

UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
UNIDADE ACADÊMICA DE ENGENHARIA QUÍMICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**EFEITO DA PRESSÃO SOBRE A DINÂMICA E O
CONTROLE DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO COM
RETIRADA LATERAL**

STEPHANIE ROLIM DANTAS

CAMPINA GRANDE – PARAÍBA

01384/14
CGBC_DIS

STEPHANIE ROLIM DANTAS



**EFEITO DA PRESSÃO SOBRE A DINÂMICA E O
CONTROLE DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO COM
RETIRADA LATERAL**

Dissertação apresentada à
Universidade Federal de
Campina Grande como parte
dos requisitos exigidos para
obtenção do título de Mestre
em Engenharia Química.

ORIENTADOR:

PROF. ROMILDO PEREIRA BRITO

CAMPINA GRANDE – PARAÍBA

MAIO/2014



FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA BIBLIOTECA CENTRAL DA UFCC

D192e Dantas, Stephanie Rolim.
Efeito da pressão sobre a dinâmica e o controle de colunas de destilação com retirada lateral / Stephanie Rolim Dantas. – Campina Grande, 2014.
75 f.: il. color

Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal de Campina Grande, Centro de Ciência e Tecnologia, 2014.

"Orientação: Prof. Dr. Romildo Pereira Brito".
Referências.

1. Destilação. 2. Simulação. 3. Dinâmica. 4. Pressão.
I. Brito, Romildo Pereira. II. Título.

CDU 66.021.3.048(043)

**EFEITO DA PRESSÃO SOBRE A DINÂMICA E O
CONTROLE DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO COM
RETIRADA LATERAL**

Dissertação Aprovada Em: 13 / 06 / 2014

Banca Examinadora:



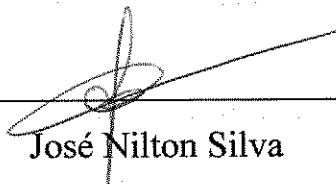
Romildo Pereira Brito

Orientador



Michel François Fossy

Examinador



José Nilton Silva

Examinador

CAMPINA GRANDE – PARAÍBA.

MAIO/2014

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Nelson e Renilda, pelo amor e por não medirem esforços quando mais precisei de ajuda e compreensão.

Ao meu irmão, Nelsinho, pelo apoio e amizade.

À minha tia Núbia, grande amiga, pelos cuidados e conselhos.

À minha prima Karoline, pela amizade e conhecimento compartilhado.

Ao meu marido, Flávio, pela parceria, revisões de texto e apoio nas minhas decisões.

À minha sogra, Valéria, que esteve do meu lado em momentos importantes na elaboração deste trabalho, por me receber tão bem em sua casa, pela amizade e carinho.

Às minhas amigas.

Aos colegas do LARCA.

Ao professor Romildo Brito, pela orientação e ensinamentos.

À Unidade Acadêmica de Engenharia Química da Universidade Federal de Campina Grande.

Ao CNPQ pelo apoio financeiro ao projeto.

RESUMO

A destilação é o processo de separação mais utilizado na indústria química e petroquímica. Como qualquer processo, seu bom desempenho depende principalmente da implementação de um sistema de controle adequado e eficaz. Devido à importância e complexidade de colunas de destilação, seu controle é um tema amplamente explorado pela literatura. Apesar desse fato e da pressão ser uma das variáveis controladas mais importantes, o efeito dessa variável sobre a dinâmica e o sistema de controle de colunas de destilação não tem sido cuidadosamente estudado. Este trabalho apresenta resultados para diferentes configurações de controle da pressão de uma coluna real, que faz parte de uma unidade de produção de polietileno. Tal coluna é dita não convencional por possuir três alimentações e quatro retiradas, sendo uma delas uma retirada lateral. As simulações realizadas em regime estacionário e regime transiente (usando os simuladores *Aspen Plus* e *Aspen Dynamics*) mostram que distúrbios na vazão da alimentação vapor alteram a pressão da coluna, que, por sua vez, tem forte influência sobre outras variáveis do processo, como composição e temperatura. Os resultados indicam que o controle da pressão usado atualmente na coluna não é o mais eficaz e que outras configurações de controle podem apresentar melhor desempenho.

Palavras-chave: Destilação; Simulação; Dinâmica; Pressão; Controle.

ABSTRACT

Distillation is the most used separation process in chemical and petrochemical industry. As any process, its performance mainly depends on the implementation of an adequate and effective control. Due to the importance and complexity of distillation columns, their control is a topic widely explored in the literature. Despite this fact and the pressure to be one of the most important controlled variables, the effect of this variable on the dynamics and control systems of distillation columns has not been carefully studied. This work aims to present results for different pressure control schemes of a real column, which is part of a production unit of polyethylene. This column is considered unconventional because it has three feeds and four withdrawn, one being a side withdrawal. The simulations of steady and transient state (using Aspen Plus and Aspen Dynamics simulators) show that disturbances in the vapor feed stream changes the column pressure, having a strong influence on other process variables such as composition and temperature. The results indicate that the pressure control currently used in the column is not the most effective and that other control schemes can perform better.

Keywords: Distillation; Simulation; Dynamic; Pressure; Control.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 - Fluxograma da área de recuperação do isobutano e hexeno.	15
Figura 2.2 - Comportamento dinâmico da vazão da retirada lateral (prato 30).....	15
Figura 3.1 - Fluxograma de uma coluna de destilação convencional.	18
Figura 3.2 - Fluxograma de uma coluna de destilação convencional com retirada lateral abaixo do prato de alimentação.	19
Figura 3.3 - Fluxograma de uma coluna de destilação convencional com cinco variáveis manipuladas e cinco variáveis controladas.	23
Figura 4.1 - Esquema geral de um estágio de equilíbrio.	29
Figura 4.2 - Cascata de estágios em contracorrente.	32
Figura 5.1 - Especificação da corrente 607A.	39
Figura 5.2 - Especificação da corrente 612A.	39
Figura 5.3 - Especificação da corrente 130A.	40
Figura 5.4 - Especificação da coluna de pesados.	40
Figura 5.5 - Especificação do condensador E1631.	41
Figura 5.6 - Especificação do vaso <i>flash</i> V1631.	41
Figura 5.7 - Especificação da condição operacional da bomba (PUMP).	42
Figura 5.8 - Especificação do divisor, bloco B12.	42
Figura 5.9 - Fluxograma usado nas simulações em regime estacionário.	43
Figura 5.10 - Fluxograma com a configuração de controle usada atualmente.	45
Figura 6.1 - Perfil de temperatura da coluna de pesados.	50
Figura 6.2 - Perfis de composição do isobutano e do hexeno ao longo da coluna de pesados.	50
Figura 6.3 - Perfis de composição do n-octano e do 2-metil-heptano (oligômeros) ao longo da coluna de pesados.	51
Figura 6.4 - Perfis de temperatura da coluna para variações na vazão da alimentação vapor.	52
Figura 6.5 - Perfis de temperatura da coluna para variações na vazão da alimentação líquida.	53
Figura 6.6 - Composição do hexeno no topo da coluna para variações na vazão da alimentação líquida e da alimentação vapor.	54

Figura 6.7 - Composição do isobutano no topo da coluna para variações na vazão da alimentação líquida e da alimentação vapor.	54
Figura 6.8 - Composição do hexeno na retirada lateral para variações na vazão da alimentação líquida e da alimentação vapor.	54
Figura 6.9 - Composição do isobutano na retirada lateral para variações na vazão da alimentação líquida e da alimentação vapor.	55
Figura 6.10 - Composição do hexeno na base da coluna para variações na vazão da alimentação líquida e da alimentação vapor.	55
Figura 6.11 - Composição do isobutano na base da coluna para variações na vazão da alimentação líquida e da alimentação vapor.	55
Figura 7.1 – Fluxograma usado nas simulações dinâmicas para a Configuração 1 (configuração usada atualmente).....	57
Figura 7.2 – Fluxograma usado nas simulações dinâmicas para a Configuração 2.	59
Figura 7.3 - Fluxograma usado nas simulações dinâmicas para a Configuração 3.....	59
Figura 7.4 - Resposta dinâmica da pressão da coluna para variações na vazão da alimentação líquida. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).	61
Figura 7.5 - Resposta dinâmica da pressão da coluna para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).	61
Figura 7.6 - Resposta dinâmica da vazão do destilado vapor para variações na vazão da alimentação líquida. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).	62
Figura 7.7 - Resposta dinâmica da vazão do destilado vapor para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).	62
Figura 7.8 - Resposta dinâmica da vazão da retirada lateral para variações na vazão da alimentação líquida. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).	63
Figura 7.9 - Resposta dinâmica da vazão da retirada lateral para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).	63

Figura 7.10 - Resposta dinâmica do perfil de temperatura da coluna para variações na vazão da alimentação líquida. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).	64
Figura 7.11 - Resposta dinâmica do perfil de temperatura da coluna para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).	64
Figura 7.12 - Resposta dinâmica da composição do isobutano na retirada lateral para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).	65
Figura 7.13 - Resposta dinâmica da composição do isobutano no topo da coluna para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).	65
Figura 7.14 - Resposta dinâmica da composição do hexeno na retirada lateral para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).	66
Figura 7.15 - Resposta dinâmica da composição do hexeno no topo da coluna para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).	66
Figura 7.16 - Resposta dinâmica da vazão do fluido de resfriamento para variações na vazão da alimentação vapor nas simulações da Configuração 3.	67
Figura 7.17 - Resposta dinâmica do nível do vaso de refluxo para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).	68
Figura 7.18 - Resposta dinâmica do nível da base da coluna para variações na vazão da alimentação.	69
Figura 7.19 - Resposta dinâmica da vazão de refluxo para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).	69

LISTA DE TABELAS

Tabela 5.1 - Componentes considerados na simulação do processo.....	38
Tabela 6.1 - Comparação dos valores de projeto e dos valores simulados da C1630.....	49
Tabela 7.1 – Resumo das variáveis controladas e manipuladas para a configuração de controle usada na planta.	56

NOMENCLATURA

A_b	área do fundo do prato (m^2)
a	parâmetro da equação de <i>Peng-Robinson</i>
b	parâmetro da equação de <i>Peng-Robinson</i>
B	vazão do produto de base da coluna (kg/h)
C	número de componentes
D	diâmetro do prato (m)
D	vazão do destilado (kg/h)
E	relação de equilíbrio
F	vazão de alimentação (kg/h)
f	fugacidade (atm)
h_w	altura do vertedouro (m)
h_{ow}	altura do líquido sobre o vertedouro (m)
H	balanço de energia
H	entalpia da fase vapor (cal/mol)
h	entalpia da fase líquida (cal/mol)
K	constante de equilíbrio
K_{dh}	coeficiente de perda de carga para o prato seco
L	vazão de refluxo (kg/h)
L	vazão de líquido (kg/h)
L_w	comprimento do vertedouro (m)
M	balanço de massa
M	holdup da fase líquida (mol)
M_B	nível da base da coluna (m)
M_D	nível do vaso de refluxo (m)
N	número do estágio
p	pressão (atm)
Q_r	carga térmica do refeedor (kcal/h)
R	constante dos gases ideais ($m^3 \cdot atm / mol \cdot K$)
S	somatório das frações molares
T	temperatura ($^{\circ}C$)
U	vazão de retirada lateral do líquido (kg/h)

V	vazão de vapor (kg/h)
V_m	volume molar (m^3/mol)
W	vazão de retirada lateral do vapor (kg/h)
x	fração do líquido
y	fração do vapor
z	fração mássica na alimentação

Letras Gregas

γ	coeficiente de atividade
ρ	densidade (mol/m^3)
v	velocidade do vapor
φ	coeficiente de fugacidade

Subscritos

i	componente i (1, 2, ..., C)
j	estágio j (1, 2, ..., N)
V	fase vapor
L	fase líquida

SUMÁRIO

1	Introdução	12
2	Descrição do Problema	14
3	Revisão Bibliográfica.....	16
3.1	Destilação Convencional	16
3.2	Colunas de Destilação com Retirada Lateral.....	18
3.3	Controle de Colunas de Destilação Convencionais.....	20
3.4	Controle da Pressão de Colunas de Destilação.....	24
3.5	Controle de Colunas com Retirada Lateral.....	26
4	Modelagem Matemática de Colunas de Destilação	29
4.1	Modelagem em Regime Estacionário	29
4.2	Modelagem em Regime Transiente.....	31
4.3	Modelo Termodinâmico	34
5	Simulação do Processo	36
5.1	Simulação em Regime Estacionário	36
5.2	Simulação em Regime Transiente	43
5.3	Método de Resolução do Aspen Plus	45
5.4	Método de Resolução do Aspen Dynamics.....	47
6	Resultados no Regime Estacionário.....	49
7	Resultados no Regime Transiente.....	56
8	Conclusões	70
9	Sugestões para Trabalhos Futuros	72
10	Referências Bibliográficas	73

1 INTRODUÇÃO

A grande maioria dos processos químicos está associada a uma ou mais reações que envolvem reagentes, produtos e subprodutos. Após a reação, a purificação consiste na etapa que garante a qualidade e valor comercial aos produtos. Quando esta purificação é feita em fase líquida, a destilação destaca-se como o processo de separação mais utilizado.

De acordo com Humphrey (1995), as colunas de destilação representam mais de 90% dos processos de separação, resultado da grande eficiência na separação das mais diferentes misturas. Essa mesma eficiência não é observada do ponto de vista termodinâmico, pois colunas de destilação apresentam um grande consumo energético, sendo responsável por cerca de 3% do consumo total de energia nos EUA e 40% da energia total utilizada no refino de petróleo bruto (Henley e Seader, 1981).

Normalmente, colunas de destilação possuem uma retirada de topo e uma retirada de base. No topo, são removidos os componentes mais leves e na base, os mais pesados. Se a alimentação contém mais de duas espécies, são necessárias duas ou mais operações de separação. Como a adição de uma coluna significa maior custo operacional e maior consumo de energia, o uso de colunas de destilação com retiradas laterais é uma alternativa para alcançar, em uma coluna, a separação que requer duas ou mais colunas, já que nesse tipo de processo, o componente com volatilidade intermediária é removido através de uma retirada lateral. Além disso, retiradas laterais podem ser utilizadas na separação binária se forem desejados diferentes níveis de pureza (Luyben, 2006).

A coluna de destilação estudada neste trabalho possui uma retirada lateral e faz parte de uma unidade de produção de polietileno. Sua finalidade consiste em separar os componentes da mistura proveniente do reator de polimerização de etileno, retirando lateralmente o hexeno (componente com volatilidade intermediária na mistura). A retirada lateral é feita na fase vapor e está localizada na seção abaixo do prato de alimentação da coluna. Essa é considerada uma coluna não convencional por possuir três alimentações e quatro retiradas. Duas das alimentações são realizadas diretamente na coluna e a terceira é realizada no vaso de refluxo. O produto de base, a retirada lateral e as duas retiradas de topo (devido à condensação parcial) compõem as quatro retiradas da coluna.

A complexidade e não-linearidade das colunas de destilação tornaram esse processo um exemplo clássico para o estudo e teste de algoritmos de controle. Segundo Skogestad (1997a), essa operação unitária é provavelmente a operação mais estudada em termos de controle. No entanto, o controle de colunas com retirada lateral não tem sido um assunto muito explorado nos últimos anos. Enquanto essas colunas oferecem economias com a redução de capital e de custos operacionais, elas também representam problemas de controle desafiantes. Segundo Buckley *et al.* (1985), mesmo a coluna com retirada lateral mais simples, geralmente, é muito mais difícil de controlar do que colunas convencionais com apenas duas correntes de produtos, além de terem menor flexibilidade e capacidade reduzida.

Dentre as variáveis controladas de uma coluna de destilação, a pressão merece atenção especial por ter forte influência sobre as vazões de vapor e sobre os perfis de temperatura. Além disso, variações no seu valor alteram as volatilidades relativas dos componentes, o que pode comprometer o desempenho da separação. Contudo, são poucos os trabalhos que realizam o estudo de como a pressão afeta o comportamento dinâmico e o sistema de controle de uma coluna de destilação.

Variações na pressão da coluna tornam o seu controle mais difícil de tal forma que a maioria dos sistemas de controle considera que as colunas de destilação operam a uma pressão constante. De acordo com Skogestad (1997a), a hipótese de pressão constante é muitas vezes justificada porque a pressão é rigorosamente controlada, mas, no geral, a dinâmica da pressão e seu efeito sobre o comportamento da coluna ainda não são bem entendidos.

Diante de tais fatos, o principal objetivo deste trabalho consistiu em avaliar o efeito da pressão sobre a dinâmica e o sistema de controle da coluna em estudo por meio das simulações do processo em regime estacionário e regime transiente, as quais foram realizadas com o auxílio dos simuladores *Aspen Plus* e *Aspen Dynamics*. Nas análises, as outras variáveis não foram controladas, ou seja, a razão R/F líquida permaneceu constante.

2 DESCRIÇÃO DO PROBLEMA

O caso de estudo deste trabalho corresponde a uma coluna de destilação de uma unidade industrial. Tal coluna faz parte da área de recuperação de isobutano e de hexeno, oriundos de um reator de polimerização do etileno, que dá origem ao polietileno, um polímero simples e um dos mais comuns entre os tipos de plásticos.

Na saída do reator da planta em questão, além do polietileno, estão presentes insumos que são enviados para o sistema de recuperação, formado pela coluna de pesados e pela coluna de leves (Figura 2.1). A alimentação da coluna de pesados é composta principalmente pelo isobutano (89%) e, em quantidades muito menores, pelo etileno (5,8%) e hexeno (0,9%), além de oligômeros e outras substâncias. A coluna de pesados tem como principal objetivo recuperar, como produto de topo, o etileno e o solvente isobutano não consumido no reator e retirar lateralmente o hexeno não incorporado na resina. A coluna de leves é alimentada pela corrente de topo da coluna de pesados e é responsável por separar o isobutano do etileno.

O presente trabalho surgiu a partir da observação de uma forte oscilação (de 0 a 1000 kg/hr) na vazão da retirada lateral da coluna de pesados (Figura 2.2), quando esse valor deveria ser mantido na ordem de dezenas de kg/h; o que resulta em problemas de especificação nas correntes de base (perda de hexeno) e lateral (perda de isobutano).

A coluna de pesados possui 41 estágios, sendo o estágio 41 o refeedor. É uma coluna não convencional, pois possui três alimentações e quatro retiradas, sendo uma alimentação no topo (que tem origem no vaso de refluxo), uma alimentação vapor que ocorre no estágio 15 e uma líquida no estágio 16, duas retiradas de topo, uma retirada lateral no estágio 30 e uma retirada de fundo. A corrente de topo da coluna é parcialmente condensada e enviada para um vaso *flash*, que dá origem ao destilado vapor e destilado líquido. Uma parte do destilado líquido faz o refluxo da coluna e a outra parte, juntamente com o destilado vapor, segue para a coluna de leves.

Figura 2.1 - Fluxograma da área de recuperação do isobutano e hexeno.

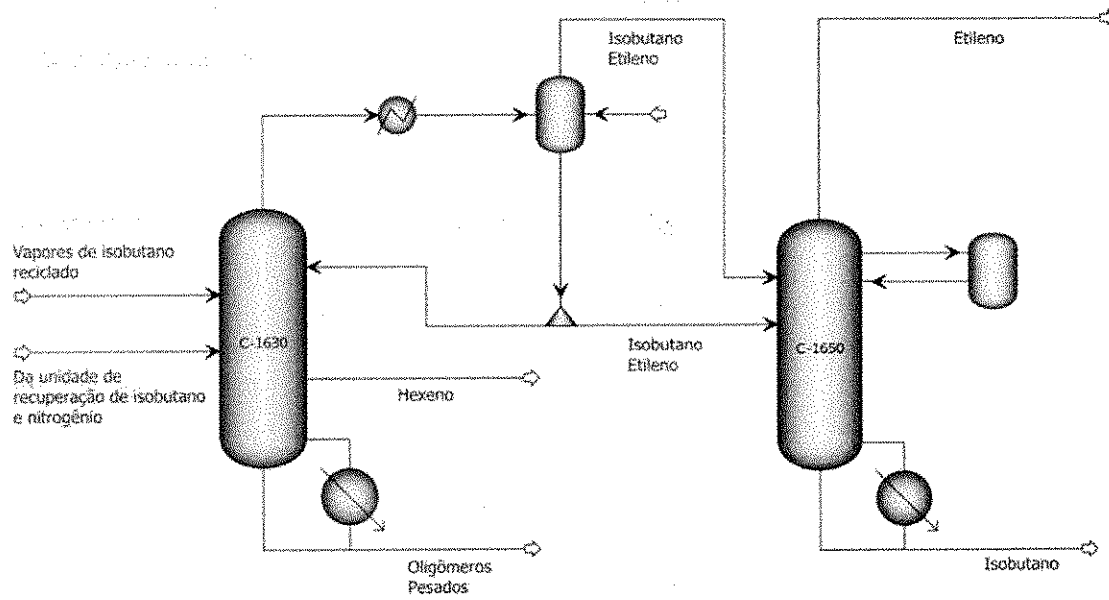
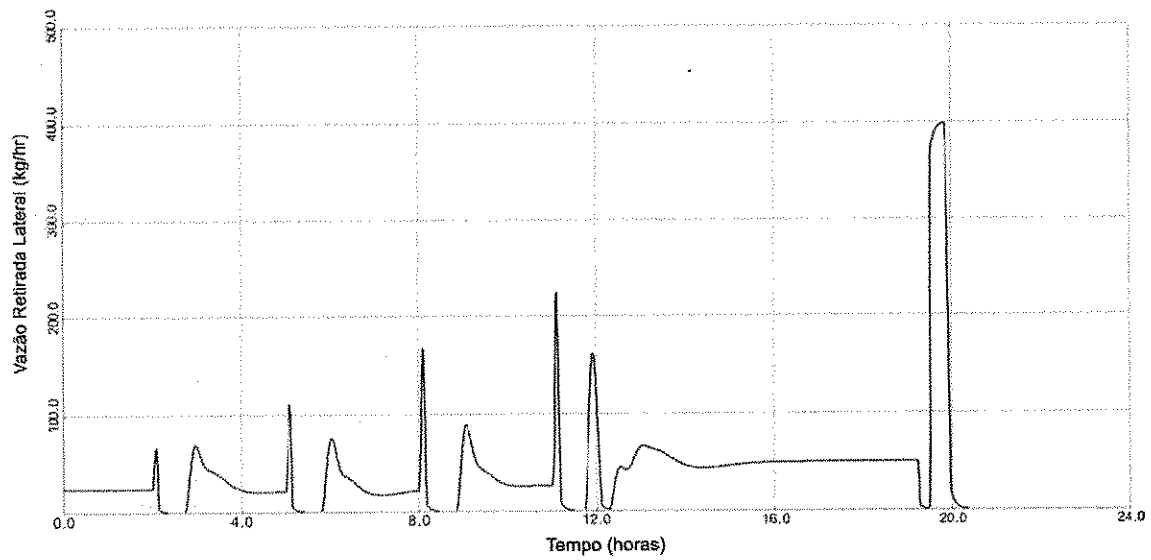


Figura 2.2 – Comportamento dinâmico da vazão da retirada lateral (prato 30).



3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 DESTILAÇÃO CONVENCIONAL

O princípio fundamental dos processos de separação consiste nas operações de transferência de massa entre as fases existentes na mistura. Em um processo de separação com duas fases em contracorrente, essa transferência de massa se dá devido ao gradiente de concentração existente entre elas. Dessa forma, operações de separação devem envolver a criação de uma segunda fase, seja pela adição de calor, no caso da destilação, seja pela adição de um agente de massa de separação, no caso da absorção ou extração.

Na destilação, as fases vapor e líquido coexistem em temperatura e pressão iguais. A compreensão desse mecanismo envolve o entendimento de conceitos fundamentais como a volatilidade e o equilíbrio líquido-vapor.

A volatilidade é definida como a facilidade de uma substância passar do estado líquido para o estado vapor. Dada uma mistura, um ou mais componentes têm mais facilidade de vaporizar que os demais. Nesse caso, é conveniente usar o conceito de volatilidade relativa, que mede a facilidade de uma substância vaporizar em relação à outra substância presente na mistura. Em caso de misturas ideais, essa volatilidade relativa é uma relação entre as pressões de vapor das duas substâncias, que depende fortemente da temperatura e é a pressão exercida pelo vapor quando este está em equilíbrio termodinâmico com o líquido que lhe deu origem.

O mecanismo do equilíbrio líquido-vapor está por trás do processo da destilação. Tal equilíbrio ocorre quando, em um sistema fechado, na interface das duas fases, a taxa das moléculas que passam do líquido para o vapor se iguala à taxa das moléculas que passam do vapor para o líquido. Como efeito, os componentes mais leves da mistura se concentram na fase vapor e os componentes mais pesados se concentram na fase líquida.

Na destilação com um único estágio, também chamada de destilação *flash*, uma mistura líquida é parcialmente vaporizada ou uma mistura vapor é parcialmente condensada e alimentada a um vaso, onde é submetida a uma expansão brusca ou à redução brusca da pressão, permitindo a separação das duas fases por gravidade.

Quando as espécies que compõem a mistura apresentam volatilidades muito diferentes, a destilação com apenas um estágio pode ser suficiente para alcançar a separação desejada. No entanto, muitas vezes, as espécies envolvidas possuem volatilidades muito próximas e necessitam de múltiplos contatos entre as fases para atingir o grau de separação necessário. Esses múltiplos contatos entre as fases ocorrem na destilação fracionada, processo de separação mais utilizado na indústria química e petroquímica.

A destilação fracionada separa as espécies de uma mistura por intermédio de sucessivas destilações *flash*. O equipamento utilizado nesse processo é uma coluna vertical composta por um número de bandejas ou pratos horizontais (também chamados de estágios). São os estágios da coluna que promovem os múltiplos contatos entre as fases líquida e vapor. O vapor que deixa um estágio entra em contato com o líquido do estágio acima. Assim, uma porção desse vapor é resfriada e condensada pelo líquido e a porção que se mantém vapor se torna enriquecida com as espécies mais voláteis. Essa etapa se repete em todos os estágios da coluna.

A Figura 3.1 apresenta um fluxograma esquemático de uma típica coluna de destilação. A mistura a ser destilada é alimentada num ponto médio da coluna, chamado de ponto de alimentação. A alimentação desce até a base, onde está presente o refeedor, que aquece o líquido, gerando o vapor que ascende na coluna em contracorrente com o líquido da alimentação. O vapor sobe passando pelos orifícios das bandejas até atingir o topo, encontrando um condensador total ou parcial. O vapor condensado é recolhido em um vaso, que dá origem ao refluxo (vazão líquida que retorna para a coluna) e à corrente do produto de topo, chamada de destilado. O refluxo tem como função garantir a existência de líquido nos estágios da coluna, além de aumentar o grau de separação. Na base, o líquido deixa a coluna como produto residual.

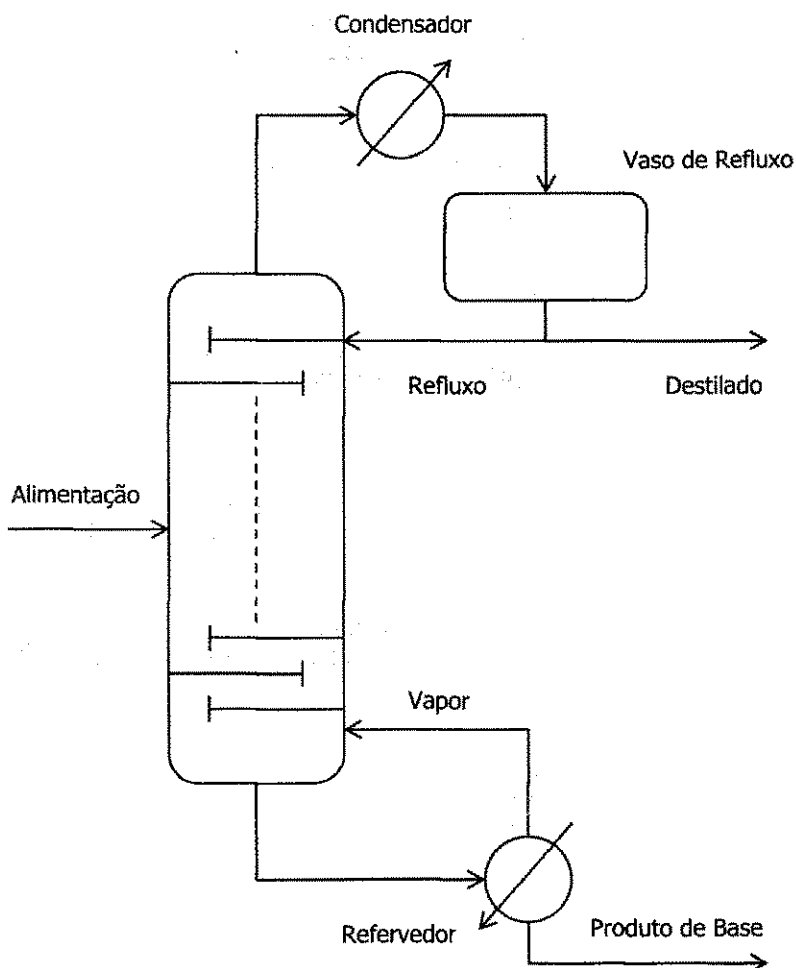
Em resumo, o vapor sobe da base para o topo da coluna e é enriquecido no componente mais volátil, enquanto que o líquido desce do topo para a base e é enriquecido no componente menos volátil.

A separação global que se consegue entre o produto de topo e o produto de base depende principalmente das volatilidades relativas dos componentes, do número de estágios da coluna e da razão entre as taxas de líquido e as taxas de vapor.

Em uma coluna de destilação convencional, a região acima do ponto de alimentação é chamada de região de enriquecimento ou seção de retificação, enquanto que abaixo desse ponto é chamada de região de esgotamento. A definição dessas seções

não é muito exata quando a coluna possui mais de uma alimentação ou correntes de retiradas laterais.

Figura 3.1 - Fluxograma de uma coluna de destilação convencional.



3.2 COLUNAS DE DESTILAÇÃO COM RETIRADA LATERAL

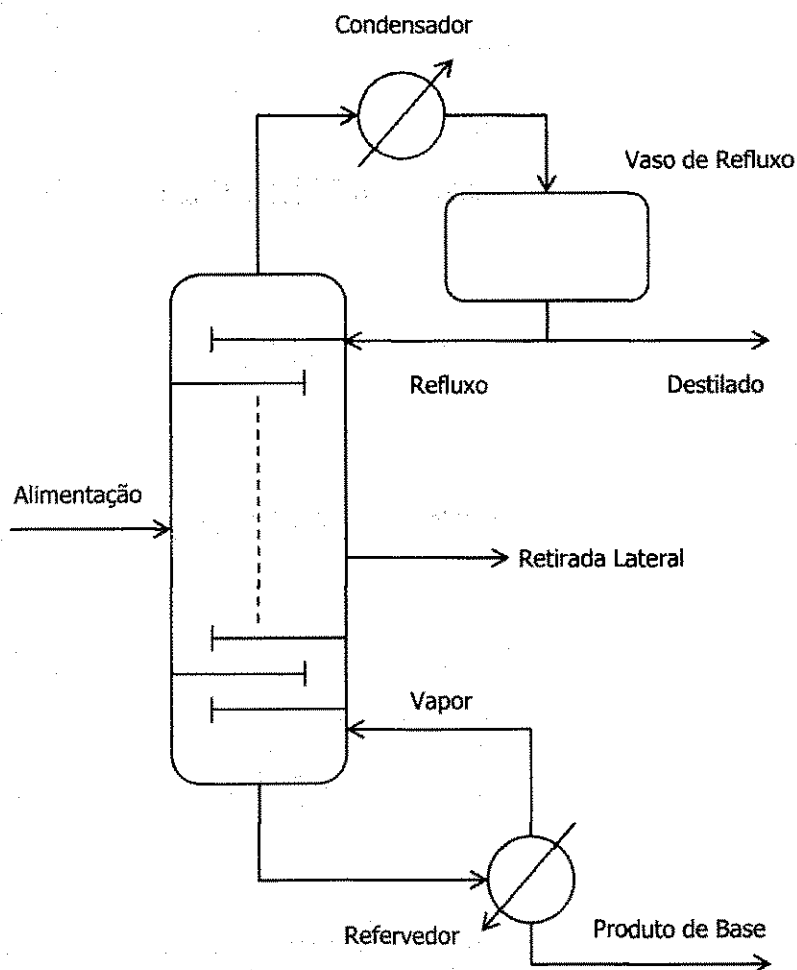
O número mínimo de colunas requeridas para uma separação é igual ao número de produtos fornecidos menos um. Assim, para separar três produtos, são necessárias duas colunas. Porém, existem colunas que possuem mais correntes de produto além das retiradas de base e de topo, chamadas de correntes laterais ou retiradas laterais. A Figura 3.2 apresenta um fluxograma esquemático de uma típica coluna de destilação com retirada lateral.

Uma coluna é projetada com retiradas laterais para substituir duas ou mais colunas convencionais usadas na separação de misturas multicomponentes. A grande

vantagem dessa prática é a redução nos custos de investimento, operação e, principalmente, do consumo de energia.

Colunas com retirada lateral são frequentemente usadas em plantas petroquímicas, onde os produtos laterais são misturas ao invés de componentes puros. (Errico, 2012). Essas colunas aparecem também em sistemas de recuperação de solventes em plantas de fabricação de plásticos ou fibras têxteis sintéticas. Também podem ser usadas na destilação binária quando são desejados diferentes níveis de pureza (Luyben, 2006).

Figura 3.2 - Fluxograma de uma coluna de destilação convencional com retirada lateral abaixo do prato de alimentação.



Raramente, a corrente lateral é um produto final devido a sua pureza limitada. Por isso, essas colunas são apropriadas para prefractionadoras (onde a retirada lateral

alimenta outra coluna para uma maior separação) e para gerar correntes de reciclo, onde não há uma exigência estrita de composição (Glinos e Malone, 1985a).

As correntes laterais podem ser correntes retiradas na fase líquida ou na fase vapor. Colunas com retiradas laterais na fase líquida são frequentemente utilizadas quando a corrente de alimentação é uma mistura ternária em que a concentração do componente mais leve é pequena. O componente intermediário é removido através de uma corrente lateral como um líquido, em um estágio acima do estágio de alimentação. Uma corrente lateral líquida é usada porque as concentrações do componente mais leve na fase líquida em todos os pratos acima do prato de alimentação são menores do que as concentrações do componente mais leve na fase vapor. Isso indica que as volatilidades do componente mais leve e do componente intermediário devem ser muito diferentes. Se essa diferença entre as volatilidades for muito pequena, o produto da corrente lateral não apresentará alta pureza. Colunas com retiradas laterais na fase vapor são frequentemente usadas quando a corrente de alimentação é uma mistura ternária e a concentração do componente mais pesado é pequena. Além disso, a volatilidade relativa entre o componente intermediário e componente pesado deve ser grande.

A maioria dos trabalhos sobre esse tema preocupa-se em definir métodos de projeto de colunas com retirada lateral. Glinos e Malone (1985a) descreveram um método aproximado para colunas com retirada lateral com uma alimentação que combina equações de Fenske-Underwood-Kirkbride. Em seguida, o método foi estendido para colunas com múltiplas alimentações (Nikolaides e Malone, 1987) e para misturas azeotrópicas (Gutiérrez-Antonio e Jiménez-Gutiérrez, 2007).

3.3 CONTROLE DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO CONVENCIONAIS

O controle de colunas de destilação é um tema amplamente estudado. A complexidade e não-linearidade desse processo tornaram as colunas de destilação exemplos clássicos para o estudo e teste de algoritmos de controle não-linear. Segundo Skogestad (1997a), essa operação unitária é provavelmente a operação mais estudada em termos de controle.

Uma breve revisão da literatura sobre esse tópico conduziu ao estudo de trabalhos como os de Buckley *et al.* (1985), Skogestad (1987), Kister (1990), Skogestad (1997a) e Skogestad (1997b). Buckley *et al.* (1985) faz uma breve revisão sobre os fundamentos da destilação com ênfase nos tópicos relacionados à engenharia de

controle, seguida de uma discussão detalhada sobre os aspectos práticos do controle de colunas de destilação. Em suas discussões, o autor utiliza a teoria de modelos mais simplificados com uma entrada e uma saída (SISO – *single input, single output*). Skogestad (1987) apresenta de forma qualitativa e sistemática as principais questões que devem ser abordadas na concepção de um sistema de controle de composição. Kister (1990) concentra-se na operação da destilação e fornece um grande número de recomendações práticas. O livro tem uma boa discussão sobre o controle da composição, controle de nível e de pressão e sobre a localização de sensores de temperatura. Skogestad (1997a) resume características importantes da operação em regime estacionário e transiente e do controle de colunas de destilação contínua. O estudo é limitado a colunas de destilação com dois produtos separando misturas binárias ideais. Skogestad (1997b) discute resultados relacionados a múltiplos estados estacionários e à instabilidade tanto de colunas simples com termodinâmica ideal como de colunas mais complexas (por exemplo, colunas de destilação azeotrópica) e, entre outros aspectos, apresenta uma compreensão geral do comportamento dinâmico de colunas de destilação.

A não obtenção do desempenho especificado pelo projeto de uma coluna deve-se, em muitos casos, à implementação de um sistema de controle deficiente ou inadequado. Segundo Kister (1990), um sistema de controle em mau funcionamento provoca instabilidades, que podem afetar negativamente a pureza do produto e a facilidade de operação. Essas instabilidades são frequentemente transmitidas a jusante ou a montante às unidades, podendo amplificar perturbações e, em casos extremos, podem significar danos à coluna ou riscos para a segurança.

O controle do balanço material e da qualidade dos produtos, bem como a satisfação de restrições podem ser vistos como os principais objetivos do controle de colunas de destilação. Tanto o controle do balanço material como o controle da composição devem funcionar de forma satisfatória em face dos possíveis distúrbios na vazão, composição e condição térmica da alimentação, na pressão e fornecimento de vapor e de água de resfriamento, na temperatura ambiente, além de distúrbios nas operações de testes, inicialização e desligamento da coluna. Kister (1990) resume que o controle de colunas de destilação trabalha em cima de dois princípios básicos: manter a operação da coluna em uma condição estável e regular as condições da coluna para que os produtos alcancem as especificações requeridas. Além disso, os dois objetivos acima

devem ser alcançados da maneira mais eficiente. Isso significa maximizar a recuperação de produto e/ou minimizar o consumo de energia.

No regime estacionário, uma coluna com duas retiradas (topo e base) e uma alimentação apresenta dois graus de liberdade, que podem ser usados, por exemplo, para especificar as composições de topo e de base. Esse número de graus de liberdade deve-se à hipótese de que, no regime estacionário, a pressão é constante e o controle do nível do condensador e do refeedor é perfeito. Já no regime transiente, os níveis e a pressão podem variar, fazendo com que a coluna possua cinco graus de liberdade e se torne um sistema 5×5 . De acordo com Skogestad (1990), o controle ótimo deve, baseado em toda a informação disponível (medições, modelo do processo, distúrbios esperados), manipular todas as cinco entradas (variáveis manipuladas) a fim de manter as cinco saídas (variáveis controladas) o mais próximo possível dos valores desejados.

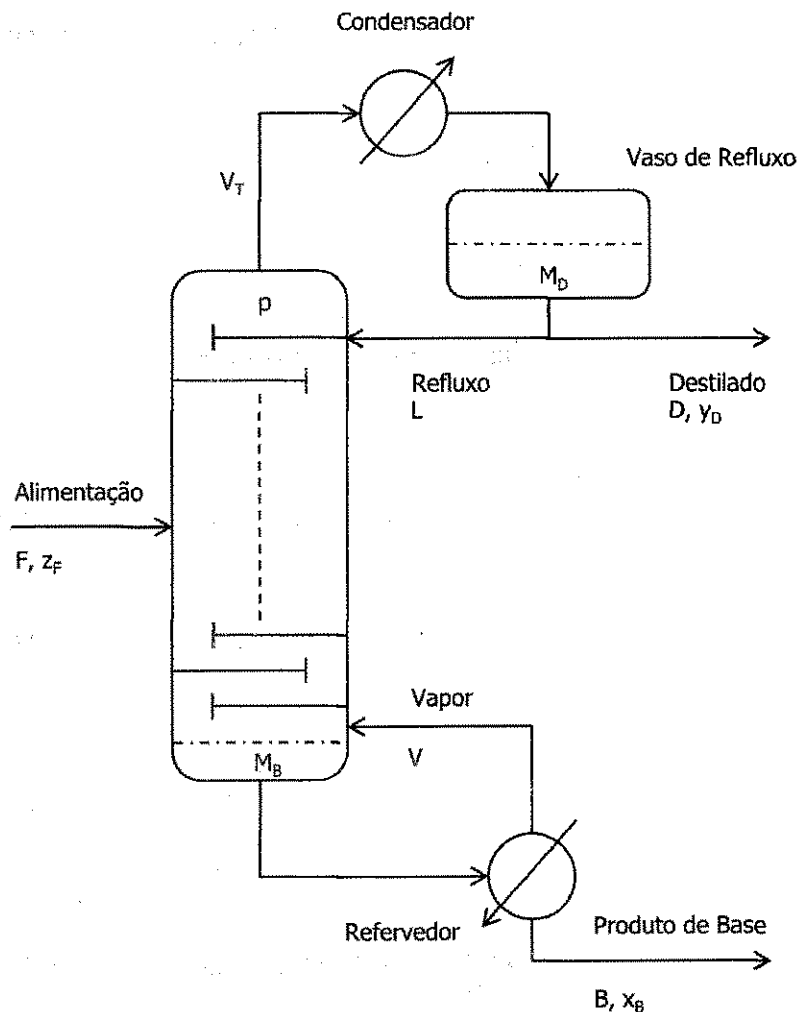
A Figura 3.3 mostra as cinco variáveis manipuladas e as cinco variáveis controladas de uma coluna de destilação convencional com duas correntes de produto (topo e base) e uma alimentação. As variáveis manipuladas são: vazão do destilado D , vazão da base B , refluxo L , vazão de vapor para o refeedor ou *boilup* V e vazão de vapor no topo da coluna V_T . O *boilup* é manipulado indiretamente através da carga térmica do refeedor e a vazão de vapor no topo é manipulada indiretamente através da carga térmica do condensador. As variáveis controladas são: pressão do topo p , nível do vaso de refluxo M_D , nível da base da coluna (refeedor) M_B , composição do produto do destilado y_D e composição do produto da base x_B .

Kister (1990) classifica as variáveis controladas em dois grupos: a pressão e os níveis são controlados para estabelecer as condições de estabilidade e as composições são controladas para atingir a pureza desejada dos produtos. O controle da pressão e dos níveis regula o acúmulo de massa na coluna. Manter os níveis constantes previne o acúmulo de líquido, enquanto que manter a pressão constante previne o acúmulo de vapor. Enquanto esses acúmulos não forem prevenidos, a coluna não irá atingir o regime estacionário e a estabilidade. As composições podem ser controladas de forma direta, usando medidores de composição nas correntes de produto, ou de forma indireta, usando a medição de propriedades físicas, como a densidade, pressão de vapor ou a temperatura (o que é mais comum).

A essência de um sistema de controle consiste no emparelhamento adequado ou conveniente das cinco variáveis controladas com as cinco variáveis manipuladas. Teoricamente, são possíveis $5!$ (=120) combinações, mas apenas algumas delas são

usadas. A triagem das combinações indesejadas é feita seguindo algumas regras básicas, que não são abordadas nesse trabalho. A escolha da melhor configuração de controle é feita, muitas vezes, através de ferramentas desenvolvidas para esse fim.

Figura 3.3 – Fluxograma de uma coluna de destilação convencional com cinco variáveis manipuladas e cinco variáveis controladas.



Os modelos usados em sistemas de controle se dividem em SISO (*single input - single output*) e MIMO (*multiple input - multiple output*). O modelo SISO é um sistema de controle simples de uma única variável. É tipicamente menos complexo que o sistema MIMO que, por sua vez, é capaz de olhar simultaneamente duas ou mais variáveis do processo e de escolher, em uma dada situação, a melhor de várias estratégias (algoritmos) pré-programadas para manipular uma ou mais válvulas de controle (ou outros elementos de controle final). Na prática, poucas colunas são controladas usando um controlador 5x5 completo. Em vez disso, é usado um sistema

descentralizado com controladores SISO, pois esse tipo de sistema é mais fácil de entender e sintonizar, é mais tolerante a falhas e menos sensível à operação da planta (Skogestad, 1990).

3.4 CONTROLE DA PRESSÃO DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO

Variações na pressão da coluna tornam o seu controle mais difícil de tal forma que a maioria dos sistemas de controle considera que as colunas de destilação operam a uma pressão constante. De acordo com Buckley *et al.* (1985), a maioria das colunas não precisa de um controle rígido da pressão e as únicas aplicações encontradas que usam esse controle rígido são esquemas de recuperação de calor, onde o calor de uma coluna serve de aquecimento médio para o refeedor de outra coluna ou serve para fornecer calor para outras correntes. No entanto, negligenciar o efeito da pressão sobre a dinâmica de qualquer sistema de destilação pode reduzir seu desempenho.

Segundo Kister (1990), a pressão é muitas vezes considerada a principal variável de controle da destilação. Essa variável afeta a condensação, vaporização, temperaturas, composições, volatilidades e quase todo processo que ocorre numa coluna de destilação. Um controle insatisfatório da pressão implica em um controle insatisfatório da coluna, a qual não atingirá um funcionamento estável, a menos que a pressão seja mantida constante. Portanto, essa variável deve ser emparelhada com a vazão manipulável da corrente que for mais eficiente para fornecer o seu melhor controle. Quando o produto de topo é um líquido, essa corrente é quase sempre a taxa de condensação; quando o produto de topo é um vapor, essa corrente é quase sempre a vazão do produto de topo.

De acordo com Skogestad (1997b), a dinâmica da pressão e seu efeito sobre o comportamento da coluna ainda não é bem entendido. Segundo o autor, a hipótese de pressão constante é muitas vezes justificada porque a pressão é rigorosamente controlada, mas como variações na pressão afetam o comportamento da composição através do ELV não tem sido cuidadosamente estudado. Por exemplo, um aumento na pressão irá normalmente reduzir a volatilidade relativa e tornar a separação mais difícil. Esse efeito será obviamente mais importante para separações difíceis com volatilidade relativa próxima de 1,0 e para colunas que operam a baixas pressões.

Pode ser visto que não existe uma interpretação comum sobre o efeito da pressão no comportamento de colunas de destilação. Segundo Liu e Jobson (1999), a influência dessa variável sobre o processo de destilação é muito complexa. Em seu trabalho, os

autores fornecem uma imagem clara e quantitativa da influência da pressão sobre o rendimento de uma coluna real. Seus resultados mostram que a influência da pressão sobre o diâmetro requerido para uma coluna de destilação é fortemente dependente da própria pressão. Em outras palavras, para diferentes sistemas de separação (separações fáceis ou difíceis, misturas binárias ou multicomponentes), uma variação na pressão possui uma influência similar sobre o diâmetro requerido da coluna. Apesar de o entendimento desses efeitos ser muito importante para o projeto de base ou de reformulação, nenhuma discussão é feita sobre o controle da pressão e sobre seu efeito no comportamento de colunas de destilação.

O controle da pressão da coluna é geralmente integrado ao sistema de condensação. Os controles da pressão e condensação precisam então ser considerados simultaneamente. No presente trabalho, foram simuladas e avaliadas três técnicas ou configurações de controle de pressão para a coluna estudada. As três configurações foram classificadas como: variações na vazão de vapor, variações na vazão do fluido de resfriamento e variações na vazão de topo da coluna. A descrição de cada método foi baseada no livro de Buckley *et al.* (1985):

- Variações na vazão de vapor - é um método simples e direto e geralmente é a melhor escolha quando a coluna possui um produto vapor. Nesse método, o controlador manipula diretamente a vazão de vapor e, portanto, a pressão da coluna.
- Variações na vazão do fluido de resfriamento - a pressão é controlada ajustando a vazão do fluido de resfriamento para o condensador. A resposta pode ser lenta ou não linear. Esse esquema pode promover incrustações com a água de resfriamento, particularmente durante a operação de baixo fluxo, quando a velocidade de resfriamento é baixa e a temperatura de saída é alta. Quando a temperatura é suficientemente alta, ela pode até ferver a água no condensador. No outro extremo, as velocidades muito baixas podem levar ao congelamento no inverno.
- Variações na vazão de topo da coluna - esse esquema representa um desperdício de energia a menos que exista uma diferença excessiva de temperatura entre o meio de aquecimento e resfriamento. Essa configuração requer que o vaso de refluxo esteja aberto a um reservatório de pressão constante. A válvula de controle requerida é grande e pode ser impraticável para vazões de topo muito altas. O sistema também requer uma área grande de condensação. A alta queda

de pressão possível nessas condições resulta em um controle lento, perda de sucção da bomba de refluxo e até mesmo na perda do controle. As vantagens desse sistema são a resposta rápida e a capacidade de rodar o condensador e o vaso de refluxo a uma pressão menor que a pressão da coluna. Esta última pode ser uma vantagem distinta quando a coluna é reformulada para operar a uma pressão maior.

3.5 CONTROLE DE COLUNAS COM RETIRADA LATERAL

O controle de colunas com retirada lateral não tem sido um assunto muito explorado atualmente. Enquanto essas colunas oferecem economias com a redução de capital e de custos operacionais, elas também representam problemas de controle desafiantes. Segundo Buckley *et al.* (1985), mesmo a coluna com retirada lateral mais simples, geralmente, é muito mais difícil de controlar que colunas convencionais com apenas duas correntes de produtos, além de terem menor flexibilidade e capacidade reduzida. Tyreus e Luyben (1975) comentam que o uso de colunas com retirada lateral na destilação de misturas binárias era pouco frequente no passado porque, com combustível pouco dispendioso, era muito mais prático e econômico usar um esquema de processamento ineficiente para obter dois produtos diferentes do que assumir as dificuldades de um controle simultâneo de três composições.

Colunas com retirada lateral vapor ou líquida possuem um grau de liberdade a mais e, a princípio, a concentração de um componente em cada uma das correntes de saída pode ser controlada. O controle exato dessa pureza de correntes de produto requer um número de correntes e um número de variáveis manipuladas igual ao número de componentes (Buckley *et al.*, 1985). Normalmente, as composições dos três produtos seriam controladas usando as três variáveis "normais" manipuladas: vazão do destilado, vazão da retirada lateral e vazão de vapor que retorna para a coluna. No entanto, quando a vazão de uma retirada lateral deve atender a uma demanda, por exemplo, seu valor deve ser controlado e não pode ser usada como uma variável manipulada. Dessa forma, se é desejado o controle das composições de todas as três correntes de produto, outra variável manipulada deve ser usada além das vazões de destilado (D) e de vapor (V).

A operação de uma coluna com apenas uma corrente lateral, de forma segura e estável com a qualidade dos produtos garantida, envolve um sistema de controle 7×7 , com sete variáveis manipuladas e sete variáveis controladas. O controle ideal deve levar

em conta todas as informações disponíveis (medições e processo), as incertezas esperadas (distúrbios) e manipular todas as sete entradas (L , D , V , B , vazão da corrente lateral, refluxo da corrente lateral e válvula de pressão) a fim de manter as sete saídas (níveis dos vasos de topo, de corrente lateral e de base, pressão e composições dos produtos de topo, de base e da corrente lateral) o mais próximo possível dos valores desejados.

Glinos e Malone (1985b) exploraram características de colunas de destilação com retirada lateral no regime estacionário e discutiram qualitativamente várias estratégias de controle. As análises RGA foram usadas para comparar os vários esquemas de controle e para avaliar seu desempenho do ponto de vista do regime estacionário. Apesar das análises não permitirem a escolha da melhor alternativa, elas permitem eliminar várias alternativas de controle que não são aceitáveis.

Para ganhar mais um grau de liberdade no controle de composição, Doukas e Luyben (1978) apresentaram a ideia de mudar a localização do prato da retirada lateral. Tyreus e Luyben (1975) também testaram um esquema eficiente de controle em que a composição da corrente lateral foi controlada manipulando a sua localização. Segundo Demicoli e Stichlmair (2004), a posição da retirada lateral determina o tamanho relativo das duas seções da coluna. Deslocando a retirada lateral para cima, a seção de cima se torna menor e a pureza dos produtos mais leves diminui, enquanto que a dos mais pesados aumenta.

Papastathopoulou e Luyben (1991) apresentaram o estudo da dinâmica e a análise de várias configurações de controle para uma grande coluna industrial que separa uma mistura binária de propileno e propano em três produtos: um destilado com propileno de alta pureza, uma retirada lateral líquida com propileno de pureza intermediária e um produto de fundo com propano. Os autores concluem que a estrutura mais eficaz depende dos objetivos de controle. Por exemplo, existem situações em que o controle da composição do destilado é mais importante e existem situações em que o controle da composição da retirada lateral é a prioridade. Inicialmente, foram usados alguns índices do estado estacionário para a triagem das alternativas de controle. As estruturas mais promissoras foram avaliadas no modelo dinâmico. Em suas análises, também foi incluída a localização da retirada lateral como variável manipulada.

Bettoniet *al.* (2000) desenvolveu um controle avançado de uma coluna de destilação com retirada lateral que remove benzeno de uma corrente de gasolina reformada. Em seu trabalho, foi desenvolvida uma estratégia de controle

multivariável baseada em dois esquemas SISO, cada um controlando a concentração de benzeno em uma corrente de saída. A dissociação entre as duas malhas individuais foi obtida mantendo constante o refluxo interno entre o prato da retirada lateral e o prato da base. Foi feita a escolha da melhor configuração de controle (usando uma análise RGA) e uma estratégia efetiva de dissociação. Em seguida, foi aplicado um estimador inferencial com base em um modelo do regime estacionário.

Fieg (2002) descreveu um conceito de controle de composição de todas as correntes de produto de uma coluna de destilação com uma retirada lateral líquida. No seu trabalho, todas as composições dos produtos são determinadas por cromatógrafos de gás *online* e são caracterizadas por elevados tempos mortos. O problema resultante do controle *feedback* de dados de amostra foi investigado por meio de um simulador dinâmico.

Em alguns trabalhos, a coluna com retirada lateral usada como caso de estudo realizava a separação de misturas binárias (Tyreus e Luyben, 1975; Papasthopoulou e Luyben, 1991). Outros trabalhos trataram colunas com retirada lateral que separavam misturas multicomponentes (Doukas e Luyben, 1978; Bettoniet *al.*, 2000; Glinos e Malone, 1985b; Fieg, 2002). Dentre eles, Tyreus e Luyben (1975), Papastathopoulou e Luyben (1991), Bettoniet *al.* (2000) e Fieg (2002) foram aqueles que incluíram o estudo da dinâmica do processo para a escolha da melhor estratégia de controle, mas nenhum dos trabalhos citados realizou o estudo do controle da pressão para colunas com retirada lateral.

4 MODELAGEM MATEMÁTICA DE COLUNAS DE DESTILAÇÃO

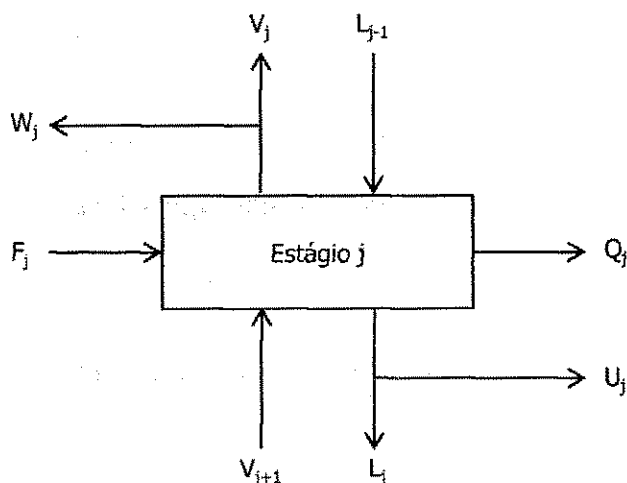
4.1 MODELAGEM EM REGIME ESTACIONÁRIO

A modelagem de uma coluna de destilação é feita a partir do desenvolvimento de um modelo matemático para um estágio de equilíbrio. Na destilação, estágio de equilíbrio é aquele onde a corrente líquida entra em contato com a corrente vapor e essas duas fases atingem o completo equilíbrio, podendo as relações termodinâmicas serem usadas para determinar as composições das correntes que deixam o estágio.

No caso de uma coluna com N estágios, a seqüência de estágios de equilíbrio é definida como cascata de N estágios em contracorrente e as equações resultantes do modelo formam as chamadas equações MESH, que são os balanços de massa, as relações de equilíbrio, o somatório das frações molares e os balanços de energia.

A Figura 4.1 apresenta o esquema de um estágio de equilíbrio (estágio j), que é alimentado por uma corrente de vazão F_j , composição $z_{i,j}$, temperatura T_{Fj} , pressão P_{Fj} e entalpia h_{Fj} . Também é alimentado pelo líquido do estágio $j-1$ e pelo vapor do estágio $j+1$ nas respectivas composições, temperaturas e pressões. O vapor que deixa o estágio j se divide em uma saída lateral de vazão W_j e uma corrente interna de vazão V_j , que alimenta o estágio $j-1$. Já o líquido que deixa o estágio se divide em uma saída lateral de vazão U_j e uma corrente interna de vazão L_j , que alimenta o estágio $j+1$. O calor transferido do estágio ou para o estágio é representado por Q_j .

Figura 4.1 - Esquema geral de um estágio de equilíbrio.



As equações MESH são então escritas em termos das variáveis que aparecem na Figura 4.1:

Equações M – Balanço de massa para cada componente (C equações para cada estágio):

$$M_{i,j} = L_{j-1}x_{i,j-1} + V_{j+1}y_{i,j+1} + F_j z_{i,j} - (L_j + U_j)x_{i,j} - (V_j + W_j)y_{i,j} = 0 \quad (4.1)$$

Equações E – Relações de equilíbrio de fases para cada componente (C equações para cada estágio):

$$E_{i,j} = y_{i,j} - K_{i,j}x_{i,j} = 0 \quad (4.2)$$

Equações S – Somatórios das frações molares (uma equação para cada estágio):

$$(S_y)_j = \sum_{i=1}^c y_{i,j} - 1 = 0 \quad (4.3)$$

$$(S_x)_j = \sum_{i=1}^c x_{i,j} - 1 = 0 \quad (4.4)$$

Equação H – Balanço de energia (uma equação para cada estágio):

$$H_j = L_{j-1}h_{L_{j-1}} + V_{j+1}h_{V_{j+1}} + F_j h_{F_j} - (L_j + U_j)h_{L_j} - (V_j + W_j)h_{V_j} - Q_j = 0 \quad (4.5)$$

Cada estágio de equilíbrio é definido por $2C + 3$ equações MESH. Uma cascata de N estágios em contracorrente, mostrada na Figura 4.2, é representada por $N(2C + 3)$ equações. Em termos de variáveis, se fixarmos a alimentação, os valores de F_j , $z_{i,j}$, T_{F_j} , P_{F_j} serão conhecidos e o estágio é definido pelas variáveis $x_{i,j}$, $y_{i,j}$, L_j , V_j e T_j . Uma cascata com N estágios é então definida por $N(2C + 3)$ variáveis, além das cargas térmicas do refeedor e condensador. Dessa forma, o número de graus de liberdade é dado por: $[N(2C + 3) + 2 - N(2C + 3)] = 2$, o que significa que o sistema é indeterminado por dois. Sendo assim, é necessário especificar duas variáveis para tornar o sistema determinado. No cálculo do número de graus de liberdade acima, admite-se que as cargas térmicas dos demais pratos e as vazões de retirada lateral são conhecidas.

4.2 MODELAGEM EM REGIME TRANSIENTE

Na modelagem de colunas no regime transiente, as equações MESH não são igualadas a zero, ou seja, são considerados os acúmulos de massa e energia em cada estágio. Por conseguinte, o modelo matemático que descreve o comportamento dinâmico de uma coluna de destilação é composto por equações diferenciais e equações algébricas. As equações diferenciais são provenientes do balanço global de massa e energia em cada prato, balanço global de energia no refeedor e do balanço parcial para cada componente em cada prato. As equações algébricas são obtidas das relações de equilíbrio e hidráulica.

Considerando a cascata da Figura 4.2, foram escritas as equações diferenciais para o modelo prato-a-prato completo e rigoroso:

Balanço global para o prato j :

$$\frac{d}{dt}(M_j) = L_{j+1} + V_{j-1} - L_j - V_j + F_j^L + F_j^V - W_j^V - W_j^L \quad (4.6)$$

Balanço de massa para o componente i no prato j :

$$M_j \frac{d}{dt}(x_{i,j}) = L_{j+1}x_{i,j+1} + V_{j-1}y_{i,j-1} - L_jx_{i,j} - V_jy_{i,j} + F_j^Lx_{i,j}^F + F_j^Vy_{i,j}^F - W_j^Vy_{i,j} - W_j^Lx_{i,j} - x_{i,j} \frac{d}{dt}(M_j) \quad (4.7)$$

Balanço global de energia no prato j :

$$M_j \frac{d}{dt}(h_j) = L_{j+1}h_{L,j+1} + V_{j-1}h_{V,j-1} - L_jh_{L,j} - V_jh_{V,j} + F_j^Lh_{L,j}^F + F_j^Vh_{V,j}^F - W_j^Vh_{V,j} - W_j^Lh_{L,j} - h_j \frac{d}{dt}(M_j) \quad (4.8)$$

O modelo dinâmico de uma coluna também apresenta dois graus de liberdade e, normalmente, são fixadas a vazão de refluxo e a vazão de vapor para o refeedor.

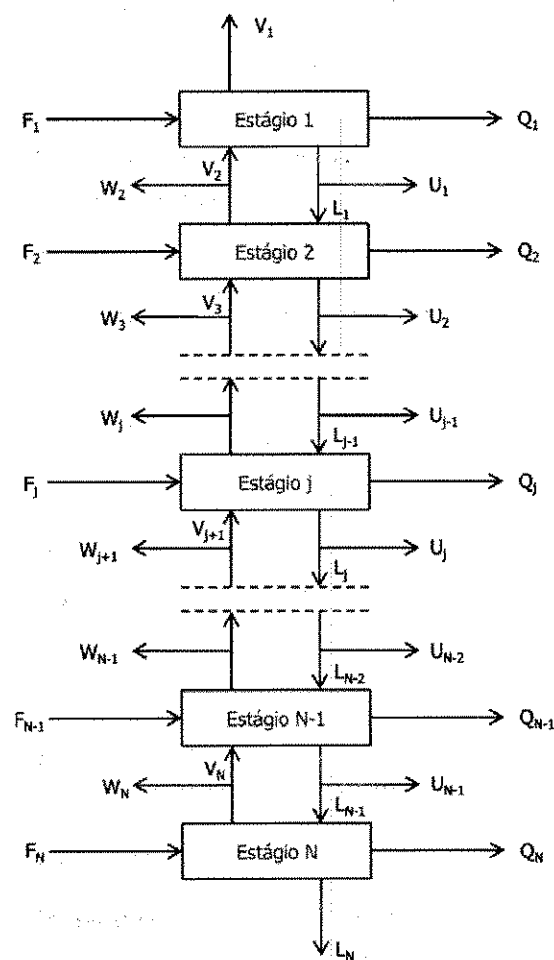
A presença de equações diferenciais e algébricas simultaneamente faz com que se tenha um sistema de difícil resolução. Para complicar mais ainda, a taxa de variação

da composição é muito menor que a taxa de variação de entalpia. A presença de equações diferenciais rápidas e lentas dá origem ao chamado sistema rígido (*stiff*) (Brito, 1997).

Visando a redução no tempo computacional, algumas simplificações podem ser feitas como considerar constantes os *holdups* no refeedor e condensador e considerar desprezível o *holdup* molar da fase vapor em todos os pratos. Outras simplificações consistem em considerar o *holdup* de líquido constante, considerar o balanço de energia na forma algébrica e desprezar o balanço de energia.

Quando o *holdup* da fase líquida é variável com o tempo e ao longo da coluna e o balanço de energia está na forma algébrica, as vazões de líquido que deixam um prato podem ser calculadas a partir da quantidade de líquido que chega nesse prato. As vazões de vapor são calculadas através do balanço de energia.

Figura 4.2 - Cascata de estágios em contracorrente.



Quando a pressão em cada prato não é considerada constante, é necessário incluir o balanço de energia na sua forma diferencial, isto é, considerar o acúmulo de energia em cada prato. Nesse caso, a vazão de vapor que deixa o prato, não pode ser calculada através do balanço global de energia, pois o mesmo se encontra na forma diferencial. A vazão de vapor é calculada a partir da "hidrodinâmica do vapor" (Brito, 1997).

Para o modelo de prato no estado transiente, geralmente o *holdup* da fase vapor é considerado desprezível em virtude do valor da pressão utilizado nas simulações. Para os modelos matemáticos que não consideram o *holdup* da fase líquida de cada prato constante, é necessário utilizar uma equação que relacione o *holdup* de líquido do prato com a vazão de líquido que deixa este prato. Essa relação pode ser obtida pela equação de Francis (4.9). A especificação do prato é conseguida através da fixação da altura do vertedouro, h_w , comprimento do vertedouro, L_w , e diâmetro do prato, D . Para todos os modelos, a equação de Francis é utilizada para calcular o *holdup* da fase líquida inicial e, para aqueles modelos que consideram o *holdup* da fase líquida variável, a equação de Francis também é utilizada para calcular a vazão de líquido.

$$L_j = L_{w,j} 1,839 h_{ow}^{1,5} \quad (4.9)$$

L_j - fluxo volumétrico do líquido (m^3/s).

$L_{w,j}$ - comprimento do vertedouro (m).

1,839 - constante do vertedouro.

h_{ow} - altura do líquido acima da altura do vertedouro.

Para calcular o h_{ow} , inicialmente, deve-se transformar o *holdup* molar em *holdup* volumétrico. Em seguida, divide-se o *holdup* volumétrico pela área do prato para obter a altura total de líquido no prato. O valor de h_{ow} é então obtido subtraindo o valor da altura do vertedouro, h_w , da altura total do líquido.

Quando o modelo considera a pressão em cada prato variável com o tempo, o balanço global de energia aparece na forma diferencial e não pode ser usado para calcular a vazão de vapor que deixa o prato. Nesse caso, a vazão de vapor é calculada a partir da perda de carga quando o prato está vazio e a partir da perda de carga causada pela altura de líquido no prato, conforme as equações (4.10) e (4.11).

$$P_{j-1} - P_j = \rho_{L,j}(h_{w,j} + h_{ow,j}) + K_{dh,j}\rho_{V,j-1}v_j^2 \quad (4.10)$$

$$V_j = v_j\rho_{V,j}A_h \quad (4.11)$$

4.3 MODELO TERMODINÂMICO

O equilíbrio líquido-vaporé o processo físico que governa a destilação e outros processos de separação. As equações do equilíbrio líquido-vapor são equações algébricas, resolvidas através de modelos, que devem levar em conta as forças que agem sobre as moléculas do sistema (forças de atração e repulsão). Dessa forma, antes de realizar os cálculos de processo, é necessário escolher um modelo capaz de descrever essas propriedades termodinâmicas (chamadas de *PhysicalPropertyMethods* no *Aspen Plus*).

Considerando uma mistura de dois ou mais componentes a uma temperatura em que a pressão de vapor seja significativa, a composição da mistura na fase vapor é diferente da composição da mistura na fase líquida. É aproveitando-se dessa diferença que é possível separar a mistura em dois componentes. Para calcular esse fenômeno, é fundamental determinar quantidades termodinâmicas como os coeficientes de fugacidade e de atividade, que são propriedades que representam a não idealidade do fluido devido às forças intermoleculares.

Quando o vapor e o líquido de uma mistura estão em equilíbrio, as frações molares de cada componente na fase líquida e na fase vapor podem ser relacionadas pela equação (4.12):

$$y_i = K_i x_i \quad (4.12)$$

A equação (4.12) deriva de outra equação definida como:

$$K_i = \frac{\gamma_i f_i^0}{\varphi_i p} \quad (4.13)$$

Onde γ_i é o coeficiente de atividade, f_i^0 é a fugacidade do componente puro, φ_i é o coeficiente de fugacidade na fase vapor, e p é a pressão total. Um caso especial da equação (4.13) acontece quando o líquido é uma mistura ideal e os coeficientes de atividade são

iguais a 1.0 e, quando a pressão é baixa (menor que 11,5atm), a fase vapor é essencialmente um gás ideal e o coeficiente de fugacidade do vapor é também igual a 1.0. Também a baixas pressões, a fugacidade do líquido no estado padrão é igual à pressão de vapor (p_i). Com essas hipóteses, a equação (4.13) se transforma na equação (4.14):

$$K_i = \frac{p_i}{p} \quad (4.14)$$

Nesse caso especial, os valores de K podem ser calculados conhecendo a pressão de vapor como uma função da temperatura e conhecendo a pressão total do sistema.

Para os casos em que γ_i e ϕ_i não são iguais a 1.0 (misturas não ideais), seus valores são encontrados a partir das equações de estado (modelos termodinâmicos). As equações de estado cúbicas são as equações mais simples capazes de representar o comportamento tanto de líquidos quanto de vapores. Duas equações cúbicas amplamente utilizadas para cálculos de ELV são a equação de *Soave-Redlich-Kwong* e a equação de *Peng-Robinson* (Smith et al., 2000).

O *Aspen Plus* recomenda usar os modelos *Peng-Robinson* ou *Soave-Redlich-Kwong* para sistemas de hidrocarbonetos e gases leves sob condições moderadas. Se a mistura contém componentes polares, são recomendados os métodos de *Wilson*, *NRTL* ou *UNIFAC* para o cálculo das propriedades do líquido. Esses métodos podem ser combinados com os métodos do gás ideal ou *Redlich-Kwong*. Para outras situações, outros métodos podem ser indicados.

Devido à pressão (moderada) de operação da coluna estudada e a mistura a ser separada ser uma mistura de hidrocarbonetos, foi utilizado o modelo *Peng-Robinson* (4.15) para o cálculo das propriedades termodinâmicas tanto para a fase líquida como para a fase vapor. O modelo se ajustou bem aos dados de projeto.

$$P = \frac{RT}{V_m - b} - \frac{a}{V_m(V_m + b) + b(V_m - b)} \quad (4.15)$$

R - constante dos gases ideais

P - pressão

T - temperatura

a e b - valores da mistura, relacionados aos a_i e b_i através de regras de mistura

V_m - volume molar

5 SIMULAÇÃO DO PROCESSO

A simulação de um processo real fundamenta-se na recriação do seu comportamento de modo que este possa ser entendido e que estratégias de operação possam ser avaliadas.

Segundo Perry *et al.* (1999), a simulação de processos refere-se à atividade em que modelos matemáticos de processos químicos são desenvolvidos por meio de equações, geralmente usando o computador. Nesse sentido, o primeiro passo da simulação consiste em descrever os balanços de massa e energia para um dado processo, levando em conta a distinção entre os modelos do estado estacionário e do estado transiente.

5.1 SIMULAÇÃO EM REGIME ESTACIONÁRIO

Um sistema sob simulação é considerado estar em regime estacionário se o seu comportamento é independente das condições iniciais e imutável com o tempo, ou seja, se um sistema está em regime permanente (regime estacionário), o comportamento recentemente observado continuará no futuro. Já um sistema é dito estar em regime transiente quando uma variável de processo é mudada e o regime estacionário ainda não é alcançado. No regime transiente, variáveis como temperatura e composição mudam com o tempo, logo, as equações que as relacionam são equações diferenciais resolvidas a partir de valores iniciais conhecidos. Dessa forma, o primeiro passo para o entendimento do comportamento dinâmico de uma coluna de destilação consiste em dispor do seu comportamento em regime estacionário como uma estimativa inicial.

O processo em estudo é composto por uma coluna de recuperação de insumos, chamada de coluna de pesados, com três alimentações, uma retirada lateral e 41 estágios, incluindo o refulvador do tipo *kettle*. Uma coluna convencional apresenta dois graus de liberdade e um grau a mais para cada retirada lateral. Logo, a coluna em questão apresentaria três graus de liberdade. No entanto, a mesma foi simulada usando o modelo *reboiledabsorption*, no qual a liberdade é reduzida à unidade devido à ausência do condensador. Assim, o número de graus de liberdade da coluna simulada é igual a dois.

Na simulação, são considerados 14 componentes: hidrogênio, nitrogênio, metano, etileno, etano, propano, n-butano, isobutano, hexeno, n-hexano, n-heptano, água, e os oligômeros n-octano e 2-metil-heptano. Porém, os componentes que têm maior representatividade na composição são o isobutano, o hexeno e o etileno.

A alimentação da coluna é feita por duas correntes (uma vapor e uma líquida) provenientes do reator de polimerização. O isobutano e o etileno são retirados no topo da coluna e são parcialmente condensados e enviados para um vaso *flash*, que dá origem ao destilado vapor e ao destilado líquido. O mesmo vaso também é alimentado por uma corrente externa composta basicamente por isobutano líquido. Uma parte do destilado líquido é bombeada de volta para a coluna como refluxo; a outra parte é retirada como produto de topo e enviada com o destilado vapor para a coluna de leves, que separa o etileno do isobutano. O hexeno é retirado lateralmente no estágio 30, na região abaixo da alimentação. O produto de base é composto pelos oligômeros formados no reator.

A simulação do processo em estudo foi realizada utilizando a ferramenta *Aspen Plus*, versão 8.4. Foi utilizada a rotina *RadFrac*, modelo de destilação multicomponente rigoroso. O *Aspen* é uma ferramenta que integra diversos módulos para simulação, análise e avaliação de desempenho. A interação do programa com o usuário é feita através de uma interface gráfica que serve como editor e também como meio de visualização dos resultados da análise. A operação deste simulador pode ser considerada relativamente simples e intuitiva, permitindo uma maior agilidade na modelagem, análise e compreensão dos resultados.

A construção do fluxograma do processo inicia-se abrindo um *template* no *Aspen Plus User Interface*. Nesse momento, surge uma janela em branco, onde estão disponíveis os ícones correspondentes às correntes e aos equipamentos. A sequência da construção do fluxograma é resumida abaixo:

- Na aba *Columns*, foi selecionada a rotina *RadFrac* e o modelo *STRIP1* para representar a coluna de pesados (C1630).
- Na aba *HeatExchangers*, a rotina *HEATER* foi usada para representar o condensador no topo da coluna. Essa rotina calcula ponto de bolha e de orvalho; remove ou adiciona calor, de acordo com a especificação do usuário, e determina a carga térmica de aquecimento ou de resfriamento para alcançar certa fração de vapor.

- Na aba *Separators*, foi selecionada a rotina *Flash2* e o modelo *V-DRUM1* para representar o vaso *flash*, que é alimentado pela corrente de topo da coluna.
- Na aba *PressureChangers*, a rotina *Pump* foi escolhida para definir a bomba que auxilia o refluxo da coluna.
- Na aba *Mixers/Splitters*, a rotina *FSplit* foi selecionada e o modelo *TRIANGLE* foi usado para representar o divisor que divide a corrente de base do vaso *flash* em refluxo e produto de topo.
- A conexão dos equipamentos foi feita com as correntes da aba *Material Streams*.

Após a montagem do fluxograma, os componentes presentes no processo simulado (Tabela 5.1) são selecionados no *menu Data | Components*.

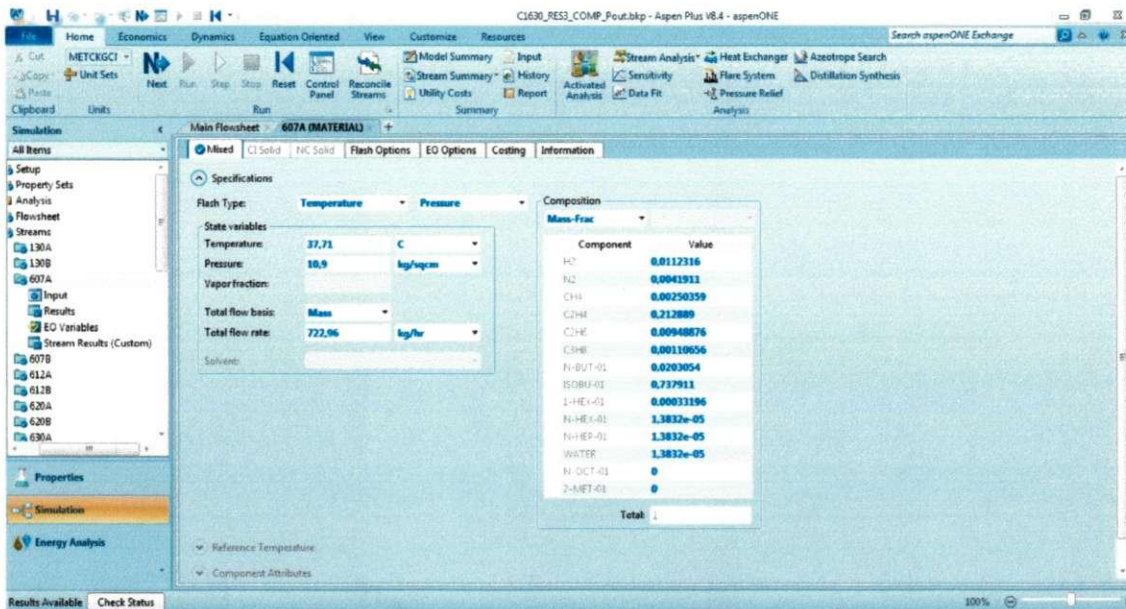
Tabela 5.1 - Componentes considerados na simulação do processo.

Componente	Fórmula
Hidrogênio	H ₂
Nitrogênio	N ₂
Metano	CH ₄
Etileno	C ₂ H ₄
Etano	C ₂ H ₆
Propano	C ₃ H ₈
n-butano	C ₄ H ₁₀ -1
Isobutano	C ₄ H ₁₀ -2
1-hexeno	C ₆ H ₁₂ -3
n-hexano	C ₆ H ₁₄ -1
n-heptano	C ₇ H ₁₆ -1
Água	H ₂ O
n-octano	C ₈ H ₁₈ -1
2-metil-heptano	C ₈ H ₁₈ -2

Em *Data | Properties* foi escolhido o modelo termodinâmico para o cálculo das propriedades termodinâmicas e representação do equilíbrio entre as fases. Em função do valor da pressão (moderada) de operação da coluna simulada, foi utilizado o modelo Peng-Robinson.

A especificação das correntes de alimentação da coluna, 607A e 612A, é mostrada nas Figuras 5.1 e 5.2, respectivamente. A corrente 130A que alimenta o vaso de refluxo foi especificada de acordo com a Figura 5.3. A definição dessas correntes é dada pelos valores de vazão, composição, temperatura e pressão. Os oligômeros n-octano e 2-metil-heptano não compõem a corrente de alimentação 607A.

Figura 5.1 – Especificação da corrente 607A.



Em *Tools | Next*, é possível seguir com as especificações de cada equipamento até que os dados requeridos de entrada estejam completos.

Na janela de especificação da coluna de pesados (C1630), na aba *Configuration*, foi definido o número de estágios igual a 41. Em *Condenser*, foi selecionada a opção *none* devido à coluna não possuir condensador. As fases válidas são vapor-líquido e, nas especificações de operação, foi definida a vazão da base igual a 26,43 kg/h, vazão usada na planta. Esses detalhes podem ser observados na Figura 5.4.

Figura 5.2 – Especificação da corrente 612A.

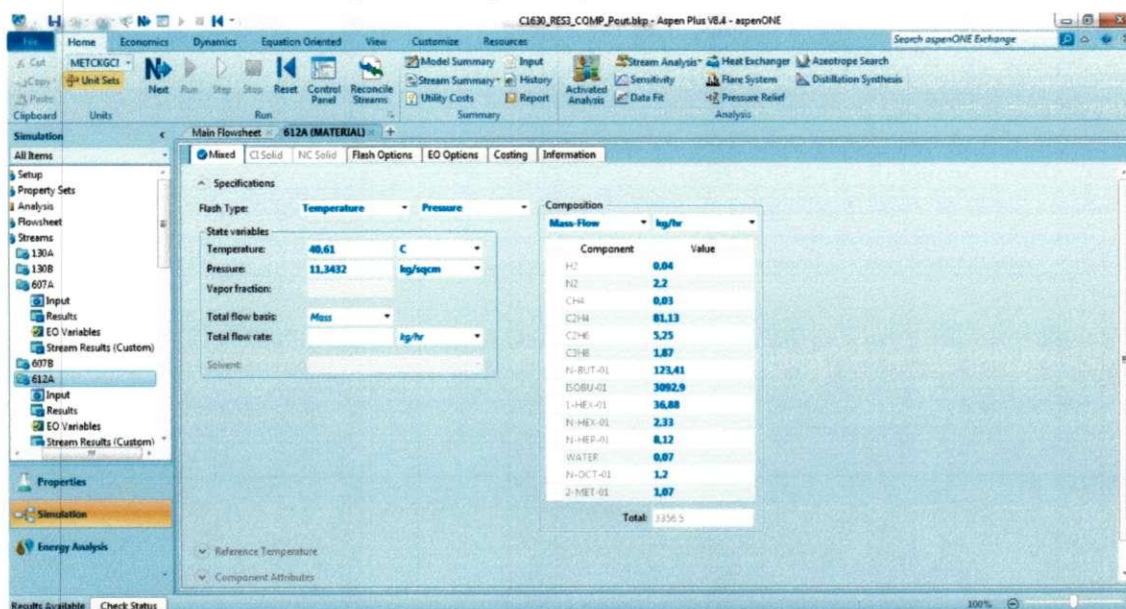
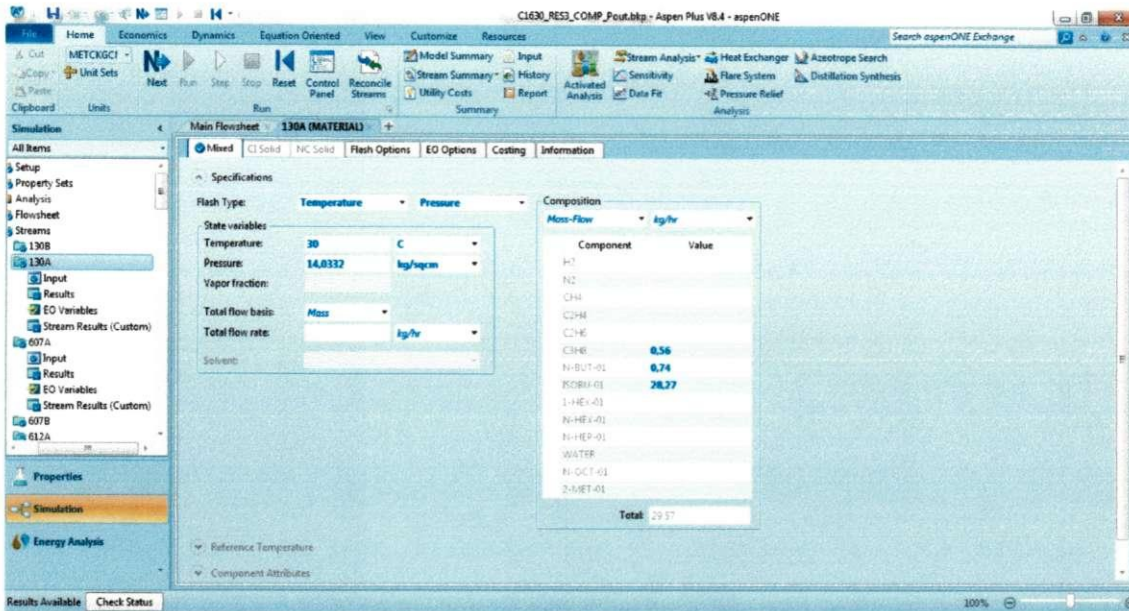
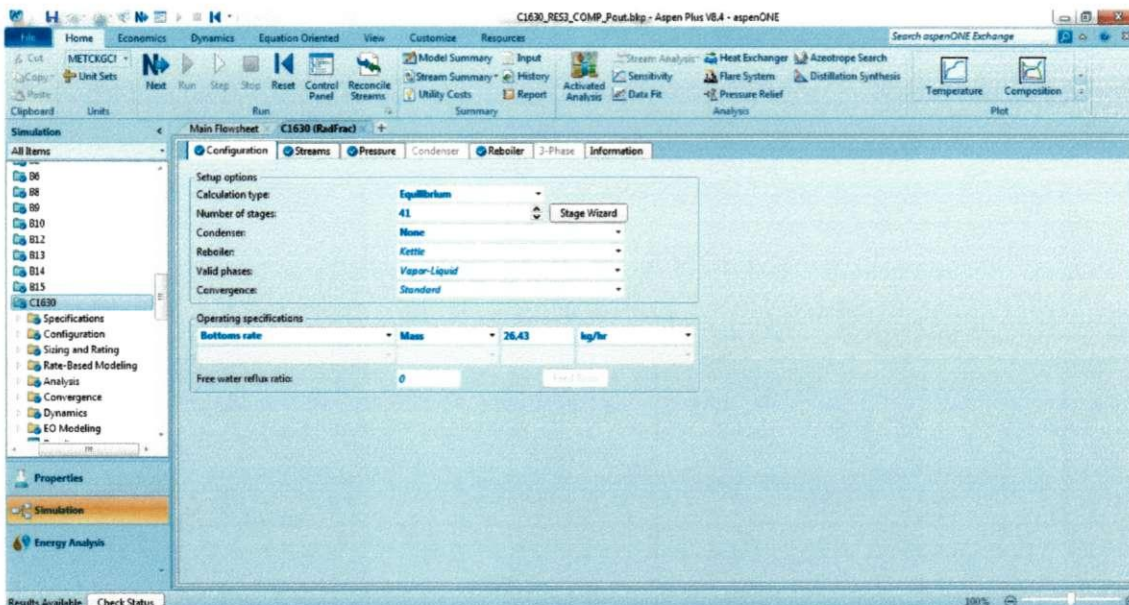


Figura 5.3 – Especificação da corrente 130A.



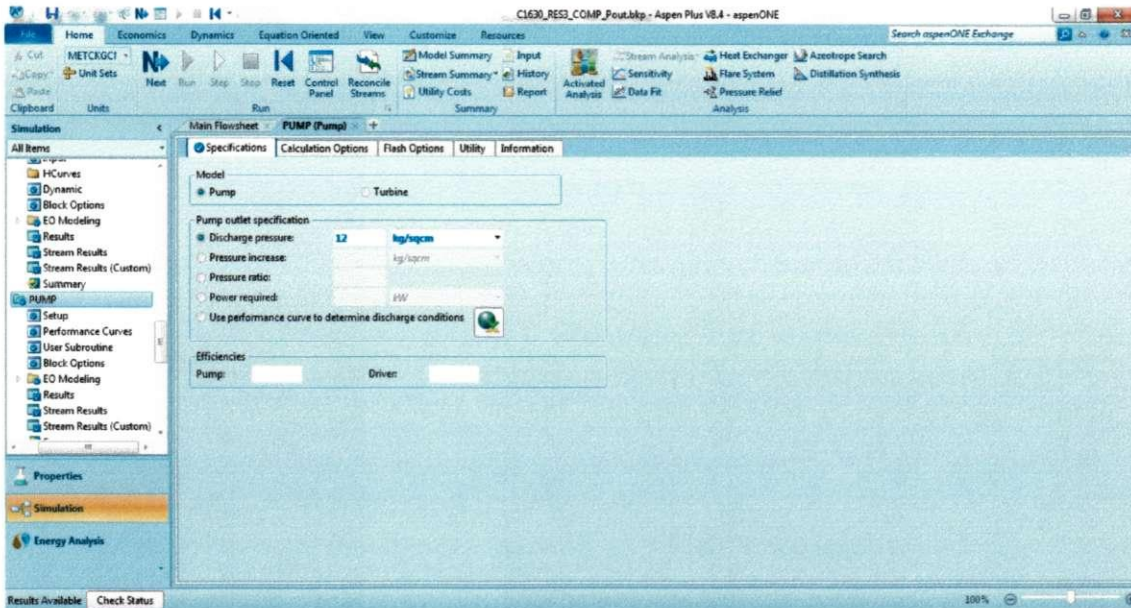
Na aba *Streams* da janela de especificação da coluna, foram especificados os estágios da alimentação, o estágio e a vazão da retirada lateral. As correntes 607A e 612A alimentam a coluna nos estágios 15 e 16, respectivamente. A retirada lateral é feita no estágio 30, com vazão igual a 23,55 kg/h. Na aba *Pressure*, as pressões de topo e variação de pressão da coluna foram definidas como 10,72 kg/cm² e 0,2 kg/cm², respectivamente.

Figura 5.4 – Especificação da coluna de pesados.



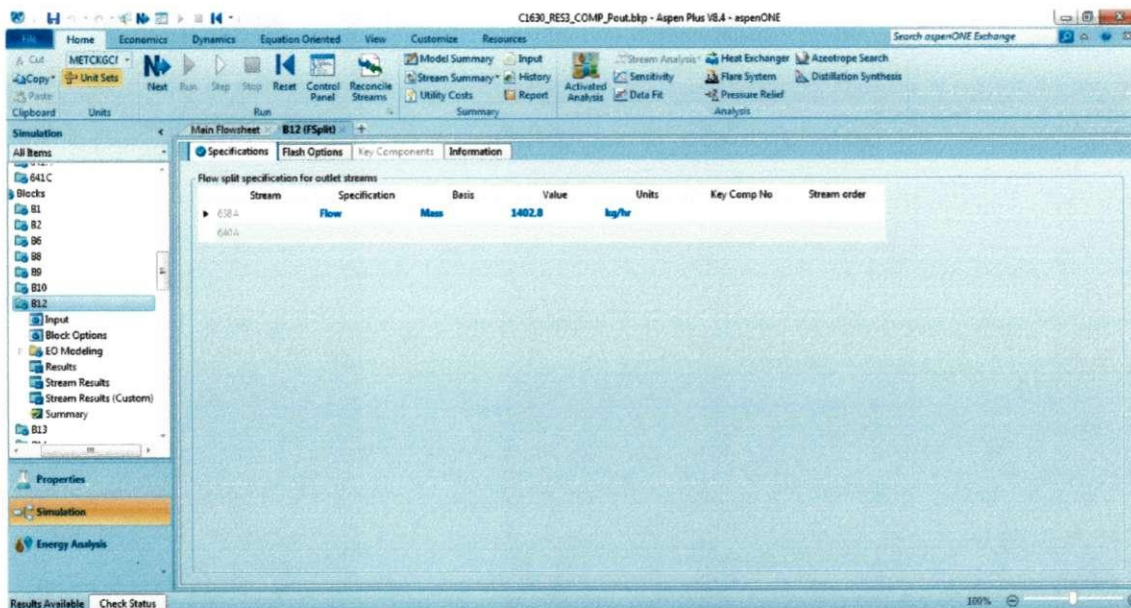
A condição de operação da bomba foi definida com sendo 12 kg/cm^2 de pressão de descarga, conforme a Figura 5.7.

Figura 5.7 - Especificação da condição operacional da bomba (PUMP).



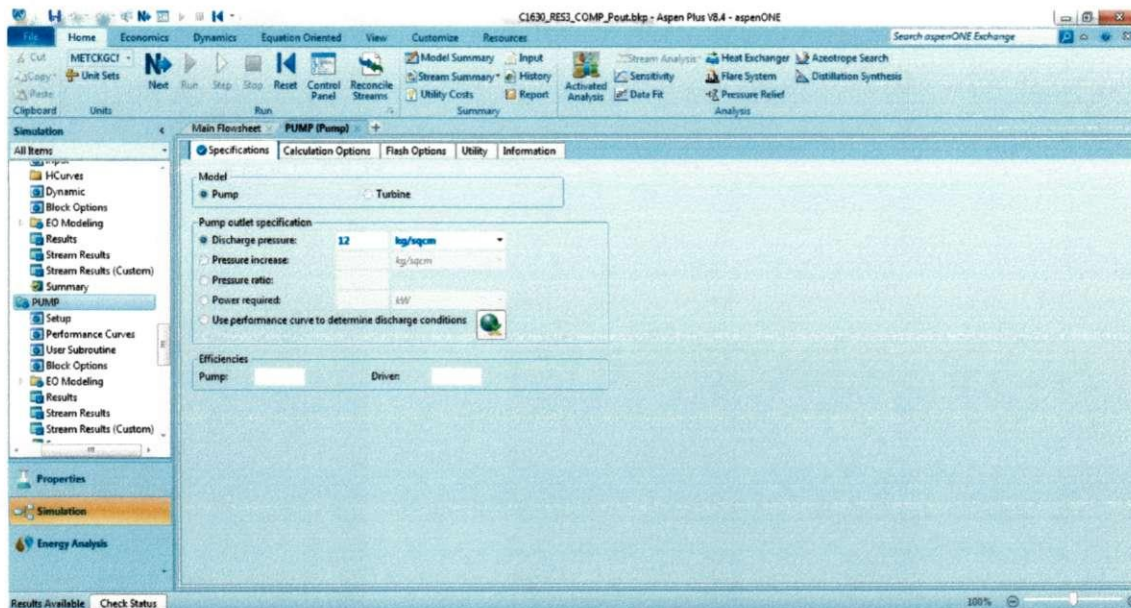
No divisor B12, equipamento que divide a corrente de base do vaso V1631 em refluxo da coluna e em destilado líquido, foi especificada a vazão da corrente que faz o refluxo, conforme a figura 5.8.

Figura 5.8 - Especificação do divisor, bloco B12.



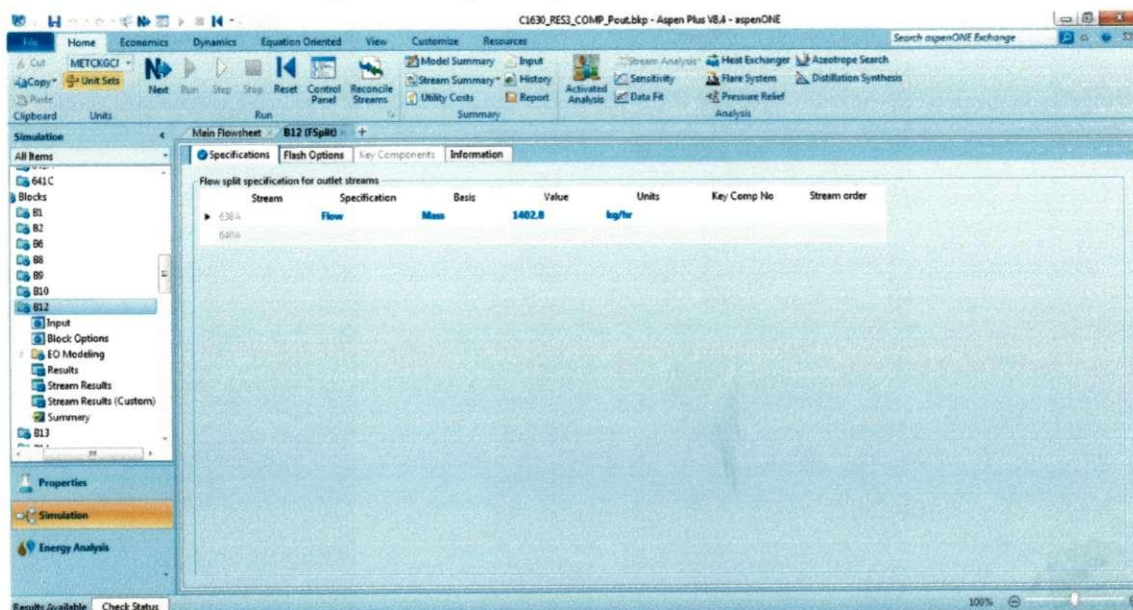
A condição de operação da bomba foi definida com sendo 12 kg/cm^2 de pressão de descarga, conforme a Figura 5.7.

Figura 5.7 - Especificação da condição operacional da bomba (PUMP).



No divisor B12, equipamento que divide a corrente de base do vaso V1631 em refluxo da coluna e em destilado líquido, foi especificada a vazão da corrente que faz o refluxo, conforme a figura 5.8.

Figura 5.8 - Especificação do divisor, bloco B12.



pressão das correntes de alimentação foi alterada configurando a pressão de saída das válvulas B8, B9 e B13. Após ajustar as pressões e rodar novamente a simulação, foi ativado o botão *Pressure Check* na barra de ferramentas. Como as pressões foram especificadas corretamente, a simulação estava pronta para ser exportada. O último passo consistiu em ativar o botão *Pressure Driven* (quarta opção da aba *Dynamics*), que envia finalmente a simulação para o *Aspen Dynamics*.

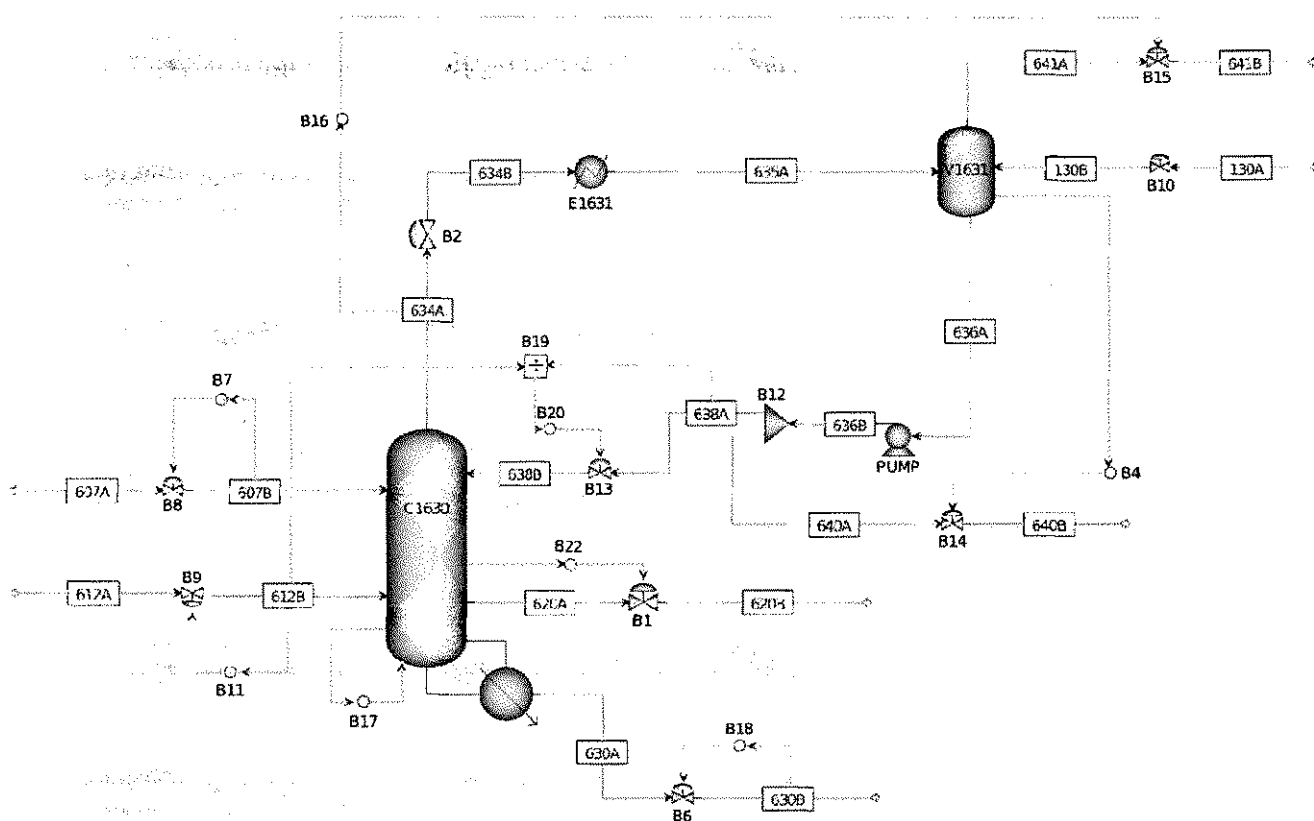
Quando as informações da simulação estacionária são exportadas para o *Aspen Dynamics*, são gerados dois novos arquivos: o *arquivo.dynf* e o *arquivo.appdf*. O primeiro é usado para abrir a simulação dinâmica e o segundo contém todas as informações das propriedades físicas usadas no *Aspen Dynamics*.

Ao abrir a simulação, na janela *Exploring*, são encontrados vários tipos de controladores, sinais de controle, correntes e outros elementos que podem ser adicionados ao fluxograma. Antes de adicionar qualquer controlador ou fazer alguma modificação, a simulação foi inicializada, rodando a simulação após selecionar a opção *Initialization* onde aparece *Dynamic* no topo da janela do programa. Também foi preciso verificar se o integrador estava funcionando corretamente, rodando a simulação, dessa vez, com a opção *Dynamic* selecionada.

Geralmente, a simulação aberta no *Aspen Dynamics* já possui alguns controladores instalados. Para essa simulação, apenas um controlador padrão foi instalado automaticamente, o controlador de nível da base da coluna. Ele é configurado para receber o sinal da medição de nível da base e manipular a vazão da retirada de fundo da coluna. No entanto, porque a vazão da base da coluna simulada é muito pequena, o nível da base é controlado manipulando a carga térmica do refeedor (vazão de vapor para o refeedor).

Controladores de vazão foram instalados nas correntes de alimentação, destilado, retirada lateral e base. A temperatura do prato 23 é controlada pela válvula (B1) que manipula a vazão da retirada lateral. O nível do vaso de refluxo é controlado pela vazão de destilado líquido e a vazão da base é fixa. A válvula de controle de pressão foi incluída após o vaso de refluxo (na planta, esse controle é realizado no topo da coluna de leves, que está diretamente ligada com o vaso de refluxo da coluna de pesados). A razão de refluxo é fixada como uma razão entre a vazão de refluxo e a vazão de alimentação líquida. O fluxograma com a configuração de controle usada atualmente é mostrado na Figura 5.10.

Figura 5.10 - Fluxograma com a configuração de controle usada atualmente.



5.3 MÉTODO DE RESOLUÇÃO DO ASPEN PLUS

Diversos algoritmos para a resolução das equações MESH no estado estacionário são propostos pela literatura. A maioria desses algoritmos resolve simultaneamente as equações usando o método de Newton modificado. O método usado pelo *Aspen Plus* é o método de Wegstein.

Como a coluna possui refluxo, os cálculos devem ser iniciados a partir desse bloco. A corrente de refluxo é inicialmente definida como sendo zero. Em seguida, os cálculos são feitos através do restante do processo até que seja calculado o valor da corrente de refluxo. Dessa forma, o valor calculado para essa corrente é diferente do valor definido inicialmente. Assim, o programa resolve outra iteração, e continua até que não haja mais mudanças entre os valores. O programa fornece informações sobre a convergência após rodar a simulação.

As iterações seguem a sequência dos blocos. Na primeira iteração, no bloco C1630 (Coluna), o refluxo tem valor inicial igual a zero, e o cálculo prossegue através dos próximos blocos, B2(válvula), E1631 (condensador), V1631 (vaso de refluxo), PUMP (bomba), B12 (divisor) e B13 (válvula). Nessa iteração, a soma das divisões no bloco B12 ainda não é igual a 1,0 e, não havendo concordância entre a entrada e a saída dos blocos, são necessárias mais iterações. Quando é atingida a convergência para a sequência C1630|E1631|V1631|PUMP|B12|B13, os cálculos continuam, são gerados os resultados para os demais blocos e a simulação é finalizada.

O método sequencial é um método simples, no entanto, ele pode não convergir. Técnicas de aceleração são usadas para aumentar as chances de convergência. O *Aspen Plus* dispõe de algumas dessas técnicas, como os métodos de Broyden, Newton, secante e Wegstein, que é o método padrão usado pelo programa.

Para aplicar o método de Wegstein, é necessário escrever o processo como a equação (5.1), onde x é a vazão do componente na corrente de reciclo, por exemplo, e $f(x)$ é o valor da vazão do componente na saída de um bloco (o mesmo que gera a corrente de reciclo), obtida depois do cálculo feito para a primeira iteração. O problema é então resolvido quando esses dois valores (x e $f(x)$) são iguais. Para um problema com mais de uma iteração, x^n é o valor de x após n iterações.

$$x = f(x) \quad (5.1)$$

$$x^{n+1} = f(x^n) \quad (5.2)$$

Esse processo iterativo é relativamente simples se a função $f(x)$ for uma série de funções avaliadas uma após a outra e se cada passo é um balanço de massa em um único bloco. O método de Wegstein calcula um valor provisório x^{n+1} e usa as duas últimas iterações para calcular um valor modificado, que posteriormente é usado como o novo valor x^{n+1} .

A derivação do método começa com a aplicação do método da secante à equação (5.1), dessa vez, escrita como uma nova função $F(x)$:

$$F(x) = x - f(x) \quad (5.4)$$

$$0 = F(x^n) + \frac{F(x^{n-1}) - F(x^n)}{x^{n-1} - x^n} [(x^*)^{n+1} - x^n] \quad (5.5)$$

onde

$$F(x^n) = x^n - f(x^n) = x^n - x^{n+1} \quad (5.6)$$

$$F(x^{n-1}) = x^{n-1} - f(x^{n-1}) = x^{n-1} - x^n \quad (5.7)$$

Combinando as equações (5.6) e (5.7) à equação (5.5),

$$(x^*)^{n+1} = \frac{x^{n-1}x^{n+1} - (x^n)^2}{x^{n-1} - 2x^n + x^{n+1}} \quad (5.8)$$

A equação (5.8) é exatamente o método de Wegstein. Esse método funciona com uma variável de cada vez e, algumas vezes, a convergência é reforçada pela aplicação de Wegstein apenas a cada tantas iterações ao invés de cada iteração.

5.4 MÉTODO DE RESOLUÇÃO DO ASPEN DYNAMICS

As variações com o tempo (acúmulos) de massa e energia consideradas na modelagem dinâmica de colunas de destilação dão origem às equações diferenciais, as quais podem ser resolvidas por meio de aproximações numéricas, que se dividem em métodos explícitos e implícitos. Os métodos explícitos calculam o estado do sistema num tempo posterior ao estado atual, enquanto que os implícitos encontram a solução resolvendo uma equação que envolve ambos estado atual e posterior do sistema. Estes últimos são usados em problemas em que o uso de um método explícito exigiria passos de tempo muito pequenos para manter a estabilidade numérica (precisão) do algoritmo.

Em soluções numéricas de equações diferenciais ordinárias, a solução y no ponto t^n é representada por y^n . O método mais simples é o método de Euler, que é obtido escrevendo uma expressão de diferença para a derivada de acordo com a equação (5.9).

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{\Delta t} = f(t^n, y^n) \quad (5.9)$$

Esse não é um método muito preciso, visto que é usada apenas a expressão da primeira derivada da equação (5.9). Além disso, os erros do método de Euler são proporcionais ao Δt e a estabilidade é difícil de ser alcançada. A única maneira de obter um método de Euler estável é usar um passo de tempo suficientemente pequeno.

Em muitos problemas, certos parâmetros variam de forma muito rápida enquanto outros variam de forma muito lenta. Por exemplo, na simulação de colunas de destilação, a taxa de variação da entalpia é muito maior do que a da fração molar. Essas diferenças entre as taxas de variação das variáveis tornam o sistema rígido (*stiff*), exigindo muitos intervalos de tempo a serem feitos com um passo muito pequeno, tornando os cálculos muito lentos. Para essas situações, os métodos implícitos são mais indicados.

O *Aspen Dynamics* usa como padrão o método de Euler implícito (5.10) para a solução numérica dos sistemas de equações diferenciais que surgem na modelagem dinâmica. Esse método é o mais simples da categoria dos métodos dos passos múltiplos. Ele continua sendo um método de primeira ordem, mas é estável para qualquer tamanho de passo.

$$\frac{y^{n+1} - y^n}{\Delta t} = f(t^{n+1}, y^{n+1}) \quad (5.10)$$

Parâmetros de integração tais como o intervalo de tempo de integração podem ser especificados no *Aspen Dynamics* e o passo de tempo de integração pode ser ajustado para aumentar a velocidade ou a estabilidade do sistema.

6 RESULTADOS NO REGIME ESTACIONÁRIO

A validação da simulação estacionária foi feita através da comparação entre os dados de projeto, fornecidos pela empresa, e os dados obtidos pela simulação (Tabela 6.1).

Tabela 6.1 - Comparação dos valores de projeto e dos valores simulados da C1630.

Tipo	Unidade	Corrente 620B		Corrente 630B		Corrente 640B		Corrente 641B	
		Valor de projeto	Valor Simulado	Valor de projeto	Valor Simulado	Valor de projeto	Valor Simulado	Valor de projeto	Valor Simulado
Vazão Mássica	kg/h								
Hidrogênio		0,00	0,00	0,00	0,00	0,27	0,27	7,89	7,89
Nitrogênio		0,00	0,00	0,00	0,00	0,34	0,36	4,89	4,88
Metano		0,00	0,00	0,00	0,00	0,30	0,30	1,55	1,54
Etileno		0,00	0,00	0,00	0,00	91,52	88,81	143,52	146,23
Etano		0,00	0,00	0,00	0,00	5,71	5,69	6,41	6,42
Propano		0,00	0,00	0,00	0,00	2,35	2,34	0,88	0,89
n-butano		0,02	0,03	0,00	0,00	121,79	121,89	17,02	16,91
Isobutano		0,12	0,10	0,00	0,00	3.096,06	3.094,80	558,46	559,77
1-hexeno		22,31	22,31	14,79	14,79	0,02	0,02	0,00	0,00
n-hexano		1,01	0,94	1,34	1,40	0,00	0,00	0,00	0,00
n-heptano		0,09	0,14	8,04	7,99	0,00	0,00	0,00	0,00
Água		0,00	0,00	0,00	0,00	0,02	0,07	0,06	0,09
Oligômeros		0,00	0,02	2,26	2,25	0,00	0,00	0,00	0,00
Vazão Mássica Total	kg/h	23,55	23,55	26,43	26,43	3.318,37	3.314,54	740,68	744,52
Vazão Molar Total	kmol/h	0,28	0,28	0,29	0,29	59,03	58,92	19,44	19,55
Temperatura	°C	160,3	157,1	175	175,4	37,78	38,1	37,78	35,1
Pressão	kg/cm ²	10,81	8,00	10,88	8,00	10,48	8,00	10,48	8,00

De acordo com a Tabela 6.1, os valores simulados no *Aspen* se aproximam muito ou são iguais aos dados de projeto, de forma que o modelo em regime estacionário obtido pôde ser usado como estimativa inicial para as simulações em regime transiente.

Foram plotados os perfis de temperatura e de composição do isobutano e hexeno nas condições de projeto. Analisando a inclinação do perfil de temperatura (Figura 6.1), o estágio que apresenta a maior mudança de temperatura de um estágio para outro é o 23. Isso indica que o estágio 23 é a região onde as composições dos componentes importantes estão mudando (Figura 6.2). Segundo a literatura, pelo "critério da

inclinação”, manter o valor da temperatura do prato localizado nessa região deve manter o perfil de composição da coluna.

Figura 6.1 - Perfil de temperatura da coluna de pesados.

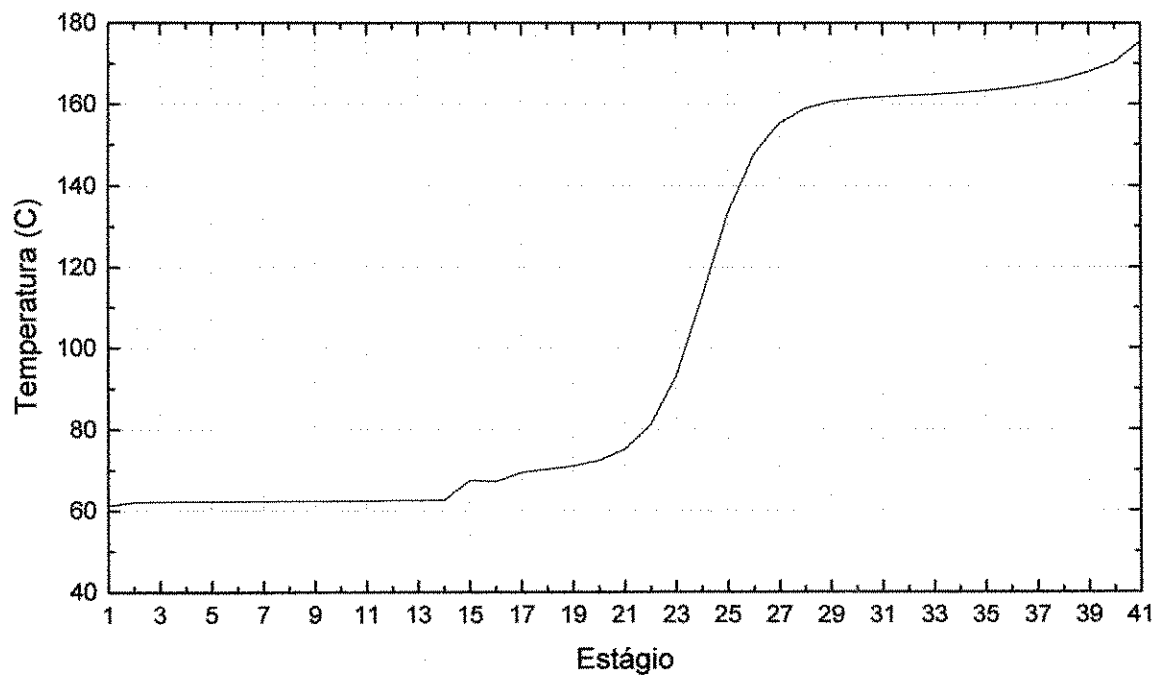
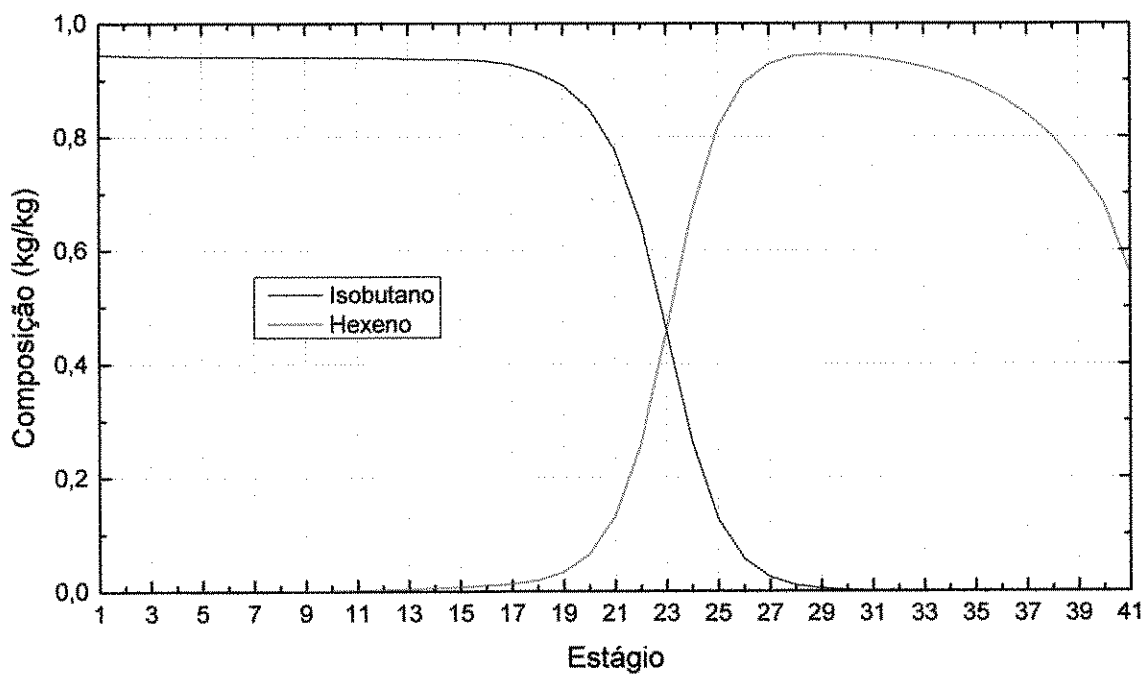
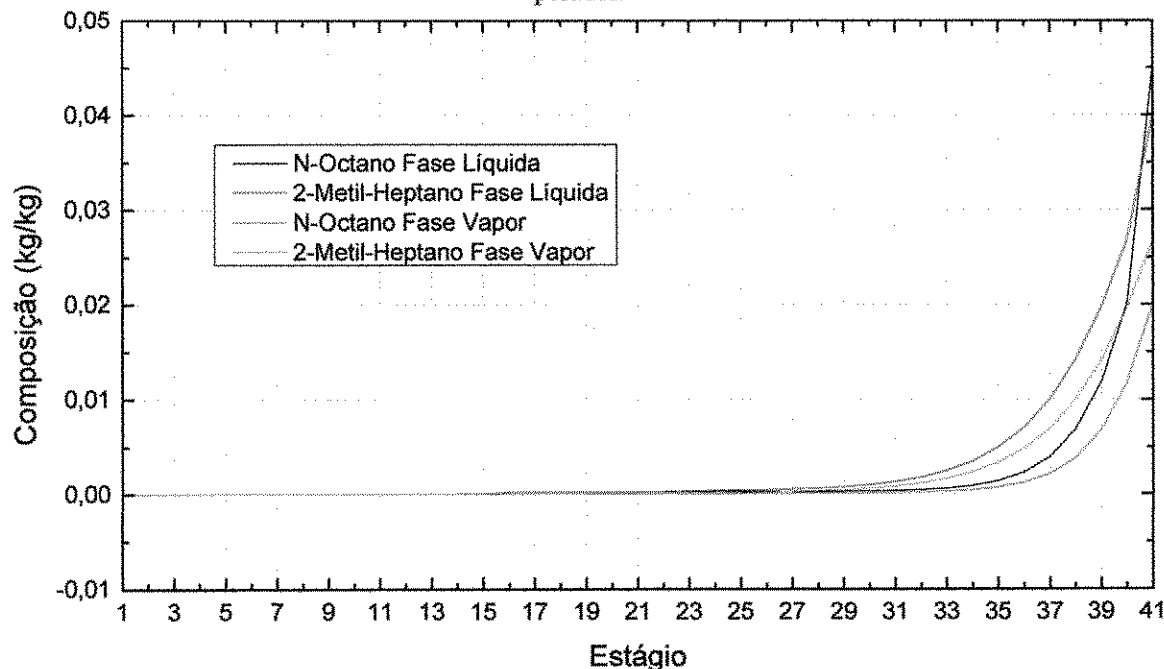


Figura 6.2 - Perfis de composição do isobutano e do hexeno ao longo da coluna de pesados.



A Figura 6.3 mostra o perfil de composição dos componentes pesados (n-octano e 2-metil-heptano). Percebe-se que as composições desses componentes na fase vapor são menores que as respectivas composições na fase líquida em todos os estágios abaixo do estágio da alimentação, justificando porque a corrente lateral é retirada como vapor e não como líquido.

Figura 6.3 - Perfis de composição do n-octano e do 2-metil-heptano (oligômeros) ao longo da coluna de pesados.



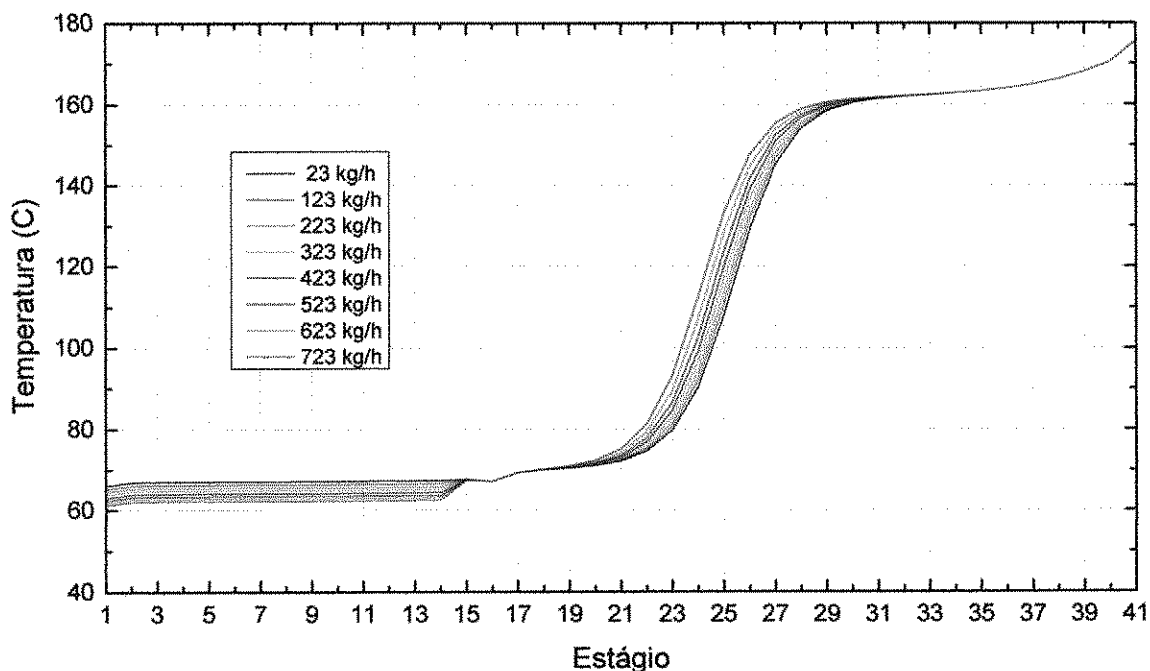
As análises da simulação em regime estacionário foram feitas modificando a vazão das alimentações líquida e vapor. Essas duas variáveis são relevantes para o processo, pois modificam o balanço de massa e têm influência significativa sobre os perfis da coluna.

A oscilação da vazão da retirada lateral é um problema frequentemente observado na unidade. Na planta, essa variável é manipulada em função do controle da temperatura do prato 23. Portanto, é essencial avaliar o efeito da vazão das alimentações líquida e vapor sobre o perfil de temperatura da coluna. O efeito sobre a composição do topo, da base e da retirada lateral também foi analisado.

A vazão da alimentação líquida (corrente 612A) foi variada de 2000 a 3356 kg/h (vazão de projeto) com intervalo de 200 kg/h. A vazão da alimentação vapor variou de 23 a 723 kg/h (vazão de projeto) com intervalo de 100 kg/h. Foi alterada uma vazão por vez, enquanto todas as outras variáveis foram mantidas constantes a cada simulação.

Observando as Figuras 6.4 e 6.5, percebe-se que há um deslocamento do perfil de temperatura, em função da mudança no perfil de composição. Nota-se também que a vazão da alimentação líquida exerce maior influência sobre o perfil de temperatura. O que era esperado, visto que a vazão da alimentação líquida é quase cinco vezes maior que a vazão da alimentação vapor e o distúrbio aplicado também é maior. Essa observação só é válida porque as duas correntes apresentam em maior composição o mesmo componente, o isobutano.

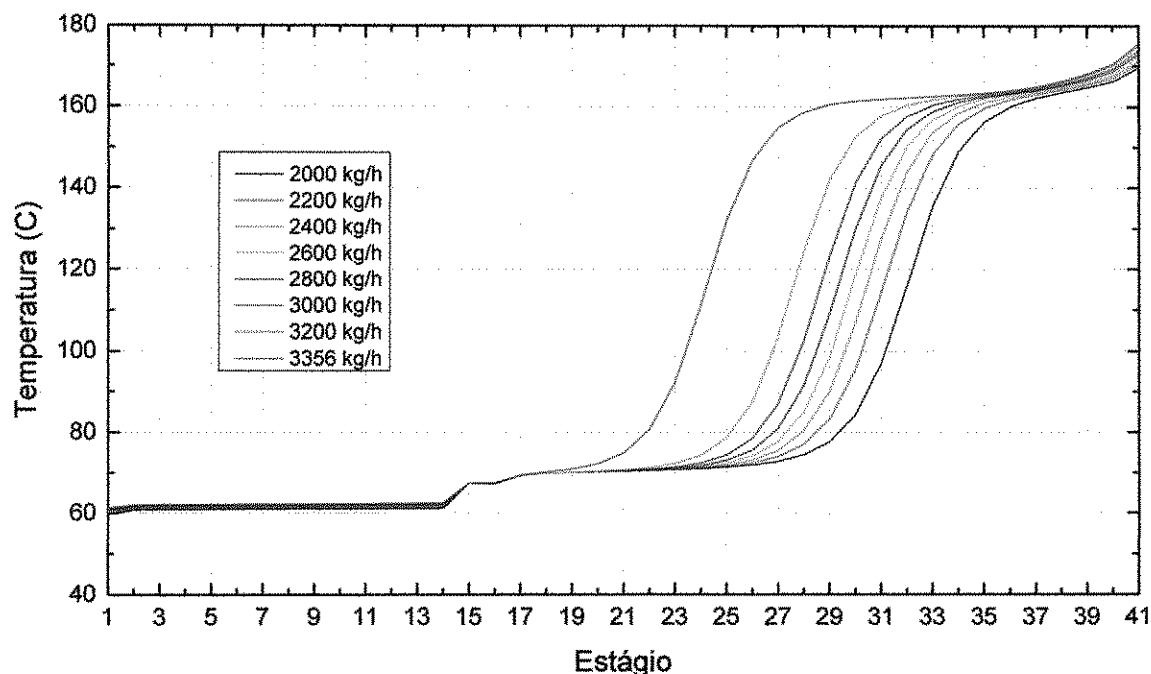
Figura 6.4 – Perfis de temperatura da coluna para variações na vazão da alimentação vapor.



Observando o comportamento da temperatura para variações na vazão da alimentação líquida, percebe-se que, nas regiões superior e inferior, a temperatura praticamente não muda, o que é coerente com os resultados da Figura 6.6 à Figura 6.11, as quais apresentam como região de maior transferência de massa exatamente a região da retirada lateral. Essa variação da temperatura na região da retirada lateral ocorre em função da diminuição da concentração do componente intermediário (hexeno) nessa região.

O comportamento da temperatura também indica que o prato cuja temperatura deverá ser controlada depende da vazão da alimentação.

Figura 6.5 - Perfis de temperatura da coluna para variações na vazão da alimentação líquida.



De forma quantitativa, apenas a composição da retirada lateral (Figuras 6.8 e 6.9) apresenta mudança significativa, principalmente para variações na alimentação líquida. Mas para uma análise qualitativa, a composição das outras correntes (topo e base) também sofre maior influência da vazão da alimentação líquida do que da alimentação vapor, conforme as Figuras 6.6, 6.7, 6.10 e 6.11.

A vazão da alimentação vapor está diretamente relacionada com a pressão da coluna. No entanto, nas simulações em regime estacionário, a pressão em cada prato da coluna e nos demais equipamentos é mantida constante. Talvez por essa razão o efeito da vazão da alimentação vapor sobre os perfis da coluna não tenha sido observado com a devida relevância nas simulações estacionárias. Dessa forma, a uso da simulação dinâmica é essencial para a avaliação do efeito da pressão sobre o comportamento do processo, como pode ser visto no próximo capítulo.

Figura 6.6 - Composição do hexeno no topo da coluna para variações na vazão da alimentação líquida e da alimentação vapor.

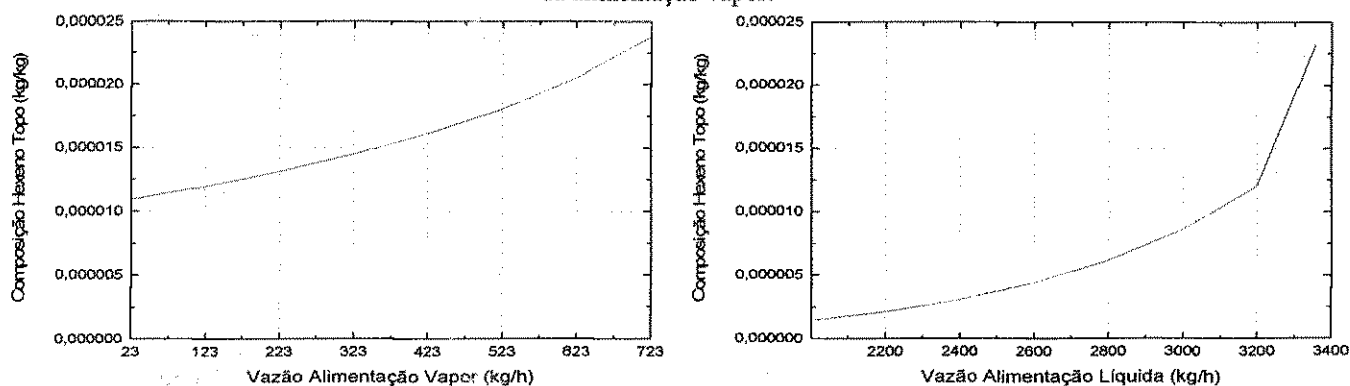


Figura 6.7 - Composição do isobutano no topo da coluna para variações na vazão da alimentação líquida e da alimentação vapor.

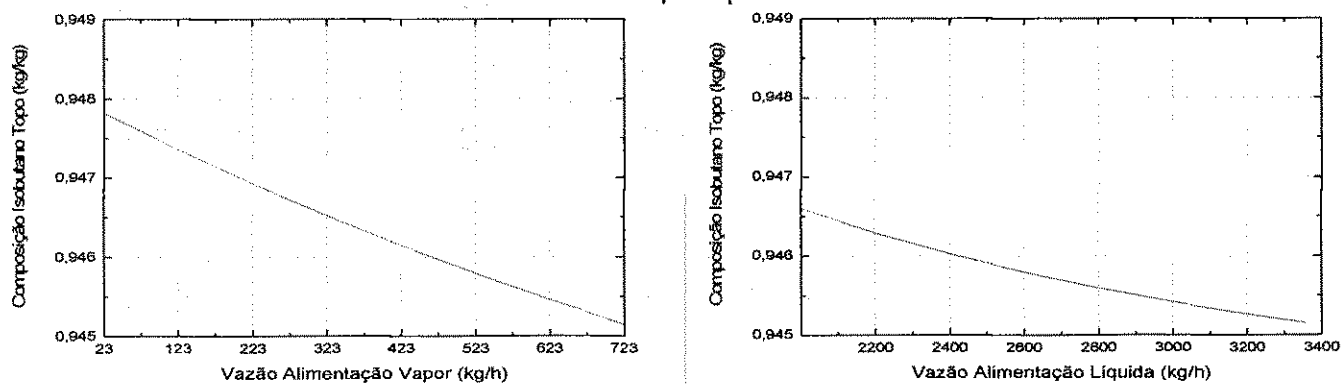


Figura 6.8 - Composição do hexeno na retirada lateral para variações na vazão da alimentação líquida e da alimentação vapor.

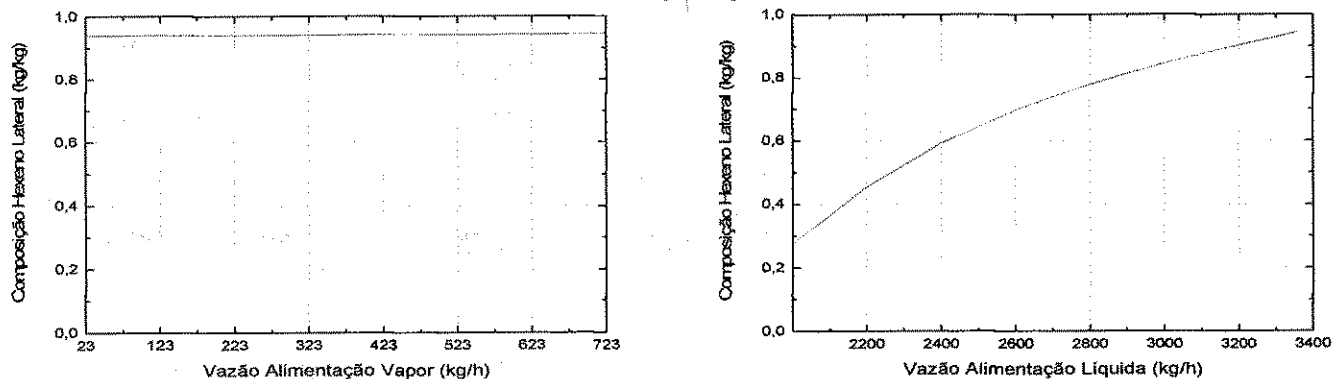


Figura 6.9 - Composição do isobutano na retirada lateral para variações na vazão da alimentação líquida e da alimentação vapor.

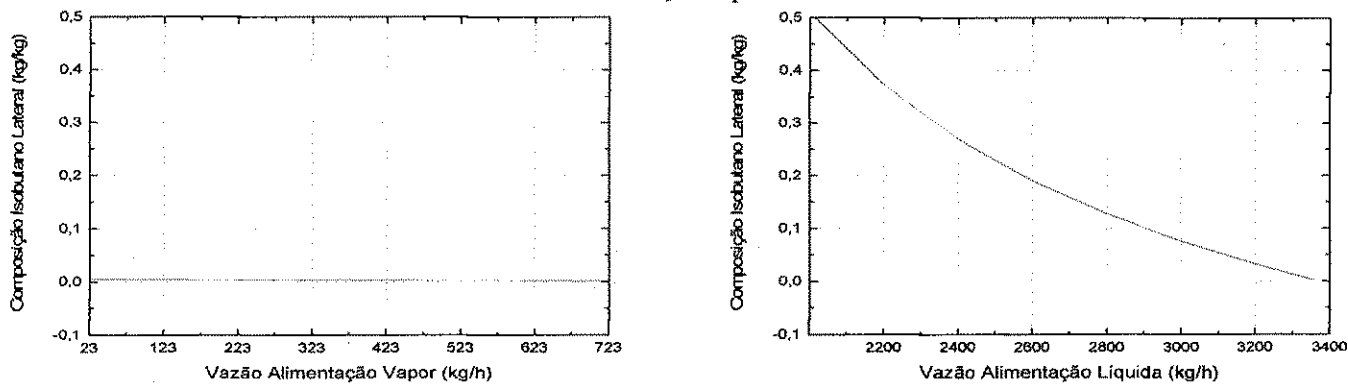


Figura 6.10 - Composição do hexeno na base da coluna para variações na vazão da alimentação líquida e da alimentação vapor.

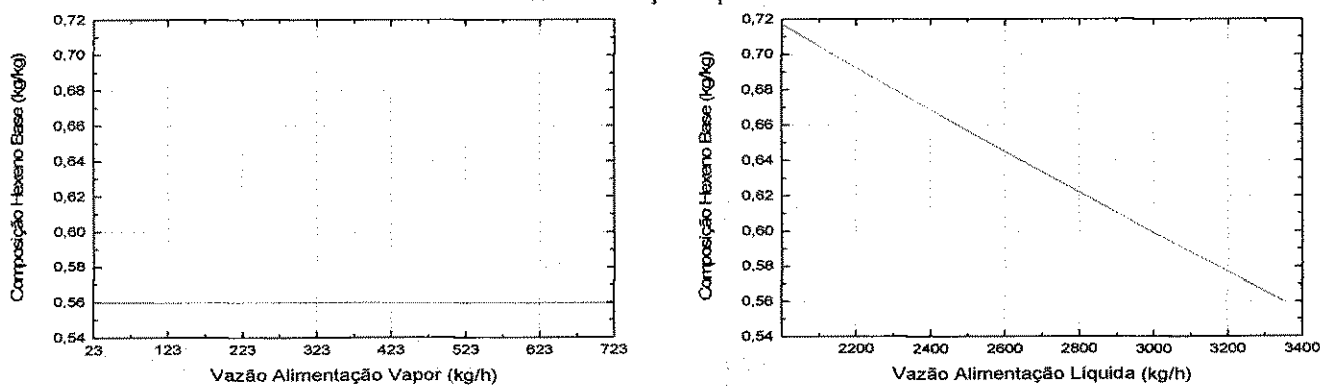
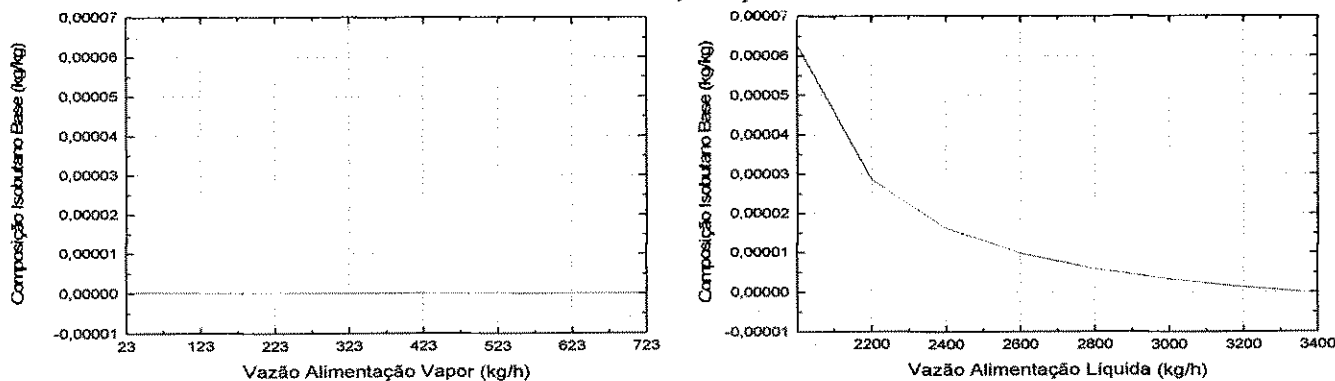


Figura 6.11 - Composição do isobutano na base da coluna para variações na vazão da alimentação líquida e da alimentação vapor.



7 RESULTADOS NO REGIME TRANSIENTE

As simulações dinâmicas foram realizadas mediante perturbações (distúrbios) na vazão da alimentação vapor e da alimentação líquida. A escolha destas variáveis deve-se ao fato das mesmas representarem os distúrbios no processo. As condições iniciais para cada simulação foram aquelas obtidas no regime estacionário.

As informações da simulação no regime estacionário, incluindo a termodinâmica e hidráulica, foram exportadas para o *Aspen Dynamics*. O sistema de controle foi definido manualmente, mas antes, a simulação foi inicializada e, em seguida, foi operada no modo dinâmico para verificar se a simulação convergia normalmente e verificar a velocidade de integração. Após essa etapa, as variáveis controladas e manipuladas foram identificadas para a instalação dos controladores.

Apesar de controladores de vazão terem sido instalados nas correntes de alimentação, essas variáveis são consideradas distúrbios e não variáveis controladas.

Foi instalado um controlador de temperatura em que o sinal de entrada é o valor da temperatura do prato 23 e a variável manipulada é a vazão da retirada lateral. O controle de nível da base da coluna é realizado através da manipulação da carga térmica (vazão de vapor para o refeedor), o que não é uma prática comum, mas que foi necessária, visto que a vazão de retirada pela base da coluna é muito pequena e insuficiente para ser usada para controlar o nível da base. A válvula de controle de pressão foi incluída após o vaso de refluxo, na corrente do destilado vapor. O nível do vaso de refluxo é controlado manipulando-se a vazão do destilado líquido. A razão de refluxo é fixada como uma razão entre a vazão de refluxo e a vazão de alimentação líquida. Os parâmetros dos controladores foram aqueles sugeridos pelo *Aspen*. Um resumo das variáveis controladas e manipuladas é mostrado na Tabela 7.1.

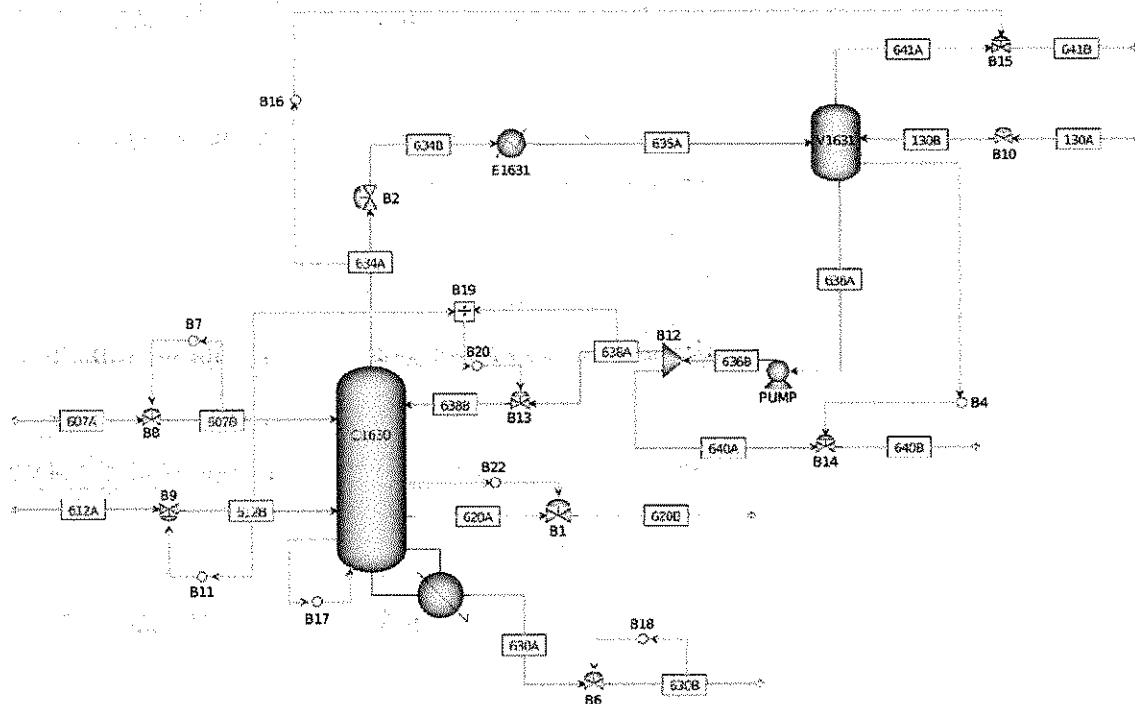
Tabela 7.1 – Resumo das variáveis controladas e manipuladas para a configuração de controle usada na planta.

Variável Controlada	Variável Manipulada
Nível da base da coluna	Carga térmica (vazão de vapor para o refeedor)
Temperatura do prato 23	Vazão da retirada lateral
Nível do vaso de refluxo	Vazão do destilado líquido
Razão de refluxo	Vazão da alimentação/Vazão de refluxo
Pressão de topo	Vazão do destilado vapor

A configuração de controle descrita corresponde à configuração usada atualmente na planta. Ela é identificada neste trabalho como Configuração 1 (Figura 7.1).

Foram simuladas as mesmas perturbações realizadas no regime estacionário, de duas em duas horas, de forma decrescente e crescente, para as vazões da alimentação líquida e vapor. Inicialmente, o efeito dos distúrbios aplicados foi observado para a simulação em malha aberta para a pressão. Foram acompanhados os resultados para a composição do isobutano e do hexeno na corrente lateral e na corrente de topo (destilado líquido), vazão da retirada lateral, vazão do destilado vapor, perfil de temperatura, nível da base da coluna e do vaso de refluxo e pressão no prato 1 (topo da coluna), no prato 23 e no prato 41 (base da coluna). As perturbações só foram realizadas após duas horas de simulação dinâmica. Logo, para todas as variáveis acompanhadas, o gráfico é uma reta paralela ao eixo das abscissas nesse intervalo. A avaliação dos resultados obtidos foi realizada através da comparação entre o efeito das alimentações líquida e vapor sobre as variáveis acompanhadas.

Figura 7.1 – Fluxograma usado nas simulações dinâmicas para a Configuração 1 (configuração usada atualmente).



Na simulação em malha aberta para a pressão, para todas as variáveis acompanhadas, os distúrbios na vazão da alimentação vapor tiveram maior influência que os distúrbios na vazão da alimentação líquida. A resposta para os distúrbios é observada principalmente sobre a pressão da coluna (Figuras 7.4a e 7.5a) e sobre vazão do destilado vapor (Figura 7.6a e 7.7a).

Em relação ao perfil de temperatura (Figuras 7.10a e 7.11a), a vazão da alimentação líquida não demonstrou a mesma influência observada nas simulações em regime estacionário. Na simulação transiente, é levada em conta a pressão da coluna e dos outros equipamentos. Quando a pressão varia, principalmente devido a variações na vazão da alimentação vapor, outras vazões são alteradas (vazão do destilado vapor), bem como os perfis de temperatura. Quando se usa o controle da temperatura, é essencial a compensação da pressão para manter as composições desejadas. É devido à compensação da pressão que, diferentemente dos resultados das simulações estacionárias, a temperatura nas simulações transientes muda nas regiões superior e inferior da coluna, pois o controle da temperatura é feito próximo à região da retirada lateral.

Além de modificar o ELV, os perfis de composição e de temperatura, variações na pressão da coluna podem causar graves problemas operacionais. Por exemplo, quando a pressão aumenta rapidamente, as vazões de vapor através dos pratos da coluna diminuem, podendo causar gotejamento. Quando diminui rapidamente, as vazões de vapor dentro da coluna aumentam o que pode levar à inundação dos pratos. Para a coluna simulada, o problema das mudanças rápidas da pressão pode ser ainda mais sério porque, como o destilado vapor é alimentado a uma unidade a jusante da planta, as mudanças nessa vazão, conduzidas pela variação da pressão, podem representar distúrbios graves no processo.

Com o objetivo de avaliar o efeito da pressão sobre a dinâmica da coluna, foram montadas mais duas novas configurações de controle, identificadas como Configuração 2 (Figura 7.2) e Configuração 3 (Figura 7.3). Essas diferem da Configuração 1 apenas pelo controle da pressão e correspondem a alternativas que podem apresentar vantagens em relação à configuração atual. Na Configuração 2 de controle, a pressão da coluna é controlada por uma válvula localizada na corrente de topo da coluna. A ação do controlador é direta, ou seja, se a pressão da coluna aumentar, a válvula de controle abre, aumentando a vazão do topo. Na Configuração 3, a pressão é controlada manipulando a vazão do fluido de resfriamento do condensador de topo e a ação do

controlador também é direta. A avaliação dos resultados teve continuidade com a comparação do desempenho de cada configuração mediante os distúrbios aplicados.

Figura 7.2 – Fluxograma usado nas simulações dinâmicas para a Configuração 2.

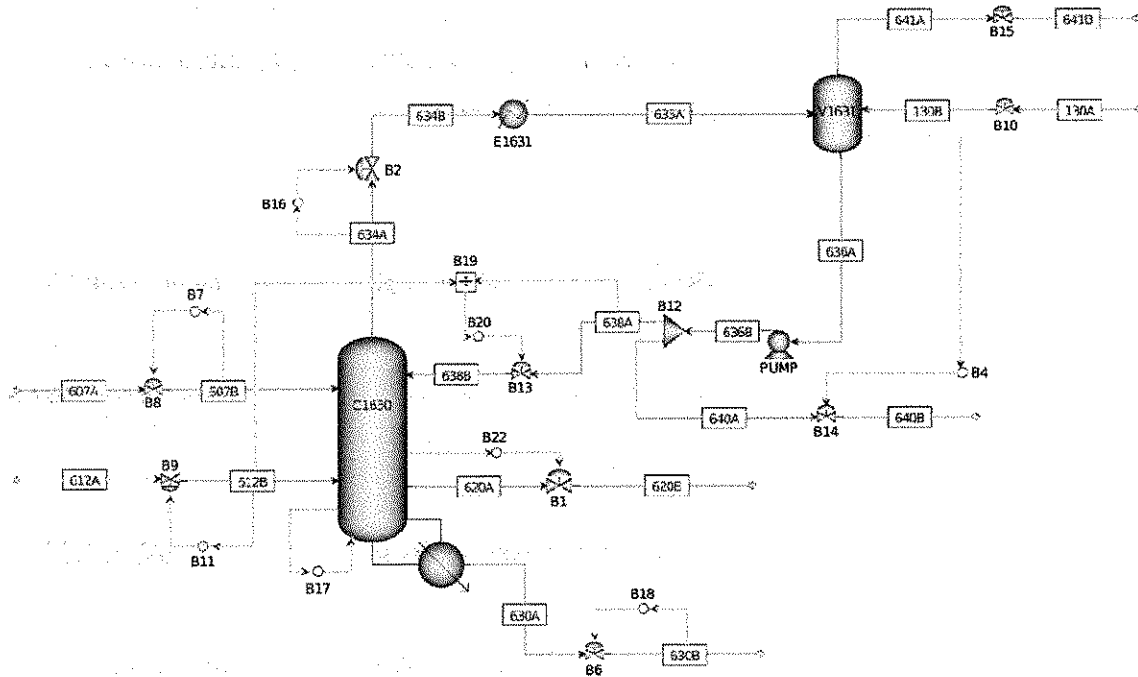
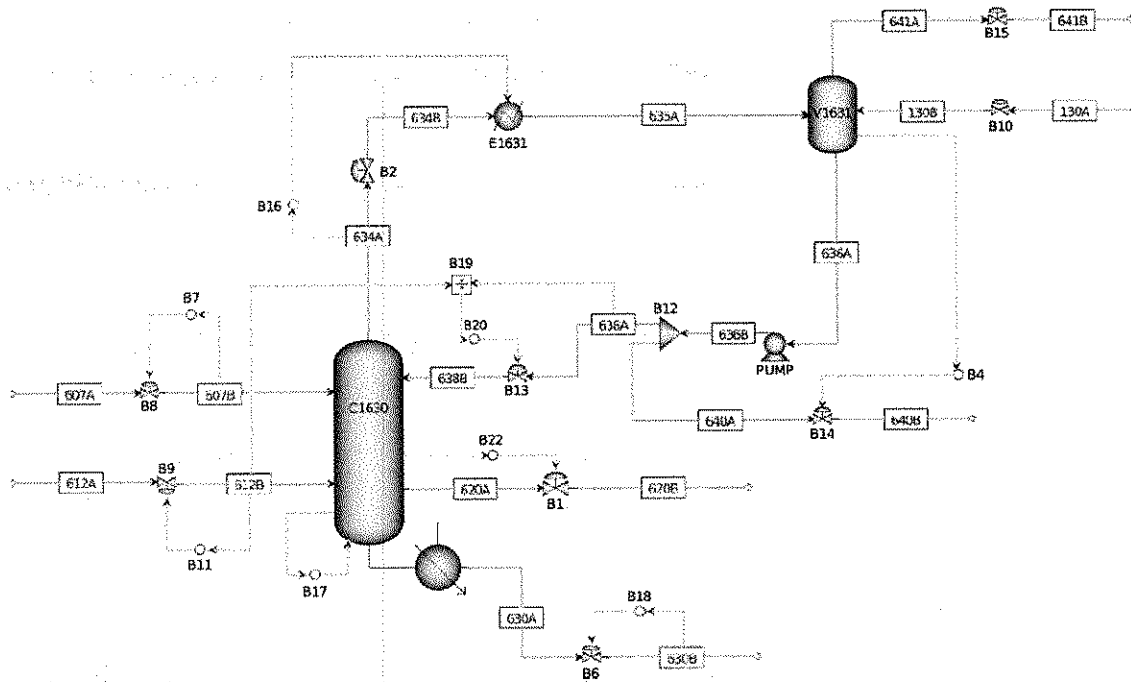


Figura 7.3 - Fluxograma usado nas simulações dinâmicas para a Configuração 3.



As três configurações de controle estudadas mostraram bom desempenho quando os distúrbios foram aplicados na vazão da alimentação líquida. Dessa forma, o desempenho de cada configuração foi avaliado levando-se em conta apenas os distúrbios na vazão da alimentação vapor.

Como pode ser observado nas Figuras 7.5b, 7.7b, 7.9b, 7.12b, 7.13b e 7.14b e 7.15b (figuras que correspondem à Configuração 1), antes do fechamento completo da válvula (vazão igual a zero) de alimentação vapor, as variáveis monitoradas, após alguma oscilação, tendiam a entrar em regime estacionário. Entretanto, após o fechamento da válvula (14h), tornou-se impossível controlar a pressão do topo da coluna (e conseqüentemente de toda a coluna). A pressão da coluna continua a diminuir e a estabilidade somente é alcançada com a abertura da válvula de vazão da alimentação vapor (quando a pressão da coluna começa a aumentar).

Conforme esperado, a vazão de topo do vaso de refluxo (Figura 7.7b) é diretamente proporcional à vazão de alimentação vapor. No instante em que a vazão de vapor se torna nula (14h), a pressão da coluna fica “fora de controle” com tendência a estabilizar em um valor muito mais baixo do que o *set-point* fixado, conforme a Figura 7.5b. Quando a vazão de alimentação deixa de ser nula (próximo de 16 h), a pressão aumenta bruscamente, fazendo com que abra a válvula de controle da vazão de topo do vaso de refluxo.

De acordo com a Figura 7.14b, no instante em que a vazão da alimentação vapor se anula (14h), a concentração de hexeno na retirada lateral aumenta bruscamente, causando um aumento na temperatura do prato 23. Nesse instante, pela ação do sistema de controle, a vazão da retirada lateral também aumenta de forma brusca (Figura 7.9b), fazendo a concentração de isobutano na corrente lateral aumentar (Figura 7.12b). No entanto, conforme mostra a Figura 7.15b, esse aumento de temperatura não resulta num aumento de hexeno no destilado.

Os mesmos distúrbios foram aplicados às simulações da Configuração 2 e Configuração 3 e o mesmo estudo foi realizado. Os resultados para esse estudo aparecem nas mesmas figuras dos resultados para a Configuração 1.

Figura 7.4 - Resposta dinâmica da pressão da coluna para variações na vazão da alimentação líquida. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).

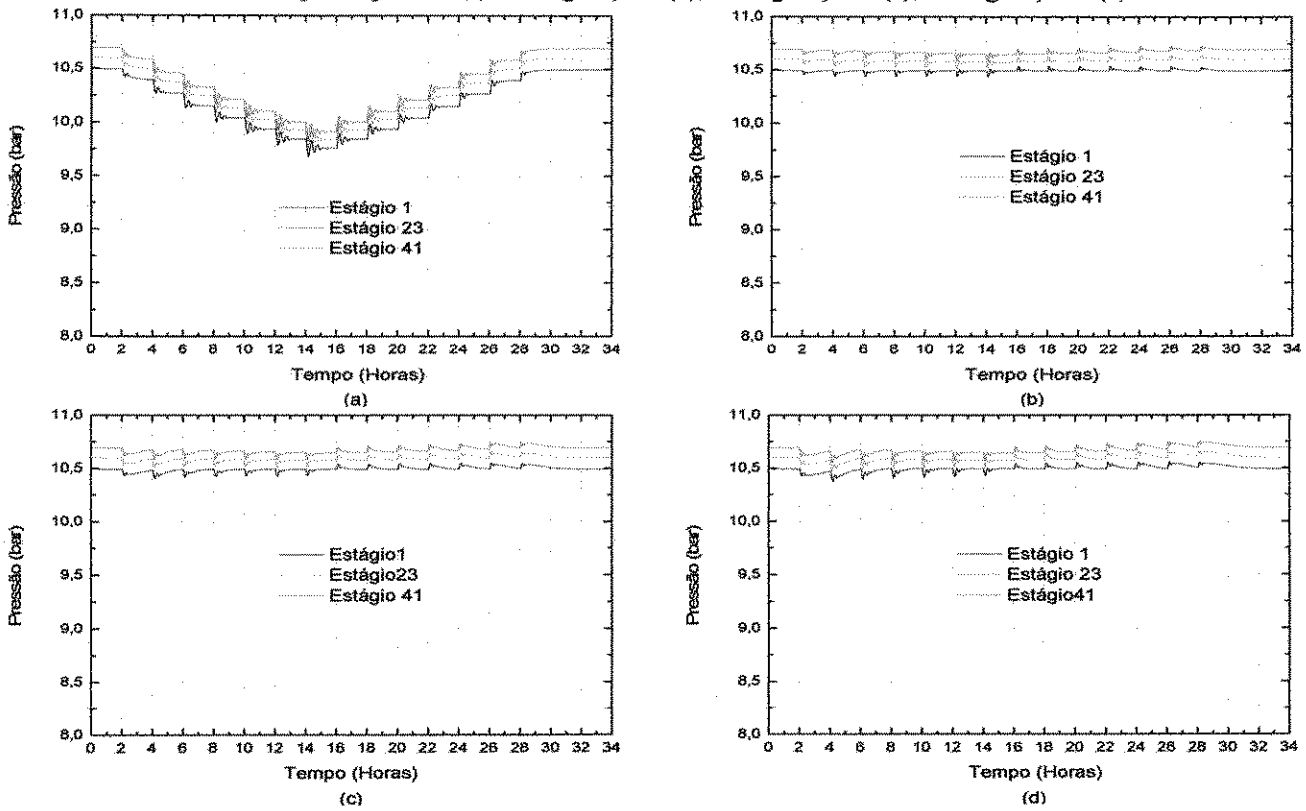


Figura 7.5 - Resposta dinâmica da pressão da coluna para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).

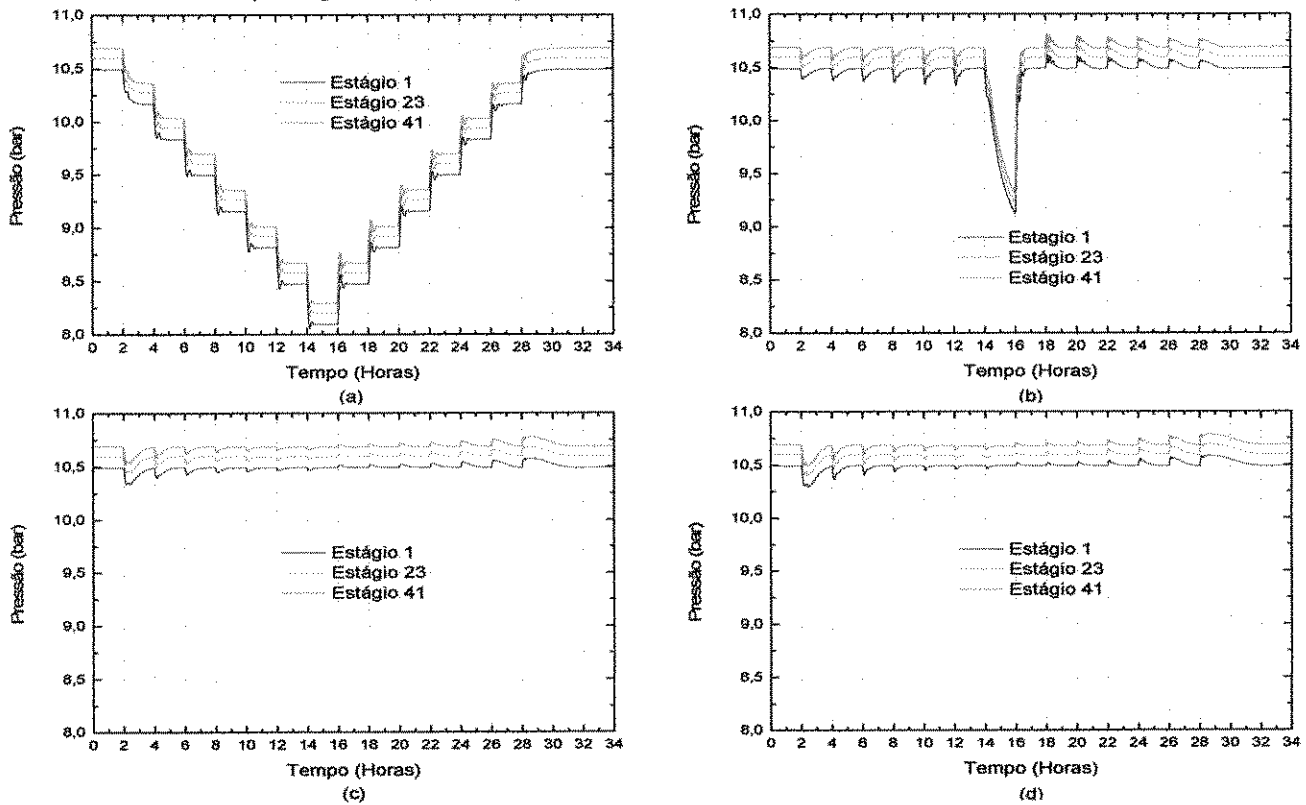


Figura 7.6 - Resposta dinâmica da vazão do destilado vapor para variações na vazão da alimentação líquida. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).

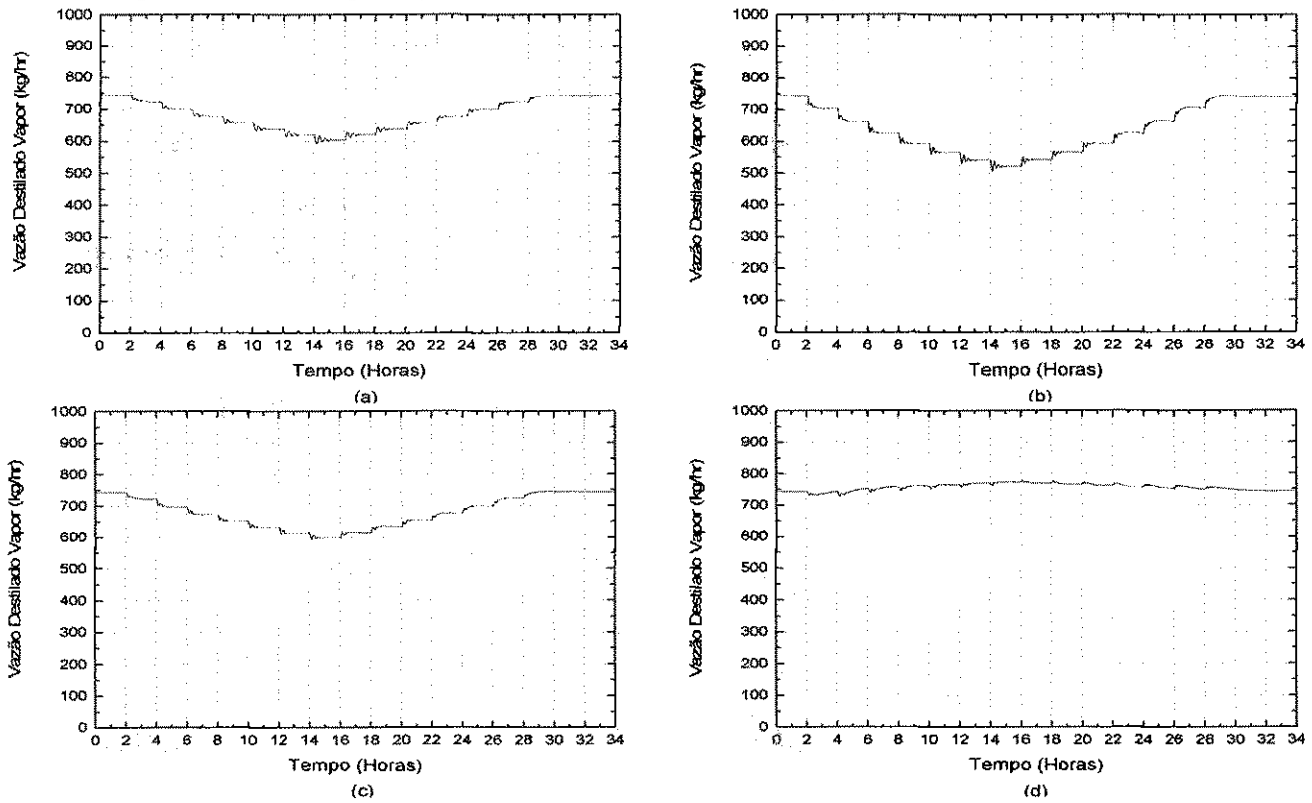


Figura 7.7 - Resposta dinâmica da vazão do destilado vapor para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).

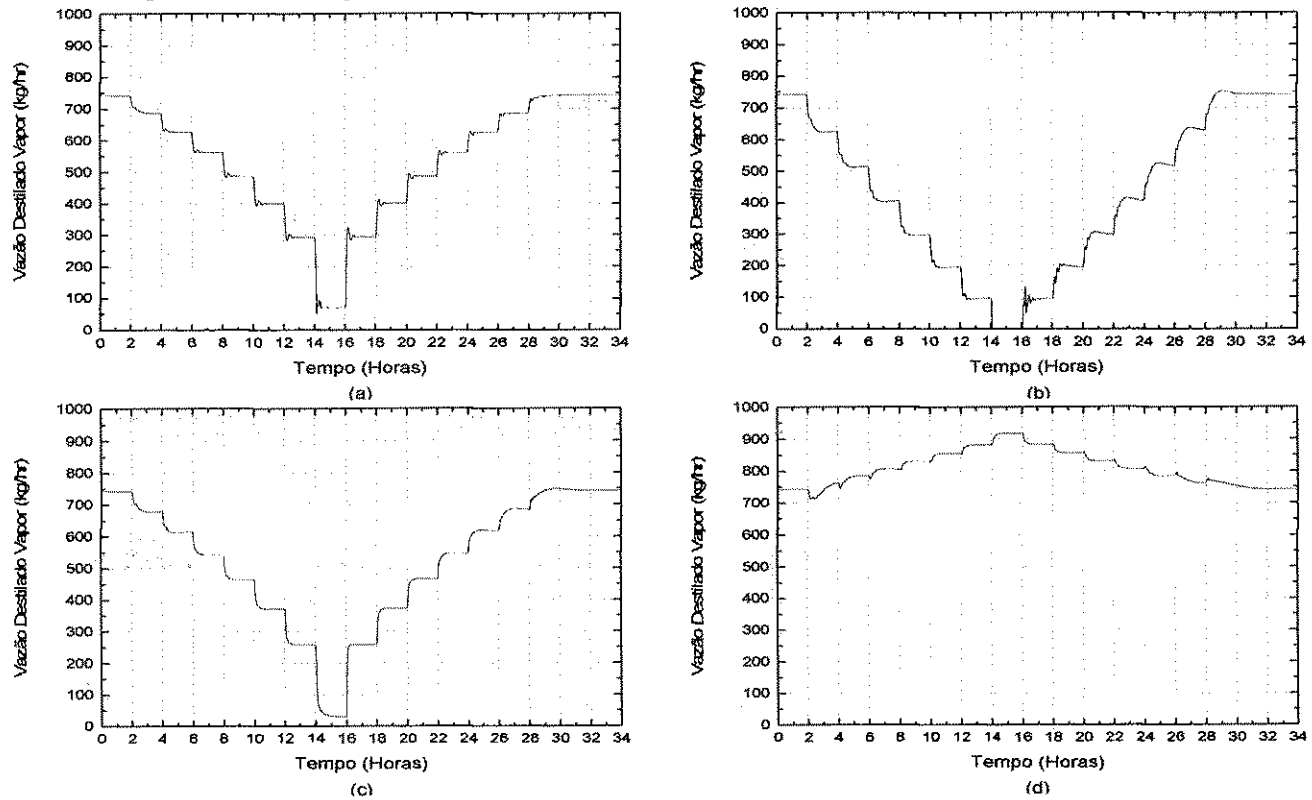


Figura 7.8 - Resposta dinâmica da vazão da retirada lateral para variações na vazão da alimentação líquida. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).

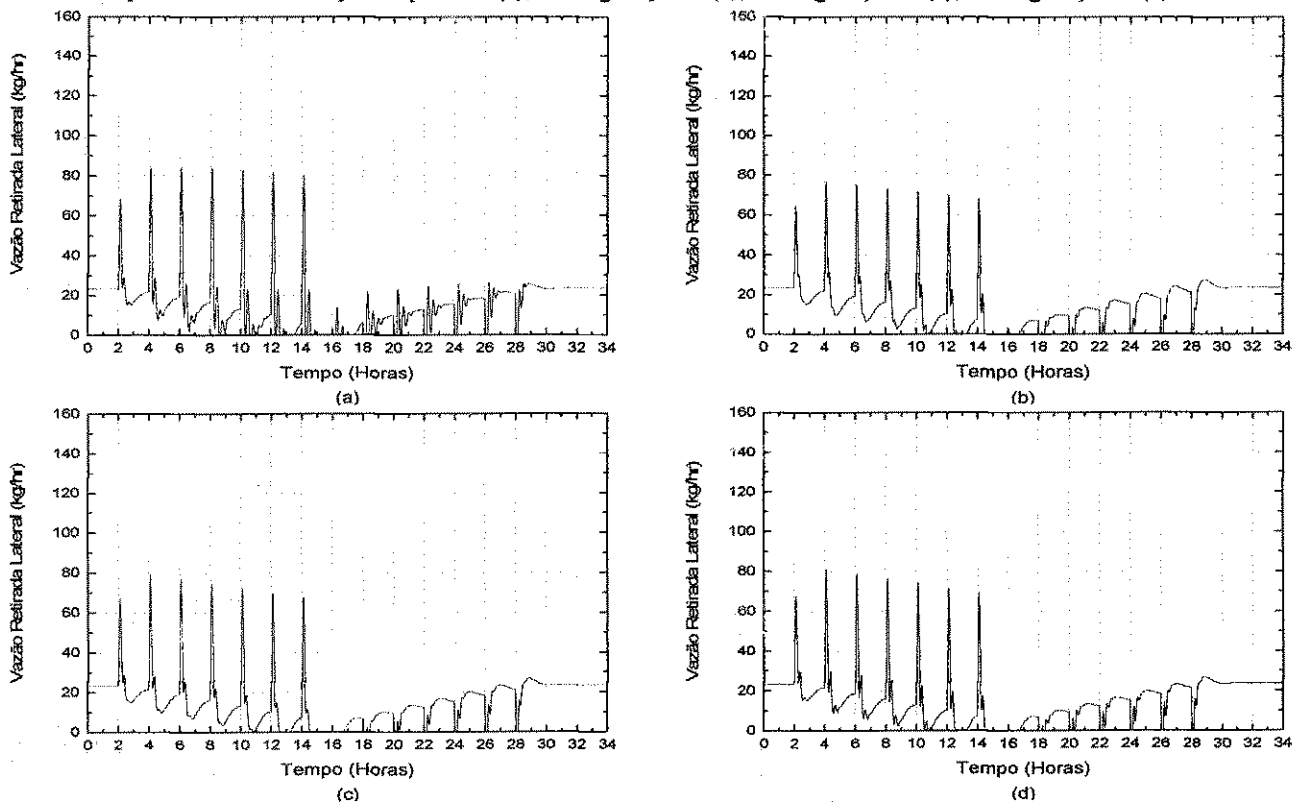


Figura 7.9 - Resposta dinâmica da vazão da retirada lateral para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).

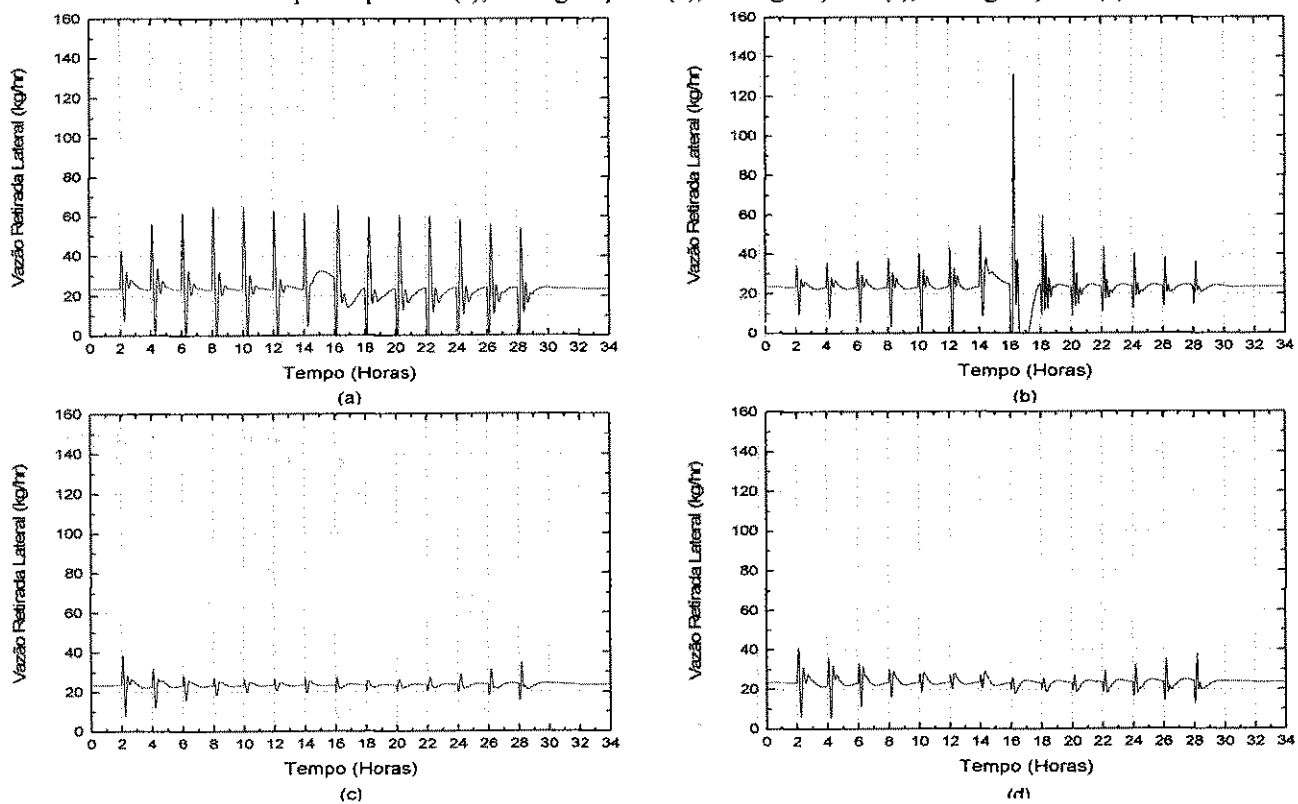


Figura 7.10 - Resposta dinâmica do perfil de temperatura da coluna para variações na vazão da alimentação líquida. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).

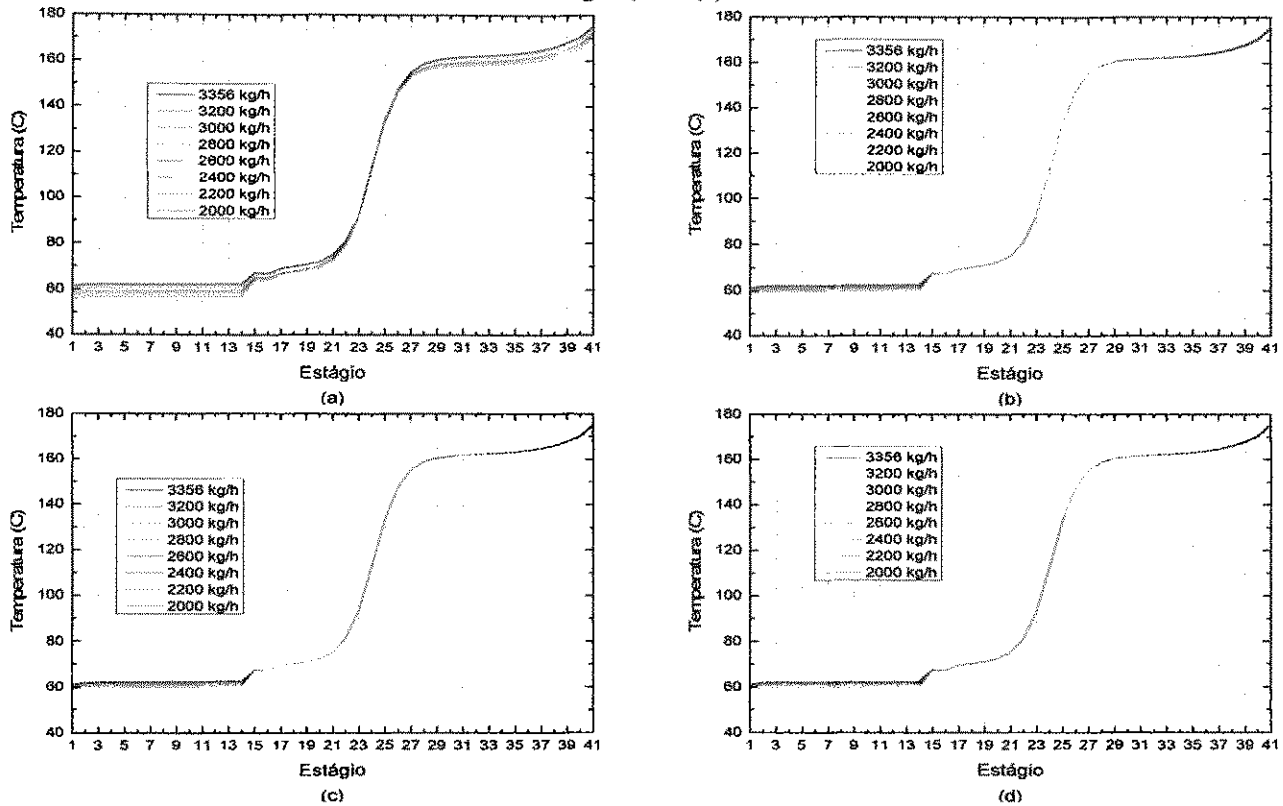


Figura 7.11 - Resposta dinâmica do perfil de temperatura da coluna para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).

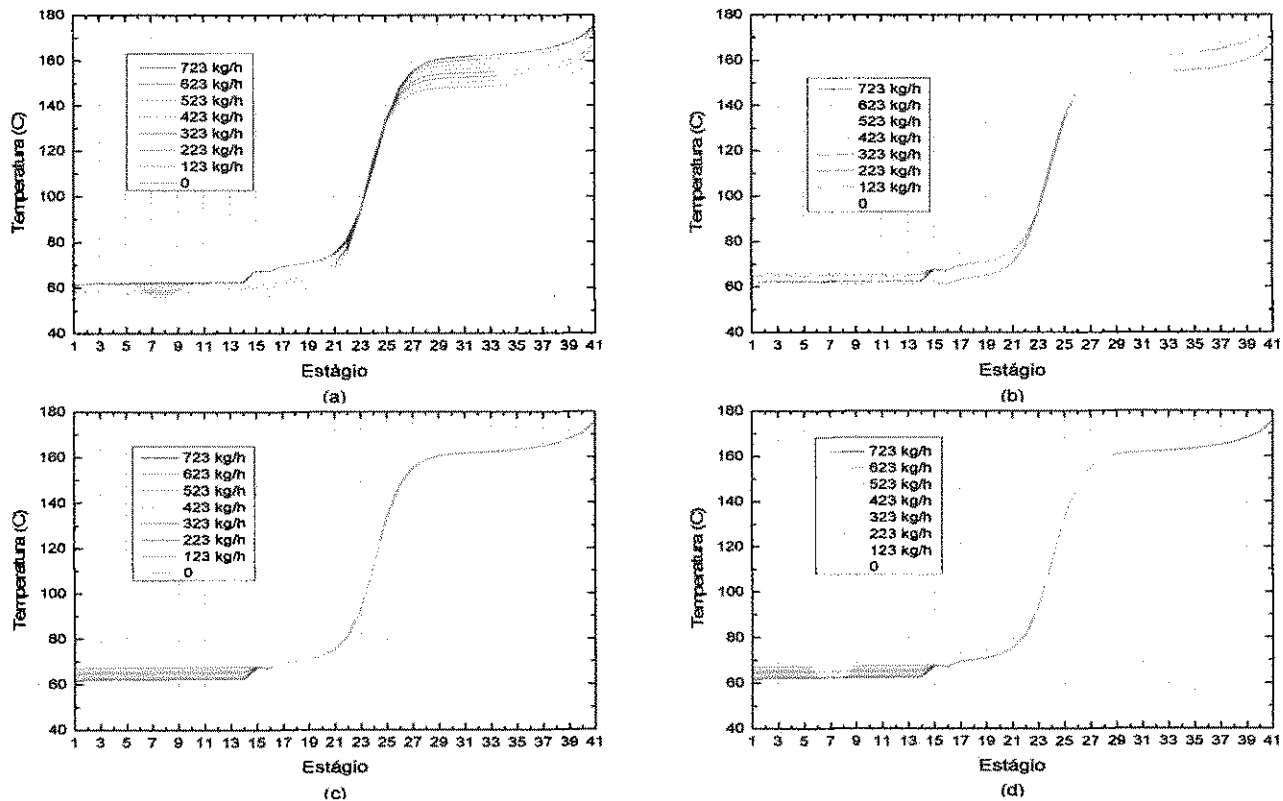


Figura 7.12 - Resposta dinâmica da composição do isobutano na retirada lateral para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).

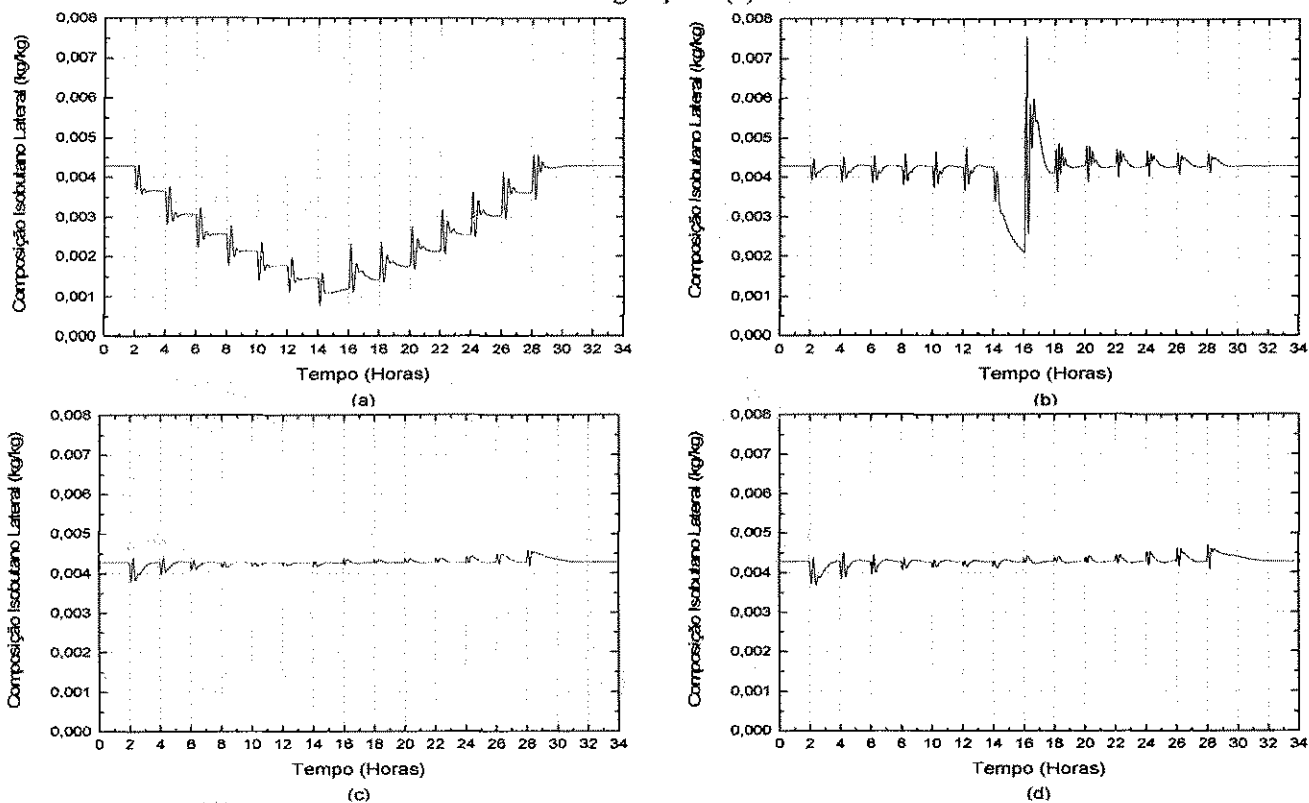


Figura 7.13 - Resposta dinâmica da composição do isobutano no topo da coluna para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).

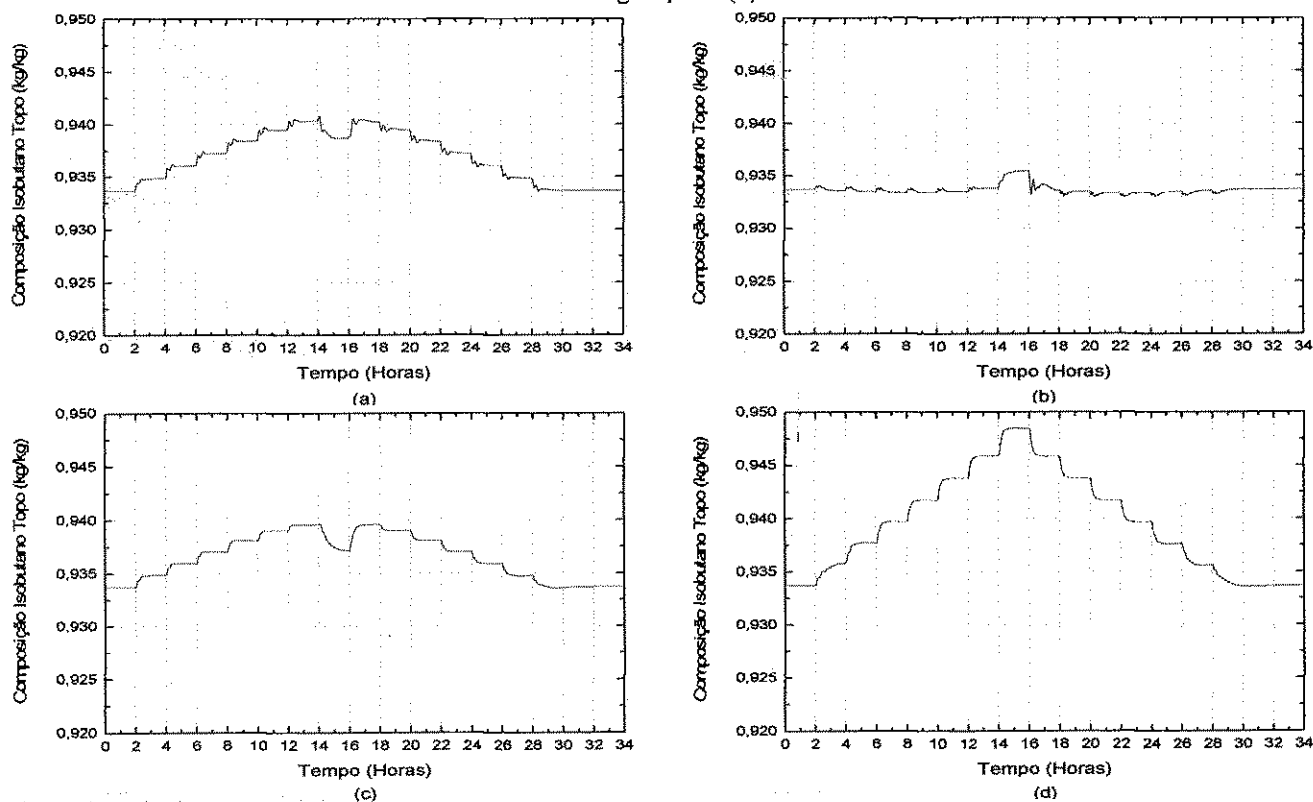


Figura 7.14 - Resposta dinâmica da composição do hexeno na retirada lateral para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).

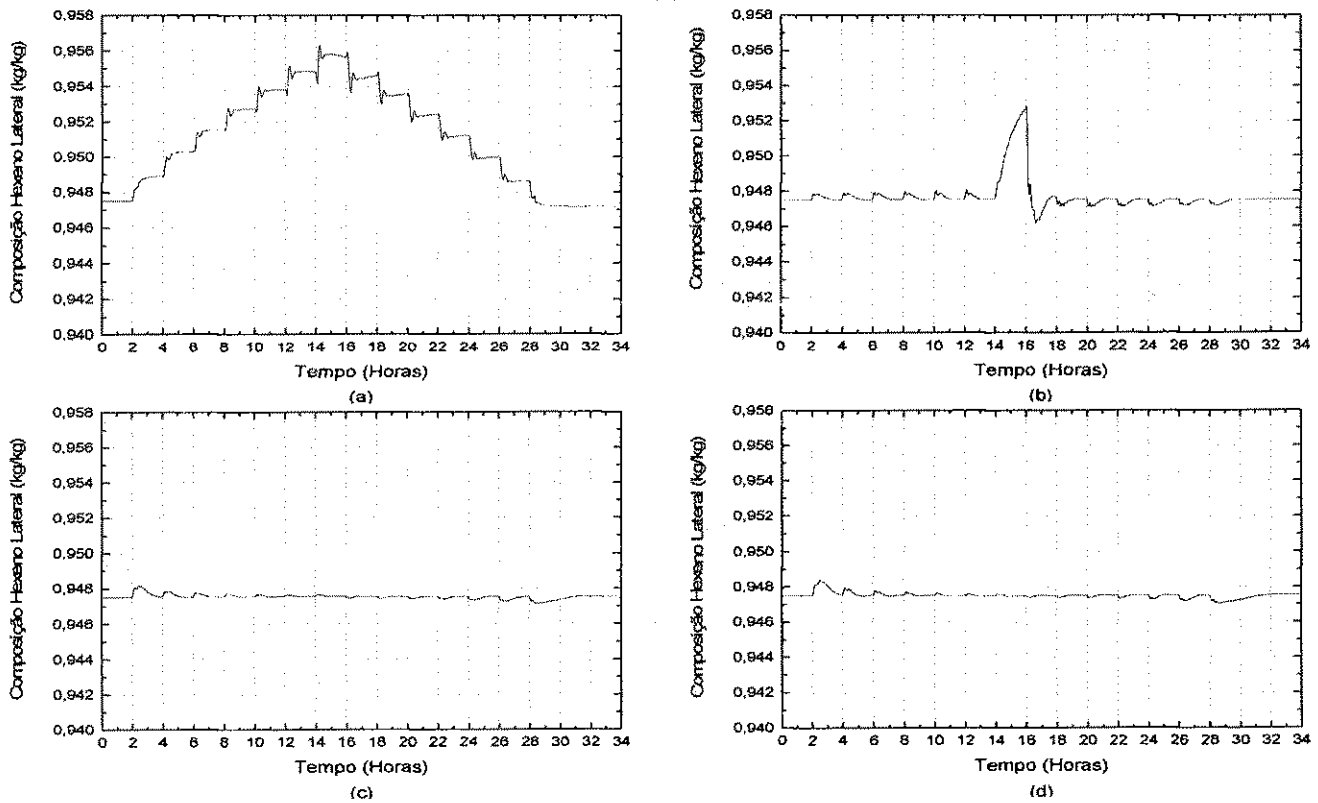
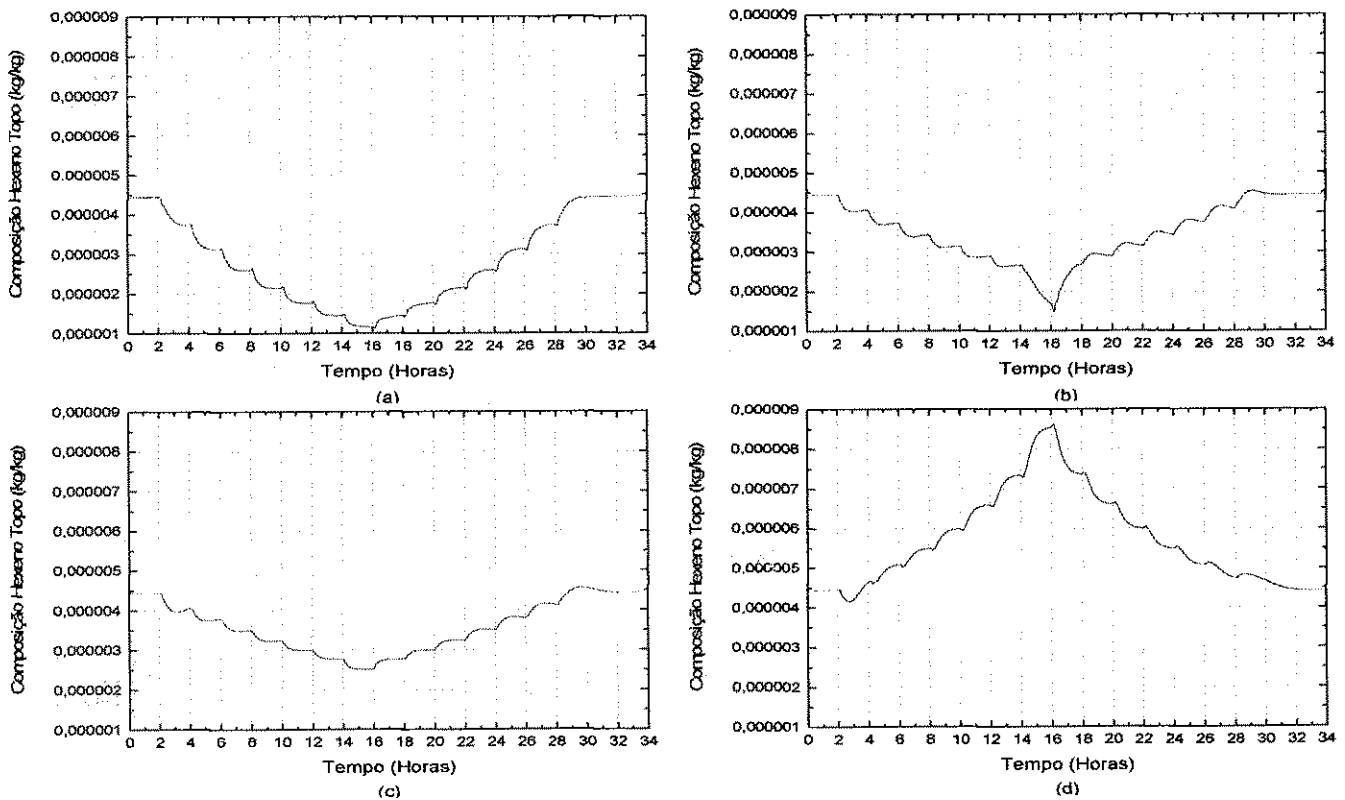


Figura 7.15 - Resposta dinâmica da composição do hexeno no topo da coluna para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).

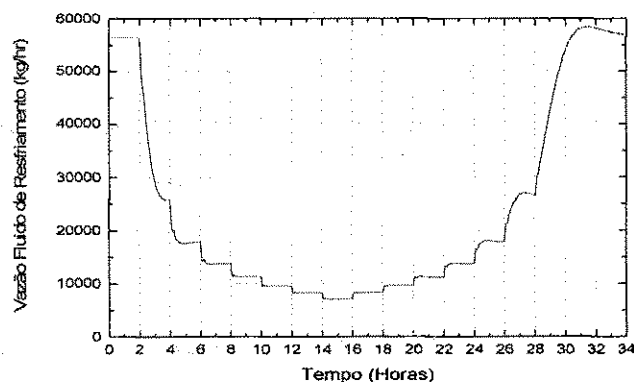


Tanto a inclusão de uma válvula de controle na corrente de topo da coluna como a manipulação do fluido de resfriamento evitam a queda brusca da pressão no topo da coluna (Figuras 7.5c e 7.5d). Também minimizam a amplitude da variação da vazão da retirada lateral (Figuras 7.9c e 7.9d) e, conseqüentemente, no teor de isobutano na corrente lateral (Figuras 7.12c e 7.12d).

O controle da pressão da Configuração 2 não resolve o problema da vazão do destilado vapor. De acordo com a Figura 7.5c, a pressão da coluna é estabilizada, mas, conforme a Figura 7.7c, a vazão do topo da coluna ainda é proporcional à vazão da alimentação vapor. Já a Configuração 3 também estabiliza a pressão da coluna, mas reduz muito a oscilação do destilado vapor (Figura 7.7d).

Nas configurações 1 e 2, a vazão do fluido de resfriamento do condensador de topo é mantida constante enquanto que a temperatura de saída do condensador é livre. Dessa forma, quando a vazão de topo da coluna diminui, a temperatura de saída do condensador também diminui. No entanto, essa variação observada na temperatura é muito pequena (menos de 2°C). Na Configuração 3, a vazão do fluido de resfriamento é manipulada de tal forma que, quando a pressão da coluna diminui, a vazão do fluido de resfriamento também diminui (Figura 7.16). Quando essa vazão atinge valores muito baixos, a temperatura de saída do condensador aumenta muito, modificando o ELV, o que ocasiona o comportamento inverso da vazão do destilado vapor da Figura 7.7d.

Figura 7.16 - Resposta dinâmica da vazão do fluido de resfriamento para variações na vazão da alimentação vapor nas simulações da Configuração 3.



Os níveis (da base da coluna e do vaso de refluxo), de acordo com as Figuras 7.17 e 7.18, são bem controlados. Como esperado, na configuração com malha aberta para a pressão e na Configuração 1, os níveis variam com amplitudes maiores, principalmente quando a vazão da alimentação vapor deixa de ser nula (16 h). Mesmo

assim, os níveis são rapidamente estabilizados pelos controladores em todas as configurações de controle, inclusive na configuração com malha aberta para a pressão e na Configuração 1.

As composições do hexeno e do isobutano estão em malha aberta e seus resultados são conseqüências do controle das outras variáveis (pressão e temperatura). As composições são então controladas de forma indireta ou por inferência, ou seja, se a pressão e a temperatura estiverem sob controle, provavelmente as composições também estarão. As configurações 2 e 3 mantêm as composições do hexeno e do isobutano na retirada lateral próximos dos valores desejados (Figuras 7.12c, 7.12d, 7.14c e 7.14d), obtidos no regime estacionário, mas geram oscilações na composição do destilado líquido (Figuras 7.13c, 7.13d, 7.15c e 7.15d). Contudo, essas oscilações não representam problemas sérios, pois a composição do isobutano só aumenta (o que não é ruim) e a composição do hexeno muda apenas na sexta casa decimal.

Figura 7.17 - Resposta dinâmica do nível do vaso de refluxo para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).

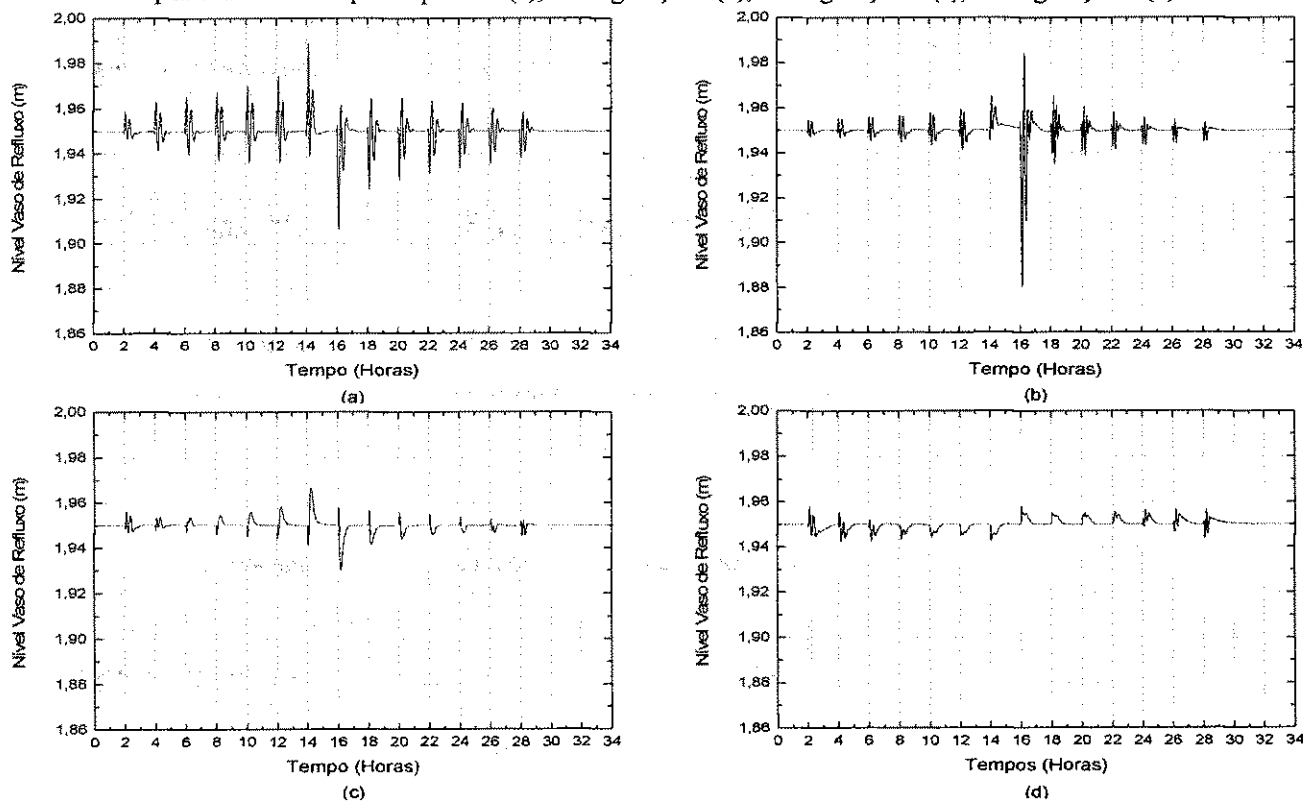


Figura 7.18 - Resposta dinâmica do nível da base da coluna para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).

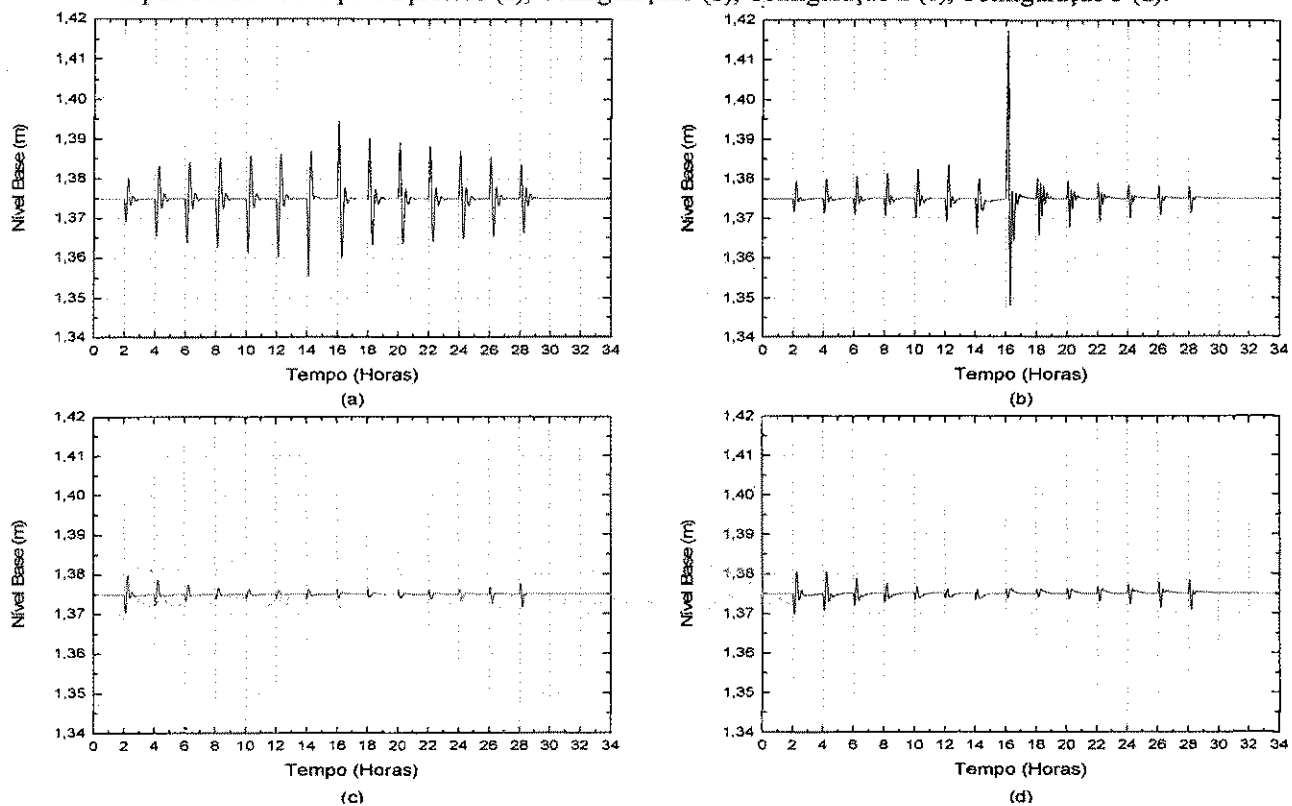
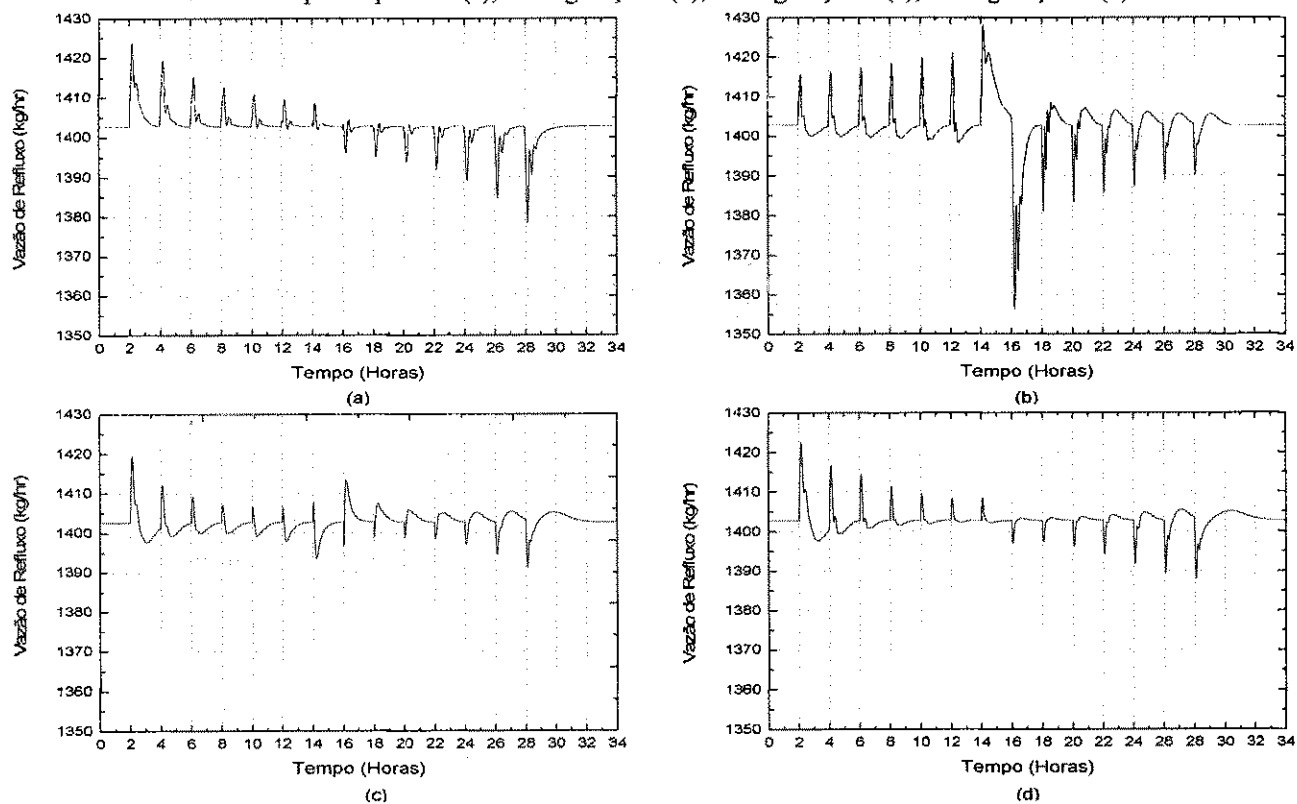


Figura 7.19 - Resposta dinâmica da vazão de refluxo para variações na vazão da alimentação vapor. Malha aberta para a pressão (a), Configuração 1 (b), Configuração 2 (c), Configuração 3 (d).



8 CONCLUSÕES

Inicialmente, por meio das simulações estacionárias, não foi possível identificar ou entender o problema que deu origem ao presente trabalho, que se refere à variação da vazão da retirada lateral da coluna de destilação estudada.

As simulações dinâmicas, as quais mostram que a coluna, de fato, não apresenta problemas, foram essenciais para o entendimento do comportamento do processo.

O que realmente acontece no processo é que, por razões não investigadas, a vazão da alimentação vapor está oscilando muito e essa oscilação é a verdadeira causa do distúrbio observado na pressão da coluna.

Conforme apresentado, com a configuração de controle atual (Configuração 1), a coluna se mantém estável apenas até o ponto em que a vazão da alimentação vapor não é nula.

Se a oscilação na vazão da alimentação vapor não puder ser corrigida, uma alternativa consiste em mudar a configuração atual do controle da pressão. Neste trabalho, duas configurações de controle foram apresentadas como alternativas, identificadas por Configuração 2 e Configuração 3.

Os resultados mostram que as configurações 2 e 3 apresentam um melhor desempenho em relação à Configuração 1 para o controle da pressão e, conseqüentemente, para todas as outras variáveis acompanhadas.

As duas novas configurações controlam igualmente a pressão da coluna, a temperatura e, por inferência, a composição. Os níveis são bem controlados tanto na configuração atual (Configuração 1) como nas duas novas configurações.

A Configuração 2 não elimina a variação da vazão do destilado vapor, o que representará distúrbios para a próxima coluna da unidade. Em termos de aplicabilidade, essa configuração adota um método simples. Contudo, variar a vazão que entra no condensador pode exigir uma válvula de controle relativamente grande, assim como uma maior área de troca de calor. Mas para o caso em estudo, a vazão que sai do topo da coluna é relativamente pequena (5,3 t/h).

A principal desvantagem da Configuração 3 é que a vazão do líquido de resfriamento pode ser alta, o que exige uma válvula de controle muito grande. Além desse inconveniente, variações na vazão do fluido de resfriamento implicam em variações de escoamento, o que pode resultar no aumento da incrustação. Apesar dessas

restrições, a Configuração 3 é a que apresenta o melhor desempenho de controle e a que causa menos distúrbio para a próxima coluna da unidade.

A solução definitiva para o problema da pressão seria alcançada se a oscilação da vazão da alimentação vapor fosse eliminada. É recomendado o estudo aprofundado sobre a origem dessa oscilação.

9 SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

Um trabalho de mestrado ou doutorado, além de apresentar conclusões, deve também apontar novas direções a serem seguidas por outros pesquisadores. Nesse sentido, sugere-se que os seguintes itens sejam abordados:

1. Avaliação do uso de controlador tipo *split-range*(N₂) para o controle da pressão.
2. Avaliação do uso do *hot-by-pass* para o controle da pressão.
3. Sintonia dos controladores.
4. Simulação da coluna de pesados e coluna de leves em conjunto.

10 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BETTONI, A., BRAVI, M., CHIANES, A. Inferential control of a sidestream distillation column. *Computers & Chemical Engineering*, Roma, 2000.

BRITO, R. P. *Processo de destilação extrativa: modelagem dinâmica, simulação e avaliação de nova configuração*. Tese (Doutorado em Engenharia Química) – Faculdade de Engenharia Química, Universidade Estadual de Campinas, Campinas. 1997.

BRITO, R. P., FOSSY, M. F. Dynamic behavior of sidestream distillation columns for the separation of binary azeotropes mixtures. *Computers & Chemical Engineering*, Campina Grande, 1999.

BUCKLEY, P. S., LUYBEN, W. L., SHUNTA, J. P. *Design of distillation column control systems*. New York: Elsevier Science & Technology, 1985. 576 p.

DEMICOLI, D., STICHLMAIR, J. Novel Operational Strategy for the Separation of Ternary Mixtures via Cyclic Operation of a Batch Distillation Column with Side Withdrawal. *Proceedings of 13th European Symposium on Computer Aided Process Engineering*, 2003.

DEMICOLI, D., STICHLMAIR, J. Separation of ternary mixtures in a batch distillation column with side withdrawal. *Computers & Chemical Engineering*, 2004.

DOUKAS, N., LUYBEN, W. L. Control of sidestream columns separating ternary mixtures. *INTECH*, 1978.

ERRICO, M., RONG, B. Modified simple column configurations for quaternary distillations. *Computers & Chemical Engineering*, 2012.

FIEG, G. Composition control of distillation columns with a sidestream by using gas chromatographs. *Chemical Engineering and Processing*, 2002.

FINLAYSON, B. A. *Introduction to Chemical Engineering Computing*. Hoboken: John Wiley & Sons, 2012. 384 p.

GLINOS, K., MALONE, M. F. Steady-state control of sidestream distillation columns. *Industrial Engineering Chemistry Design Development*, 1985a.

GLINOS, K. and MALONE, M. F. Design of sidestream distillation columns. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.*, 1985b.

GUTIÉRREZ, A. C., JIMÉNEZ, A. G. Design of side-stream azeotrope distillation columns. *ICHEME, Part A, Chemical Engineering Research and Design*, 2007.

HENLEY, E. J., SEADER, J. D. *Equilibrium-Stage Separation Operations in Chemical Engineering*. New York: John Wiley & Sons, 1981. 768 p.

HENLEY, E.J., SEADER, J. D. *Separation process principles: chemical and biochemical operations*. John Wiley & Sons, 2011.848 p.

HUMPHREY, J. Separation Processes: Playing a Critical Role, *Chemical Engineering Progress*. 1995, 91, 10.

KISTER, Z. H. *Distillation Operation*. McGraw-Hill, 1990. 729 P.

LIU, Z., JOBSON, M. The effect of operating pressure on distillation column throughput. *Elsevier: European Symposium on Computer Aided Process Engineering*. 1999, 831-834.

LUYBEN, W. L. *Process Modeling, Simulation and Control for Chemical Engineers*. McGraw-Hill. 1990. 752p.

LUYBEN, W. L. *Distillation design and control using Aspen simulation*. Hoboken: John Wiley & Sons, 2006. 368 p.

MÉNDEZ-VALENCIA, D. M., VÁZQUEZ-OJEDA, M., SEGOVIA-HERNÁNDEZ, J. G., HERNANDEZ, H., BONILLA-PETRICIOLET, A. Study of Arrangements for Distillation of Quaternary Mixtures Using Less Than N-1 Columns. *Computer Aided Engineering*. 2008, 295-300.

NIKOLAIDES, I. P., MALONE, M. F. Approximate design of multiple feed/sidestream distillation systems. *Industrial & Engineering Chemistry Research*. 1987, 26, 1839-1845.

PAPASTATHOPOULOU, H. S., LUYBEN, W. L. Control of a binary sidestream distillation column. *Industrial Engineering Chemistry Research*. 1991, 30, 705-713.

PERRY, R.H., GREEN, D.W., MALONEY, J.O. *Perry's Chemical Engineers' Handbook*. New York: McGraw-Hill, seventh edition. 1999. 2700 p.

SEBORG, D. E., MELLICHAMP, D. A., EDGAR, T. F., DOYLE, F. J. *Process Dynamics and Control*. John Wiley & Sons, 2010. 514p.

SKOGESTAD, S., MORARI, M. Control configuration selection for distillation columns. *AIChE J*. 1987, 1620-1635.

SKOGESTAD, S., LUNDSTROM, P. JACOBSEN, E. W. Selecting the best distillation control configuration. *AIChE J*. 1990, 753-764.

SKOGESTAD, S. Dynamics and Control of Distillation Columns: A Critical Survey. *IFAC-symposium*. 1997a, 177-217.

SKOGESTAD, S. Dynamics and Control of Distillation Columns: A Tutorial Introduction. *Elsevier*. 1997b, 539-562.

SIMITH, J. M., VAN NESS, H. C., ABBOTT, M. M. *Introdução à Termodinâmica da Engenharia Química*. Editora LTC, quinta edição. 2000. 697 p.

TYREUS, B., LUYBEN, W. L. Control of a binary distillation column with sidestreamdrawoff. *Ind. Eng. Chem. Process Des. Dev.* 1975, 391-398.