa diferença não aparenta mudar significativamente com a composição dos gases de alimentação.

Tabela 5-5 - Temperatura e pressão, de operação e ponto de orvalho, da corrente 2.

Simulação	Temperature (°C)	Dew Point Temp. (°C)	Delta Temp. (°C)	Pressure (bar)	Dew Point Press. (bar)	Delta Press. (bar)
N2 20%	24,97	24,764	0,20	30	30,56	-0,56
N2 80%	25,01	24,768	0,24	30	30,57	-0,57
N2 100%	25,07	24,770	0,30	30	30,67	-0,67
CH4 20%	24,98	24,763	0,21	30	30,63	-0,63
CH4 80%	25,02	24,765	0,26	30	30,71	-0,71
CH4 100%	25,07	24,766	0,30	30	30,80	-0,80
Gas 20%	24,99	24,762	0,23	30	30,69	-0,69
Gas 80%	25,04	24,762	0,27	30	30,86	-0,86
Gas 100%	25,07	24,762	0,30	30	0,00	30,00

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Essa proximidade do ponto de orvalho se deve pelo fato de que a maior parte da composição de **2** vem da corrente **RegP_Ch#3**, que é a corrente de saída da seção de regeneração das colunas TSA após passar por um tanque Knock-out, ou seja, uma corrente de gás saturado. De modo a evitar possível condensação nesta corrente e causar danos ao “**K-100 Gas_Booster**”, essa corrente poderia passar por um aquecedor, de modo a aumentar sua temperatura antes de entrar no compressor.

Antes de comentar sobre o comportamento das correntes **4** e **14**, vale notar que não foram calculados dados de pressão do ponto de orvalho em quatro situações nas tabelas acima. Esse mesmo evento ocorreu em todas as simulações para diferentes correntes (vide APÊNDICE B), e às vezes até mesmo ao tentar calcular a temperatura do ponto de orvalho. Não se sabe ao certo a causa desse evento, mas acredita-se que seja uma limitação do software, e não um erro, pois ao repetir as simulações com os mesmos parâmetros, os mesmos resultados eram encontrados. Nessas ocorrências, portanto, serão apenas considerados os valores de delta dos dados de ponto de orvalho que tenham sido calculados.

De um modo geral, pode-se perceber na Tabela 5-6 que a corrente **4** está em condições de temperatura e pressão muito menos favoráveis para condensação que a corrente **2**. Isso se deve principalmente ao fato de que 85% de sua composição é definida pela corrente **AdsP_Ch#2**, que é a corrente de gás seco que sai da etapa de adsorção das colunas TSA.

Tabela 5-6 - Temperatura e pressão, de operação e ponto de orvalho, da corrente 4.

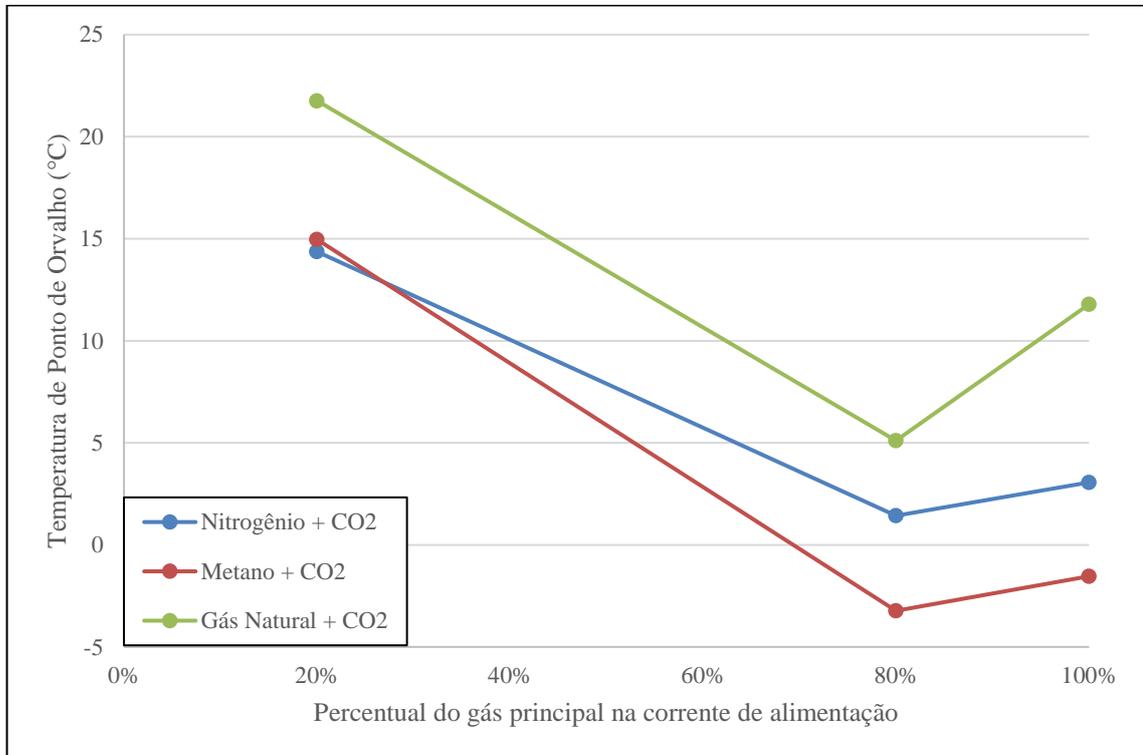
Simulação	Temperature (°C)	Dew Point Temp. (°C)	Delta Temp. (°C)	Pressure (bar)	Dew Point Press. (bar)	Delta Press. (bar)
N2 20%	44,80	14,367	30,43	80	134,52	-54,52
N2 80%	53,49	1,431	52,06	80	-	-
N2 100%	55,87	3,068	52,80	80	292,62	-212,62
CH4 20%	43,14	14,965	28,17	80	118,56	-38,56
CH4 80%	49,04	-3,228	52,27	80	186,53	-106,53
CH4 100%	49,94	-1,541	51,49	80	-	-
Gas 20%	41,67	21,762	19,90	80	117,18	-37,18
Gas 80%	45,37	5,108	40,26	80	148,64	-68,64
Gas 100%	45,57	11,789	33,78	80	8303,21	-8223,21

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

A temperatura do ponto de orvalho da corrente **4** não varia linearmente com a composição do gás de alimentação; nos casos para os 3 gases principais de alimentação, a temperatura calculada para o ponto de orvalho teve seu valor mais baixo a uma concentração de 80% do gás

principal, ou seja, com 20% de CO₂ na Alimentação. Isso pode ser visto na Figura 5-2 - Variação da temperatura do ponto de orvalho da corrente 4.

Figura 5-2 - Variação da temperatura do ponto de orvalho da corrente 4.



Fonte: elaborado pelo autor (2023).

Ao analisarmos a corrente 14 (Tabela 5-7), que antecede a seção de adsorção, podemos observar uma correlação com a seção 5.1. Os valores de delta da corrente 14 ficam bem próximos de zero nas simulações de nitrogênio e metano a 20%, e chegam a zero com os mesmos componentes a 80% e 100%. Esses dados coincidem com o observado na seção 5.1, isto é, para as alimentações de nitrogênio e metano a 80% e 100% na quantidade escolhida de água para ser usada na saturação durante a simulação, a vazão da corrente **V-101_Res** não havia zerado, sugerindo que a corrente de topo do tanque de saturação estava completamente saturada. Para as outras simulações, a corrente 14 esteve um pouco mais distante das temperaturas e pressões necessárias para atingir possíveis pontos de orvalho.

Em um primeiro momento, a saturação máxima da corrente gasosa é desejável pois representa uma situação limite na operação da planta, além de garantir a saturação máxima da corrente. Já por outro lado, ela é indesejável por interferir na eficiência das colunas de adsorção, como mencionado na Introdução. (Capítulo 1).

Tabela 5-7 - Temperatura e pressão, de operação e ponto de orvalho, da corrente 14.

Simulação	Temperature (°C)	Dew Point Temp. (°C)	Delta Temp. (°C)	Pressure (bar)	Dew Point Press. (bar)	Delta Press. (bar)
N2 20%	39,15	37,762	1,38	90	-	-
N2 80%	38,61	38,606	0,00	90	90,00	0,00
N2 100%	38,56	38,560	0,00	90	90,00	0,00
CH4 20%	39,38	33,457	5,93	90	-	-
CH4 80%	38,67	38,665	0,00	90	86,16	3,84
CH4 100%	38,61	38,607	0,00	90	89,97	0,03
Gas 20%	39,59	29,721	9,87	90	106,64	-16,64
Gas 80%	39,07	34,222	4,85	90	124,33	-34,33
Gas 100%	39,03	34,507	4,52	90	151,08	-61,08

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tendo isso em mente, para a simulação da planta no estágio atual, a corrente em sua saturação máxima de água não é algo ruim, visto que ainda não foi feita uma modelagem complexa dos cálculos de adsorção da coluna, apenas uma simplificação; mas para a planta piloto, essa informação é de extrema relevância. Ao sermos capazes de saturar a corrente gasosa **10** por completo, com o auxílio da corrente “**ByPass**” e a análise de teor de água vindo da corrente “**Analysis Pre_Ads**” (possui as mesmas características intensivas que a corrente **14**), pode ser definida uma porcentagem de umidade relativa desejada para a corrente gasosa, a ser definida de acordo com o quanto de gás vindo da corrente **ByPass** será misturado à corrente principal.

Para etapas posteriores, poderá ser adicionado um objeto de controle no fluxograma que simule o analisador de teor de água da corrente, de modo a visualizar o teor de água em ppm e definir a partir desse dado uma proporção de mistura entre as correntes **10** e **ByPass**, de modo a garantir uma alta umidade relativa, ao mesmo tempo que previne a entrada de fase líquida nas colunas.

6. Conclusão e sugestões para trabalhos futuros

O arquivo de simulação elaborado neste trabalho, chamado no HYSYS de “Flowsheet Case” é atualmente capaz de simular o comportamento da planta piloto com o intuito de obter dados simples, de modo a fornecer um norte para possíveis resultados e situações limite dos experimentos. Ao lidarmos com experimentos que ocorrem a condições de alta pressão e temperatura, uma maior previsibilidade do processo é de alta serventia tanto para a segurança dos experimentos quanto para seu direcionamento.

Após os experimentos iniciais na planta piloto, os dados coletados podem ser usados para serem comparados com os dados simulados, e com isso ajustar a simulação, de modo a melhorar sua precisão para este sistema. Quanto maior a quantidade de experimentos que possam ser usados para comparações e ajustes, melhores serão os resultados das simulações.

Com isso, este arquivo de simulação poderá servir futuramente para prever com precisão o efeito de mudanças nas condições do processo, na composição da alimentação, e em quaisquer variáveis da planta. Assim, a otimização das condições de operação pode ser estudada por simulação, diminuindo a quantidade de experimentos necessários.

Além dos ajustes feitos a partir dos dados experimentais, também pode ser avaliada no futuro a influência do pacote termodinâmico escolhido para a simulação. O pacote utilizado atualmente não é capaz de simular bem o comportamento das correntes ao adicionar componentes de comportamento mais complexo, como etanol e sulfeto de hidrogênio. A simulação de misturas gasosas contendo traços de etanol, por exemplo, é de grande relevância, pois o gás distribuído em gasodutos pode conter traços de etanol advindos do tratamento durante a extração para evitar formação de hidratos.

A partir das sugestões fornecidas pelo próprio guia do HYSYS, alguns dos modelos termodinâmicos sugeridos podem ser testados, como Lee-Kesler-Plocker, SRK, CPA, PC-SAFT, Wilson, NRTL, UNIQUAC e Glycol. Também podem ser testadas variações do modelo de Peng-Robinson, como aquelas propostas por Stryjek-Vera, Wong-Sandler e Boston-Mathias. Alguns destas variações são ditas serem mais eficazes na predição do comportamento de misturas que tenham componentes polares e/ou acima do ponto crítico. Outra alternativa é a inclusão de um modelo personalizado, desenvolvido especificamente para ser usado nas condições de operação do processo de desidratação por adsorção.

E por fim, podem ser estudadas em detalhes as diferentes formas de implementação de modelos personalizados de equipamentos no HYSYS, de modo a simular a operação das colunas TSA, ao invés de abstrair seu funcionamento por meio de simplificações.

7. Referências Bibliográficas

- ASPENTECH. **Aspen HYSYS RT - Industry Leading Process Simulation - AspenTech.** , 2023a. Disponível em: <<https://www.aspentech.com/en/products/pages/aspem-hysysrt>>. Acesso em: 29 jan. 2023
- ASPENTECH. **Aspen Plus - Industry Leading Process Simulation - AspenTech.** , 2023b. Disponível em: <<https://www.aspentech.com/en/products/engineering/aspem-plus>>. Acesso em: 29 jan. 2023
- ASPENTECH. **AspenTech: over 40 Years of Innovation.** , 2023c. Disponível em: <<https://www.aspentech.com/en/about-aspentech/history>>. Acesso em: 29 jan. 2023
- ASPENTECH. **35 Years of Innovation - About AspenTech.** , 2023d. Disponível em: <<https://www.aspentech.com/en/about-aspentech/35-years-of-innovation>>. Acesso em: 29 jan. 2023
- BARANENKO, V. et al. Air solubility in water. **Russian Journal of Physical Chemistry A (Zh Fiz Khim)**, v. 64, p. 3256–3261, 1990.
- BARRETO JR, A. G.; TAVARES, F. W. **Pilot Plant Technical Specification: Dehydration of Natural Gas using Adsorption.** Rio de Janeiro: [s.n.].
- BERG, F. et al. Temperature Swing Adsorption in Natural Gas Processing: A Concise Overview. **ChemBioEng Reviews**, p. cben.201900005, 17 abr. 2019.
- CINES, M. R. et al. Nitrogen-methane vapor-liquid equilibria. **Chemical engineering progress symposium series**, v. 49, n. 6, p. 1–10, 1953.
- DONNELLY, H. G.; KATZ, D. L. Phase Equilibria in the Carbon Dioxide–Methane System. **Industrial & Engineering Chemistry**, v. 46, n. 3, p. 511–517, 1 mar. 1954.
- FIRMINO, B. **Modelagem e Simulação - Projeto ALSOC - entropialivre.blogspot.com. Entropia Livre**, abr. 2010. Disponível em: <<http://entropialivre.blogspot.com/2010/04/modelagem-e-simulacao-projeto-alsoc.html>>. Acesso em: 29 jan. 2023
- FROST, M. et al. Vapor–Liquid Equilibrium of Methane with Water and Methanol. Measurements and Modeling. **Journal of Chemical & Engineering Data**, v. 59, n. 4, p. 961–967, 10 abr. 2014.
- GÁMEZ, O. E. O. **What is UNISIM? - ChemEngGuy - chemicalengineeringguy.com.** , 2023. Disponível em: <<https://www.chemicalengineeringguy.com/the-blog/process-simulation/what-is-unisim>>. Acesso em: 29 jan. 2023
- GILLESPIE, P. C.; WILSON, G. M. **Vapor-liquid equilibrium data on water-substitute gas components: N₂-H₂O, H₂-H₂O, CO-H₂O, H₂-CO-H₂O, and H₂S-H₂O, Gas Processors Association RR-41, 1980, No. 41.** Provo, Utah: [s.n.].

HYSYS® 2004.2 User Guide. CambridgeAspen Technology, Inc., , out. 2005.

KAMINISHI, G.; TORIUMI, T. Vapor-Liquid Phase Equilibrium in the CO₂-H₂, CO₂-N₂ and CO₂-O₂ Systems. Gas-liquid equilibrium under high pressures: VI. **The Journal of the Society of Chemical Industry, Japan**, v. 69, n. 2, p. 175–178, 1966.

KRICHEVSKY, I. R. et al. Liquid-gas equilibrium in the nitrogen + carbon dioxide system under elevated pressures. **Khimicheskaya Promyshlennost (Moscow)**, v. 3, p. 169–171, 1962.

MEDEIROS, D. W. O. DE. **DWSIM – the open source chemical process simulator. DWSIM The Open Source Chemical Process Simulator**, 2023. Disponível em: <<https://dwsim.org/>>. Acesso em: 29 jan. 2023

NETUSIL, M.; DITL, P. Comparison of three methods for natural gas dehydration. **Journal of Natural Gas Chemistry**, v. 20, n. 5, p. 471–476, set. 2011.

RIGBY, M.; PRAUSNITZ, J. M. Solubility of water in compressed nitrogen, argon, and methane. **The Journal of Physical Chemistry**, v. 72, n. 1, p. 330–334, 1 jan. 1968.

SIDOROV, I. P.; KAZARNOVSKII, Y. S.; GOLDMAN, A. M. Solubility of water in compressed gases. **Tr Gosudarst Nauch Issled I Proekt Inst Azot Prom. (Trudy GIAP)**, n. 1, p. 48–67, 1952.

SOARES, R. DE P. **ALSOC PROJECT - EMSO. Welcome to the Alsoc Project Homepage.**UFRGS, , 2023. Disponível em: <<https://www.enq.ufrgs.br/trac/alsoc>>. Acesso em: 29 jan. 2023

SOMAIT, F. A.; KIDNAY, A. J. Liquid-vapor equilibria at 270.00 K for systems containing nitrogen, methane, and carbon dioxide. **Journal of Chemical & Engineering Data**, v. 23, n. 4, p. 301–305, 1 out. 1978.

TAKENOUCHI, S.; KENNEDY, G. C. The binary system H₂O-CO₂ at high temperatures and pressures. **American Journal of Science**, v. 262, n. 9, p. 1055–1074, 1 nov. 1964.

TAVARES, F. W.; SEGTOVICH, I. S. V.; MEDEIROS, F. DE A. **Termodinâmica na Engenharia Química**. 1. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2023.

TOEDHEIDE, K.; FRANCK, E. U. Two-phase range and the critical curve in the system carbon dioxide-water up to 3500 bar. **Zeitschrift für Physikalische Chemie (München)**, v. 37, p. 387–401, 1963.

YARYMAGAEV, N. et al. Phase-Equilibria in the Water Methane and Methanol Methane Binary-Systems under High-Pressures. **Journal of applied chemistry of the USSR**, v. 58, n. 1, p. 154–157, 1985.

ZENNER, G. H.; DANA, L. I. Liquid-Vapor Equilibrium Compositions of Carbon Dioxide-Oxygen-Nitrogen mixtures. **Chemical engineering progress symposium series**, v. 59, n. 44, p. 36–41, 1963.

APÊNDICE A. Scripts em python usados no trabalho

A.1. Script para pegar os dados de validação do modelo termodinâmico

```
import win32com.client as win32
from win32com.client import Dispatch
import os

#Abrindo o HYSYS e executando o arquivo.
print('Abrindo o Aspen HYSYS, aguarde...')
hysys = Dispatch("HYSYS.Application") # Pega o arquivo ativo do HYSYS
hysysPath = os.path.abspath(r'C:\Users\atoms\JGFS\Estagio e TCC\Comparação Peng-Robinson vs Experimental\H_PR_test.hsc')
hysysSim = hysys.SimulationCases.Open(hysysPath)
hysysSim.Visible = True
print('Executando o arquivo', hysysSim.Title)

#Se der erro e o hysysSim não for encontrado
if hysysSim is None:
    print('wtf')
    raise ValueError('wtf')

#Descobrir se o Excel está aberto ou fechado, para usá-lo
try:
    excelApp = win32.GetActiveObject("Excel.Application")
    excelWorkbook = excelApp.Workbooks.Item(r'C:\Users\atoms\JGFS\Estagio e TCC\Comparação Peng-Robinson vs
Experimental\H_PR_test.xlsx')
except:
    excelApp = win32.gencache.EnsureDispatch("Excel.Application")
    excelWorkbook = excelApp.Workbooks.Open(r'C:\Users\atoms\JGFS\Estagio e TCC\Comparação Peng-Robinson vs
Experimental\H_PR_test.xlsx')
    print("Excel não está rodando. Abriremos ele para você.")
else:
    print("Excel já está rodando. Usaremos ele.")

excelApp.Visible = False
excelSheet = excelWorkbook.Worksheets("Plan1")
```

```

# Pega as correntes existentes no HYSYS e atualiza seus respectivos valores de pressão e temperatura
N2_H2O = hysysSim.Flowsheet.MaterialStreams.Item('N2_H2O')
CH4_H2O = hysysSim.Flowsheet.MaterialStreams.Item('CH4_H2O')
CO2_H2O = hysysSim.Flowsheet.MaterialStreams.Item('CO2_H2O')
N2_CH4 = hysysSim.Flowsheet.MaterialStreams.Item('N2_CH4')
N2_CO2 = hysysSim.Flowsheet.MaterialStreams.Item('N2_CO2')
CH4_CO2 = hysysSim.Flowsheet.MaterialStreams.Item('CH4_CO2')

#Cria uma variável no Python para chamar a Operação Spreadsheet "Teste VLE" da Flowsheet
hySS = hysysSim.Flowsheet.Operations.Item("Teste VLE")

#Aninhamento de For Loops para importar os dados do HYSYS para o Excel em Várias T e P diferentes
for i in range(3,202+1):
    #for j in range(3,14):
    hysysSim.Solver.CanSolve = True #Reativando o solver do HYSYS (Active)
    # Pega os dados de pressão e temperatura do Excel para o HYSYS
    temperatura = excelSheet.Cells(i,1).Value
    pressao = excelSheet.Cells(i,2).Value
    N2_H2O.Pressure.SetValue(pressao, "bar")
    N2_H2O.Temperature.SetValue(temperatura, "C")

    j = 4 # Referência à coluna D da planilha do Excel
    # Ordem: H2O, CO2, Methane, Nitrogen
    c1 = excelSheet.Cells(i,3).Value
    c2 = 1 - c1
    #for stream in [N2_H2O, CH4_H2O, CO2_H2O, ]
    N2_H2O.ComponentMolarFraction.Values = (c1, 0.0, 0.0, c2)
    CH4_H2O.ComponentMolarFraction.Values = (c1, 0.0, c2, 0.0)
    CO2_H2O.ComponentMolarFraction.Values = (c1, c2, 0.0, 0.0)
    N2_CH4.ComponentMolarFraction.Values = (0.0, 0.0, c1, c2)
    N2_CO2.ComponentMolarFraction.Values = (0.0, c2, 0.0, c1)
    CH4_CO2.ComponentMolarFraction.Values = (0.0, c2, c1, 0.0)
    #Desativando o solver do HYSYS (On Hold)
    hysysSim.Solver.CanSolve = False

    for k in range(1,6+1):
        for l in range(3,4+1):
            try:
                excelSheet.Cells(i,j).Value = hySS.Cell(l,k).CellValue

```

```
    except:
        excelSheet.Cells(i,j).Value = ""
        j += 1

#Reativando o solver do HYSYS (Active)
hysysSim.Solver.CanSolve = True

#testes para o For Loop
#temporario[j] = hySS.Cell(k,l).CellValue

#Mensagem Final
print("Script rodado com sucesso!!")

#Salva A pasta de trabalho e o flowsheet, depois fecha o Excel
excelApp.ActiveWorkbook.Save()
excelApp.Quit()
hysysSim.Save
print("Pasta de trabalho e Flowsheet salvos!")
print("Fin!")
#hysys.Quit()
```

A.2. Script para criar os gráficos

```

import pandas as pd
import matplotlib.pyplot as plt
import os #para usar o mesmo diretório do arquivo e poder rodar o arquivo em qualquer lugar enquanto usando o VSCode
import time

print('O nome do arquivo é:', os.path.basename(__file__))
print('O nome do arquivo é:', __file__)
print('O diretório do arquivo é: ', os.path.dirname(__file__))
print('O diretório atual no VS Code é: ', os.getcwd())
start = time.time()
os.chdir(os.path.dirname(__file__))
# Carrega dados do arquivo do Excel no DataFrame do Pandas
excelname = ('DadosVLE_v5.xlsx')
sheets = pd.ExcelFile(excelname).sheet_names
j=0 # um número para cada mistura, de 0 a 5
k=0 # 0 é fase vapor, 1 é fase líquida
end = time.time()
delta = end - start
print('Tempo para carregar o dataframe com os nomes das planilhas: ', delta, ' segundos')
total = delta
start = time.time()
if k == 0:
    phase = 'Fase Vapor'
elif k == 1:
    phase = 'Fase Líquida'
df = pd.read_excel(excelname, sheet_name=sheets[j])
dfisotermas = df["Temp. (°C)"].unique()
dfisotermas.sort()
dfdicionario = {}

misturas = sheets
primeiros = sheets
misturas = [m.replace('_', ' + ') for m in misturas]
primeiros = [p.split('_')[0] for p in primeiros]
end = time.time()
delta = end - start
print('Tempo para carregar o dataframe com os nomes dos componentes: ', delta, ' segundos')

```

```

total += delta
start = time.time()
plt.figure(figsize=(10,6))
for i in range(0, dfisotermas.size):
    grouped = df.groupby(df["Temp. (°C)"])
    df0 = grouped.get_group(dfisotermas[i])
    colunas = list(df0.columns.values)
    x = df0[colunas[1]]
    y1 = df0[colunas[2+k]]
    y2 = df0[colunas[4+k]]
    pexp = plt.plot(x,y1, 'x', label="T="+str(dfisotermas[i].round(2))+°C - Exp.")
    hysys = plt.plot(x,y2, 'o', label="T="+str(dfisotermas[i].round(2))+°C - HYSYS", color=pexp[0].get_color())
    plt.legend(loc='upper left',bbox_to_anchor=[1,1])

# Nomes dos Eixos
plt.xlabel('Pressão (bar)')
plt.ylabel(f'Fração de {primeiros[j]} na {phase}')
end = time.time()
delta = end - start
print('Tempo para plotar a figura: ',delta, ' segundos')
total += delta
start = time.time()
# Título do plot (e do arquivo final)
graphname = (f'Mistura binária {misturas[j]} - {phase}')
finalpath = os.path.dirname(__file__) + '\\Test Graphs\\'+graphname+'.png' # Escolha se o arquivo será .svg, .jpg ou .png
plt.title(graphname,loc='center')
plt.tight_layout()

plt.savefig(finalpath, dpi=1000) # Salva o plot em um arquivo de imagem
plt.clf()
plt.cla()
plt.close()

end = time.time()
delta = end - start
print('Tempo para salvar a figura: ',delta, ' segundos')
total += delta
print('Tempo total de criação do gráfico: ',total)

```

A.3. Script para pegar os dados ao final da simulação e construir as tabelas

```

import win32com.client as win32
from win32com.client import Dispatch
import os
import time
inicio = time.time()
os.chdir(os.path.dirname(__file__))
#Abrindo o HYSYS e executando o arquivo.
print('Abrindo o Aspen HYSYS, aguarde...')
hyApp = Dispatch('HYSYS.Application')
hyCase = hyApp.ActiveDocument # Pega o documento HYSYS ativo no momento
if hyCase is None:
    hyPath = os.path.abspath('TabelasTCC.hsc')
    hyCase = hyApp.SimulationCases.Open(hyPath)
hyCase.Visible = True
print('Executando o arquivo', hyCase.Title)
hyOp = hyCase.Flowsheet.Operations
# Definir o solver para ser chamado e criar uma função de espera para quando o HYSYS estiver calculando
solver = hyCase.Solver
solver.CanSolve = False # Desativa o Solver do HYSYS
ADJ1 = hyOp.Item("ADJ-1")
ADJ2 = hyOp.Item("ADJ-2")
def esperar():
    start = time.time()
    ADJ1.IsIgnored = True
    ADJ2.IsIgnored = True
    solver.CanSolve = True
    time.sleep(0.1)
    while solver.IsSolving:
        time.sleep(0.001)
    ADJ1.IsIgnored = False
    ADJ2.IsIgnored = False
    time.sleep(0.1)
    while solver.IsSolving:
        time.sleep(0.001)
    end = time.time()
    delta = end-start
    formatando(delta)

```

```

    return

def formatando(delta):
    minutes = delta//60
    newdelta = delta - 60*minutes
    seconds = int(newdelta)
    miliseconds = (newdelta % 1)*1000
    print('Tempo de execução: %d minutos, %d segundos e %d milissegundos' %(minutes,seconds,miliseconds))

#Descobrir se o Excel está aberto ou fechado, para usá-lo
try:
    excelApp = win32.GetActiveObject("Excel.Application")
    excelWorkbook = excelApp.Workbooks.Item('TabelasTCC.xlsx')
except:
    #excelApp = new_excelApp(visible=visible)
    # Set Excel Application object
    excelApp = win32.gencache.EnsureDispatch("Excel.Application")
    excelWorkbook = excelApp.Workbooks.Open('TabelasTCC.xlsx')
    print("Excel não está rodando. Abriremos ele para você.")
else:
    print("Excel já está rodando. Usaremos ele.")
excelApp.Visible = True
excelSheet = excelWorkbook.Worksheets("Conditions")

# criando novas planilhas
newsheets = []
for i in range(9):
    newsheets.append(excelSheet.Cells(2+i,1).Value)

# Pegando lista de componentes no HYSYS e adicionando a um dicionário, segundo ordem
hyComp = hyCase.BasisManager.ComponentLists.Item(0).Components
DictComp = {}
for i in range(len(hyComp.Names)):
    DictComp[hyComp.Names[i]] = i
correntes = ('Gas', 'CO2', 'N2', '1', '2', '3', 'AdsP_Ch#2', '4', '5', '6', '7_Ch#1', 'V-100_Res', 'ByPass', '8',
'Water_In',
            '9', 'V-101_Res', '10', '11', '12', 'V-102_Res', '13', 'Analysis Pre_Ads', '14', 'X-101_Water', '15', '15_Rec',
            '16', '17', 'Analysis Post_Ads', '18', '19', 'X-100_Water', '20', '21', '22', '23', '24', '25', 'V-103_Res',
'RegP_Ch#3')

```

```

j=0
for planilha in newsheets:
    excelSheet2 = excelWorkbook.Worksheets(planilha)
    ADJ1.IsIgnored = True
    ADJ2.IsIgnored = True
    print(f"Preenchendo a planilha {planilha}! Primeiro inserindo parâmetros e convergindo a simulação:")

    # Criando conexão com as correntes e definindo a composição do gás natural
    hyStreams = hyCase.Flowsheet.MaterialStreams
    GasStream = hyStreams.Item("Gas")
    listinha = []
    for comp in DictComp:
        match comp:
            case "Methane":
                listinha.append(excelSheet.Cells(2+j, 2).Value)
            case "Ethane":
                listinha.append(excelSheet.Cells(2+j, 3).Value)
            case "Propane":
                listinha.append(excelSheet.Cells(2+j, 4).Value)
            case "Isobutane":
                listinha.append(excelSheet.Cells(2+j, 5).Value)
            case "n-Butane":
                listinha.append(excelSheet.Cells(2+j, 6).Value)

            case default:
                listinha.append(0)
    GasStream.ComponentMolarFraction.Values = listinha

    # Definindo a proporção dos gases de alimentação
    hySS = hyCase.Flowsheet.Operations.Item("MakeUp_ & VOID")
    # No excel, a ordem é (linha,coluna). No HYSYS, a ordem é (coluna, linha)
    hySS.Cell(2, 3).CellValue = excelSheet.Cells(2+j, 8).Value #N2 é (2,8) no excel e (2,3) no SS do HYSYS
    hySS.Cell(2, 4).CellValue = excelSheet.Cells(2+j, 9).Value #Gas é (2,9) no excel e (2,4) no SS do HYSYS
    esperar()

    inicim= time.time()
    i = 0
    for corrente in correntes:
        stream = hyStreams.Item(corrente)

```

```

myFluid = stream.DuplicateFluid()
excelSheet2.Cells(2 + i, 1).Value = stream.Name
excelSheet2.Cells(2 + i, 2).Value = stream.VapourFractionValue
excelSheet2.Cells(2 + i, 3).Value = stream.Temperature.GetValue("C")
try:
    excelSheet2.Cells(2 + i, 4).Value = (myFluid.DewPointTemperatureValue)
except:
    pass
excelSheet2.Cells(2 + i, 6).Value = stream.Pressure.GetValue("bar")
try:
    excelSheet2.Cells(2 + i, 7).Value = (myFluid.DewPointPressureValue)/100
except:
    pass
excelSheet2.Cells(2 + i, 9).Value = stream.MolarFlow.GetValue("kgmole/h")
excelSheet2.Cells(2 + i, 10).Value = stream.MassFlow.GetValue("kg/h")
excelSheet2.Cells(2 + i, 11).Value = stream.ActualVolumeFlow.GetValue("m3/h")
excelSheet2.Cells(2 + i, 12).Value = stream.HeatFlow.GetValue("kcal/h")
excelSheet2.Cells(2 + i, 13).Value = stream.ComponentMolarFraction.Values[DictComp['Nitrogen']]
excelSheet2.Cells(2 + i, 14).Value = stream.ComponentMolarFraction.Values[DictComp['H2O']]
excelSheet2.Cells(2 + i, 15).Value = stream.ComponentMolarFraction.Values[DictComp['CO2']]
excelSheet2.Cells(2 + i, 16).Value = stream.ComponentMolarFraction.Values[DictComp['Methane']]
excelSheet2.Cells(2 + i, 17).Value = stream.ComponentMolarFraction.Values[DictComp['Ethane']]
excelSheet2.Cells(2 + i, 18).Value = stream.ComponentMolarFraction.Values[DictComp['Propane']]
excelSheet2.Cells(2 + i, 19).Value = stream.ComponentMolarFraction.Values[DictComp['Isobutane']]
excelSheet2.Cells(2 + i, 20).Value = stream.ComponentMolarFraction.Values[DictComp['n-Butane']]
i += 1
finalzim = time.time()
deltinha = finalzim-inicim
j += 1
print(f'Coleta de dados para planilha {planilha} finalizada!')
formatando(deltinha)
finalzao = time.time()
deltao = finalzao-inicio
print ('Script finalizado. tempo total abaixo:')
formatando(deltao).

```

APÊNDICE B. Tabelas detalhadas contendo dados das simulações

Tabela B-1 - Nitrogênio 20% - Condições das correntes.

Stream	Temperature (°C)	Dew Point Temp. (°C)	Delta Temp. (°C)	Pressure (bar)	Dew Point Press. (bar)	Delta Press. (bar)	Molar Flow (kgmole/h)	Mass Flow (kg/h)	Act. Volume Flow (m3/h)	Heat Flow (kcal/h)
Gas	30,00	4,195	25,80	30	115,55	-85,55	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
CO2	30,00	0,409	29,59	35	72,11	-37,11	2,40E-03	1,06E-01	1,38E-03	-2,27E+02
N2	30,00	-149,621	179,62	30	-	-	6,00E-04	1,68E-02	5,00E-04	-9,24E-03
1	24,98	24,957	0,03	30	30,07	-0,07	2,25E-01	9,18E+00	1,62E-01	-1,70E+04
2	24,97	24,764	0,20	30	30,56	-0,56	2,28E-01	9,29E+00	1,63E-01	-1,72E+04
3	124,35	29,166	95,18	80	240,66	-160,66	2,28E-01	9,29E+00	8,40E-02	-1,70E+04
AdsP_Ch#2	36,99	15,502	21,49	85	123,74	-38,74	1,27E+00	5,18E+01	2,57E-01	-9,64E+04
4	44,80	14,367	30,43	80	134,52	-54,52	1,50E+00	6,11E+01	3,56E-01	-1,13E+05
5	55,80	13,334	42,47	90	149,61	-59,61	1,50E+00	6,11E+01	3,33E-01	-1,13E+05
6	40,00	13,334	26,67	90	130,89	-40,89	1,50E+00	6,11E+01	2,87E-01	-1,14E+05
7_Ch#1	40,00	13,334	26,67	90	130,89	-40,89	1,50E+00	6,11E+01	2,87E-01	-1,14E+05
V-100_Res	40,00	18,080	21,92	90	120,93	-30,93	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
ByPass	40,00	13,334	26,67	90	130,89	-40,89	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
8	40,00	13,334	26,67	90	130,89	-40,89	1,50E+00	6,11E+01	2,87E-01	-1,14E+05
Water_In	30,00	303,330	-273,33	90	0,04	89,96	3,00E-03	5,40E-02	5,40E-05	-2,04E+02
9	39,15	37,762	1,38	90	-	-	1,50E+00	6,12E+01	2,84E-01	-1,14E+05
V-101_Res	39,15	44,002	-4,86	90	34,61	55,39	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
10	39,15	37,762	1,38	90	-	-	1,50E+00	6,12E+01	2,84E-01	-1,14E+05
11	39,15	37,762	1,38	90	-	-	1,50E+00	6,12E+01	2,84E-01	-1,14E+05
12	39,15	37,762	1,38	90	-	-	1,50E+00	6,12E+01	2,84E-01	-1,14E+05
V-102_Res	39,15	44,002	-4,86	90	34,61	55,39	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
13	39,15	37,762	1,38	90	-	-	1,50E+00	6,12E+01	2,84E-01	-1,14E+05
Analysis Pre_Ads	39,15	37,762	1,38	90	-	-	1,50E-03	6,12E-02	2,84E-04	-1,14E+02
14	39,15	37,762	1,38	90	-	-	1,50E+00	6,11E+01	2,84E-01	-1,14E+05
X-101_Water	271,16	303,330	-32,17	90	56,03	33,97	8,33E-04	1,50E-02	1,95E-05	-5,30E+01
15	39,23	43,470	-4,24	90	38,21	51,79	1,50E+00	6,11E+01	2,84E-01	-1,14E+05

15_Rec	39,23	43,470	-4,24	90	38,21	51,79	1,50E+00	6,11E+01	2,84E-01	-1,14E+05
16	40,21	13,343	26,87	90	128,26	-38,26	1,50E+00	6,10E+01	2,88E-01	-1,14E+05
17	36,99	15,502	21,49	85	123,74	-38,74	1,50E+00	6,10E+01	3,02E-01	-1,14E+05
Analysis Post_Ads	36,99	15,502	21,49	85	123,74	-38,74	1,50E-03	6,10E-02	3,02E-04	-1,14E+02
18	36,99	15,502	21,49	85	123,74	-38,74	2,24E-01	9,16E+00	4,54E-02	-1,70E+04
19	280,00	15,502	264,50	85		85,00	2,24E-01	9,16E+00	1,20E-01	-1,64E+04
X-100_Water	40,21	303,330	-263,12	90	0,07	89,93	4,16E-03	7,50E-02	7,53E-05	-2,83E+02
20	260,60	95,846	164,76	85	409,60	-324,60	2,29E-01	9,23E+00	1,17E-01	-1,67E+04
21	268,80	96,517	172,28	90	420,15	-330,15	2,29E-01	9,23E+00	1,12E-01	-1,66E+04
22	271,16	89,616	181,55	90	423,37	-333,37	2,28E-01	9,22E+00	1,12E-01	-1,66E+04
23	269,17	88,378	180,79	80	420,95	-340,95	2,28E-01	9,22E+00	1,26E-01	-1,66E+04
24	190,35	72,586	117,77	30	323,17	-293,17	2,28E-01	9,22E+00	2,86E-01	-1,68E+04
25	25,00	72,586	-47,59	30	2,22	27,78	2,28E-01	9,22E+00	1,61E-01	-1,72E+04
V-103_Res	25,00	233,866	-208,87	30	0,03	29,97	2,99E-03	5,39E-02	5,40E-05	-2,04E+02
RegP_Ch#3	25,00	25,000	0,00	30	30,00	0,00	2,25E-01	9,16E+00	1,61E-01	-1,70E+04

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tabela B-2 - Nitrogênio 20% - Frações de vapor e Composições

Stream	Vapor Fraction	zi N2	zi H2O	zi CO2	zi Methane	zi Ethane	zi Propane	zi i-Butane	zi n-Butane
Gas	1	0,0000	0,0000	0,0000	0,7598	0,1191	0,0801	0,012	0,029
CO2	1	0,0000	0,0000	1,0000	0	0	0	0	0
N2	1	1,0000	0,0000	0,0000	0	0	0	0	0
1	1	0,2018	0,0015	0,7967	0	0	0	0	0
2	1	0,1997	0,0015	0,7988	0	0	0	0	0
3	1	0,1997	0,0015	0,7988	0	0	0	0	0
AdsP_Ch#2	1	0,2000	0,0000	0,8000	0	0	0	0	0
4	1	0,2000	0,0002	0,7998	0	0	0	0	0
5	1	0,2000	0,0002	0,7998	0	0	0	0	0
6	1	0,2000	0,0002	0,7998	0	0	0	0	0
7_Ch#1	1	0,2000	0,0002	0,7998	0	0	0	0	0

V-100_Res	0	0,1658	0,0003	0,8339	0	0	0	0	0
ByPass	1	0,2000	0,0002	0,7998	0	0	0	0	0
8	1	0,2000	0,0002	0,7998	0	0	0	0	0
Water_In	0	0,0000	1,0000	0,0000	0	0	0	0	0
9	1	0,1996	0,0022	0,7982	0	0	0	0	0
V-101_Res	0	0,1620	0,0029	0,8350	0	0	0	0	0
10	1	0,1996	0,0022	0,7982	0	0	0	0	0
11	1	0,1996	0,0022	0,7982	0	0	0	0	0
12	1	0,1996	0,0022	0,7982	0	0	0	0	0
V-102_Res	0	0,1620	0,0029	0,8350	0	0	0	0	0
13	1	0,1996	0,0022	0,7982	0	0	0	0	0
Analysis Pre_Ads	1	0,1996	0,0022	0,7982	0	0	0	0	0
14	1	0,1996	0,0022	0,7982	0	0	0	0	0
X-101_Water	0	0,0000	1,0000	0,0000	0	0	0	0	0
15	0,9996	0,1994	0,0028	0,7978	0	0	0	0	0
15_Rec	0,9996	0,1994	0,0028	0,7978	0	0	0	0	0
16	1	0,2000	0,0000	0,8000	0	0	0	0	0
17	1	0,2000	0,0000	0,8000	0	0	0	0	0
Analysis Post_Ads	1	0,2000	0,0000	0,8000	0	0	0	0	0
18	1	0,2000	0,0000	0,8000	0	0	0	0	0
19	1	0,2000	0,0000	0,8000	0	0	0	0	0
X-100_Water	0	0,0000	1,0000	0,0000	0	0	0	0	0
20	1	0,1964	0,0182	0,7854	0	0	0	0	0
21	1	0,1964	0,0182	0,7854	0	0	0	0	0
22	1	0,1971	0,0146	0,7883	0	0	0	0	0
23	1	0,1971	0,0146	0,7883	0	0	0	0	0
24	1	0,1971	0,0146	0,7883	0	0	0	0	0
25	0,9869	0,1971	0,0146	0,7883	0	0	0	0	0
V-103_Res	0	0,0000	1,0000	0,0000	0	0	0	0	0
RegP_Ch#3	1	0,1997	0,0015	0,7988	0	0	0	0	0

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tabela B-3 - Nitrogênio 80% - Condições das correntes.

Stream	Temperature (°C)	Dew Point Temp. (°C)	Delta Temp. (°C)	Pressure (bar)	Dew Point Press. (bar)	Delta Press. (bar)	Molar Flow (kgmole/h)	Mass Flow (kg/h)	Act. Volume Flow (m3/h)	Heat Flow (kcal/h)
Gas	30,00	4,195	25,80	30	115,55	-85,55	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
CO2	30,00	0,409	29,59	35	72,11	-37,11	6,00E-04	2,64E-02	3,44E-04	-5,66E+01
N2	30,00	-149,621	179,62	30	-	-	2,40E-03	6,72E-02	2,00E-03	-3,70E-02
1	25,04	24,820	0,22	30	30,53	-0,53	2,27E-01	7,08E+00	1,82E-01	-4,26E+03
2	25,01	24,768	0,24	30	30,57	-0,57	2,28E-01	7,11E+00	1,82E-01	-4,32E+03
3	143,61	35,366	108,25	80	366,78	-286,78	2,28E-01	7,11E+00	9,90E-02	-4,12E+03
AdsP_Ch#2	39,14	-48,066	87,21	85	238,82	-153,82	1,27E+00	3,97E+01	3,68E-01	-2,40E+04
4	53,49	1,431	52,06	80	-	-	1,50E+00	4,68E+01	4,89E-01	-2,82E+04
5	67,25	1,583	65,67	90	-	-	1,50E+00	4,68E+01	4,57E-01	-2,80E+04
6	40,00	1,583	38,42	90	240,64	-150,64	1,50E+00	4,68E+01	4,11E-01	-2,84E+04
7_Ch#1	40,00	1,583	38,42	90	240,64	-150,64	1,50E+00	4,68E+01	4,11E-01	-2,84E+04
V-100_Res	40,00	11,343	28,66	90	230,07	-140,07	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
ByPass	40,00	1,583	38,42	90	240,64	-150,64	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
8	40,00	1,583	38,42	90	240,64	-150,64	1,50E+00	4,68E+01	4,11E-01	-2,84E+04
Water_In	30,00	303,330	-273,33	90	0,04	89,96	3,00E-03	5,40E-02	5,40E-05	-2,04E+02
9	38,61	46,488	-7,88	90	44,06	45,94	1,50E+00	4,68E+01	4,09E-01	-2,86E+04
V-101_Res	38,61	303,330	-264,72	90	0,07	89,93	1,01E-03	1,83E-02	1,83E-05	-6,90E+01
10	38,61	38,606	0,00	90	90,00	0,00	1,50E+00	4,68E+01	4,09E-01	-2,85E+04
11	38,61	38,606	0,00	90	90,00	0,00	1,50E+00	4,68E+01	4,09E-01	-2,85E+04
12	38,61	38,606	0,00	90	90,00	0,00	1,50E+00	4,68E+01	4,09E-01	-2,85E+04
V-102_Res	38,61	51,618	-13,01	90	31,14	58,86	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
13	38,61	38,606	0,00	90	90,00	0,00	1,50E+00	4,68E+01	4,09E-01	-2,85E+04
Analysis Pre_Ads	38,61	38,606	0,00	90	90,00	0,00	1,50E-03	4,68E-02	4,09E-04	-2,85E+01
14	38,61	38,606	0,00	90	90,00	0,00	1,50E+00	4,68E+01	4,08E-01	-2,85E+04
X-101_Water	274,51	303,330	-28,82	90	59,01	30,99	5,73E-04	1,03E-02	1,35E-05	-3,64E+01
15	38,78	43,367	-4,58	90	56,41	33,59	1,50E+00	4,68E+01	4,08E-01	-2,85E+04
15_Rec	38,78	43,367	-4,58	90	56,41	33,59	1,50E+00	4,68E+01	4,08E-01	-2,85E+04
16	40,37	-48,046	88,41	90	240,35	-150,35	1,50E+00	4,67E+01	4,11E-01	-2,83E+04

17	39,14	-48,066	87,21	85	238,82	-153,82	1,50E+00	4,67E+01	4,34E-01	-2,83E+04
Analysis Post_Ads	39,14	-48,066	87,21	85	238,82	-153,82	1,50E-03	4,67E-02	4,34E-04	-2,83E+01
18	39,14	-48,066	87,21	85	238,82	-153,82	2,25E-01	7,01E+00	6,50E-02	-4,25E+03
19	280,00	-48,066	328,07	85	-	-	2,25E-01	7,01E+00	1,24E-01	-3,80E+03
X-100_Water	40,37	303,330	-262,96	90	0,08	89,92	2,87E-03	5,16E-02	5,18E-05	-1,95E+02
20	261,82	89,811	172,01	85	504,41	-419,41	2,27E-01	7,06E+00	1,21E-01	-3,99E+03
21	272,22	90,774	181,44	90	516,38	-426,38	2,27E-01	7,06E+00	1,17E-01	-3,97E+03
22	274,51	84,462	190,05	90	519,14	-429,14	2,27E-01	7,05E+00	1,17E-01	-3,94E+03
23	273,92	82,597	191,32	80	518,46	-438,46	2,27E-01	7,05E+00	1,32E-01	-3,94E+03
24	181,05	65,063	115,98	30	409,83	-379,83	2,27E-01	7,05E+00	2,86E-01	-4,10E+03
25	25,00	65,063	-40,06	30	3,22	26,78	2,27E-01	7,05E+00	1,80E-01	-4,40E+03
V-103_Res	25,00	233,866	-208,87	30	0,03	29,97	1,98E-03	3,57E-02	3,58E-05	-1,35E+02
RegP_Ch#3	25,00	25,000	0,00	30	30,00	0,00	2,25E-01	7,02E+00	1,80E-01	-4,26E+03

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tabela B-4 - Nitrogênio 80% - Frações de vapor e Composições

Stream	Vapor Fraction	zi N2	zi H2O	zi CO2	zi Methane	zi Ethane	zi Propane	zi i-Butane	zi n-Butane
Gas	1	0,0000	0,0000	0,0000	0,7598	0,1191	0,0801	0,012	0,029
CO2	1	0,0000	0,0000	1,0000	0	0	0	0	0
N2	1	1,0000	0,0000	0,0000	0	0	0	0	0
1	1	0,8010	0,0014	0,1976	0	0	0	0	0
2	1	0,7989	0,0014	0,1997	0	0	0	0	0
3	1	0,7989	0,0014	0,1997	0	0	0	0	0
AdsP_Ch#2	1	0,8000	0,0000	0,2000	0	0	0	0	0
4	1	0,7998	0,0002	0,2000	0	0	0	0	0
5	1	0,7998	0,0002	0,2000	0	0	0	0	0
6	1	0,7998	0,0002	0,2000	0	0	0	0	0
7_Ch#1	1	0,7998	0,0002	0,2000	0	0	0	0	0
V-100_Res	0	0,7380	0,0004	0,2616	0	0	0	0	0
ByPass	1	0,7998	0,0002	0,2000	0	0	0	0	0

8	1	0,7998	0,0002	0,2000	0	0	0	0	0
Water_In	0	0,0000	1,0000	0,0000	0	0	0	0	0
9	0,9993	0,7982	0,0022	0,1996	0	0	0	0	0
V-101_Res	0	0,0000	1,0000	0,0000	0	0	0	0	0
10	1	0,7988	0,0015	0,1997	0	0	0	0	0
11	1	0,7988	0,0015	0,1997	0	0	0	0	0
12	1	0,7988	0,0015	0,1997	0	0	0	0	0
V-102_Res	0	0,7394	0,0028	0,2578	0	0	0	0	0
13	1	0,7988	0,0015	0,1997	0	0	0	0	0
Analysis Pre_Ads	1	0,7988	0,0015	0,1997	0	0	0	0	0
14	1	0,7988	0,0015	0,1997	0	0	0	0	0
X-101_Water	0	0,0000	1,0000	0,0000	0	0	0	0	0
15	0,9996	0,7985	0,0019	0,1996	0	0	0	0	0
15_Rec	0,9996	0,7985	0,0019	0,1996	0	0	0	0	0
16	1	0,8000	0,0000	0,2000	0	0	0	0	0
17	1	0,8000	0,0000	0,2000	0	0	0	0	0
Analysis Post_Ads	1	0,8000	0,0000	0,2000	0	0	0	0	0
18	1	0,8000	0,0000	0,2000	0	0	0	0	0
19	1	0,8000	0,0000	0,2000	0	0	0	0	0
X-100_Water	0	0,0000	1,0000	0,0000	0	0	0	0	0
20	1	0,7899	0,0126	0,1975	0	0	0	0	0
21	1	0,7899	0,0126	0,1975	0	0	0	0	0
22	1	0,7919	0,0101	0,1980	0	0	0	0	0
23	1	0,7919	0,0101	0,1980	0	0	0	0	0
24	1	0,7919	0,0101	0,1980	0	0	0	0	0
25	0,9913	0,7919	0,0101	0,1980	0	0	0	0	0
V-103_Res	0	0,0000	1,0000	0,0000	0	0	0	0	0
RegP_Ch#3	1	0,7989	0,0014	0,1997	0	0	0	0	0

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tabela B-5 - Nitrogênio 100% - Condições das correntes.

Stream	Temperature (°C)	Dew Point Temp. (°C)	Delta Temp. (°C)	Pressure (bar)	Dew Point Press. (bar)	Delta Press. (bar)	Molar Flow (kgmole/h)	Mass Flow (kg/h)	Act. Volume Flow (m3/h)	Heat Flow (kcal/h)
Gas	30,00	4,195	25,80	30	115,55	-85,55	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
CO2	30,00	0,409	29,59	35	72,11	-37,11	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
N2	30,00	-149,621	179,62	30	-	-	3,00E-03	8,40E-02	2,50E-03	-4,62E-02
1	25,07	24,770	0,30	30	30,67	-0,67	2,28E-01	6,38E+00	1,86E-01	-2,92E+01
2	25,07	24,770	0,30	30	30,67	-0,67	2,28E-01	6,38E+00	1,86E-01	-2,92E+01
3	153,30	36,532	116,77	80	407,79	-327,79	2,28E-01	6,38E+00	1,03E-01	1,76E+02
AdsP_Ch#2	39,66	-	-	85	-	-	1,27E+00	3,56E+01	3,87E-01	-2,17E+01
4	55,87	3,068	52,80	80	292,62	-212,62	1,50E+00	4,20E+01	5,14E-01	1,54E+02
5	70,76	3,581	67,17	90	310,51	-220,51	1,50E+00	4,20E+01	4,81E-01	3,11E+02
6	40,00	3,581	36,42	90	273,33	-183,33	1,50E+00	4,20E+01	4,32E-01	-4,78E+01
7_Ch#1	40,00	3,581	36,42	90	273,33	-183,33	1,50E+00	4,20E+01	4,32E-01	-4,78E+01
V-100_Res	40,00	14,375	25,62	90	273,33	-183,33	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
ByPass	40,00	3,581	36,42	90	273,33	-183,33	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
8	40,00	3,581	36,42	90	273,33	-183,33	1,50E+00	4,20E+01	4,32E-01	-4,78E+01
Water_In	30,00	303,330	-273,33	90	0,04	89,96	3,00E-03	5,40E-02	5,40E-05	-2,04E+02
9	38,56	48,454	-9,89	90	41,42	48,58	1,50E+00	4,20E+01	4,30E-01	-2,52E+02
V-101_Res	38,56	303,330	-264,77	90	0,07	89,93	1,23E-03	2,21E-02	2,22E-05	-8,36E+01
10	38,56	38,560	0,00	90	90,00	0,00	1,50E+00	4,20E+01	4,30E-01	-1,69E+02
11	38,56	38,560	0,00	90	90,00	0,00	1,50E+00	4,20E+01	4,30E-01	-1,69E+02
12	38,56	38,560	0,00	90	90,00	0,00	1,50E+00	4,20E+01	4,30E-01	-1,69E+02
V-102_Res	38,56	51,823	-13,26	90	33,81	56,19	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
13	38,56	38,560	0,00	90	90,00	0,00	1,50E+00	4,20E+01	4,30E-01	-1,69E+02
Analysis Pre_Ads	38,56	38,560	0,00	90	90,00	0,00	1,50E-03	4,20E-02	4,30E-04	-1,69E-01
14	38,56	38,560	0,00	90	90,00	0,00	1,50E+00	4,20E+01	4,30E-01	-1,68E+02
X-101_Water	275,36	303,330	-27,97	90	59,79	30,21	5,17E-04	9,31E-03	1,22E-05	-3,29E+01
15	38,74	43,215	-4,47	90	60,34	29,66	1,50E+00	4,20E+01	4,30E-01	-2,01E+02
15_Rec	38,74	43,215	-4,47	90	60,34	29,66	1,50E+00	4,20E+01	4,30E-01	-2,01E+02
16	40,39	-	-	90	-	-	1,50E+00	4,19E+01	4,32E-01	-2,55E+01

17	39,66	-	-	85	-	-	1,50E+00	4,19E+01	4,56E-01	-2,55E+01
Analysis Post_Ads	39,66	-	-	85	-	-	1,50E-03	4,19E-02	4,56E-04	-2,55E-02
18	39,66	-	-	85	-	-	2,25E-01	6,29E+00	6,84E-02	-3,83E+00
19	280,00	-	-	85	-	-	2,25E-01	6,29E+00	1,25E-01	4,00E+02
X-100_Water	40,39	303,330	-262,94	90	0,08	89,92	2,58E-03	4,66E-02	4,68E-05	-1,76E+02
20	261,55	88,577	172,97	85	531,85	-446,85	2,27E-01	6,34E+00	1,22E-01	2,24E+02
21	273,03	89,619	183,41	90	544,95	-454,95	2,27E-01	6,34E+00	1,18E-01	2,43E+02
22	275,36	83,438	191,92	90	547,98	-457,98	2,27E-01	6,33E+00	1,19E-01	2,76E+02
23	275,20	81,408	193,80	80	547,80	-467,80	2,27E-01	6,33E+00	1,33E-01	2,76E+02
24	175,26	63,243	112,02	30	432,18	-402,18	2,27E-01	6,33E+00	2,84E-01	1,15E+02
25	25,00	63,243	-38,24	30	3,57	26,43	2,27E-01	6,33E+00	1,84E-01	-1,50E+02
V-103_Res	25,00	233,866	-208,87	30	0,03	29,97	1,77E-03	3,18E-02	3,19E-05	-1,21E+02
RegP_Ch#3	25,00	25,000	0,00	30	30,00	0,00	2,25E-01	6,30E+00	1,84E-01	-2,92E+01

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tabela B-6 - Nitrogênio 100% - Frações de vapor e Composições

Stream	Vapor Fraction	zi N2	zi H2O	zi CO2	zi Methane	zi Ethane	zi Propane	zi i-Butane	zi n-Butane
Gas	1	0,0000	0,0000	0	0,7598	0,1191	0,0801	0,012	0,029
CO2	1	0,0000	0,0000	1	0	0	0	0	0
N2	1	1,0000	0,0000	0	0	0	0	0	0
1	1	0,9987	0,0013	0	0	0	0	0	0
2	1	0,9987	0,0013	0	0	0	0	0	0
3	1	0,9987	0,0013	0	0	0	0	0	0
AdsP_Ch#2	1	1,0000	0,0000	0	0	0	0	0	0
4	1	0,9998	0,0002	0	0	0	0	0	0
5	1	0,9998	0,0002	0	0	0	0	0	0
6	1	0,9998	0,0002	0	0	0	0	0	0
7_Ch#1	1	0,9998	0,0002	0	0	0	0	0	0
V-100_Res	0	0,9996	0,0004	0	0	0	0	0	0
ByPass	1	0,9998	0,0002	0	0	0	0	0	0

8	1	0,9998	0,0002	0	0	0	0	0	0
Water_In	0	0,0000	1,0000	0	0	0	0	0	0
9	0,9992	0,9978	0,0022	0	0	0	0	0	0
V-101_Res	0	0,0000	1,0000	0	0	0	0	0	0
10	1	0,9986	0,0014	0	0	0	0	0	0
11	1	0,9986	0,0014	0	0	0	0	0	0
12	1	0,9986	0,0014	0	0	0	0	0	0
V-102_Res	0	0,9974	0,0026	0	0	0	0	0	0
13	1	0,9986	0,0014	0	0	0	0	0	0
Analysis Pre_Ads	1	0,9986	0,0014	0	0	0	0	0	0
14	1	0,9986	0,0014	0	0	0	0	0	0
X-101_Water	0	0,0000	1,0000	0	0	0	0	0	0
15	0,9997	0,9983	0,0017	0	0	0	0	0	0
15_Rec	0,9997	0,9983	0,0017	0	0	0	0	0	0
16	1	1,0000	0,0000	0	0	0	0	0	0
17	1	1,0000	0,0000	0	0	0	0	0	0
Analysis Post_Ads	1	1,0000	0,0000	0	0	0	0	0	0
18	1	1,0000	0,0000	0	0	0	0	0	0
19	1	1,0000	0,0000	0	0	0	0	0	0
X-100_Water	0	0,0000	1,0000	0	0	0	0	0	0
20	1	0,9886	0,0114	0	0	0	0	0	0
21	1	0,9886	0,0114	0	0	0	0	0	0
22	1	0,9909	0,0091	0	0	0	0	0	0
23	1	0,9909	0,0091	0	0	0	0	0	0
24	1	0,9909	0,0091	0	0	0	0	0	0
25	0,9922	0,9909	0,0091	0	0	0	0	0	0
V-103_Res	0	0,0000	1,0000	0	0	0	0	0	0
RegP_Ch#3	1	0,9987	0,0013	0	0	0	0	0	0

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tabela B-7 - Metano 20% - Condições das correntes.

Stream	Temperature (°C)	Dew Point Temp. (°C)	Delta Temp. (°C)	Pressure (bar)	Dew Point Press. (bar)	Delta Press. (bar)	Molar Flow (kgmole/h)	Mass Flow (kg/h)	Act. Volume Flow (m3/h)	Heat Flow (kcal/h)
Gas	30,00	-96,178	126,18	30	-	-	6,00E-04	9,626E-03	4,741E-04	-1,074E+01
CO2	30,00	0,409	29,59	35	72,11	-37,11	2,40E-03	1,056E-01	1,377E-03	-2,266E+02
N2	30,00	-149,621	179,62	30	-	-	0,00E+00	7,806E-16	0,000E+00	0,000E+00
1	24,99	24,953	0,04	30	30,11	-0,11	2,25E-01	8,636E+00	1,590E-01	-1,777E+04
2	24,98	24,763	0,21	30	30,63	-0,63	2,28E-01	8,741E+00	1,606E-01	-1,800E+04
3	120,77	25,817	94,95	80	220,24	-140,24	2,28E-01	8,741E+00	8,111E-02	-1,783E+04
AdsP_Ch#2	36,76	18,739	18,02	85	109,40	-24,40	1,27E+00	4,879E+01	2,329E-01	-1,011E+05
4	43,14	14,965	28,17	80	118,56	-38,56	1,50E+00	5,753E+01	3,280E-01	-1,189E+05
5	53,62	22,270	31,35	90	132,66	-42,66	1,50E+00	5,753E+01	3,064E-01	-1,188E+05
6	40,00	22,270	17,73	90	114,25	-24,25	1,50E+00	5,753E+01	2,608E-01	-1,192E+05
7_Ch#1	40,00	22,270	17,73	90	114,25	-24,25	1,50E+00	5,753E+01	2,608E-01	-1,192E+05
V-100_Res	40,00	23,957	16,04	90	126,73	-36,73	0,00E+00	0,000E+00	0,000E+00	0,000E+00
ByPass	40,00	22,270	17,73	90	114,25	-24,25	0,00E+00	0,000E+00	0,000E+00	0,000E+00
8	40,00	22,270	17,73	90	114,25	-24,25	1,50E+00	5,753E+01	2,608E-01	-1,192E+05
Water_In	30,00	303,330	-273,33	90	0,04	89,96	3,00E-03	5,396E-02	5,398E-05	-2,043E+02
9	39,38	33,457	5,93	90	-	-	1,50E+00	5,758E+01	2,579E-01	-1,194E+05
V-101_Res	39,38	38,807	0,58	90	43,47	46,53	0,00E+00	0,000E+00	0,000E+00	0,000E+00
10	39,38	33,457	5,93	90	-	-	1,50E+00	5,758E+01	2,579E-01	-1,194E+05
11	39,38	33,457	5,93	90	-	-	1,50E+00	5,758E+01	2,579E-01	-1,194E+05
12	39,38	33,457	5,93	90	-	-	1,50E+00	5,758E+01	2,579E-01	-1,194E+05
V-102_Res	39,38	38,807	0,58	90	43,47	46,53	0,00E+00	0,000E+00	0,000E+00	0,000E+00
13	39,38	33,457	5,93	90	-	-	1,50E+00	5,758E+01	2,579E-01	-1,194E+05
Analysis Pre_Ads	39,38	33,457	5,93	90	-	-	1,50E-03	5,758E-02	2,579E-04	-1,194E+02
14	39,38	33,457	5,93	90	-	-	1,50E+00	5,752E+01	2,577E-01	-1,193E+05
X-101_Water	272,02	303,330	-31,31	90	56,78	33,22	8,35E-04	1,504E-02	1,955E-05	-5,311E+01
15	39,35	40,162	-0,81	90	40,64	49,36	1,50E+00	5,754E+01	2,574E-01	-1,194E+05
15_Rec	39,35	40,162	-0,81	90	40,64	49,36	1,50E+00	5,754E+01	2,574E-01	-1,194E+05
16	40,17	22,387	17,78	90	114,30	-24,30	1,50E+00	5,746E+01	2,613E-01	-1,191E+05

17	36,76	18,739	18,02	85	109,40	-24,40	1,50E+00	5,746E+01	2,744E-01	-1,191E+05
Analysis Post_Ads	36,76	18,739	18,02	85	109,40	-24,40	1,50E-03	5,746E-02	2,744E-04	-1,191E+02
18	36,76	18,739	18,02	85	109,40	-24,40	2,24E-01	8,620E+00	4,116E-02	-1,786E+04
19	280,00	18,739	261,26	85	-	-	2,24E-01	8,620E+00	1,189E-01	-1,715E+04
X-100_Water	40,17	303,330	-263,16	90	0,07	89,93	4,17E-03	7,519E-02	7,548E-05	-2,838E+02
20	262,19	94,493	167,70	85	393,30	-308,30	2,29E-01	8,695E+00	1,161E-01	-1,744E+04
21	269,80	95,031	174,77	90	402,44	-312,44	2,29E-01	8,695E+00	1,115E-01	-1,742E+04
22	272,02	88,049	183,97	90	405,45	-315,45	2,28E-01	8,680E+00	1,117E-01	-1,736E+04
23	269,97	87,095	182,87	80	403,00	-323,00	2,28E-01	8,680E+00	1,253E-01	-1,736E+04
24	195,71	72,289	123,42	30	312,51	-282,51	2,28E-01	8,680E+00	2,883E-01	-1,752E+04
25	25,00	72,289	-47,29	30	2,21	27,79	2,28E-01	8,680E+00	1,585E-01	-1,797E+04
V-103_Res	25,00	233,866	-208,87	30	0,03	29,97	2,99E-03	5,390E-02	5,398E-05	-2,044E+02
RegP_Ch#3	25,00	25,000	0,00	30	30,00	0,00	2,25E-01	8,626E+00	1,585E-01	-1,776E+04

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tabela B-8 - Metano 20% - Frações de vapor e Composições

Stream	Vapor Fraction	zi N2	zi H2O	zi CO2	zi Methane	zi Ethane	zi Propane	zi i-Butane	zi n-Butane
Gas	1	0	0,0000	0,0000	1,0000	0	0	0	0
CO2	1	0	0,0000	1,0000	0,0000	0	0	0	0
N2	1	1	0,0000	0,0000	0,0000	0	0	0	0
1	1	0	0,0015	0,7966	0,2018	0	0	0	0
2	1	0	0,0015	0,7988	0,1997	0	0	0	0
3	1	0	0,0015	0,7988	0,1997	0	0	0	0
AdsP_Ch#2	1	0	0,0000	0,8000	0,2000	0	0	0	0
4	1	0	0,0002	0,7998	0,2000	0	0	0	0
5	1	0	0,0002	0,7998	0,2000	0	0	0	0
6	1	0	0,0002	0,7998	0,2000	0	0	0	0
7_Ch#1	1	0	0,0002	0,7998	0,2000	0	0	0	0
V-100_Res	0	0	0,0003	0,8168	0,1830	0	0	0	0
ByPass	1	0	0,0002	0,7998	0,2000	0	0	0	0

8	1	0	0,0002	0,7998	0,2000	0	0	0	0
Water_In	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0	0	0	0
9	1	0	0,0022	0,7982	0,1996	0	0	0	0
V-101_Res	0	0	0,0027	0,8176	0,1797	0	0	0	0
10	1	0	0,0022	0,7982	0,1996	0	0	0	0
11	1	0	0,0022	0,7982	0,1996	0	0	0	0
12	1	0	0,0022	0,7982	0,1996	0	0	0	0
V-102_Res	0	0	0,0027	0,8176	0,1797	0	0	0	0
13	1	0	0,0022	0,7982	0,1996	0	0	0	0
Analysis Pre_Ads	1	0	0,0022	0,7982	0,1996	0	0	0	0
14	1	0	0,0022	0,7982	0,1996	0	0	0	0
X-101_Water	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0	0	0	0
15	0,9999	0	0,0028	0,7978	0,1994	0	0	0	0
15_Rec	0,9999	0	0,0028	0,7978	0,1994	0	0	0	0
16	1	0	0,0000	0,8000	0,2000	0	0	0	0
17	1	0	0,0000	0,8000	0,2000	0	0	0	0
Analysis Post_Ads	1	0	0,0000	0,8000	0,2000	0	0	0	0
18	1	0	0,0000	0,8000	0,2000	0	0	0	0
19	1	0	0,0000	0,8000	0,2000	0	0	0	0
X-100_Water	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0	0	0	0
20	1	0	0,0183	0,7854	0,1963	0	0	0	0
21	1	0	0,0183	0,7854	0,1963	0	0	0	0
22	1	0	0,0147	0,7883	0,1971	0	0	0	0
23	1	0	0,0147	0,7883	0,1971	0	0	0	0
24	1	0	0,0147	0,7883	0,1971	0	0	0	0
25	0,9869	0	0,0147	0,7883	0,1971	0	0	0	0
V-103_Res	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0	0	0	0
RegP_Ch#3	1	0	0,0015	0,7988	0,1997	0	0	0	0

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tabela B-9 - Metano 80% - Condições das correntes.

Stream	Temperature (°C)	Dew Point Temp. (°C)	Delta Temp. (°C)	Pressure (bar)	Dew Point Press. (bar)	Delta Press. (bar)	Molar Flow (kgmole/h)	Mass Flow (kg/h)	Act. Volume Flow (m3/h)	Heat Flow (kcal/h)
Gas	30,00	-96,178	126,18	30	-	-	2,40E-03	3,85E-02	1,90E-03	-4,29E+01
CO2	30,00	0,409	29,59	35	72,11	-37,11	6,00E-04	2,64E-02	3,44E-04	-5,66E+01
N2	30,00	-149,621	179,62	30	-	-	0,00E+00	7,81E-16	0,00E+00	0,00E+00
1	25,05	24,814	0,23	30	30,64	-0,64	2,27E-01	4,90E+00	1,73E-01	-7,52E+03
2	25,02	24,765	0,26	30	30,71	-0,71	2,28E-01	4,93E+00	1,74E-01	-7,57E+03
3	122,36	31,713	90,64	80	270,65	-190,65	2,28E-01	4,93E+00	8,82E-02	-7,39E+03
AdsP_Ch#2	38,36	-35,624	73,99	85	173,47	-88,47	1,27E+00	2,75E+01	3,23E-01	-4,24E+04
4	49,04	-3,228	52,27	80	186,53	-106,53	1,50E+00	3,24E+01	4,32E-01	-4,98E+04
5	60,54	-4,692	65,23	90	199,93	-109,93	1,50E+00	3,24E+01	4,01E-01	-4,96E+04
6	40,00	-4,692	44,69	90	175,88	-85,88	1,50E+00	3,24E+01	3,60E-01	-5,00E+04
7_Ch#1	40,00	-4,692	44,69	90	175,88	-85,88	1,50E+00	3,24E+01	3,60E-01	-5,00E+04
V-100_Res	40,00	0,001	40,00	90	182,43	-92,43	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
ByPass	40,00	-4,692	44,69	90	175,88	-85,88	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
8	40,00	-4,692	44,69	90	175,88	-85,88	1,50E+00	3,24E+01	3,60E-01	-5,00E+04
Water_In	30,00	303,330	-273,33	90	0,04	89,96	3,00E-03	5,40E-02	5,40E-05	-2,04E+02
9	38,67	40,552	-1,89	90	57,15	32,85	1,50E+00	3,25E+01	3,58E-01	-5,02E+04
V-101_Res	38,67	303,330	-264,66	90	0,07	89,93	2,66E-04	4,79E-03	4,81E-06	-1,81E+01
10	38,67	38,665	0,00	90	86,16	3,84	1,50E+00	3,25E+01	3,58E-01	-5,02E+04
11	38,67	38,665	0,00	90	86,16	3,84	1,50E+00	3,25E+01	3,58E-01	-5,02E+04
12	38,67	38,665	0,00	90	86,16	3,84	1,50E+00	3,25E+01	3,58E-01	-5,02E+04
V-102_Res	38,67	50,319	-11,65	90	26,94	63,06	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
13	38,67	38,665	0,00	90	86,16	3,84	1,50E+00	3,25E+01	3,58E-01	-5,02E+04
Analysis Pre_Ads	38,67	38,665	0,00	90	86,16	3,84	1,50E-03	3,25E-02	3,58E-04	-5,02E+01
14	38,67	38,665	0,00	90	86,16	3,84	1,50E+00	3,24E+01	3,57E-01	-5,01E+04
X-101_Water	273,01	303,330	-30,32	90	57,66	32,34	7,66E-04	1,38E-02	1,80E-05	-4,88E+01
15	38,85	43,777	-4,93	90	42,71	47,29	1,50E+00	3,24E+01	3,58E-01	-5,02E+04
15_Rec	38,85	43,777	-4,93	90	42,72	47,28	1,50E+00	3,24E+01	3,58E-01	-5,02E+04
16	40,34	-31,550	71,89	90	175,79	-85,79	1,50E+00	3,24E+01	3,61E-01	-4,99E+04

17	38,36	-35,624	73,99	85	173,47	-88,47	1,50E+00	3,24E+01	3,81E-01	-4,99E+04
Analysis Post_Ads	38,36	-35,624	73,99	85	173,47	-88,47	1,50E-03	3,24E-02	3,81E-04	-4,99E+01
18	38,36	-35,624	73,99	85	173,47	-88,47	2,24E-01	4,86E+00	5,71E-02	-7,48E+03
19	280,00	-35,624	315,62	85	-	-	2,24E-01	4,86E+00	1,21E-01	-6,87E+03
X-100_Water	40,34	303,330	-262,99	90	0,08	89,92	3,83E-03	6,90E-02	6,93E-05	-2,61E+02
20	263,70	93,531	170,17	85	426,24	-341,24	2,28E-01	4,92E+00	1,19E-01	-7,13E+03
21	271,00	94,246	176,76	90	434,14	-344,14	2,28E-01	4,92E+00	1,14E-01	-7,11E+03
22	273,01	87,552	185,46	90	436,60	-346,60	2,27E-01	4,91E+00	1,14E-01	-7,06E+03
23	271,88	86,200	185,68	80	435,37	-355,37	2,27E-01	4,91E+00	1,28E-01	-7,06E+03
24	201,98	70,461	131,52	30	358,06	-328,06	2,27E-01	4,91E+00	2,96E-01	-7,23E+03
25	25,00	70,461	-45,46	30	2,41	27,59	2,27E-01	4,91E+00	1,71E-01	-7,66E+03
V-103_Res	25,00	233,866	-208,87	30	0,03	29,97	2,73E-03	4,91E-02	4,92E-05	-1,86E+02
RegP_Ch#3	25,00	25,000	0,00	30	30,00	0,00	2,25E-01	4,86E+00	1,71E-01	-7,47E+03

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tabela B-10 - Metano 80% - Frações de vapor e Composições

Stream	Vapor Fraction	zi N2	zi H2O	zi CO2	zi Methane	zi Ethane	zi Propane	zi i-Butane	zi n-Butane
Gas	1	0	0,0000	0,0000	1,0000	0	0	0	0
CO2	1	0	0,0000	1,0000	0,0000	0	0	0	0
N2	1	1	0,0000	0,0000	0,0000	0	0	0	0
1	1	0	0,0015	0,1976	0,8009	0	0	0	0
2	1	0	0,0015	0,1997	0,7988	0	0	0	0
3	1	0	0,0015	0,1997	0,7988	0	0	0	0
AdsP_Ch#2	1	0	0,0000	0,2000	0,8000	0	0	0	0
4	1	0	0,0002	0,1999	0,7998	0	0	0	0
5	1	0	0,0002	0,1999	0,7998	0	0	0	0
6	1	0	0,0002	0,1999	0,7998	0	0	0	0
7_Ch#1	1	0	0,0002	0,1999	0,7998	0	0	0	0
V-100_Res	0	0	0,0003	0,2169	0,7828	0	0	0	0
ByPass	1	0	0,0002	0,1999	0,7998	0	0	0	0

8	1	0	0,0002	0,1999	0,7998	0	0	0	0
Water_In	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0	0	0	0
9	0,9998	0	0,0022	0,1996	0,7982	0	0	0	0
V-101_Res	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0	0	0	0
10	1	0	0,0020	0,1996	0,7984	0	0	0	0
11	1	0	0,0020	0,1996	0,7984	0	0	0	0
12	1	0	0,0020	0,1996	0,7984	0	0	0	0
V-102_Res	0	0	0,0034	0,2239	0,7728	0	0	0	0
13	1	0	0,0020	0,1996	0,7984	0	0	0	0
Analysis Pre_Ads	1	0	0,0020	0,1996	0,7984	0	0	0	0
14	1	0	0,0020	0,1996	0,7984	0	0	0	0
X-101_Water	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0	0	0	0
15	0,9995	0	0,0026	0,1995	0,7980	0	0	0	0
15_Rec	0,9995	0	0,0026	0,1995	0,7980	0	0	0	0
16	1	0	0,0000	0,2000	0,8000	0	0	0	0
17	1	0	0,0000	0,2000	0,8000	0	0	0	0
Analysis Post_Ads	1	0	0,0000	0,2000	0,8000	0	0	0	0
18	1	0	0,0000	0,2000	0,8000	0	0	0	0
19	1	0	0,0000	0,2000	0,8000	0	0	0	0
X-100_Water	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0	0	0	0
20	1	0	0,0168	0,1966	0,7866	0	0	0	0
21	1	0	0,0168	0,1966	0,7866	0	0	0	0
22	1	0	0,0135	0,1973	0,7892	0	0	0	0
23	1	0	0,0135	0,1973	0,7892	0	0	0	0
24	1	0	0,0135	0,1973	0,7892	0	0	0	0
25	0,9880	0	0,0135	0,1973	0,7892	0	0	0	0
V-103_Res	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0	0	0	0
RegP_Ch#3	1	0	0,0015	0,1997	0,7988	0	0	0	0

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tabela B-11 - Metano 100% - Condições das correntes.

Stream	Temperature (°C)	Dew Point Temp. (°C)	Delta Temp. (°C)	Pressure (bar)	Dew Point Press. (bar)	Delta Press. (bar)	Molar Flow (kgmole/h)	Mass Flow (kg/h)	Act. Volume Flow (m3/h)	Heat Flow (kcal/h)
Gas	30,00	-96,178	126,18	30	-	-	3,00E-03	4,81E-02	2,37E-03	-5,37E+01
CO2	30,00	0,409	29,59	35	72,11	-37,11	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
N2	30,00	-149,621	179,62	30	-	-	0,00E+00	7,81E-16	0,00E+00	0,00E+00
1	25,07	24,766	0,30	30	30,80	-0,80	2,28E-01	3,66E+00	1,76E-01	-4,10E+03
2	25,07	24,766	0,30	30	30,80	-0,80	2,28E-01	3,66E+00	1,76E-01	-4,10E+03
3	123,06	32,499	90,56	80	281,80	-201,80	2,28E-01	3,66E+00	8,97E-02	-3,91E+03
AdsP_Ch#2	38,68	-	-	85	-	-	1,27E+00	2,04E+01	3,37E-01	-2,29E+04
4	49,94	-1,541	51,49	80	-	-	1,50E+00	2,40E+01	4,49E-01	-2,68E+04
5	61,61	-2,272	63,88	90	-	-	1,50E+00	2,40E+01	4,17E-01	-2,67E+04
6	40,00	-2,272	42,27	90	189,30	-99,30	1,50E+00	2,40E+01	3,76E-01	-2,70E+04
7_Ch#1	40,00	-2,272	42,27	90	189,30	-99,30	1,50E+00	2,40E+01	3,76E-01	-2,70E+04
V-100_Res	40,00	4,149	35,85	90	189,19	-99,19	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
ByPass	40,00	-2,272	42,27	90	189,30	-99,30	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
8	40,00	-2,272	42,27	90	189,30	-99,30	1,50E+00	2,40E+01	3,76E-01	-2,70E+04
Water_In	30,00	303,330	-273,33	90	0,04	89,96	3,00E-03	5,40E-02	5,40E-05	-2,04E+02
9	38,61	41,685	-3,08	90	53,52	36,48	1,50E+00	2,41E+01	3,74E-01	-2,72E+04
V-101_Res	38,61	303,330	-264,72	90	0,07	89,93	4,30E-04	7,74E-03	7,77E-06	-2,92E+01
10	38,61	38,607	0,00	90	89,97	0,03	1,50E+00	2,41E+01	3,74E-01	-2,72E+04
11	38,61	38,607	0,00	90	89,97	0,03	1,50E+00	2,41E+01	3,74E-01	-2,72E+04
12	38,61	38,607	0,00	90	89,97	0,03	1,50E+00	2,41E+01	3,74E-01	-2,72E+04
V-102_Res	38,61	50,950	-12,34	90	27,30	62,70	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
13	38,61	38,607	0,00	90	89,97	0,03	1,50E+00	2,41E+01	3,74E-01	-2,72E+04
Analysis Pre_Ads	38,61	38,607	0,00	90	89,97	0,03	1,50E-03	2,41E-02	3,74E-04	-2,72E+01
14	38,61	38,607	0,00	90	89,97	0,03	1,50E+00	2,41E+01	3,73E-01	-2,72E+04
X-101_Water	273,77	303,330	-29,56	90	58,34	31,66	7,25E-04	1,31E-02	1,70E-05	-4,61E+01
15	38,79	43,610	-4,82	90	45,72	44,28	1,50E+00	2,41E+01	3,74E-01	-2,72E+04
15_Rec	38,79	43,610	-4,82	90	45,72	44,28	1,50E+00	2,41E+01	3,74E-01	-2,72E+04
16	40,34	-	-	90	-	-	1,50E+00	2,40E+01	3,76E-01	-2,70E+04

17	38,68	-	-	85	-	-	1,50E+00	2,40E+01	3,97E-01	-2,70E+04
Analysis Post_Ads	38,68	-	-	85	-	-	1,50E-03	2,40E-02	3,97E-04	-2,70E+01
18	38,68	-	-	85	-	-	2,24E-01	3,60E+00	5,96E-02	-4,05E+03
19	280,00	-	-	85	-	-	2,24E-01	3,60E+00	1,22E-01	-3,44E+03
X-100_Water	40,34	303,330	-262,99	90	0,08	89,92	3,62E-03	6,53E-02	6,55E-05	-2,46E+02
20	264,66	92,498	172,16	85	433,80	-348,80	2,28E-01	3,67E+00	1,20E-01	-3,69E+03
21	271,86	93,249	178,61	90	441,03	-351,03	2,28E-01	3,67E+00	1,15E-01	-3,67E+03
22	273,77	86,650	187,12	90	443,70	-353,70	2,27E-01	3,65E+00	1,15E-01	-3,62E+03
23	272,84	85,219	187,63	80	442,72	-362,72	2,27E-01	3,65E+00	1,29E-01	-3,62E+03
24	204,09	69,286	134,81	30	368,33	-338,33	2,27E-01	3,65E+00	2,98E-01	-3,79E+03
25	25,00	69,286	-44,29	30	2,55	27,45	2,27E-01	3,65E+00	1,74E-01	-4,22E+03
V-103_Res	25,00	233,866	-208,87	30	0,03	29,97	2,56E-03	4,62E-02	4,63E-05	-1,75E+02
RegP_Ch#3	25,00	25,000	0,00	30	30,00	0,00	2,25E-01	3,61E+00	1,74E-01	-4,05E+03

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tabela B-12 - Metano 100% - Frações de vapor e Composições

Stream	Vapor Fraction	zi N2	zi H2O	zi CO2	zi Methane	zi Ethane	zi Propane	zi i-Butane	zi n-Butane
Gas	1	0	0,0000	0	1,0000	0	0	0	0
CO2	1	0	0,0000	1	0,0000	0	0	0	0
N2	1	1	0,0000	0	0,0000	0	0	0	0
1	1	0	0,0015	0	0,9985	0	0	0	0
2	1	0	0,0015	0	0,9985	0	0	0	0
3	1	0	0,0015	0	0,9985	0	0	0	0
AdsP_Ch#2	1	0	0,0000	0	1,0000	0	0	0	0
4	1	0	0,0002	0	0,9998	0	0	0	0
5	1	0	0,0002	0	0,9998	0	0	0	0
6	1	0	0,0002	0	0,9998	0	0	0	0
7_Ch#1	1	0	0,0002	0	0,9998	0	0	0	0
V-100_Res	0	0	0,0003	0	0,9997	0	0	0	0
ByPass	1	0	0,0002	0	0,9998	0	0	0	0

8	1	0	0,0002	0	0,9998	0	0	0	0
Water_In	0	0	1,0000	0	0,0000	0	0	0	0
9	0,9997	0	0,0022	0	0,9978	0	0	0	0
V-101_Res	0	0	1,0000	0	0,0000	0	0	0	0
10	1	0	0,0019	0	0,9981	0	0	0	0
11	1	0	0,0019	0	0,9981	0	0	0	0
12	1	0	0,0019	0	0,9981	0	0	0	0
V-102_Res	0	0	0,0033	0	0,9967	0	0	0	0
13	1	0	0,0019	0	0,9981	0	0	0	0
Analysis Pre_Ads	1	0	0,0019	0	0,9981	0	0	0	0
14	1	0	0,0019	0	0,9981	0	0	0	0
X-101_Water	0	0	1,0000	0	0,0000	0	0	0	0
15	0,9995	0	0,0024	0	0,9976	0	0	0	0
15_Rec	0,9995	0	0,0024	0	0,9976	0	0	0	0
16	1	0	0,0000	0	1,0000	0	0	0	0
17	1	0	0,0000	0	1,0000	0	0	0	0
Analysis Post_Ads	1	0	0,0000	0	1,0000	0	0	0	0
18	1	0	0,0000	0	1,0000	0	0	0	0
19	1	0	0,0000	0	1,0000	0	0	0	0
X-100_Water	0	0	1,0000	0	0,0000	0	0	0	0
20	1	0	0,0159	0	0,9841	0	0	0	0
21	1	0	0,0159	0	0,9841	0	0	0	0
22	1	0	0,0127	0	0,9873	0	0	0	0
23	1	0	0,0127	0	0,9873	0	0	0	0
24	1	0	0,0127	0	0,9873	0	0	0	0
25	0,9887	0	0,0127	0	0,9873	0	0	0	0
V-103_Res	0	0	1,0000	0	0,0000	0	0	0	0
RegP_Ch#3	1	0	0,0015	0	0,9985	0	0	0	0

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tabela B-13 - Gás Natural 20% - Condições das correntes.

Stream	Temperature (°C)	Dew Point Temp. (°C)	Delta Temp. (°C)	Pressure (bar)	Dew Point Press. (bar)	Delta Press. (bar)	Molar Flow (kgmole/h)	Mass Flow (kg/h)	Act. Volume Flow (m3/h)	Heat Flow (kcal/h)
Gas	30,00	4,195	25,80	30	115,55	-85,55	6,00E-04	1,30E-02	4,46E-04	-1,16E+01
CO2	30,00	0,409	29,59	35	72,11	-37,11	2,40E-03	1,06E-01	1,38E-03	-2,27E+02
N2	30,00	-149,621	179,62	30	-	-	0,00E+00	7,81E-16	0,00E+00	0,00E+00
1	25,00	24,950	0,05	30	30,15	-0,15	2,25E-01	8,89E+00	1,56E-01	-1,78E+04
2	24,99	24,762	0,23	30	30,69	-0,69	2,28E-01	9,00E+00	1,58E-01	-1,81E+04
3	117,34	21,956	95,38	80	204,55	-124,55	2,28E-01	9,00E+00	7,87E-02	-1,79E+04
AdsP_Ch#2	36,70	25,690	11,01	85	99,45	-14,45	1,27E+00	5,02E+01	2,11E-01	-1,02E+05
4	41,67	21,762	19,90	80	117,18	-37,18	1,50E+00	5,92E+01	3,02E-01	-1,20E+05
5	51,54	29,399	22,14	90	119,00	-29,00	1,50E+00	5,92E+01	2,82E-01	-1,19E+05
6	40,00	29,399	10,60	90	114,02	-24,02	1,50E+00	5,92E+01	2,37E-01	-1,20E+05
7_Ch#1	40,00	29,399	10,60	90	114,02	-24,02	1,50E+00	5,92E+01	2,37E-01	-1,20E+05
V-100_Res	40,00	30,679	9,32	90	107,83	-17,83	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
ByPass	40,00	29,399	10,60	90	114,02	-24,02	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
8	40,00	29,399	10,60	90	114,02	-24,02	1,50E+00	5,92E+01	2,37E-01	-1,20E+05
Water_In	30,00	303,330	-273,33	90	0,04	89,96	3,00E-03	5,40E-02	5,40E-05	-2,04E+02
9	39,59	29,721	9,87	90	106,64	-16,64	1,50E+00	5,93E+01	2,35E-01	-1,20E+05
V-101_Res	39,59	31,055	8,53	90	-	-	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
10	39,59	29,721	9,87	90	106,64	-16,64	1,50E+00	5,93E+01	2,35E-01	-1,20E+05
11	39,59	29,721	9,87	90	106,64	-16,64	1,50E+00	5,93E+01	2,35E-01	-1,20E+05
12	39,59	29,721	9,87	90	106,64	-16,64	1,50E+00	5,93E+01	2,35E-01	-1,20E+05
V-102_Res	39,59	31,055	8,53	90	-	-	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
13	39,59	29,721	9,87	90	106,64	-16,64	1,50E+00	5,93E+01	2,35E-01	-1,20E+05
Analysis Pre_Ads	39,59	29,721	9,87	90	106,64	-16,64	1,50E-03	5,93E-02	2,35E-04	-1,20E+02
14	39,59	29,721	9,87	90	106,64	-16,64	1,50E+00	5,92E+01	2,34E-01	-1,20E+05
X-101_Water	272,52	303,330	-30,81	90	57,23	32,77	8,36E-04	1,51E-02	1,96E-05	-5,32E+01
15	39,57	35,862	3,70	90	43,62	46,38	1,50E+00	5,92E+01	2,34E-01	-1,20E+05
15_Rec	39,57	35,862	3,70	90	43,62	46,38	1,50E+00	5,92E+01	2,34E-01	-1,20E+05
16	40,12	29,573	10,55	90	103,88	-13,88	1,50E+00	5,92E+01	2,38E-01	-1,20E+05

17	36,70	25,690	11,01	85	99,45	-14,45	1,50E+00	5,92E+01	2,49E-01	-1,20E+05
Analysis Post_Ads	36,70	25,690	11,01	85	99,45	-14,45	1,50E-03	5,92E-02	2,49E-04	-1,20E+02
18	36,70	25,690	11,01	85	99,45	-14,45	2,24E-01	8,87E+00	3,74E-02	-1,80E+04
19	280,00	25,690	254,31	85	-	-	2,24E-01	8,87E+00	1,18E-01	-1,72E+04
X-100_Water	40,12	303,330	-263,21	90	0,07	89,93	4,18E-03	7,53E-02	7,56E-05	-2,84E+02
20	263,23	93,562	169,67	85	373,88	-288,88	2,29E-01	8,95E+00	1,16E-01	-1,75E+04
21	270,47	94,002	176,47	90	382,23	-292,23	2,29E-01	8,95E+00	1,11E-01	-1,75E+04
22	272,52	86,942	185,58	90	384,78	-294,78	2,28E-01	8,93E+00	1,11E-01	-1,74E+04
23	270,43	86,200	184,23	80	382,38	-302,38	2,28E-01	8,93E+00	1,25E-01	-1,74E+04
24	199,33	72,092	127,23	30	299,37	-269,37	2,28E-01	8,93E+00	2,90E-01	-1,76E+04
25	25,00	72,092	-47,09	30	1,80	28,20	2,28E-01	8,93E+00	1,56E-01	-1,80E+04
V-103_Res	25,00	233,866	-208,87	30	0,03	29,97	2,99E-03	5,39E-02	5,40E-05	-2,04E+02
RegP_Ch#3	25,00	25,000	0,00	30	30,00	0,00	2,25E-01	8,88E+00	1,56E-01	-1,78E+04

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tabela B-14 - Gás Natural 20% - Frações de vapor e Composições

Stream	Vapor Fraction	zi N2	zi H2O	zi CO2	zi Methane	zi Ethane	zi Propane	zi i-Butane	zi n-Butane
Gas	1	0	0,0000	0,0000	0,7598	0,1191	0,0801	0,0120	0,0290
CO2	1	0	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
N2	1	1	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
1	1	0	0,0016	0,7966	0,1533	0,0240	0,0162	0,0024	0,0059
2	1	0	0,0015	0,7988	0,1517	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
3	1	0	0,0015	0,7988	0,1517	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
AdsP_Ch#2	1	0	0,0000	0,8000	0,1520	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
4	1	0	0,0002	0,7998	0,1519	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
5	1	0	0,0002	0,7998	0,1519	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
6	1	0	0,0002	0,7998	0,1519	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
7_Ch#1	1	0	0,0002	0,7998	0,1519	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
V-100_Res	0	0	0,0003	0,8074	0,1415	0,0241	0,0173	0,0027	0,0067
ByPass	1	0	0,0002	0,7998	0,1519	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058

8	1	0	0,0002	0,7998	0,1519	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
Water_In	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
9	1	0	0,0022	0,7982	0,1516	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
V-101_Res	0	0	0,0026	0,8056	0,1411	0,0240	0,0173	0,0027	0,0067
10	1	0	0,0022	0,7982	0,1516	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
11	1	0	0,0022	0,7982	0,1516	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
12	1	0	0,0022	0,7982	0,1516	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
V-102_Res	0	0	0,0026	0,8056	0,1411	0,0240	0,0173	0,0027	0,0067
13	1	0	0,0022	0,7982	0,1516	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
Analysis Pre_Ads	1	0	0,0022	0,7982	0,1516	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
14	1	0	0,0022	0,7982	0,1516	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
X-101_Water	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
15	1	0	0,0028	0,7978	0,1515	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
15_Rec	1	0	0,0028	0,7978	0,1515	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
16	1	0	0,0000	0,8000	0,1520	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
17	1	0	0,0000	0,8000	0,1520	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
Analysis Post_Ads	1	0	0,0000	0,8000	0,1520	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
18	1	0	0,0000	0,8000	0,1520	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
19	1	0	0,0000	0,8000	0,1520	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058
X-100_Water	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
20	1	0	0,0183	0,7854	0,1492	0,0234	0,0157	0,0024	0,0057
21	1	0	0,0183	0,7854	0,1492	0,0234	0,0157	0,0024	0,0057
22	1	0	0,0147	0,7883	0,1497	0,0235	0,0158	0,0024	0,0057
23	1	0	0,0147	0,7883	0,1497	0,0235	0,0158	0,0024	0,0057
24	1	0	0,0147	0,7883	0,1497	0,0235	0,0158	0,0024	0,0057
25	0,9869	0	0,0147	0,7883	0,1497	0,0235	0,0158	0,0024	0,0057
V-103_Res	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
RegP_Ch#3	1	0	0,0016	0,7987	0,1517	0,0238	0,0160	0,0024	0,0058

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tabela B-15 - Gás Natural 80% - Condições das correntes.

Stream	Temperature (°C)	Dew Point Temp. (°C)	Delta Temp. (°C)	Pressure (bar)	Dew Point Press. (bar)	Delta Press. (bar)	Molar Flow (kgmole/h)	Mass Flow (kg/h)	Act. Volume Flow (m3/h)	Heat Flow (kcal/h)
Gas	30,00	4,195	25,80	30	115,55	-85,55	2,40E-03	5,20E-02	1,78E-03	-4,65E+01
CO2	30,00	0,409	29,59	35	72,11	-37,11	6,00E-04	2,64E-02	3,44E-04	-5,66E+01
N2	30,00	-149,621	179,62	30	-	-	0,00E+00	7,81E-16	0,00E+00	0,00E+00
1	25,05	24,808	0,24	30	30,76	-0,76	2,27E-01	5,93E+00	1,64E-01	-7,78E+03
2	25,04	24,762	0,27	30	30,86	-0,86	2,28E-01	5,95E+00	1,65E-01	-7,84E+03
3	109,01	27,326	81,68	80	195,70	-115,70	2,28E-01	5,95E+00	7,96E-02	-7,67E+03
AdsP_Ch#2	37,70	1,399	36,30	85	122,59	-37,59	1,27E+00	3,32E+01	2,76E-01	-4,41E+04
4	45,37	5,108	40,26	80	148,64	-68,64	1,50E+00	3,92E+01	3,73E-01	-5,17E+04
5	55,21	2,093	53,12	90	169,49	-79,49	1,50E+00	3,92E+01	3,45E-01	-5,16E+04
6	40,00	2,093	37,91	90	138,11	-48,11	1,50E+00	3,92E+01	3,07E-01	-5,20E+04
7_Ch#1	40,00	2,093	37,91	90	138,11	-48,11	1,50E+00	3,92E+01	3,07E-01	-5,20E+04
V-100_Res	40,00	28,801	11,20	90	97,01	-7,01	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
ByPass	40,00	2,093	37,91	90	138,11	-48,11	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
8	40,00	2,093	37,91	90	138,11	-48,11	1,50E+00	3,92E+01	3,07E-01	-5,20E+04
Water_In	30,00	303,330	-273,33	90	0,04	89,96	3,00E-03	5,40E-02	5,40E-05	-2,04E+02
9	39,07	34,222	4,85	90	124,33	-34,33	1,50E+00	3,92E+01	3,05E-01	-5,22E+04
V-101_Res	39,07	38,484	0,58	90	45,41	44,59	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
10	39,07	34,222	4,85	90	124,33	-34,33	1,50E+00	3,92E+01	3,05E-01	-5,22E+04
11	39,07	34,222	4,85	90	124,33	-34,33	1,50E+00	3,92E+01	3,05E-01	-5,22E+04
12	39,07	34,222	4,85	90	124,33	-34,33	1,50E+00	3,92E+01	3,05E-01	-5,22E+04
V-102_Res	39,07	38,480	0,59	90	45,44	44,56	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
13	39,07	34,222	4,85	90	124,33	-34,33	1,50E+00	3,92E+01	3,05E-01	-5,22E+04
Analysis Pre_Ads	39,07	34,222	4,85	90	124,33	-34,33	1,50E-03	3,92E-02	3,05E-04	-5,22E+01
14	39,07	34,222	4,85	90	124,33	-34,33	1,50E+00	3,92E+01	3,04E-01	-5,21E+04
X-101_Water	273,57	303,330	-29,76	90	58,16	31,84	8,38E-04	1,51E-02	1,97E-05	-5,33E+01
15	39,01	39,885	-0,88	90	43,23	46,77	1,50E+00	3,92E+01	3,04E-01	-5,22E+04
15_Rec	39,01	39,885	-0,88	90	43,23	46,77	1,50E+00	3,92E+01	3,04E-01	-5,22E+04
16	40,24	-	-	90	124,98	-34,98	1,50E+00	3,91E+01	3,08E-01	-5,19E+04

17	37,70	1,399	36,30	85	122,59	-37,59	1,50E+00	3,91E+01	3,25E-01	-5,19E+04
Analysis Post_Ads	37,70	1,399	36,30	85	122,59	-37,59	1,50E-03	3,91E-02	3,25E-04	-5,19E+01
18	37,70	1,399	36,30	85	122,59	-37,59	2,24E-01	5,87E+00	4,87E-02	-7,79E+03
19	280,00	1,399	278,60	85	-	-	2,24E-01	5,87E+00	1,20E-01	-7,01E+03
X-100_Water	40,24	303,330	-263,09	90	0,07	89,93	4,19E-03	7,55E-02	7,58E-05	-2,85E+02
20	265,79	92,756	173,04	85	356,37	-271,37	2,29E-01	5,94E+00	1,18E-01	-7,29E+03
21	271,85	93,218	178,63	90	353,70	-263,70	2,29E-01	5,94E+00	1,13E-01	-7,27E+03
22	273,57	86,267	187,30	90	355,43	-265,43	2,28E-01	5,93E+00	1,13E-01	-7,22E+03
23	272,15	85,452	186,70	80	356,48	-276,48	2,28E-01	5,93E+00	1,27E-01	-7,22E+03
24	212,64	71,678	140,96	30	296,63	-266,63	2,28E-01	5,93E+00	3,01E-01	-7,38E+03
25	25,00	71,678	-46,68	30	1,80	28,20	2,28E-01	5,93E+00	1,62E-01	-7,94E+03
V-103_Res	25,00	233,866	-208,87	30	0,03	29,97	2,99E-03	5,39E-02	5,40E-05	-2,04E+02
RegP_Ch#3	25,00	25,000	0,00	30	30,00	0,00	2,25E-01	5,87E+00	1,62E-01	-7,74E+03

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tabela B-16 - Gás Natural 80% - Frações de vapor e Composições

Stream	Vapor Fraction	zi N2	zi H2O	zi CO2	zi Methane	zi Ethane	zi Propane	zi i-Butane	zi n-Butane
Gas	1	0	0,0000	0,0000	0,7598	0,1191	0,0801	0,0120	0,0290
CO2	1	0	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
N2	1	1	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
1	1	0	0,0016	0,1976	0,6085	0,0954	0,0641	0,0096	0,0232
2	1	0	0,0016	0,1997	0,6069	0,0951	0,0640	0,0096	0,0232
3	1	0	0,0016	0,1997	0,6069	0,0951	0,0640	0,0096	0,0232
AdsP_Ch#2	1	0	0,0000	0,2000	0,6078	0,0953	0,0641	0,0096	0,0232
4	1	0	0,0002	0,2000	0,6077	0,0953	0,0641	0,0096	0,0232
5	1	0	0,0002	0,2000	0,6077	0,0953	0,0641	0,0096	0,0232
6	1	0	0,0002	0,2000	0,6077	0,0953	0,0641	0,0096	0,0232
7_Ch#1	1	0	0,0002	0,2000	0,6077	0,0953	0,0641	0,0096	0,0232
V-100_Res	0	0	0,0006	0,2055	0,4918	0,1179	0,1093	0,0209	0,0540
ByPass	1	0	0,0002	0,2000	0,6077	0,0953	0,0641	0,0096	0,0232

8	1	0	0,0002	0,2000	0,6077	0,0953	0,0641	0,0096	0,0232
Water_In	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
9	1	0	0,0022	0,1996	0,6065	0,0951	0,0639	0,0096	0,0231
V-101_Res	0	0	0,0028	0,2025	0,5776	0,1014	0,0744	0,0119	0,0293
10	1	0	0,0022	0,1996	0,6065	0,0951	0,0639	0,0096	0,0231
11	1	0	0,0022	0,1996	0,6065	0,0951	0,0639	0,0096	0,0231
12	1	0	0,0022	0,1996	0,6065	0,0951	0,0639	0,0096	0,0231
V-102_Res	0	0	0,0028	0,2025	0,5777	0,1014	0,0744	0,0119	0,0293
13	1	0	0,0022	0,1996	0,6065	0,0951	0,0639	0,0096	0,0231
Analysis Pre_Ads	1	0	0,0022	0,1996	0,6065	0,0951	0,0639	0,0096	0,0231
14	1	0	0,0022	0,1996	0,6065	0,0951	0,0639	0,0096	0,0231
X-101_Water	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
15	0,9999	0	0,0028	0,1994	0,6061	0,0950	0,0639	0,0096	0,0231
15_Rec	0,9999	0	0,0028	0,1994	0,6061	0,0950	0,0639	0,0096	0,0231
16	1	0	0,0000	0,2000	0,6078	0,0953	0,0641	0,0096	0,0232
17	1	0	0,0000	0,2000	0,6078	0,0953	0,0641	0,0096	0,0232
Analysis Post_Ads	1	0	0,0000	0,2000	0,6078	0,0953	0,0641	0,0096	0,0232
18	1	0	0,0000	0,2000	0,6078	0,0953	0,0641	0,0096	0,0232
19	1	0	0,0000	0,2000	0,6078	0,0953	0,0641	0,0096	0,0232
X-100_Water	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
20	1	0	0,0183	0,1963	0,5967	0,0935	0,0629	0,0094	0,0228
21	1	0	0,0183	0,1963	0,5967	0,0935	0,0629	0,0094	0,0228
22	1	0	0,0147	0,1971	0,5989	0,0939	0,0631	0,0095	0,0229
23	1	0	0,0147	0,1971	0,5989	0,0939	0,0631	0,0095	0,0229
24	1	0	0,0147	0,1971	0,5989	0,0939	0,0631	0,0095	0,0229
25	0,9869	0	0,0147	0,1971	0,5989	0,0939	0,0631	0,0095	0,0229
V-103_Res	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
RegP_Ch#3	1	0	0,0016	0,1997	0,6069	0,0951	0,0640	0,0096	0,0232

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tabela B-17 - Gás Natural 100% - Condições das correntes.

Stream	Temperature (°C)	Dew Point Temp. (°C)	Delta Temp. (°C)	Pressure (bar)	Dew Point Press. (bar)	Delta Press. (bar)	Molar Flow (kgmole/h)	Mass Flow (kg/h)	Act. Volume Flow (m3/h)	Heat Flow (kcal/h)
Gas	30,00	4,195	25,80	30	115,55	-85,55	3,00E-03	6,51E-02	2,23E-03	-5,81E+01
CO2	30,00	0,409	29,59	35	72,11	-37,11	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
N2	30,00	-149,621	179,62	30	-	-	0,00E+00	7,81E-16	0,00E+00	0,00E+00
1	25,07	24,762	0,30	30	0,00	30,00	2,28E-01	4,94E+00	1,65E-01	-4,44E+03
2	25,07	24,762	0,30	30	0,00	30,00	2,28E-01	4,94E+00	1,65E-01	-4,44E+03
3	106,64	27,622	79,02	80	201,72	-121,72	2,28E-01	4,94E+00	7,92E-02	-4,27E+03
AdsP_Ch#2	37,89	9,562	28,32	85	-	-	1,27E+00	2,75E+01	2,82E-01	-2,50E+04
4	45,57	11,789	33,78	80	8303,21	-8223,21	1,50E+00	3,25E+01	3,79E-01	-2,93E+04
5	55,21	6,693	48,52	90	174,90	-84,90	1,50E+00	3,25E+01	3,51E-01	-2,92E+04
6	40,00	6,693	33,31	90	125,77	-35,77	1,50E+00	3,25E+01	3,14E-01	-2,95E+04
7_Ch#1	40,00	6,693	33,31	90	125,77	-35,77	1,50E+00	3,25E+01	3,14E-01	-2,95E+04
V-100_Res	40,00	56,763	-16,76	90	25,53	64,47	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
ByPass	40,00	6,693	33,31	90	125,77	-35,77	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
8	40,00	6,693	33,31	90	125,77	-35,77	1,50E+00	3,25E+01	3,14E-01	-2,95E+04
Water_In	30,00	303,330	-273,33	90	0,04	89,96	3,00E-03	5,40E-02	5,40E-05	-2,04E+02
9	39,03	34,507	4,52	90	151,08	-61,08	1,50E+00	3,25E+01	3,12E-01	-2,97E+04
V-101_Res	39,03	38,327	0,70	90	46,80	43,20	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
10	39,03	34,507	4,52	90	151,08	-61,08	1,50E+00	3,25E+01	3,12E-01	-2,97E+04
11	39,03	34,507	4,52	90	151,08	-61,08	1,50E+00	3,25E+01	3,12E-01	-2,97E+04
12	39,03	34,507	4,52	90	151,08	-61,08	1,50E+00	3,25E+01	3,12E-01	-2,97E+04
V-102_Res	39,03	38,327	0,70	90	46,80	43,20	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00	0,00E+00
13	39,03	34,507	4,52	90	151,08	-61,08	1,50E+00	3,25E+01	3,12E-01	-2,97E+04
Analysis Pre_Ads	39,03	34,507	4,52	90	151,08	-61,08	1,50E-03	3,25E-02	3,12E-04	-2,97E+01
14	39,03	34,507	4,52	90	151,08	-61,08	1,50E+00	3,25E+01	3,11E-01	-2,97E+04
X-101_Water	273,91	303,330	-29,42	90	58,47	31,53	8,39E-04	1,51E-02	1,97E-05	-5,33E+01
15	38,98	40,073	-1,10	90	43,42	46,58	1,50E+00	3,25E+01	3,11E-01	-2,97E+04
15_Rec	38,98	40,073	-1,10	90	43,42	46,58	1,50E+00	3,25E+01	3,11E-01	-2,97E+04
16	40,25	6,407	33,84	90	125,47	-35,47	1,50E+00	3,24E+01	3,15E-01	-2,95E+04

17	37,89	9,562	28,32	85	-	-	1,50E+00	3,24E+01	3,32E-01	-2,95E+04
Analysis Post_Ads	37,89	9,562	28,32	85	-	-	1,50E-03	3,24E-02	3,32E-04	-2,95E+01
18	37,89	9,562	28,32	85	-	-	2,24E-01	4,87E+00	4,98E-02	-4,42E+03
19	280,00	9,562	270,44	85	-	-	2,24E-01	4,87E+00	1,20E-01	-3,61E+03
X-100_Water	40,25	303,330	-263,08	90	0,07	89,93	4,19E-03	7,55E-02	7,58E-05	-2,85E+02
20	266,52	92,623	173,90	85	337,01	-252,01	2,29E-01	4,94E+00	1,18E-01	-3,90E+03
21	272,26	93,088	179,17	90	342,10	-252,10	2,29E-01	4,94E+00	1,13E-01	-3,88E+03
22	273,91	86,153	187,76	90	343,73	-253,73	2,28E-01	4,93E+00	1,13E-01	-3,83E+03
23	272,60	85,331	187,27	80	342,67	-262,67	2,28E-01	4,93E+00	1,27E-01	-3,83E+03
24	216,07	71,615	144,46	30	290,83	-260,83	2,28E-01	4,93E+00	3,03E-01	-3,99E+03
25	25,00	71,615	-46,62	30	1,80	28,20	2,28E-01	4,93E+00	1,63E-01	-4,58E+03
V-103_Res	25,00	233,866	-208,87	30	0,03	29,97	2,99E-03	5,39E-02	5,40E-05	-2,04E+02
RegP_Ch#3	25,00	25,000	0,00	30	0,00	30,00	2,25E-01	4,87E+00	1,63E-01	-4,38E+03

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).

Tabela B-18 - Gás Natural 100% - Frações de vapor e Composições

Stream	Vapor Fraction	zi N2	zi H2O	zi CO2	zi Methane	zi Ethane	zi Propane	zi i-Butane	zi n-Butane
Gas	1	0	0,0000	0,0000	0,7598	0,1191	0,0801	0,0120	0,0290
CO2	1	0	0,0000	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
N2	1	1	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
1	1	0	0,0016	0,0000	0,7586	0,1189	0,0800	0,0120	0,0290
2	1	0	0,0016	0,0000	0,7586	0,1189	0,0800	0,0120	0,0290
3	1	0	0,0016	0,0000	0,7586	0,1189	0,0800	0,0120	0,0290
AdsP_Ch#2	1	0	0,0000	0,0000	0,7598	0,1191	0,0801	0,0120	0,0290
4	1	0	0,0002	0,0000	0,7596	0,1191	0,0801	0,0120	0,0290
5	1	0	0,0002	0,0000	0,7596	0,1191	0,0801	0,0120	0,0290
6	1	0	0,0002	0,0000	0,7596	0,1191	0,0801	0,0120	0,0290
7_Ch#1	1	0	0,0002	0,0000	0,7596	0,1191	0,0801	0,0120	0,0290
V-100_Res	0	0	0,0011	0,0000	0,5166	0,1611	0,1782	0,0386	0,1045
ByPass	1	0	0,0002	0,0000	0,7596	0,1191	0,0801	0,0120	0,0290

8	1	0	0,0002	0,0000	0,7596	0,1191	0,0801	0,0120	0,0290
Water_In	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
9	1	0	0,0022	0,0000	0,7581	0,1188	0,0799	0,0120	0,0289
V-101_Res	0	0	0,0028	0,0000	0,7253	0,1272	0,0931	0,0149	0,0367
10	1	0	0,0022	0,0000	0,7581	0,1188	0,0799	0,0120	0,0289
11	1	0	0,0022	0,0000	0,7581	0,1188	0,0799	0,0120	0,0289
12	1	0	0,0022	0,0000	0,7581	0,1188	0,0799	0,0120	0,0289
V-102_Res	0	0	0,0028	0,0000	0,7253	0,1272	0,0931	0,0149	0,0367
13	1	0	0,0022	0,0000	0,7581	0,1188	0,0799	0,0120	0,0289
Analysis Pre_Ads	1	0	0,0022	0,0000	0,7581	0,1188	0,0799	0,0120	0,0289
14	1	0	0,0022	0,0000	0,7581	0,1188	0,0799	0,0120	0,0289
X-101_Water	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
15	0,9999	0	0,0028	0,0000	0,7577	0,1188	0,0799	0,0120	0,0289
15_Rec	0,9999	0	0,0028	0,0000	0,7577	0,1188	0,0799	0,0120	0,0289
16	1	0	0,0000	0,0000	0,7598	0,1191	0,0801	0,0120	0,0290
17	1	0	0,0000	0,0000	0,7598	0,1191	0,0801	0,0120	0,0290
Analysis Post_Ads	1	0	0,0000	0,0000	0,7598	0,1191	0,0801	0,0120	0,0290
18	1	0	0,0000	0,0000	0,7598	0,1191	0,0801	0,0120	0,0290
19	1	0	0,0000	0,0000	0,7598	0,1191	0,0801	0,0120	0,0290
X-100_Water	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
20	1	0	0,0183	0,0000	0,7459	0,1169	0,0786	0,0118	0,0285
21	1	0	0,0183	0,0000	0,7459	0,1169	0,0786	0,0118	0,0285
22	1	0	0,0147	0,0000	0,7486	0,1173	0,0789	0,0118	0,0286
23	1	0	0,0147	0,0000	0,7486	0,1173	0,0789	0,0118	0,0286
24	1	0	0,0147	0,0000	0,7486	0,1173	0,0789	0,0118	0,0286
25	0,9869	0	0,0147	0,0000	0,7486	0,1173	0,0789	0,0118	0,0286
V-103_Res	0	0	1,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
RegP_Ch#3	1	0	0,0016	0,0000	0,7586	0,1189	0,0800	0,0120	0,0290

Fonte: calculado pelo autor no Aspen HYSYS (2023).