

Desenvolvimento de uma Extensão Robusta para Simulação de Módulos de Membranas no *Aspen HYSYS* utilizando *ACM*

Sabrina de Abreu e de Abreu^a, Argimiro Secchi^b, Miguel Bagajewicz^c, André Felipe Ferreira de Souza^d, Diego Gabriel Oliva^e, João Tupinambá^f

^a Aluna de Mestrado, PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro-RJ, Brasil

^b Professor Adjunto, PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro-RJ, Brasil

^c Professor Visitante, PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro-RJ, Brasil; Professor Emérito, University of Oklahoma, Norman, Oklahoma, Estados Unidos

^d Petrobras, Rio de Janeiro-RJ, Brasil

^e Pós-Doutorando, PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro-RJ, Brasil

^f Aluno de Mestrado, PEQ/COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro-RJ, Brasil

*sabrina.abreu@peq.coppe.ufrj.br

RESUMO

A simulação rigorosa de processos de separação por membranas é de grande interesse para aplicações na indústria de óleo e gás, especialmente em sistemas de remoção de CO₂ e contaminantes. Entretanto, simuladores comerciais como o Aspen HYSYS ainda apresentam limitações na representação detalhada desses processos, sobretudo quando há forte acoplamento entre transferência de massa, balanços de energia e queda de pressão. Nesse contexto, este trabalho propõe o desenvolvimento de uma extensão robusta para o HYSYS, utilizando o Aspen Custom Modeler (ACM), visando ampliar sua capacidade preditiva e flexibilidade de aplicação em sistemas de permeação gasosa. Foram desenvolvidos dois modelos em regime estacionário e escoamento contracorrente. O primeiro baseia-se na média logarítmica das diferenças de pressões parciais (LMPD), incorporando uma formulação de fechamento para a composição do permeado na extremidade de saída (*Yeof*), inspirada na abordagem de Shindo et al. (1985). O segundo consiste em um modelo discretizado ao longo do comprimento do módulo, fundamentado em formulações rigorosas de transporte e balanços distribuídos, conforme estratégias reportadas por Scholz et al. (2012), incluindo balanços de massa e energia e cálculo explícito da queda de pressão. Ambos os modelos foram implementados no ACM e integrados ao HYSYS como operações unitárias customizadas. Estratégias numéricas robustas, como regularização da força motriz e tratamento de componentes traço, foram empregadas para ampliar a estabilidade e a convergência. Os modelos foram avaliados com dados industriais. O modelo LMPD-*Yeof* apresentou elevada robustez numérica e baixo custo computacional, mostrando-se adequado para aplicações de engenharia conceitual e estudos rápidos de sensibilidade. Já o modelo discretizado forneceu maior detalhamento físico, capturando gradientes de composição, temperatura e pressão ao longo do módulo, embora com maior esforço computacional. A comparação entre as abordagens indicou boa concordância nas tendências globais de separação e no fechamento de balanços, com diferenças mais evidentes em cenários com maior não linearidade e presença de componentes traço. A extensão desenvolvida amplia a capacidade do HYSYS para a simulação de sistemas de membranas, permitindo ao usuário selecionar modelos mais simples ou mais rigorosos conforme o objetivo do estudo. Como perspectivas futuras, destacam-se a integração com rotinas de reconciliação de dados e estimação de parâmetros, bem como sua aplicação em estudos de otimização de processos. O trabalho contribui para a Engenharia de Sistemas em Processos ao disponibilizar uma ferramenta mais robusta e flexível para modelagem e análise de separação por membranas.

Palavras-chave: Membranas, Aspen HYSYS, ACM, Modelagem de Processos, Separação de Gases.

Agradecimentos: Os autores agradecem à Petrobras pelo fornecimento dos dados industriais e apoio financeiro.

Referências

Scholz, M.; Harlacher, T.; Melin, T.; Wessling, M. Modeling Gas Permeation by Linking Nonideal Effects. Chemical Process Engineering, RWTH Aachen University, Turmstrasse 46, 52064 Aachen, Germany.

Shindo, Y.; Hakuta, T.; Yoshitome, H.; Inoue, H. Calculation methods for multicomponent gas separation by permeation. Separation Science and Technology, v. 20, n. 5–6, 1985. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/01496398508060692>.



Realização:

