

UNIVERSIDADE FEDERAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
PÓS - GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE
DESTILAÇÃO EXTRATIVA COM INTEGRAÇÃO
ENERGÉTICA PARA PRODUÇÃO DO ETANOL ANIDRO.**

Delba Nisi Cosme Melo

CAMPINA GRANDE - PARAÍBA
MARÇO - 1998

**SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE
DESTILAÇÃO EXTRATIVA COM INTEGRAÇÃO
ENERGÉTICA PARA PRODUÇÃO DO ETANOL ANIDRO.**

DISSERTAÇÃO APRESENTADA AO CURSO DE PÓS - GRADUAÇÃO
EM ENGENHARIA QUÍMICA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DA
PARAÍBA, COMO REQUISITO À OBTENÇÃO DO TÍTULO DE MESTRE.

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO :	OPERAÇÕES E PROCESSOS
PROFESSOR ORIENTADOR :	DR. MICHEL FRANÇOIS FOSSY
PROFESSOR CO - ORIENTADOR :	MSC NAGEL ALVES COSTA

CAMPINA GRANDE - PARAÍBA

MARÇO - 1998



M528s Melo, Delba Nisi Cosme.
 Simulacao e otimizacao do processo de destilacao
 extrativa com integracao energetica para producao do etanol
 anidro / Delba Nisi Cosme Melo. - Campina Grande, 1998.
 131 f. : il.

 Dissertacao (Mestrado em Engenharia Quimica) -
 Universidade Federal da Paraiba, Centro de Ciencias e
 Tecnologia.

 1. Etanol Anidro. 2. Destilacao - Processo. 3.
 Dissertacao. I. Fossy, Michel Francois. Dr. II. Costa,
 Nagel Alves. Msc. III. Universidade Federal da Paraiba -
 Campina Grande (PB). IV. Título

CDU 661.722(043)

**SIMULAÇÃO E OTIMIZAÇÃO DO PROCESSO DE
DESTILAÇÃO EXTRATIVA COM INTEGRAÇÃO
ENERGÉTICA PARA PRODUÇÃO DO ETANOL ANIDRO.**

Delba Nisi Cosme Melo

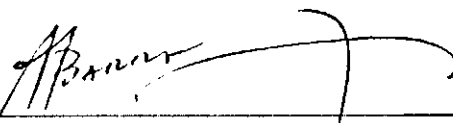
DISSERTAÇÃO APROVADA EM : 20 / 03 / 1998

BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Michel François Fossy

Orientador



Prof. Dr. Antonio André Chivanga Barros

Examinador



Prof. Dr. Romildo Pereira Brito

Examinador

CAMPINA GRANDE - PB

MARÇO - 1998

DEDICATÓRIA

A Deus, “por ter me dito sempre : instruir-te-ei e ensinar-te-ei o caminho que deves seguir, guiar-te-ei com os meu olhos”.

Aos meus pais, Maria Inês e José Cosme, pelo incentivo e apoio de inestimável compreensão.

Aos meus familiares, em especial, meus irmãos: Denise e Antônio; meus sobrinhos Marcos e Aninha; e ao meu cunhado Anísio, todos de sublime existência para mim..

Ao meu avô José Vieira (in memorian) por toda sua afeição e empenho na minha educação.

Ao meu namorado Neto pelo carinho e afeto.

AGRADECIMENTOS

Aos professores : Michel F. Fossy pela orientação e disponibilidade sempre que solicitado, contribuindo de forma decisiva para a elaboração deste trabalho; Nagel A. Costa, como Co - Orientador, pelas contribuições bastante valiosas no momento oportuno.

Registro os meus agradecimentos ao prof. Eudésio O. Vilar - Coordenador do Laboratório de Simulação e Modelagem do Departamento de Engenharia Química-UFPB - e a Tereza M. Araújo pelo apoio dispensado.

À coordenação de Pós - Graduação em Engenharia Química, nas pessoas do prof. Kepler B. França (Coordenador), de Maria José Bezerra e de Maricé P. Silva (Secretárias) pelo carinho, atenção e amizade.

Ao membros participantes da banca examinadora : Prof. Antônio A. C. Barros e Prof. Romildo P. Brito, pela disposição e paciência em colaborar na avaliação e sugestões sempre bem oportunas.

A CAPES pelo suporte financeiro.

A nossa turma de mestrado, Lily, Carmem, Cláudia e Paulo pela união nessa árdua jornada. E em especial aos amigos : Stélvia, Magna, Cibele, Wilton, Carlos, e Oswaldo pelos momentos de descontração e incentivo em alguns momentos difíceis.

Agradeço em especial a minha amiga Lily que nos momentos de aflições, dificuldades e desatinos soube nos confortar, sem nos deixar abater. Aprendendo juntas que : "a experiência que não dói, pouco se aproveita dela". Portanto, o trabalho incessante nos edificou levando a nossa realização profissional.

Ao prof. Severino R. de Farias Neto, do qual, ouvi críticas justas e perspicazes, ajudando de forma grandiosa na elaboração deste trabalho.

A professora Élvia A. V. Miranda pela orientação, ensinando sempre a luz da verdade espiritual.

As professoras Líbia de S. Conrado e Meiry Gláucia pelo apoio material e moral durante a realização dessa caminhada.

E, finalmente, a todos que de alguma forma contribuíram direta ou indiretamente para o desenvolvimento da minha dissertação.

SUMÁRIO

NOMENCLATURA

RESUMO

ABSTRACT

INTRODUÇÃO.....1

OBJETIVOS.....4

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....6

2. INTRODUÇÃO.....6

2.1 Característica da Destilação Extrativa.....7

2.1.1 Azeotropia7

2.1.2 Destilação Extrativa.....9

2.1.3 Coluna de Recuperação de Solvente.....10

2.1.4 Seleção do agente extrativo.....10

2.2 Conservação de Energia.....12

2.2.1 Alternativas de economia de energia e de integração energética.....13

2.2.2 Particularidades da integração térmica múltiplo efeito.....20

3. FUNDAMENTOS DA SIMULAÇÃO.....24

3. Simulação.....	24
3.1 Procedimentos de partida para a simulação	24
3.2 Simulador de Processos- HYSIM.....	26
3.2.1 Introdução e Filosofia.....	26
3.2.2 Estrutura operacional do HYSIM.....	26
3.2.3 Operações Unitárias específicas.....	27
Coluna de Destilação Extrativa.....	27
Trocadores de Calor simples.....	29
3.3 Modelagem matemática.....	30
3.3.1 Modelagem simplificada de uma coluna de destilação.....	30
3.3.2 Análise operacional da coluna de destilação.....	30
3.3.3 Procedimento de cálculo na coluna de destilação.....	32
3.3.4 Seleção do método para as propriedades termodinâmicas.....	33

4. METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO.....36

4. Introdução.....	36
4.1 Simulação e Otimização do Caso estudado.....	36
4.2 Simulação preliminar.....	38
4.2.1 Destilação Extrativa.....	38
4.2.2 Destilação Convencional.....	39
4.3 Melhorias operacionais de cada coluna.....	40
4.4 Melhorias operacionais do caso padrão.....	43
4.5 Melhorias operacionais do caso proposto.....	44
4.5.1 Integração energética.....	44
4.6 Parâmetros estudados durante a otimização.....	48

5. RESULTADOS DA SIMULAÇÃO.....	53
5.1 Simulação preliminar.....	54
5.1.1 Coluna de Destilação Extrativa.....	54
5.1.2 Coluna de Destilação Convencional.....	61
5.2 Otimização Não Seqüencial.....	63
5.2.1 Destilação Extrativa.....	63
5.2.2 Destilação Convencional- parâmetros otimizados.....	66
5.3 Otimização Seqüencial.....	68
5.3.1 Melhorias operacionais do caso padrão.....	68
5.3.2 Melhorias operacionais do caso proposto.....	70
5.4 Cálculo de economia de energia.....	77
5.5 Influência dos perfis - efeito comparativo.....	78
5.5.1 Efeitos da integração energética no perfil de temperatura	78
5.5.2 Efeitos da integração energética nos perfis de fluxo total de líquido e de vapor.....	80
5.5.3 Efeitos da integração energética nos perfis de composição dos componentes.....	81
6. CONCLUSÃO.....	87
7. SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS.....	89
8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	91
BIBLIOGRAFIA ADICIONAL.....	97
APÊNDICE A	
APÊNDICE B	
APÊNDICE C	

NOMENCLATURA

Componentes : (1) etanol ; (2) água ; (3) etileno glicol;

F = vazão de alimentação original, kg/h;

FA = posição da alimentação original;

FS = posição da alimentação do solvente;

N = número de estágios das colunas;

Q_c = carga térmica do condensador, GJ/H;

Q_R = carga térmica do refeedor, GJ/H;

Q = consumo de energia no "reboiler" ,GJ/H;

R = razão de refluxo externa;

R_{MIN} = razão de refluxo mínima;

S = vazão de solvente, kg/h;

S/F = taxa de solvente: vazão de solvente/ vazão alimentação original;

T = temperatura operacional da coluna;

T_B = temperatura da base, ° C;

T_t = temperatura do topo, ° C;

T_b = temperatura do ponto de orvalho, ° C;

D = vazão de destilado, kg/h;

B = vazão do resíduo, kg/h;

P_p = pressão do topo, kpa;

P_B = pressão da base, kpa;

P = pressão operacional da coluna, kpa;

P_i^S = pressão de vapor do componente i;

f_i^L = fugacidade do componente i na fase líquida;

ΔP = diferença de pressão;

ΔT = diferença de temperatura;

K_i = constante de equilíbrio do componente i;

UA = produto do coeficiente global de transferência de calor e área de troca térmica;

• **Composições dos componentes :**

• $i ; j : 1, 2 \text{ e } 3;$

X_i = fração do componente i na fase líquida;

Y_j = fração do componente j na fase vapor;

$X^{(l)}_F$ = Composição do componente i na corrente líquida da alimentação, % (mássica);

$X^{(l)}_D$ = composição do componente i na corrente líquida do destilado, % (mássica);

$X^{(l)}_R$ = composição do componente i no líquido residual, % (mássica);

- **Variáveis Operacionais Ótimas:**

N_{OTM} = número de estágio ótimo;

R_{OTM} = razão de refluxo ótima;

Q_{COTM} = Carga térmica ótima do condensador, gj/h;

Q_{ROTM} = Carga térmica ótima do refeedor, gj/h;

S_{OTM} = vazão de solvente ótima, kg/h;

FA_{OTM} = estágio da alimentação original;

FS_{OTM} = estágio do solvente;

S/F_{OTM} = taxa de solvente ótima;

- **Cálculo multicomponente na coluna de destilação:**

L_n = fluxo total de líquido;

V_n =fluxo total de vapor;

$K_{n,i}$ =constante de equilíbrio do componente i, no estágio n;

T_n =temperatura do estágio n;

- **Letras Gregas:**

γ_i^L = coeficiente de atividade do componente i, na fase líquida;

ϕ_i^V =coeficiente de fugacidade do componente i, na fase vapor.

UFPB/CCT/DEQ

DISSERTAÇÃO DE MESTRADO- MARÇO/98

TÍTULO: Simulação e Otimização Do Processo De Destilação Extrativa Com Integração Energética Para Produção do Etanol Anidro.

RESUMO

Etanol-água é uma das misturas azeotrópicas de maior interesse comercial. Assim, a destilação extrativa destaca-se como método de separação dessa mistura, haja vista sua facilidade operacional com um bom agente extrativo. O consumo excessivo de energia numa coluna de destilação gera esforços para buscar alternativas de economia. A proposta deste trabalho de simulação, baseada no simulador **HYSIM**, é otimizar a unidade de produção do etanol anidro considerando o caso padrão (colunas interligadas) e o caso proposto (integração energética) fazendo uma avaliação das variáveis relevantes e a otimização das mesmas, para cada coluna, com o objetivo de minimizar o consumo energético. Avaliou-se a sensibilidade de alguns parâmetros como: concentração do etanol na alimentação, taxa de solvente, posições das alimentações, e pureza do produto final, bem como a sua influência no consumo energético. Analisou-se também a viabilidade da técnica de integração energética, comparando os perfis de temperatura, vazão total de líquido e de vapor, e de composição para os casos padrão e proposto. Com os resultados obtidos, constatou-se que a otimização da unidade reduziu o consumo de energia em torno de 20% em relação às condições de instalação e que o arranjo obtido pela integração energética, como proposta de trabalho, apresentou uma economia no consumo de energia no refeedor de 33% em relação ao consumo da unidade padrão otimizada.

PALAVRAS-CHAVES: Destilação Extrativa, Integração Energética, Simulação.

ABSTRACT

One of the greatest commercial interests of azeotropic mixtures is ethanol-water. Consequently, extractive distillation appears as a method of separation for this kind of mixture, regarding its simple operation with a good extractive agent. The excessive use of energy in a distillation column points forward the investigation alternative ways of economy. The purpose of this simulation work, using Hysim, is to optimize an anhydrous ethanol production unit regarding a model case (sequential columns) and a suggested case (energetical integration), establishing an evaluation and optimization of the most significant parameters for each column, trying to minimize the energy consumption. Sensitivity of some parameters as: concentration of ethanol in the feed, solvent ratio, positions double of the feeding and purity of the final product, as also its influences in the energy consumption was evaluated. The viability of the technique of energy integration was also analyzed comparing the temperature, total outflow of liquid and vapor and composition profiles for the model and suggest cases. The results show that an optimized unity can reduce the use of energy in about 20% regarding installation conditions. With an energetic integration scheme, an economy of 33% is obtained comparing to the energy required by the optimized unity without thermal integration.

KEY WORDS: Extractive Distillation, Energetical Integration, Simulation.

CAPÍTULO I

INTRODUÇÃO

A destilação é um dos processos de fracionamento mais utilizado nas indústrias químicas e petroquímicas e se baseia em diferenças de pontos de ebulição cuja interação entre as fases nos diversos estágios da coluna proporciona vaporizações e condensações parciais que consomem grande quantidade de energia. Mais de 95% da energia fornecida à coluna através do refeedor é removida pelo condensador (**LEE & PAHL, 1985**).

Quando nos confrontamos com o problema de conservação de energia nos processos de destilação, exige-se melhorias operacionais, modificações extensas em equipamentos já existentes, ou até mesmo, se recorre à outras alternativas de separação que auxiliarão na diminuição do consumo energético.

Uma das técnicas mais antigas para produção do etanol anidro, é a fermentação do açúcar proveniente da cana. O álcool presente no mosto de fermentação com baixa concentração é recuperado por destilação convencional até aproximar-se de sua concentração azeotrópica com a água. A desidratação final do álcool para a produção do etanol de alta pureza, requer o emprego de métodos especiais de destilação, como por exemplo, a destilação azeotrópica explorada por **LAROCHE ET AL. (1992)** que tem mostrado estudos sobre colunas de destilação azeotrópica homogênea, bem como **KNAPP & DOHERTY (1990)** que avaliaram a destilação azeotrópica heterogênea e artigos atuais como os de **WIDAGDO & SEIDER (1996)** e de **BAUER & STICHLMAIR (1995)** que exploraram também a destilação azeotrópica. A destilação extrativa é explorada por **LEE & PAHL (1985)**, **LYNN & HANSON (1986)**, **MEIRELLES (1992)**, **KNAPP & DOHERTY (1994)**, e finalmente, **BATISTA & MEIRELLES (1997)** que fizeram o estudo da

simulação e integração energética de refluxo secundário e vaporização (SRV) na coluna de destilação extrativa.

Dependendo do componente adicionado, o processo de destilação será denominado de azeotrópico ou extrativo, ambos de emprego industrial já testados e de plena viabilidade operacional, não apenas na desidratação do etanol mas também na separação de outras misturas azeotrópicas. Na destilação extrativa, para que haja uma modificação no equilíbrio de fases do sistema azeotrópico etanol-água, é necessária a adição de um terceiro componente cujo ponto de ebulição é elevado. Com o auxílio do solvente se altera a volatilidade relativa dos constituintes da mistura original, afastando o seu valor da unidade, permitindo assim que o ponto azeotrópico seja quebrado.

A destilação extrativa se destaca frente à outros métodos especiais de separação devido a sua simplicidade e flexibilidade operacional, necessitando de um número de estágios menor e, conseqüentemente, um menor dimensionamento de suas unidades. Nesta técnica, o solvente interage com os componentes da mistura original, permitindo a quebra do azeótropo sem formar qualquer outro ponto azeotrópico.

No processo de destilação extrativa para a fabricação do álcool desidratado, com a adição por exemplo do etileno glicol, o binário azeotrópico etanol-água pode ser rompido permitindo obter etanol anidro como produto de topo da coluna extrativa a mistura solvente-água como produto de base, que, por sua vez, é separada em seguida na coluna de recuperação do solvente. O solvente assim recuperado é reciclado para a coluna extrativa.

A integração energética entre equipamentos ou entre correntes de uma unidade é bastante utilizada em processos industriais, como forma de conservação de energia. A técnica de integração de calor entre as correntes do processo se torna possível devido ao gradiente de temperatura entre as correntes que trocarão calor. Deste modo, o vapor de topo de ambas as colunas pode ser aproveitado no pré-aquecimento da alimentação original, diminuindo assim, de maneira significativa, o consumo de energia.

A técnica de integração térmica entre as colunas com o aproveitamento do calor das correntes de topo ou de fundo das colunas possibilitará uma redução significativa no fornecimento total de energia para o sistema.

Para o conhecimento amplo destas técnicas, a simulação vem sendo uma grande aliada em processos industriais como uma ferramenta de manipulação da unidade para uma avaliação prévia do comportamento operacional da planta, como por exemplo, a produção do etanol sem a necessidade de modificações efetivas no processo. A simulação de processos é um meio de representar um processo real através de modelos matemáticos elaborados para prever a sua performance mediante incorporação de equações de balanço material e de energia nas operações unitárias, tais como: trocadores de calor, resfriadores, compressores, expansores, bombas, válvulas, separadores, reatores ou colunas de colunas de destilação (NETO & MORI, 1995).

Mediante a simulação busca-se a otimização de um sistema, e portanto, otimizar um processo, significa encontrar um meio de operá-lo mais consistente possível em função do objetivo que se quer alcançar, requerendo que o mesmo seja modificado do seu estado existente para um estado considerado mais proveitoso que o anterior. Portanto, a otimização realiza um ajuste das variáveis manipuladas na operação. Na maioria dos processos de separação se busca condições ótimas operacionais.

OBJETIVOS

Este trabalho tem como objetivo a otimização de uma unidade de processamento do sistema azeotrópico etanol (1)-água (2) mediante destilação extrativa com auxílio da integração energética, como alternativa de economia de energia. A minimização do consumo energético consiste na determinação das variáveis de decisão para a otimização da unidade de produção do etanol anidro integrada energeticamente, a partir das especificações do produto desejado.

A análise do caso estudado, será restrita à aspectos meramente energéticos. Não serão levados em consideração aspectos inerentes a investimento ou a viabilidade econômica e sim a otimização feita buscando condições ótimas operacionais e a minimização do consumo de energia.

A unidade de produção do etanol anidro pode ser representada no simulador de processos HYSIM envolvendo as várias etapas dessa unidade. O modelo termodinâmico empregado para descrever a não-idealidade da fase líquida da mistura etanol (1)-água (2)-etileno glicol (3) é o modelo UNIQUAC.

O procedimento da simulação engloba a otimização das principais variáveis operacionais (taxa de solvente, número de estágios, localizações do estágio de carga e outras) do processo padrão, e também do caso com a integração térmica (caso proposto).

No final da simulação poder-se-á explorar os resultados da seguinte forma:

- **Comprovar a viabilidade da técnica de integração térmica na destilação extrativa de misturas azeotrópicas;**
- **Comparar o caso padrão com o caso proposto (integração energética), com ou sem otimização através do cálculo de economia obtida;**
- **Analisar a influência desta técnica sobre os perfis de temperatura,**

de concentração, vazão total de líquido e de vapor, na pureza dos produtos, bem como, na economia de energia.

- Verificar a sensibilidade paramétrica das variáveis envolvidas no processo.

CAPÍTULO II

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2. Introdução

Um dos métodos convencionais para recuperação do etanol anidro dos mostos de fermentação está na destilação de etanol em diluição aquosa no azeótropo. Todos os métodos de destilação, sejam eles, especiais ou simples, consomem cerca de 50 a 80% da energia usada no processo típico de produção do etanol (**LADISCH & DYCK, 1979**). A maioria do consumo de energia acontece na destilação numa concentração acima de 85% em mol de etanol (**LEE & PAHL, 1985**).

Na busca de purezas elevadas de etanol, a quantidade de pratos teóricos aumenta. No entanto, para minimizar esta quantidade, uma maior razão de refluxo é requerida, conseqüentemente o consumo de energia tende a aumentar (**LEE & PAHL, 1985**). Quando da aproximação do ponto azeotrópico está se aproximando, a energia requerida para a destilação se aproxima da quantidade de energia necessária para a produção do etanol anidro. Assim, uma energia adicional é requerida para a destilação, na busca da quebra do azeótropo (**LEE & PAHL, 1985**). Então, além de desenvolver uma alternativa de economia de energia é necessário encontrar uma técnica especial de destilação a fim de produzir o etanol anidro.

Tendencialmente, misturas azeotrópicas são muitas vezes separadas pela destilação extrativa. Em muitas aplicações da destilação extrativa, são destacadas algumas desvantagens devido a uma combinação de alto consumo de energia e um alto nível de temperatura, cujo calor é fornecido para o processo para efetivar a separação desejada. No entanto, esses fatores são compensados pelas alternativas de economia de energia disponíveis,

tornando o processo viável tanto operacionalmente quanto em termos de viabilidade econômica.

A desidratação do etanol aquoso pelo método de destilação extrativa foi previamente testado e comparado com o de destilação azeotrópica por **BLACK & DITSLER (1972)**. Os resultados obtidos mostraram que a destilação extrativa com etileno glicol é mais dispendioso que a destilação azeotrópica com n-pentano. Eles acreditaram que o método de destilação extrativa melhorado operacionalmente resultaria numa melhor economia que outros processos apresentados comercialmente.

DOUGLAS & FEINBERG(1983) estudaram o processo de separação do etanol via não destilativo. Dentro da perspectiva de economia e de consumo de energia, estes autores relataram que a mais competitiva tecnologia convencional seria o sistema de destilação azeotrópica com integração de energia, utilizando o sistema dietil éter que proporcionou um consumo específico de 6000 Kg/Kj de etanol como produto (**KNAPP & DOHERTY, 1990**).

2.1 Características da Destilação Extrativa

2.1.1 Azeotropia

A palavra azeótropo foi traduzida por um ancião grego, como sendo "ponto inalterado", meio em que, o vapor emitido tem a mesma composição que o líquido (**SWIETOSLAWSKI, 1963**).

De acordo com **AHÓN & MEDEIROS (1996)**, um azeótropo é definido como uma mistura na qual as composições da fase líquida e da fase vapor em equilíbrio são iguais, o que implica que qualquer que seja a quantidade de energia fornecida haverá vaporização sem mudança de composições das fases em oposição ao que ocorre com uma mistura ideal. Esse comportamento

azeotrópico pode ser gerado pelas interações não ideais entre as moléculas de dois ou mais componentes da mistura.

Para classificar as misturas azeotrópicas do ponto de vista termodinâmico, **LECAT (1918)** examinou seus desvios em relação a lei de Raoult (**AHÓN & MEDEIROS, 1996**).

Para um equilíbrio líquido-vapor (ELV) de um sistema multicomponente, a constante de equilíbrio K_i para a espécie i , é definida por:

$$K_i = \frac{Y_i}{X_i} = \frac{\gamma_i^L \cdot f_i^L}{\phi_i^V \cdot P} \quad (2.1)$$

onde: Y_i e X_i são as frações molares das espécies i nas fases vapor e líquido, respectivamente em equilíbrio. O grau de não-idealidade é expressado pelos desvios do coeficiente de atividade γ_i^L da unidade para a fase líquida e o coeficiente de fugacidade (ϕ_i^V) para a fase vapor; f_i^L é a fugacidade do líquido puro da espécie i . Em pressões baixas, $\phi_i^V = 1$ e $f_i^L = P_i^S$ e a **Equação (2.1)** se reduz a :

$$K_i = \frac{Y_i}{X_i} = \gamma_i^L \cdot \frac{P_i^S}{P} \quad (2.2)$$

onde: P_i^S é a pressão de vapor da espécie i .

Um azeótropo de ponto de ebulição máximo ocorre para desvios negativos da lei de Raoult ($\gamma_i^L < 1$). Desvios positivos ($\gamma_i^L > 1$), caracterizam azeótropos de ponto de ebulição mínimo. Em um ponto azeotrópico, a constante de equilíbrio para todos os componentes é unitária.

O desvio em relação à lei de Raoult não é suficiente para caracterizar a ocorrência de um azeótropo. Os pontos de ebulição dos componentes puros devem estar suficientemente próximos para que haja a ocorrência de uma

temperatura máxima ou mínima. Os componentes que têm ebulições próximas, com pequenos desvios em relação à idealidade podem formar azeótropo, enquanto outros que formam soluções poucos ideais, não podem apresentar azeotropismo em virtude da grande diferença entre os seus pontos de ebulições.

Um azeótropo binário é homogêneo quando apenas uma fase líquida está presente, como por exemplo o sistema etanol-água.

2.1.2 Destilação Extrativa

A simplicidade operacional do processo de destilação extrativa para produção do etanol anidro, mais simples que o processo de destilação azeotrópica, é um processo atrativo para a separação de misturas fortemente não-ideais. A idéia básica desse processo é adicionar um solvente extrativo somente na porção mais rica em etanol no fracionador, onde a curva de equilíbrio líquido-vapor (VLE) é muito desfavorável para a destilação simples. A adição do solvente tais como os glicóis não só elimina o azeótropo etanol-água, como também modifica a aparência da curva VLE da porção mais rica em etanol, que agora se torna favorável para ocorrer a destilação. O solvente atua alterando as volatilidades relativas dos componentes. Essa mudança das volatilidades se torna necessária em virtude das semelhanças das pressões de vapor dos componentes da alimentação original e da presença do azeótropo. Como o ponto de ebulição do solvente é elevado torna-se difícil a formação de novos azeótropos e ocorre a eliminação total dos azeótropos presentes na mistura original. A taxa de transferência do solvente líquido de estágio para estágio é relativamente constante, em virtude da sua baixa volatilidade.

No processo de destilação extrativa para a fabricação do álcool desidratado, o etileno glicol é adicionado na seção superior da coluna, enquanto que o sistema azeotrópico etanol-água é alimentado próximo da região central da mesma.

2.1.3 Coluna de Recuperação do Solvente

Na coluna de recuperação do solvente, separa-se a mistura solvente-água, onde a água sai como produto de topo e o agente extrativo (solvente) como produto de base, que por sua vez é reciclado para a coluna extrativa. A recuperação do solvente é efetuada de maneira simples e normalmente separado pela destilação convencional, de modo que as taxas de solvente, de refluxo e as condições térmicas da alimentação sejam escolhidos para formar o perfil de concentração do solvente nesta coluna. A coluna de recuperação do solvente deve ser operada em uma pressão reduzida, por causa da grande diferença na volatilidade relativa entre a água e o etileno glicol. Com as duas colunas interligadas se formaliza o processo de destilação extrativa padrão.

2.1.4 Seleção do Agente Extrativo

A maioria das misturas azeotrópicas homogêneas é geralmente separada com o auxílio de um agente de separação que é totalmente recirculado dentro do processo destilativo. A seleção do agente extrativo é de fundamental importância, bem como as condições otimizadas de alimentação, que podem conduzir a um processo ótimo de separação.

STICHLMAIR & HERGUIJUELA (1992) ilustraram uma visão geral sobre solventes e destilação adequada de pratos. Estes autores mostraram que para selecionar um agente de separação se faz necessário avaliar e otimizar alguns parâmetros do processo bem como simultaneamente avaliar algumas características do solvente.

A escolha do melhor agente extrativo para a separação de uma mistura binária é feita através da análise do **mapa de composição residual (MCR)**¹ na mistura resultante ternária (KNAPP & DOHERTY, 1990). Uma estrutura simples destes mapas pode ser obtida com o conhecimento das composições dos azeótropos presentes, de suas temperaturas e das temperaturas de ebulição dos componentes puros presentes.

FOUCHER ET AL. (1991) fizeram um estudo sobre a busca dos melhores agentes extrativos para a separação por destilação azeotrópica homogênea da mistura etanol-água com estes mapas simplificados. Os resultados destes autores podem ser estendidos à destilação extrativa com o seu agente de arraste correspondente. Os bons candidatos são aqueles com alto ponto de ebulição e que não formam fronteiras de destilação e nem adicionam novos azeótropos à mistura. Fazem parte deste grupo o ácido acético, o etileno glicol, 2-amino-etanol, o meso-2-3-butanodiol e a morfolina. Segundo estes autores, somente o ácido acético e o etileno glicol são utilizados em escala industrial, sendo que o etileno glicol é mais vantajoso que o ácido acético, no que diz respeito à separação na coluna de recuperação do agente extrativo, pois apresenta um alto ponto de ebulição em relação a água.

GUIMARÃES (1996a) desenvolveu um algoritmo, utilizando uma mistura etanol-água-etileno glicol numa faixa de pressão de 1 a 12 atm para verificar e confirmar se realmente o etileno glicol continuava sendo um bom agente extrativo, sem a formação de novos azeótropos e nem limites de destilação, mesmo com a integração energética instalada. Os resultados confirmaram somente a presença do azeótropo etanol-água com a variação da composição com a pressão. Mesmo com o aumento das pressões operacionais

¹ **Mapa de Composição residual** apresenta-se como ferramenta para a seleção inicial de "entrainers" (agentes de separação), pois permite identificar os "entrainers" que podem gerar azeótropos, suas separatrizes e regiões de confinamento dos produtos (AHÓN & MEDEIROS, 1996).

pela integração energética adotada, **GUIMARÃES (1996a)** mostrou que o etileno glicol continua sendo o melhor agente extrativo.

LEE & PAHL (1985) indicaram, através de um estudo seletivo de solventes, que glicóis são, em geral, solventes bastante seletivos para a produção do etanol anidro a partir do caldo presente nos mostos de fermentação, aliado a destilação extrativa. Assim, desenvolveu-se um processo de destilação extrativa melhorado, baseado na análise de dados experimentais, para a separação do etanol desidratado com candidatos a solventes. A idéia básica deste processo é adicionar um solvente extrativo na porção rica em etanol do fracionador, para eliminar o azeótropo etanol-água, mudando a aparência indesejável da **curva do equilíbrio líquido-vapor (ELV)** para uma condição mais favorável para a destilação. **LEE & PAHL (1985)** concluíram que os solventes mais promissores são glicerina, etileno glicol, tetraetileno glicol e trietileno glicol.

2.2 Conservação de Energia

O consumo excessivo de energia transforma as colunas de destilação na primeira área de esforços na busca de economia de energia (**SHINSKEY, 1977**). Diversos autores, vêm se dedicando ao desenvolvimento de métodos para a conservação de energia em processos de destilação, por exemplo, **ROBINSON & GILLILAND, 1950**. A maioria destes estudos tem sido limitado para **misturas de volatilidades constantes** que requerem procedimentos simples para o cálculo short-cut de projeto (**KNAPP & DOHERTY, 1990**). Viu-se a necessidade de separação e purificação de misturas não-ideais e azeotrópicas, associando a integração térmica de separações dessas misturas com diferentes unidades de operação, tais como: destilação e destilação extrativa, como áreas de pesquisas vitais para "reduções substanciais" no consumo de energia, e, portanto, novas combinações de processos foram

explorados, a começar pelos trabalhos de **KANTZEN ET AL.(1980)**, **MESSICK ET AL.(1983)**, e de **LYNN & HANSON(1986)** (**KNAPP & DOHERTY, 1990**).

2.2.1 Alternativas de Economia de Energia e de Integração Energética

Para solucionar o problema de como economizar a energia utilizada nos processos de destilação, dentre as alternativas de melhorias operacionais e meios não-destilativos, existem outros, que são os métodos de aproveitamento de energia na própria coluna de destilação como a recompressão mecânica de vapor e sistemas de múltiplo efeito. A destilação extrativa múltiplo efeito para sistemas azeotrópicos é bastante utilizada em processos industriais, a qual engloba uma operação com duas ou mais colunas de destilação em paralelo, com o refeedor de uma coluna servindo como o condensador da próxima coluna (**PINTO & PEREIRA, 1988**). De maneira similar, introduzindo a alimentação da mistura original numa coluna de destilação extrativa na forma de vapor, ao invés de líquido saturado, consegue-se uma economia de energia, principalmente quando o componente de maior proporção da mistura original é um chave leve. Estes dois efeitos combinados oferecem um método atrativo para a separação do chave leve.

Numerosos compostos orgânicos formam azeótropos aquosos cuja separação da água é comumente um problema industrial. Quando a volatilidade relativa dos componentes se aproxima de um, o produto de uma destilação simples é então limitado devido a composição do azeótropo da mistura original, requerendo um grande número de estágios teóricos e um alto refluxo. Conseqüentemente se torna necessário um tratamento especial para a mistura inicial com técnicas de separação exclusivas, para que possa obter compostos orgânicos como produtos anidros desejados. Vale ressaltar que em muitas vezes o tratamento se torna dispendioso com investimento de capital e geração de custos operacionais.

Nos últimos quinze anos, o etanol produzido pela fermentação tem ganho enorme importância como uma octana, se destacando como aditivo para a gasolina e como combustível, particularmente no Brasil, pelo incentivo do proálcool até então um pouco adormecido e que só agora vem sendo resgatado, com respaldos governamentais.

Na década atual, a destilação extrativa com etileno glicol é usada para desidratar etanol azeotrópico. Com isso surgiram vários trabalhos para análises de diferentes possibilidades de conservação de energia. Alguns estudos recentes mostram que a destilação extrativa seria mais favorável que a tradicional destilação azeotrópica com benzeno (**MEIRELLES ET AL., 1992**).

LYND & GRETHLEIN (1984) usaram recompressão mecânica de vapor para reduzir o consumo de energia e utilizaram acetato de potássio como agente de separação ou extrativo.

KNIGHT & DOHERTY(1989) mostraram que economias substanciais de energia e de capital podem ser conseguidas pela otimização da seqüência de separação. Adicional economia de energia crescente de 65% sobre a seqüência otimizada é atingida pela integração térmica múltiplo efeito. Eles adotaram como exemplo a produção do etanol com 99.8% mol de pureza de uma fermentação do caldo de cana através da seqüência de destilação extrativa clássica com o etileno glicol como solvente. Mostraram um procedimento short-cut de otimização baseado no trabalho de **FISHER ET AL. (1985)**, só que o procedimento adotado por eles foi incompleto no que se refere as variáveis de otimização. Portanto, **KNIGHT & DOHERTY (1989)** concluíram que apenas uma variável de otimização era significativa para o processo: a razão entre as alimentações da coluna extrativa. Mais tarde foi comprovado por **KNAPP & DOHERTY(1990)** a existência de mais variáveis de decisão na otimização.

COLLURA & LUYBEN (1988) analisaram diversas opções para a conservação de energia na destilação de soluções diluídas de etanol até a proximidade da composição azeotrópica, recorrendo a técnicas convencionais

como a integração de colunas em múltiplos efeitos e a recompressão de vapor.

KNAPP & DOHERTY (1990) desenvolveram uma metodologia para a integração térmica de seqüências de colunas para a separação de azeótropos homogêneos empregando como sistemas de interesse comercial metanol-acetona-propileno glicol e etanol-água-etileno glicol. Eles calcularam as **pressões de bifurcação**² e manipularam os mapas de composições residuais em diferentes pressões, com pressões de operação entre 1 e 10 atm com o objetivo de verificar:

- Quais as seqüências são possíveis na pressão atmosférica;
- Que processo de separação, se há algum, torna-se impossível em altas pressões;
- Que composição do produto da coluna deve ser alcançada, se há alguma, que necessita ser ajustada quando a pressão é mudada.

Então para as pressões de interesse, o **mapa de composição residual (MCR)**³ está mostrado na **Figura 2.1** para o sistema etanol-água-etileno glicol, conforme os itens a e b. **KNAPP & DOHERTY (1990)** observaram com a **Figura 2.1a** que não havia limites de destilação para o sistema estudado na pressão atmosférica e que aparecia plausivelmente com argumentos simétricos que um ou outro, etanol puro ou água pura, seria recuperado na coluna de extração, cálculos exaustivos, no entanto, indica que somente etanol puro pode ser obtido como destilado. A **Figura 2.1b** mostra

² **Pressões de Bifurcações** são aquelas pressões em que novos azeótropos aparecem ou em que, azeótropos já existentes desaparecem da mistura (**GUIMARÃES ET AL., 1996b**).

³ **Mapa de Composição residual** é a geração de um conjunto de curvas residuais que representam o perfil de composição dos componentes na fase líquida em função das suas temperaturas de ebulição para uma determinada pressão. Serve para caracterizar o comportamento de misturas azeotrópicas binárias, e para medir a sensibilidade dos azeótropos com a pressão, indicando se a separação é possível sobre qual extensão de pressão e quais os limites de destilação.

que não há formação de novos azeótropos ou nem limites de destilação em elevadas pressões. Os autores concluíram que para os arranjos testados e para as condições operacionais exploradas, a separação se torna possível em altas pressões e a análise da integração energética pode ser procedida.

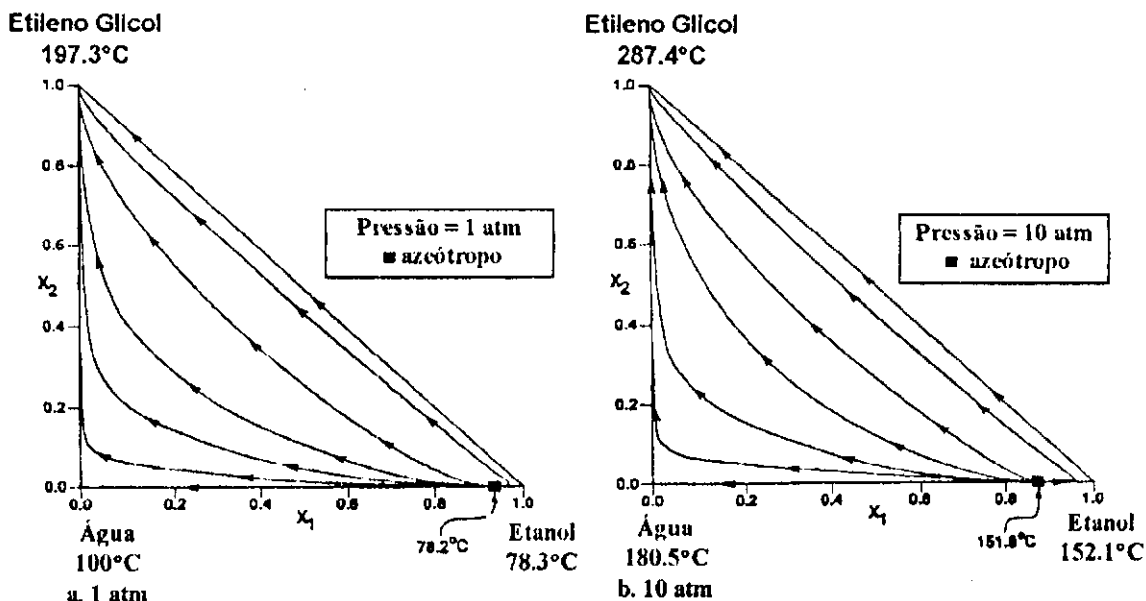


Figura 2.1- Mapa de Composição Residual para o Sistema Etanol-água-etileno glicol para as pressões de operação de 1 e 10 atm respectivamente

HERFURTH ET AL. (1987) otimizaram os parâmetros de operação para a destilação azeotrópica do sistema etanol-água-ciclohexano. MEIRELLES ET AL. (1992) também trabalharam com a otimização das variáveis operacionais para a destilação extrativa do sistema etanol-água-etileno glicol, reduzindo de forma significativa o consumo de energia.

De acordo com KNAPP & DOHERTY (1992), uma nova técnica de destilação por balanço de pressão para a separação de misturas azeotrópicas homogêneas foi desenvolvida. A técnica é baseada em misturas em que os limites de destilação estão em função da sensibilidade da pressão azeotrópica. Ambos azeótropos binários insensíveis e sensíveis com a pressão podem ser

separados em componentes puros através de duas colunas usando novos solventes, como por exemplo, acetona para a mistura etanol-água e o metil etil cetona (MEK) separando a acetona do metanol, formando condições de destilação sensíveis com a pressão, entre os dois componentes puros para ser isolados. Examinando as misturas etanol-água e acetona-metanol, **KNAPP & DOHERTY (1992)** puderam observar comportamentos do tipo:

- Uma região de multiplicidade no número de pratos requeridos para encontrar a separação desejada, dada uma razão de refluxo fixa;
- Um refluxo máximo sobre o qual a coluna se torna inoperável;
- A separação onde o componente inesperado é o destilado, devido a reversão da volatilidade relativa que muda com a pressão;
- Quando a pressão é aumentada, numa separação não-azeotrópica torna-se possível a separação.
- Muitos sistemas contêm limites de destilação múltiplas, onde somente uma destas condições separa o produto desejado, isto é, há somente um caminho possível de destilação, tornando-se mais complexo se todas as possibilidades variar com a pressão. Os autores concluíram para o método por balanço de pressão (variação da pressão), que, com a introdução do solvente gera condições de destilação que leva à um dos três caminhos opcionais, podendo selecionar melhor os solventes em função do produto que se quer obter e em função das composições que realmente mudam de forma apreciável com a pressão. Os caminhos opcionais são:

(i) O solvente não forma novos azeótropos na pressão ambiente, mas quando a pressão é aumentada ou diminuída, novos azeótropos aparecem, e se movem rapidamente com a mudança da pressão, como é o caso da desidratação do etanol com acetona;

(ii) O solvente forma um ou mais novos azeótropos, onde composições mudam rapidamente com a pressão;

(iii) O solvente forma um ou mais novos azeótropos na pressão atmosférica. No entanto, eles desaparecem quando a pressão é aumentada

(ou decrescida), caso por exemplo da separação da acetona e metanol usando metil etil cetona.

LYNN & HANSON (1986) propuseram o uso de uma alimentação vapor saturado de uma mistura azeotrópica para economizar energia na destilação extrativa. Eles se valeram de características específicas da destilação extrativa aplicada ao sistema etanol/água-etileno glicol para sugerirem possibilidades de conservação de energia. A idéia principal consiste em empregar, como alimentação para a coluna de destilação extrativa, uma mistura azeotrópica etanol-água na forma de vapor saturado. Esta técnica reduz de forma substancial a energia consumida desta unidade, já que o componente principal da fase vapor é o etanol. Outros estudos de integração térmica feitos por **KNAPP & DOHERTY (1990)** confirmaram a significativa redução do consumo de energia neste tipo de destilação. **MEIRELLES (1991)** se valeu da mesma idéia de **LYNN & HANSON (1986)**, e após otimizar parâmetros operacionais chegou a uma redução de 17% do consumo de energia.

A teoria de bifurcação⁴ desenvolvida por **KNAPP & DOHERTY (1994)** mostra que existe um fluxo mínimo de solvente (expressado como a razão das duas correntes de alimentação) e uma razão de refluxo máxima para a destilação extrativa que geram perturbações ao sistema. Esta técnica diz que, na adição de uma razão de refluxo mínimo, cada destilação extrativa exibe uma razão de refluxo máxima e uma taxa de fluxo de solvente mínima, onde a separação desejada se torna impossível. Ambas estas quantidades correspondem aos pontos fixados para a bifurcação de equações de diferenças finitas⁵ que descrevem a seção central da coluna. Dado um

⁴ a teoria de bifurcação é essencial para o conhecimento dos azeótropos que podem estar presentes na mistura a ser separada, de suas composições e de suas temperaturas de ebulições.

⁵ Equações de diferenças finitas são introduzidas no algoritmo formalizado para serem resolvidas, representando uma mistura azeotrópica com a previsão da composição e da temperatura de ebulição dos azeótropos presentes.

modelo do ELV (equilíbrio líquido-vapor), os dados desta seção podem ser facilmente calculados, conhecendo somente informações sobre a alimentação da mistura e as composições do produto desejado, que servem para iniciar o cálculo de projeto de qualquer coluna.

KNAPP & DOHERTY(1994) observaram que ambos refluxo máximo e fluxo mínimo de solvente tem implicações importantes para o projeto e operação da destilação extrativa. O fluxo mínimo de solvente corresponde a um ponto de bifurcação onde os três pontos da seção central estão reunidos, e a razão de refluxo máxima à um dos dois pontos fixos restantes dessa seção. Os pontos fixos, razão de refluxo máxima e fluxo mínimo de solvente presentes no mapa da seção central da coluna, representam duas perturbações para o sistema. Pela limitação da extensão de taxas de refluxos possíveis, o refluxo máximo afeta a flexibilidade, operabilidade e controlabilidade da coluna. Ambas as quantidades são facilmente calculadas usando comercialmente pacotes de software com a elaboração de algoritmos. Em função do fluxo mínimo de solvente, eles buscaram valores ótimos de fluxo de solvente que são apresentados durante o seu trabalho e adquiridos através da elaboração de um algoritmo para esquematizar o grupo de solventes possíveis pela identificação e eliminação destes "entrainers", claramente inviáveis economicamente com razões de alimentação mínima amplas.

STICHLMAIR & BAUER (1995) estudaram a síntese e otimização de seqüências de destilação para a separação de misturas azeotrópicas, e propuseram um novo método de otimização para cálculo do fluxo mínimo de solvente, razão de refluxo e localização dos pontos "pinchs" na coluna. Estes valores são requeridos para a destilação extrativa. O método consiste em aprofundar a seleção de candidatos a solventes. Os valores encontrados são usados como ponto de partida para a otimização pelo algoritmo desenvolvido por estes autores.

2.2.2 Particularidades da Integração Térmica Múltiplo Efeito.

ANDRECOVICH & WESTERBERG (1985) basearam-se no conceito de destilação múltiplo efeito, onde a separação de uma mistura é executada em duas ou mais colunas com suas pressões de operação modificadas de forma a integrar termicamente os condensadores com os refeedores. Segundo **GUIMARÃES ET AL. (1996a)**, a aplicação deste método possibilita uma rápida determinação das pressões de operação das colunas e a estimativa do consumo de utilidades dos arranjos integrados energeticamente da unidade.

KNAPP & DOHERTY(1990) preocupados com o surgimento de novos azeótropos na mistura e geração de condições limitadas de destilação, quando as pressões de operação das colunas eram aumentadas pelo método de **ANDRECOVICH & WESTERBERG (1985)** para a destilação integrada termicamente, apresentaram um novo procedimento de integração energética múltiplo efeito, combinando-se as análises dos mapas de composição residual (MCR), que indicam em que pressões de operação aparecem novos pontos de azeotropia, com o método de **ANDRECOVICH & WESTERBERG (1985)**, dando mais segurança para a técnica ser aplicada. O procedimento foi demonstrado para duas importantes misturas comerciais etanol-água-etileno glicol e metanol-acetona-água gerando uma economia de energia de 65% e 40%, respectivamente sobre as seqüências otimizadas sem integração térmica.

BRITO (1992) analisou vários arranjos de integração energética múltiplo efeito e, dentre os arranjos estudados, o que demonstrou melhor desempenho energético foi o que utilizou a energia da corrente de topo da coluna de destilação extrativa para vaporizar parte da alimentação original. Para completar a vaporização dessa alimentação azeotrópica, aproveitou-se a energia da corrente de topo da coluna de regeneração do solvente. O método proposto por **BRITO (1992)** consiste em introduzir um trocador de calor com o

objetivo de aproveitar o calor existente ainda na fase vapor que após a sua passagem pelo condensador parcial da coluna era desperdiçado, esta energia utilizada serve para vaporizar parcialmente a alimentação original. Para a vaporização total, um novo trocador de calor é introduzido aproveitando a energia proveniente da coluna de recuperação que também se encontra na forma de vapor, com o condensador de topo da mesma, que opere parcialmente.

BRITO (1992) se baseou na junção dos métodos de **ANDRECOVICH & WESTERBERG(1985)** com a manipulação das pressões de operação de ambas as colunas e no método de **LYNN & HANSON(1986)** na destilação múltiplo efeito. **LYNN & HANSON(1986)** utilizaram um aquecedor e um resfriador parcial para ajudar na economia de energia para a produção do etanol e a alimentação original na forma de vapor como fórmula também geradora de economia. **BRITO (1992)** preocupou-se apenas em estudar as seqüências que dariam o menor consumo energético, sugerindo a otimização das condições operacionais da unidade e a otimização da seqüência de integração energética para efeito comparativo de quanto de energia consumida seria economizada com este procedimento.

GUIMARÃES ET AL. (1996c) apresentaram um estudo realizado em uma unidade de produção da **Rhodia S. A.** com a introdução de uma técnica de integração energética para colunas azeotrópicas, visando a minimização de seu consumo de utilidades. O método de integração apresentado por estes autores foi o de **ANDRECOVICH & WESTERBERG (1985)**. A comparação dos resultados obtidos diretamente na unidade com os resultados alcançados com os novos arranjos obtidos de integração, apresentou uma economia no consumo de utilidades que variou de 7 a 46% em relação ao consumo atual. A sugestão proposta por **GUIMARÃES (1996c)**, para os representantes da **Rhodia S. A.**, foi uma avaliação econômica da unidade, com os casos propostos de integração, a fim de decidir com maior segurança qual arranjo ofereceria a melhor relação entre o investimento necessário e a economia obtida.

PINTO & PEREIRA (1988) realizaram uma análise de diversos arranjos de integração energética múltiplo efeito, levando em consideração o investimento inicial, os problemas de controle e as possibilidades de economia de energia. O estudo foi aplicado à destilação do sistema etanol-água sendo apresentadas comparações técnicas entre arranjos de múltiplo efeito e a destilação tida como convencional, voltadas para a minimização da energia consumida pelos sistemas.

GUIMARÃES ET AL. (1996a) trabalharam com a otimização e integração energética de uma unidade de destilação azeotrópica de água e etanol, o trabalho de simulação consistiu na síntese dessa unidade que operasse próxima do mínimo de utilidades. O procedimento de otimização adotado por eles englobou a determinação do melhor agente extrativo (entrainer), a otimização das principais variáveis de processo e a posterior integração energética com os seus refinamentos na busca obsessiva de uma economia menor ainda de energia. Os resultados obtidos mostraram a viabilidade da otimização da unidade que pode levar a redução no consumo em torno de 20% em relação às condições industriais utilizadas normalmente numa planta. Dos arranjos propostos, o escolhido para as colunas de destilação integradas termicamente, apresentou uma economia de energia de 44% em relação ao consumo de utilidades da unidade otimizada sem integração energética.

BATISTA & MEIRELLES (1997) estudaram a aplicação da técnica de integração térmica de **Refluxo Secundário e Vaporização (SRV) na destilação extrativa**. Esta técnica é baseada no calor trocado entre as seções de retificação e esgotamento, usando a diferença natural de temperatura destas duas seções da coluna de destilação extrativa para a mistura etanol-água-etileno glicol. Os resultados encontrados foram comparados ao sistema de destilação extrativa para a mistura acetona-metanol-água. Uma substancial redução no consumo de energia foi observada quando compararam colunas integradas com colunas convencionais. **BATISTA & MEIRELLES (1997)** verificaram os efeitos da integração energética nos perfis de temperatura de

ambos os sistemas, nos perfis de fluxo total de líquido e de vapor, na pureza dos produtos e finalmente na avaliação das possibilidades de redução do consumo de energia.

CAPÍTULO III

FUNDAMENTOS DA SIMULAÇÃO

3. Simulação

Simulação é utilizar a modelagem para representar o comportamento real do sistema (SATYRO ET AL., 1986). A simulação de processos nada mais é do que um meio de representar um processo através de modelos matemáticos projetados para prever a performance desse processo, pela incorporação de equações de balanço material e de energia das operações unitárias, tais como: trocadores de calor, resfriadores, compressores, expansores, bombas, válvulas, separadores, reatores ou colunas de destilação (NETO & MORI, 1995).

3.1 Procedimentos de como iniciar uma Simulação

I- Identificar a dimensão do problema

Ser consciente dos objetivos que se quer atingir, tais como: mistura a ser separada, as especificações do produto final e configuração básica e especificação da operação.

Identificar os modelos que melhor vão representar seu problema em estudo, sejam eles, modelos termodinâmicos, entálpicos, de atividades e outros. Verificando a sua faixa de aplicabilidade e operabilidade para o sistema base, em função da influência que os mesmos podem trazer na validade e veracidade dos resultados obtidos.

II- Localizar os dados necessários

Fazer um levantamento bibliográfico, no sentido de buscar dados experimentais na literatura, gerando elementos para iniciar a simulação e também para efeito comparativo da veracidade dos resultados da simulação e, finalmente, atingir o embasamento teórico necessário para a continuação da simulação e poder interpretar os resultados.

III- Selecionar o pacote de software correto

Procurar simuladores comerciais disponíveis no mercado, que sejam robustos e de elevada precisão e que possam atender as necessidades do seu caso em estudo.

IV- Adquirir recursos computacionais apropriados

Utilizar computadores munidos de memória viva (ou RAM) e dispositivos de segurança, capazes de executar softwares com um tempo computacional reduzido.

V- Prática no manuseio do software

Estudar o manual do simulador que vai trabalhar minuciosamente, verificando todos os recursos disponíveis do software: operações contidas e utilitários, o que ajudará bastante no manuseio e melhor aproveitamento para o caso a ser estudado.

De preferência haver um curso básico de prática e manuseio do simulador, ministrado pôr pessoas capacitadas vindas de quem fabricou o software. E, finalmente, um curso avançado do simulador ministrado pôr pessoas com visão de Engenharia e técnica.

VI- Verificação e validade dos resultados

Mesmo usando métodos computacionais sofisticados, este item se torna extremamente importante, visto que pôr conta dos softwares usados utilizarem modelos tipo "CAIXA PRETA", onde o modelo matemático se torna

invisível no seu manuseio. Fica evidenciada a validade dos resultados quando comparados com os dados experimentais expostos na literatura para efeito comparativo e também em função do embasamento teórico adquirido durante a revisão específica, através das referências bibliográficas.

3.2 Simulador de Processos - Hysim (Versão C2.54, 1994-Hyprotech Ltda)

3.2.1 Introdução e Filosofia

O Hysim é um simulador de processos interativo que realiza balanços de massa e de energia em estado estacionário, projetado comercialmente para o processamento de uma planta de gás, refinação de óleos, química e petroquímica e indústrias de combustíveis sintéticos. Este simulador possui uma estrutura seqüencial modular aproximada (módulos ou unidades de operação que representam a quase totalidade dos processos das indústrias químicas) e de propagação bidirecional, com esta filosofia, cada operação pode ser usada separadamente dando condições de se obter informações de qualquer unidade operacional, permitindo especificar, por exemplo, uma corrente de saída ou intermediária e encontrar a corrente de entrada.

3.2.2 Estrutura Operacional do Hysim:

A **Figura 3.1** apresenta o diagrama de blocos com todas as funções que o Hysim dispõe.

3.2.3 Operações Unitárias Específicas

3.2.3.1 Coluna de Destilação Extrativa

Um exemplo de coluna utilizado como caso prático, consiste em simular uma torre de destilação extrativa para a separação do sistema azeotrópico etanol-água para produção do etanol anidro. Foi escolhido este tipo de operação visto às dificuldades encontradas na operabilidade da mesma, já que se trata de uma coluna mais complexa de se operar, com grandes problemas de convergências.

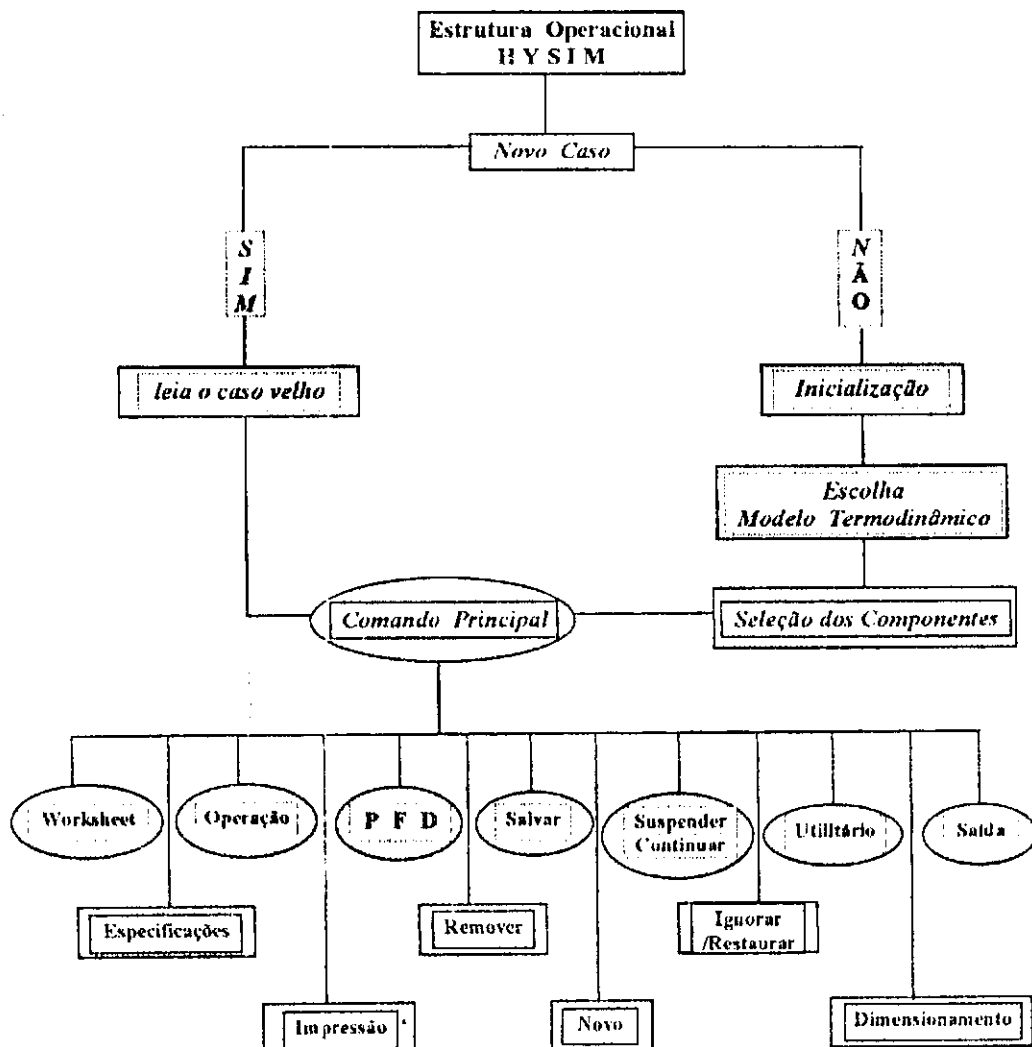


Figura 3.1 Diagrama de Blocos com todas as operações necessárias para o manuseio do simulador

Para que a convergência da coluna seja atingida são necessários e indispensáveis os seguintes parâmetros:

i) Parâmetros Básicos da Coluna;

Os parâmetros básicos da coluna devem ser obrigatoriamente especificados, já que o hysim não procede o cálculo para a convergência da coluna, sem os mesmos. Os elementos que fazem parte da configuração básica da coluna são:

- **Pressão do topo e da base da coluna;**

- **Número de estágios da coluna**, o qual deve ser especificado incluindo o condensador e o refeedor.

- **Características das alimentações**, localizações, condições e composições das correntes devem ser introduzidas na configuração da coluna pela worksheet. Por exemplo:

- **Alimentação e prato da mistura original;**

- **Alimentação e prato do solvente.**

ii) Especificações Substituíveis;

Estas são as variáveis que o algoritmo precisa para iniciar a convergência, tais como :

- **Taxa de fluxo de vapor de topo (vazão de destilado),**

- **Razão de refluxo**

iii) Estimativas Iniciais;

O hysim utiliza as estimativas iniciais como ponto de partida para a convergência do algoritmo e forma os perfis de temperatura e de composição na busca da solução. Quando modifica-se o "default" das especificações

originais, estes valores se tornam também estimativas. As temperaturas de topo e de base devem ser obrigatoriamente estimadas.

3.2.3.2 Trocadores de Calor Simples

Este tipo de trocador traz a informação necessária para determinar o equilíbrio termodinâmico. As características físicas do trocador não são consideradas, provém as informações necessárias e o HYSIM calculará as condições desconhecidas.

Quando seleciona-se a instalação de um trocador de calor simples, você estará requerendo informação enorme para o HYSIM calcular os desconhecidos. Como condicionado anteriormente, se faz necessário fornecer os nomes das correntes de entrada e de saída de ambos lados do trocador, fornecendo as quedas de pressão diretamente na forma. Existe a opção de especificar ou calcular pelo HYSIM o valor de UA. Especificando-se um valor para UA, o Hysim será hábil para calcular as variáveis desconhecidas (alguma combinação de temperatura e/ou fluxos ligados para o trocador). A operação que está instalada no flowsheet, neste caso, concordará unicamente com o equilíbrio termodinâmico entre as correntes ligadas. A ilustração para a instalação da operação trocador de calor simples está mostrada na **Figura 3.2**:

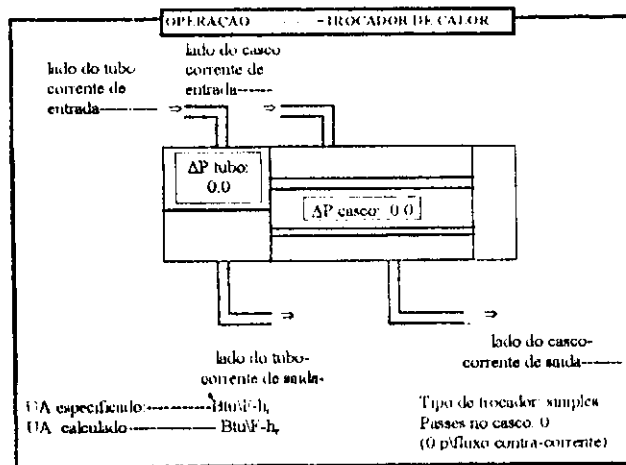


Figura 3.2 - Instalação da Operação Trocador de Calor Simples

3.3 Modelagem Matemática

A modelagem matemática é a reprodução de uma realidade física de um determinado sistema através de ferramentas matemáticas adequadas.

3.3.1 Modelagem Simplificada de uma Coluna de Destilação

O modelo matemático de uma coluna de destilação em estado estacionário consiste basicamente de um conjunto de equações algébricas não lineares. O modelo utilizado pelo HYSIM é baseado no conceito de estágio de equilíbrio, pressão constante ao longo da coluna e equilíbrio térmico entre as correntes que deixam o estágio. As equações são balanço de massa por componente nas fases líquida e vapor, balanço de energia nas fases líquida e vapor e as relações de equilíbrio por componente.

NAPHTALI E SANDHOLM (1971) desenvolveram uma técnica bastante flexível para os cálculos de colunas de destilação, em estado estacionário. As equações de conservação de massa, de energia e de relações de equilíbrio que regem a modelagem da coluna, são fixadas para cada componente e para cada número de estágios. Esta técnica forma uma função discrepância de estrutura de blocos tridiagonal que é resolvida utilizando o método iterativo de Newton Raphson pôr correções simultâneas e de rápida solução.

3.3.2 Análise Operacional da Coluna de Destilação Multicomponente

Para a solução multicomponente de uma coluna, a quantidade de variáveis de projeto é de fundamental importância, no sentido de estabelecer corretamente as especificações necessárias para o cálculo dos perfis de

temperatura e de composições para a convergência numérica da coluna. O **Apêndice B** explica melhor como se determinar as variáveis de projeto numa coluna, elaborado por **COSTA (1993)**.

ESPECIFICAÇÕES

Devem ser definidas as seguintes variáveis:

- a) Número de estágios;
- b) Eficiências de estágios;
- c) Localização da alimentação e correntes laterais;
- d) Composições das alimentações, taxas de fluxos, e estados térmicos;
- e) Pressão da coluna
- f) Condições das fases das correntes laterais e taxas de fluxos;
- g) Razão de refluxo e
- h) Vazão do destilado.

Estas especificações são válidas para a configuração da coluna descrita na **Figura 3.3** apresentada a seguir:

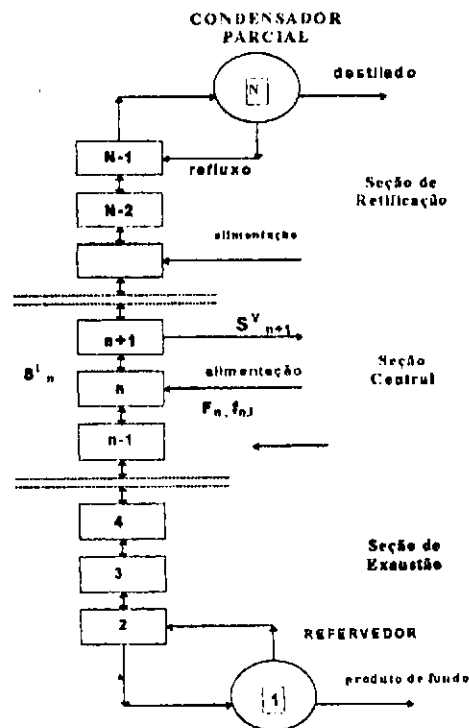


Figura 3.3 - Configuração da Coluna Multicomponente

Onde: $F_n \Rightarrow$ Fluxo total da alimentação do estágio n ;

$n \Rightarrow$ Estágio genérico, $n=1,2,\dots,N$;

$i \Rightarrow$ Componente, $i=1,2,\dots,M$;

$f_{n,i} \Rightarrow$ Fluxo do componente i , no estágio n ;

$S_n^V \Rightarrow$ Corrente lateral de vapor no estágio n ;

$S_n^L \Rightarrow$ Corrente lateral de líquido no estágio n ;

3.3.3 Procedimentos de Cálculo na Coluna de Destilação

O procedimento dos cálculos está descrito esquematicamente pelo diagrama de blocos que se segue:

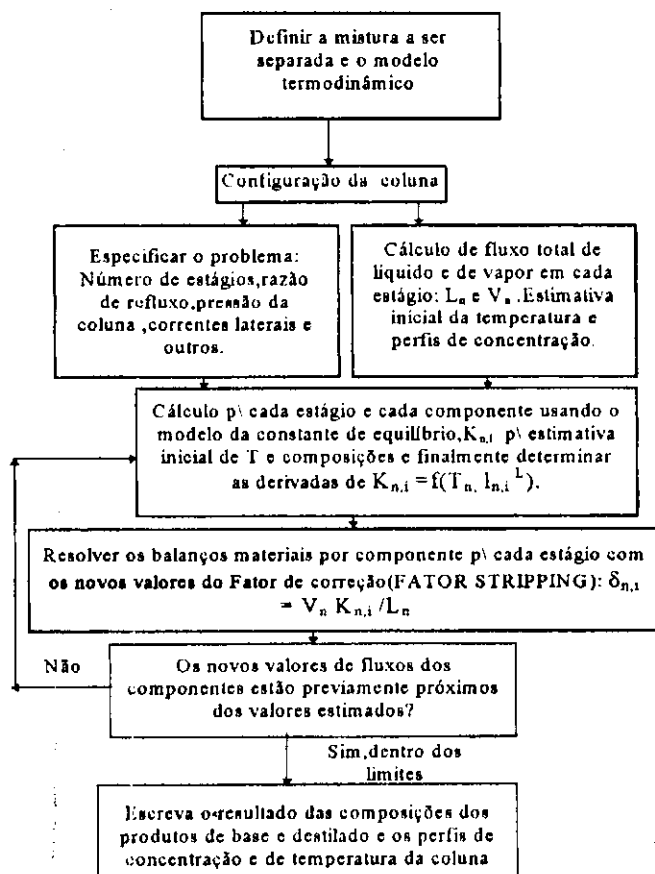


Figura 3.4 - Procedimentos de Cálculos de uma Coluna Multicomponente

3.3.4 Seleção do Método para o Cálculo das Propriedades Termodinâmicas

A escolha dos modelos termodinâmicos adequados é uma etapa importante no projeto e na síntese de um sistema de separação, levando em consideração a faixa de aplicabilidade de cada um.

O conjunto de propriedades disponível no HYSIM engloba misturas desde sistemas de hidrocarbonetos leves até misturas complexas de óleos e sistemas químicos fortemente não-ideais. Este conjunto reúne equações de estado para o tratamento rigoroso de sistemas de hidrocarbonetos; modelos semi-empíricos e de pressão de vapor para sistemas de hidrocarbonetos pesados; correlações de energia para predição exata de propriedades e modelos de coeficientes de atividades de sistemas químicos.

3.3.4.1 Modelo de Atividades

Para as soluções ideais, o coeficiente de atividade é unitário. Para a maioria dos sistemas químicos (não ideais) esta aproximação é incorreta. Diferentes soluções químicas normalmente exibem grandes desvios em relação a solução ideal.

Para considerar esta não idealidade, modelos de atividade são desenvolvidos para predizer os coeficientes de atividades dos componentes na fase líquida. As correlações derivadas estão baseadas na função Energia de Gibbs, que é definida como sendo uma grandeza em excesso que mede a diferença entre o valor da grandeza numa solução real e o valor da grandeza que seria calculado para uma dada pressão, temperatura e composição, pelas equações de uma solução ideal (**SMITH & VAN NESS, 1980**).

Os coeficientes de atividades individuais para qualquer sistema podem ser obtidos de uma expressão derivada para função energia de Gibbs em excesso ligada com a equação de Gibbs-Duhem.

3.3.4.2 Correção da Fase Líquida-Modelo de Atividades: UNIQUAC

O modelo termodinâmico definido para representar o afastamento da fase líquida da idealidade, foi o modelo UNIQUAC estendido, pôr ter se tornado um método adequado para as misturas utilizadas, Já que se trata de uma mistura fortemente não-ideal. A aplicabilidade do método é justificada pela tabela seguinte:

Tabela 3.1 Aplicabilidade do modelo de Atividade para Diferentes Sistemas

APLICAÇÃO	MARGULES	VAN LAAR	WILSON	NRTL	UNIQUAC
Sistemas Binários	A	A	A	A	A
Sistemas					
Multicomponentes	LA	LA	A	A	A
Sistemas Azeotrópicos	A	A	A	A	A
Equilíbrio Líquido-Líquido	A	A	N/A	A	A
Sistemas Diluídos	?	?	A	A	A
Sistemas Auto-associantes	?	?	A	A	A
Polímeros	N/A	N/A	N/A	N/A	A
Extrapolação	?	?	G	G	G

A=aplicável: N/A= não aplicável: ?= questionável: G=bom: LA= aplicação limitada

O método UNIQUAC é aplicado para uma variedade de substâncias não-ionizantes de misturas líquidas contendo fluidos polares e não-polares como os hidrocarbonetos, álcoois, nitrilos, cetonas, água, com somente dois parâmetros ajustáveis representando dados de alta qualidade e precisão ou exatidão. A equação UNIQUAC¹ (UNIVERSAL QUASI QUÍMICA) proposta por **ABRAMS E PRAUSNITZ (1975)** usa mecânica estatística e a teoria quasi-química de Guggenheim para representar a estrutura líquida. O modelo

considera moléculas de diferentes grupos de tamanho e formas utilizando o conceito de composição local definido por Wilson.

A equação é capaz de representar o equilíbrio (líquido-líquido (LLE), líquido-vapor (VLE), líquido-líquido-vapor (VLLE)) com exatidão. A equação UNIQUAC é significativamente mais detalhada e, portanto bastante utilizada para representar os coeficientes de atividade da fase líquida.

3.3.4.3 Vantagens do Método UNIQUAC

A principal vantagem deste método é que uma boa representação de ambos VLE (equilíbrio líquido-vapor) e LLE (equilíbrio líquido-líquido) pode ser obtido para uma larga extensão de misturas de não-eletrólitos usando apenas dois parâmetros ajustáveis para cada par de binário. Os parâmetros embutidos usualmente exibem uma pequena dependência com a temperatura, que faz deles mais conveniente para esta extrapolação.

CAPÍTULO IV

METODOLOGIA DA SIMULAÇÃO

4. Introdução

Antes de iniciar a simulação e a otimização propriamente dita, se fez necessário realizar algumas simulações preliminares com a finalidade de auxiliar na escolha das variáveis de processo, tais como: a pureza do produto final, a taxa de solvente, posições das cargas, entre outras relevantes ao processo. Este estudo serviu para estabelecer as estimativas iniciais para a simulação rigorosa do processo, com a seleção de algumas configurações básicas. Em seguida, efetuou-se a simulação e otimização não sequencial modular de cada coluna, avaliando todas as variáveis de decisão em busca do ponto ótimo. Finalmente, realizou-se a simulação sequencial padrão (colunas interligadas) e posterior integração térmica (caso proposto).

4.1 Simulação e Otimização do Caso Estudado

O caso estudado por BRITO (1992) serviu como base para a realização deste trabalho. O autor analisou vários arranjos de integração energética múltiplo efeito e, dentre os arranjos estudados, o que demonstrou melhor desempenho energético foi o que utilizou a energia da corrente de topo da coluna de destilação extrativa para vaporizar parte da alimentação original, que consiste na introdução de um trocador de calor (**troca 1 - Figura 4.6**) com o objetivo de aproveitar o calor remanescente da fase vapor que anteriormente era desperdiçado logo após a sua passagem pelo condensador parcial da coluna. Para completar a vaporização da alimentação, aproveitou-se a energia

da corrente de topo da coluna de regeneração do solvente, onde um novo trocador de calor foi introduzido (troca 2 - Figura 4.6), coluna esta que opera também com um condensador parcial. BRITO (1992) se baseou na junção dos métodos de ANDRECOVICH & WESTERBERG (1985), e LYNN & HANSON (1986) para a destilação múltiplo efeito que utilizando a alimentação original na forma de vapor como fórmula também geradora de economia. Acatou-se a sugestão de BRITO (1992) de otimização das condições operacionais da unidade, seguida da otimização de uma de suas seqüências de integração energética que apresentou o menor consumo energético.

O diagrama apresentado a seguir, ilustra as principais etapas empregadas na descrição da metodologia usada na simulação:

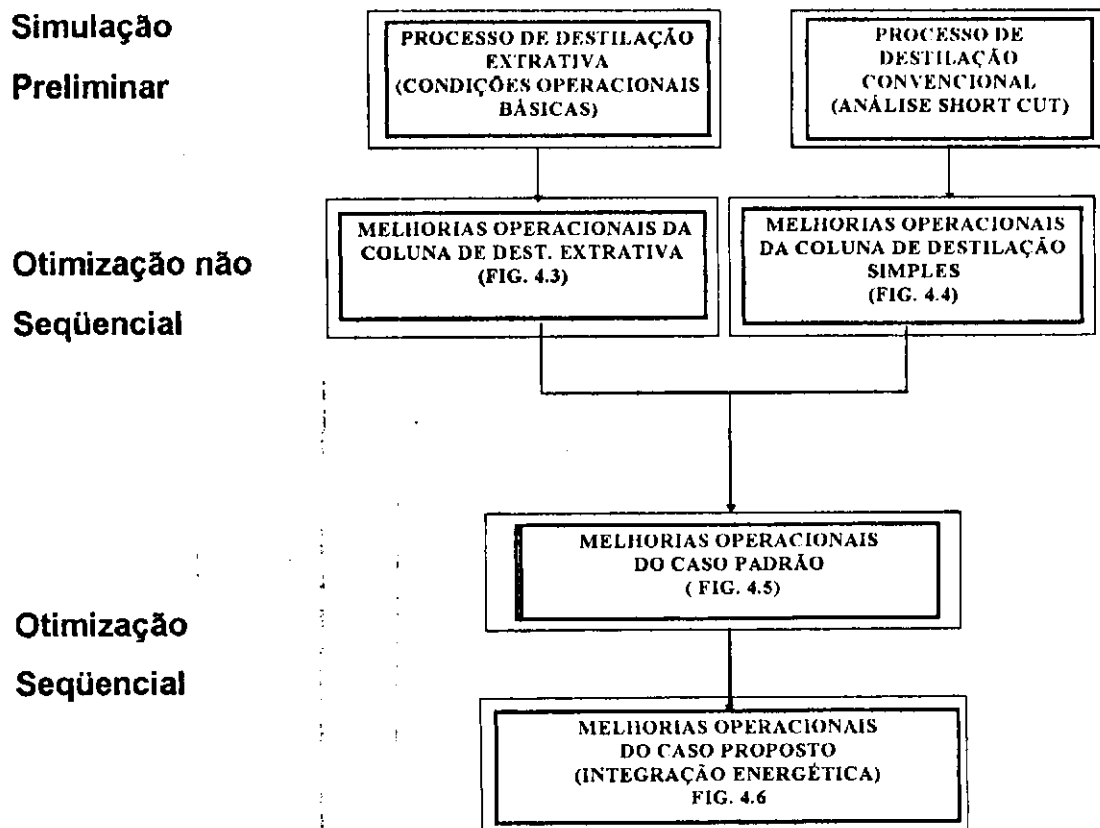


Figura 4.1 Diagrama Metodológico da otimização global do sistema

4.2 Simulação Preliminar

A metodologia adotada para a simulação preliminar da unidade consiste na identificação das variáveis mais relevantes para a otimização. Através da simulação da unidade de produção com o simulador comercial HYSIM, é feita uma análise da influência destas variáveis no processo, auxiliando na busca do ponto ótimo e dos seus valores iniciais para o início da otimização das colunas individualmente.

4.2.1 Destilação Extrativa

As variáveis manipuladas no decorrer da otimização foram: a pureza do produto desejado ($X_b^{(1)}$), prato de alimentação principal e do solvente (FA e FS), número de estágios (N), taxa de solvente (S/F), vazão de solvente (S) ou vazão de reciclo (S) para que na otimização final se buscar a razão de refluxo ótima ($R_{ÓTIM}$), cargas térmicas (Q_c e Q_R), e número de estágios ($N_{ÓTM}$) ótimos de operação.

Avaliou-se a pureza do produto final, tendo-se estabelecido um valor mínimo de 99,4% em peso de etanol no topo e um valor máximo de 99,8% (MEIRELES ET AL., 1992). Com o estudo preliminar dessa grandeza, associada as demais variáveis, como taxa de solvente, número de estágios e cargas térmicas, determina-se a grandeza de maior relevância ao processo.

Partiu-se sempre de uma razão: vazão de solvente/vazão de alimentação (S/F) um pouco acima da razão unitária. Foi adotado para este trabalho como estimativa inicial de S/F um valor de 1.35 e incrementado de 0.1 até a sua convergência. O intervalo de variação das variáveis (S/F) e da razão de refluxo externo (R) foi de 1.35 a 1.65 e 0.5 a 2.5, respectivamente, para análise do comportamento da coluna de destilação extrativa isoladamente.

4.2.2 Destilação convencional

Como ponto de partida para a otimização da coluna de Destilação convencional (Separação do Solvente), faz-se uma análise short cut para calcular o número mínimo de estágios, o refluxo mínimo correspondente e a localização do prato de alimentação.

A Figura 4.2 ilustra a configuração do utilitário short cut com os dados necessários para a implantação do método.

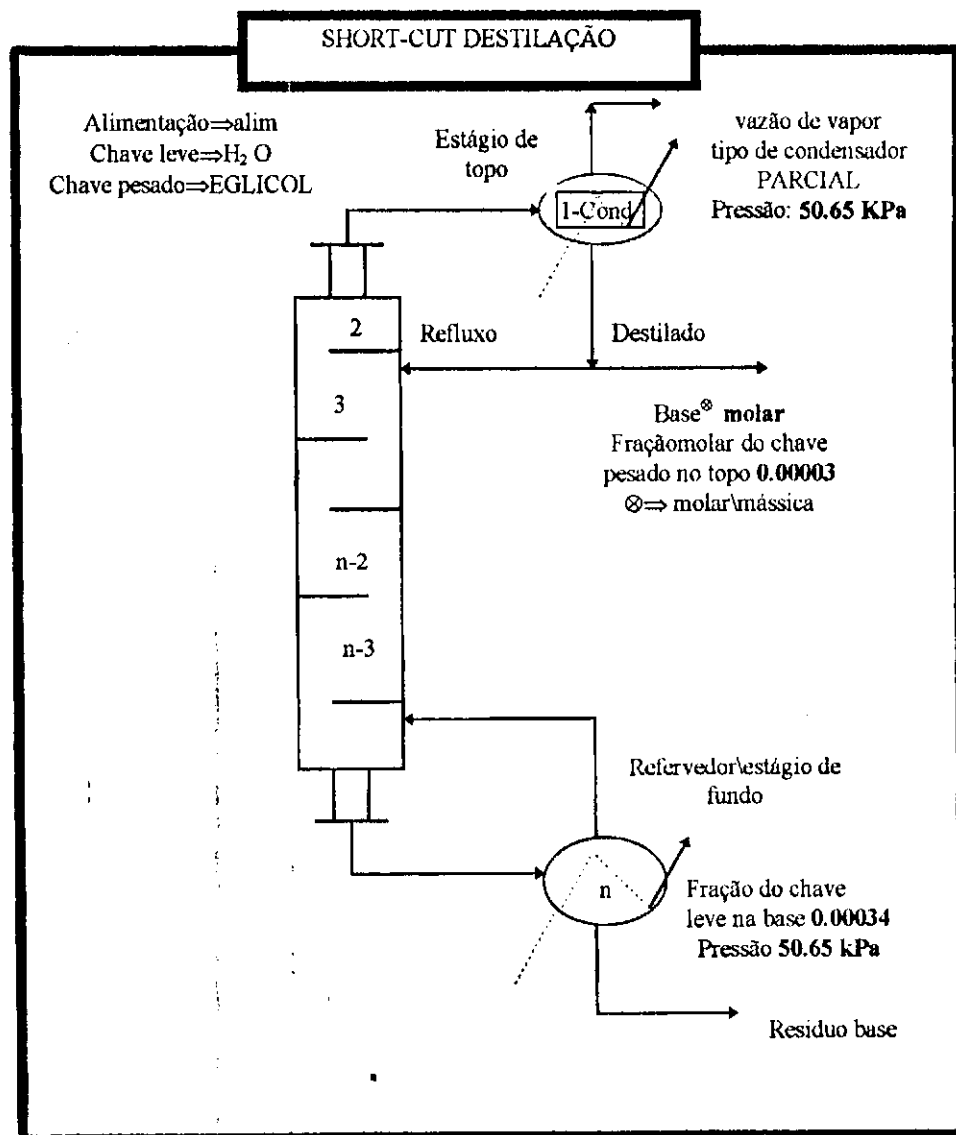


Figura 4.2- Configuração Básica do Utilitário Short-Cut

4.3 Melhorias Operacionais de cada Coluna

A partir da simulação preliminar, que consistiu na identificação das variáveis mais relevantes, visando a busca das condições operacionais básicas das colunas, como por exemplo número de estágios, estágios de cargas, taxa de solvente e razão de refluxo, identificou-se tais variáveis permitindo a otimização das colunas isoladamente.

A otimização não seqüencial consistiu em otimizar cada coluna individualmente em função das especificações usadas e das variáveis operacionais, de forma a se localizar as posições ótimas das alimentações. Determina-se simultaneamente o refluxo mínimo e o refluxo ótimo, bem como o número de estágios e as cargas térmicas ótimos. Após otimizar a primeira coluna, faz-se o mesmo procedimento com a outra.

Coluna de destilação extrativa: A operação tem como finalidade produzir o etanol anidro, como produto de topo, numa composição mássica de 99.8%, em função da mistura original etanol-água que apresenta composição mássica de 96% de etanol hidratado. A vazão de alimentação usada foi de 1000 kg/h.

A configuração básica da coluna, com as informações necessárias para completar os dados para o "start up" da coluna, está ilustrada nas Figuras 4.3 e 4.5 representada pela coluna 01 do caso padrão.

O caso padrão consistiu da interligação das colunas de destilação extrativa e de recuperação do solvente, a partir dos dados ótimos operacionais obtidos das colunas isoladamente.

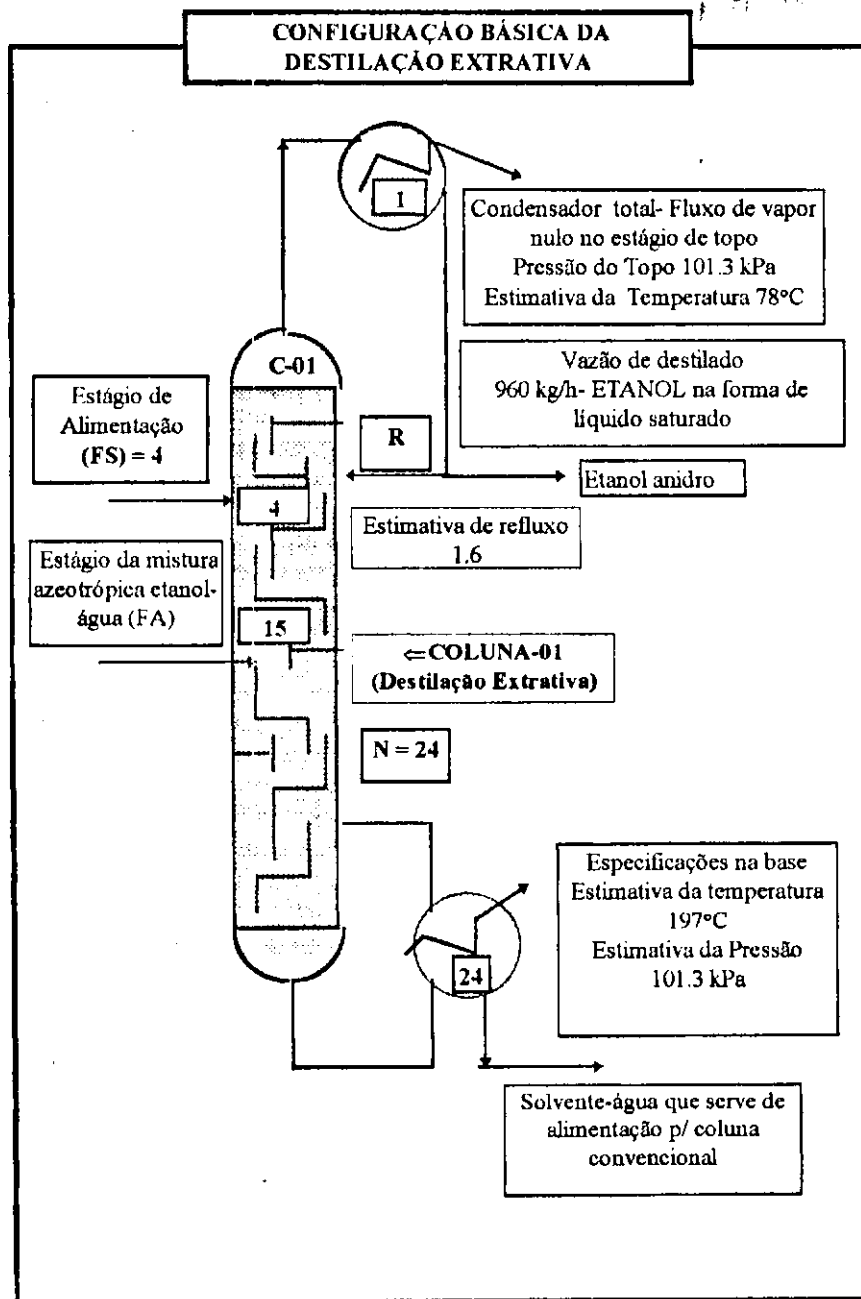


Figura 4.3 Configuração Básica da Coluna

Coluna de recuperação do solvente (destilação convencional): as Figuras 4.4 e 4.5 (coluna 2) representam a configuração básica da coluna convencional com os dados iniciais obtidos pelo método Short cut.

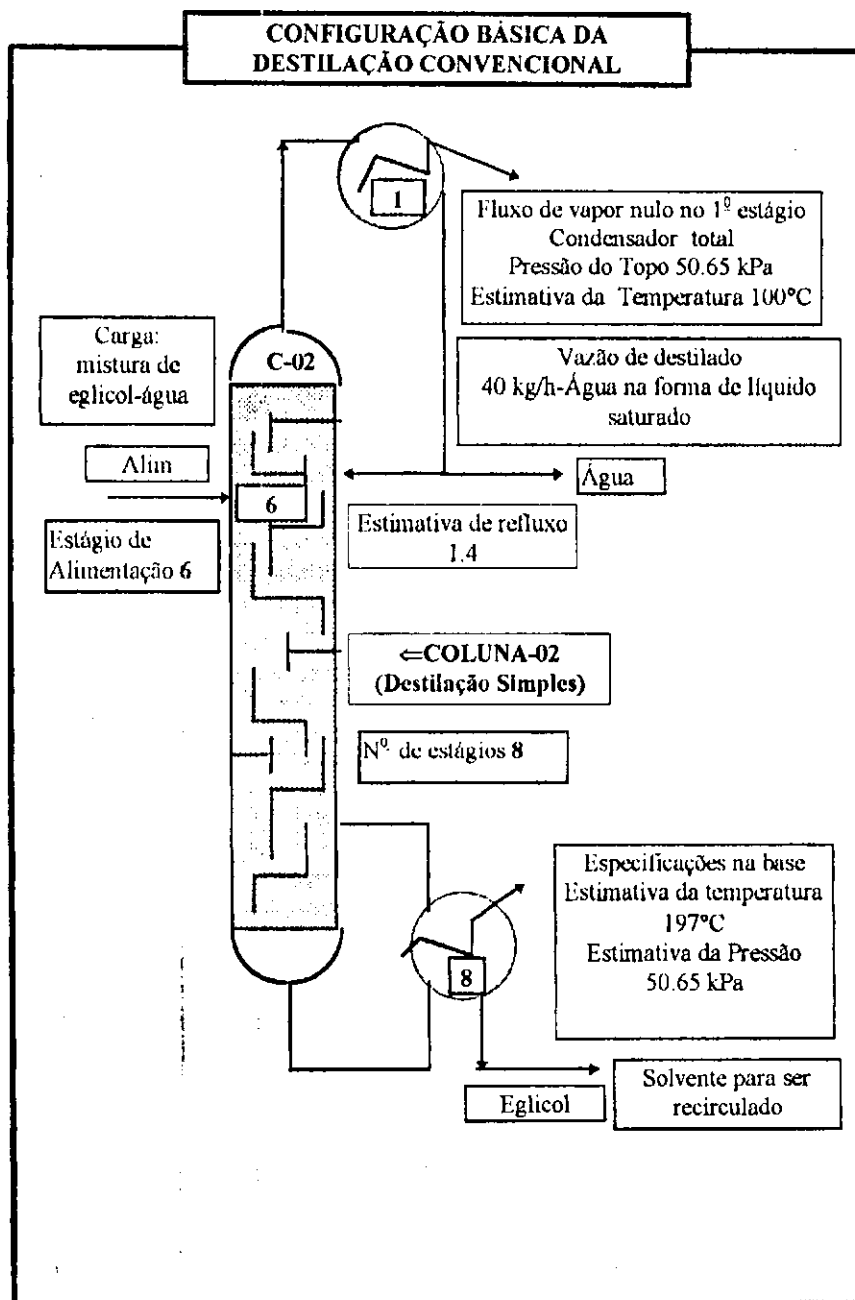


Figura 4.4 Configuração Básica da Coluna de destilação Simples

A Tabela A.1 do Apêndice A mostra um resumo das variáveis estudadas e as especificações usadas no decorrer da simulação e otimização das duas colunas individualmente.

4.4 Otimização Seqüencial- Melhorias Operacionais do Caso Padrão

Nesta etapa faz-se a interligação das duas colunas através de suas correntes e conseqüente otimização. São feitas as melhorias operacionais, a partir das especificações ótimas determinadas pelo método não seqüencial de cada coluna. A **Figura 4.5** ilustra a técnica de destilação extrativa padrão usada neste trabalho.

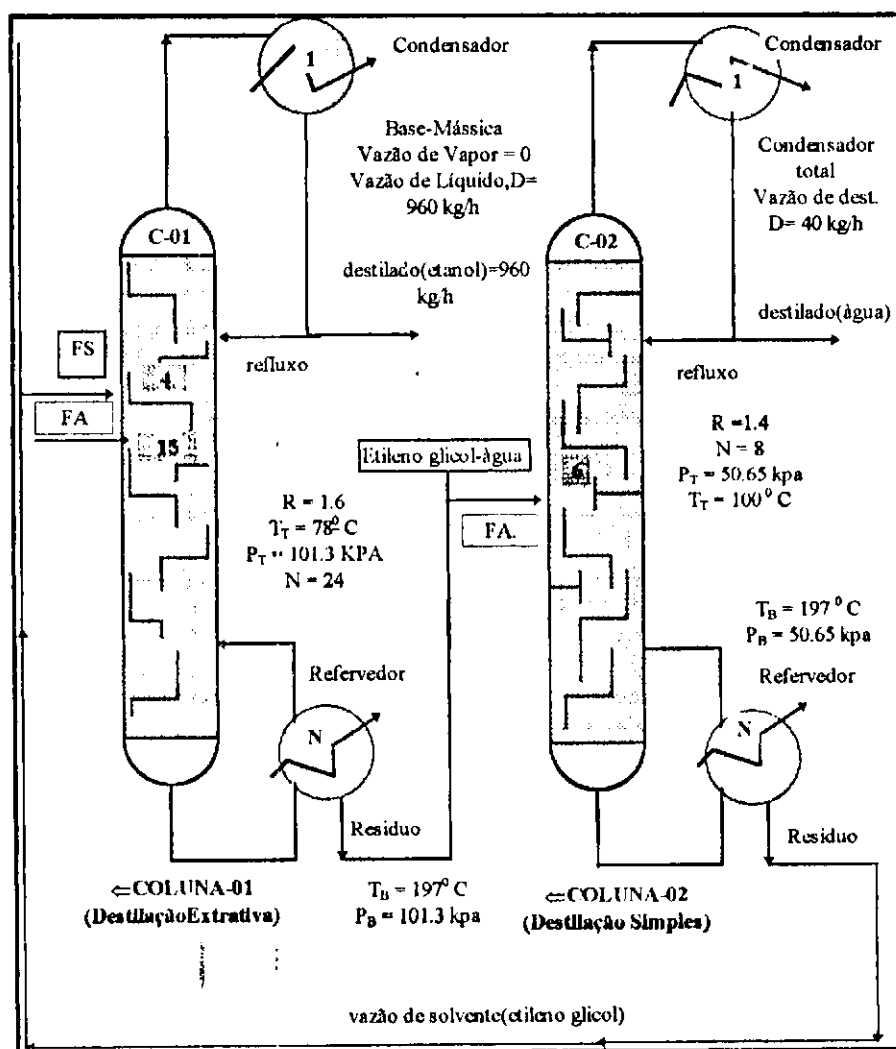


Figura 4.5 Fluxograma Geral para o Caso Padrão

4.5 Otimização Seqüencial- Melhorias Operacionais do Caso Proposto com Integração Energética

Nesta etapa, é feita a otimização seqüencial mediante integração energética entre as correntes. A partir das especificações ótimas, determinadas pelo método padrão foi estabelecida a integração de energia introduzindo-se dois trocadores de calor entre as colunas que operam em diferentes pressões. Este arranjo de integração de energia é chamado de **caso proposto** representando portanto a proposta deste trabalho. A seqüência referenciada se apresenta na **Figura 4.6**, ilustrando as configurações básicas **troca 1 e troca 2** estabelecidas pelo método proposto, definindo-se as correntes de entrada e de saída que servirão como base para a redução da carga térmica do refulvador e auxiliados simultaneamente pelo pré-aquecimento da corrente de alimentação. O efeito comparativo pode ser evidenciado pela economia gerada entre o caso padrão e o caso proposto otimizados. O fluxograma para a configuração integrada energeticamente está representado na **Figura 4.6**.

A **Tabela A.2 do Apêndice A** ilustra as especificações e os dados das variáveis operacionais da unidade de destilação extrativa com as modificações necessárias que o caso proposto exige.

4.5.1 Integração Energética

O tipo de arranjo de integração energética adotado utiliza a energia da corrente de topo da coluna de destilação extrativa para vaporizar parte da alimentação original. E para completar a vaporização dessa alimentação, aproveita-se da energia da corrente de topo da coluna de recuperação do solvente, vaporizando totalmente a alimentação da mistura.

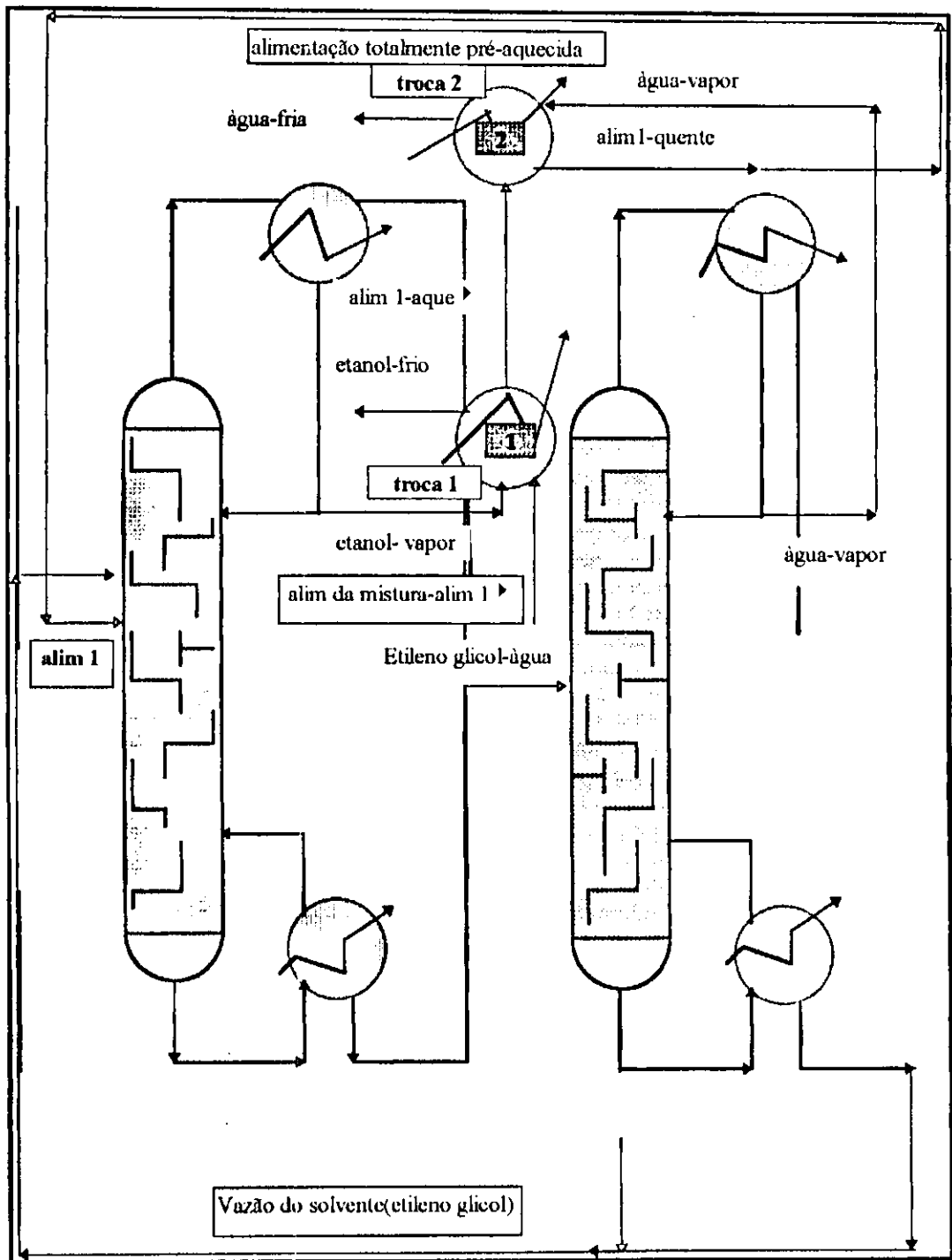


Figura 4.6 Fluxograma Geral para o Caso de Integração Energética

4.5.1.1 Trocador de calor I- Energia proveniente do Condensador de Topo da Coluna Extrativa

O princípio de funcionamento do condensador-trocador consiste na condensação do vapor de topo da coluna de destilação de forma que o condensado retorne a coluna como refluxo líquido. A energia do condensador pode ser facilmente cedida, mas, devido a temperatura de condensação dos vapores ser inferior à da base da coluna para o caso da destilação extrativa, essa energia não pode ser conduzida diretamente para o refeedor, portanto, a idéia do múltiplo efeito é então sanar este problema, utilizando este potencial de energia em outra coluna, mediante a integração energética.

A integração é realizada através de um trocador que funciona simultaneamente como refeedor (da coluna de menor pressão) e como condensador (da coluna de maior pressão). A partir desse ponto, muitos arranjos podem ser formados, nos quais variam o estado térmico da alimentação original, o número de colunas existentes, ou ainda, efetuam alguma forma de integração de material. Como é o caso de colunas que efetuam a mesma separação, o nível de temperatura entre a base e o topo da coluna ser compatível para a integração energética, a segunda coluna deve operar numa pressão inferior à da primeira.

A **Figura 4.7** ilustra a configuração básica do trocador de calor simples e as especificações necessárias para as correntes de entrada e de saída de forma que a operação seja completada.

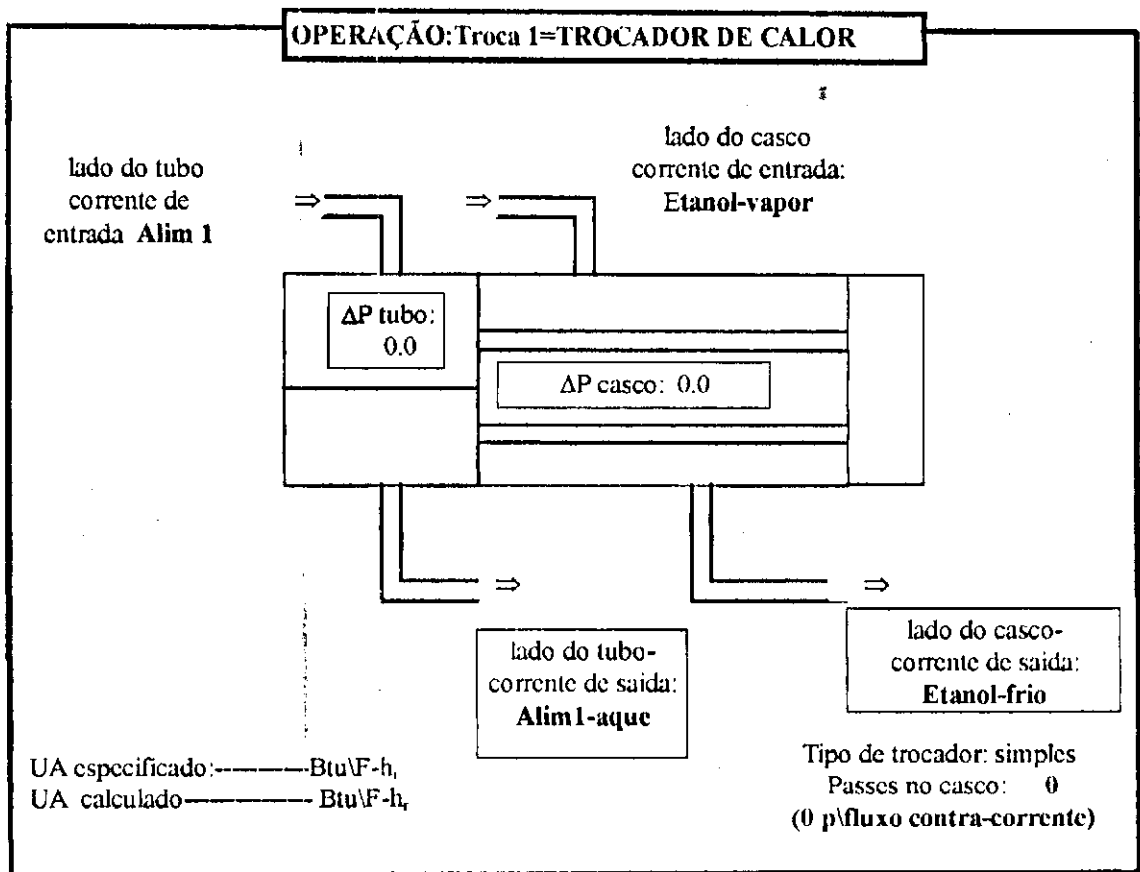


Figura 4.7 Configuração Básica do Trocador de Calor Simples-Troca-01

4.5.1.2 Trocador de Calor II- Energia Proveniente do Condensador de Topo da Coluna de Recuperação do Solvente

A Figura 4.8 representa a configuração básica necessária para a elaboração da operação trocador de calor simples que, ao especificar duas correntes de entrada, determina-se as características das correntes de saída e a efetiva troca térmica.

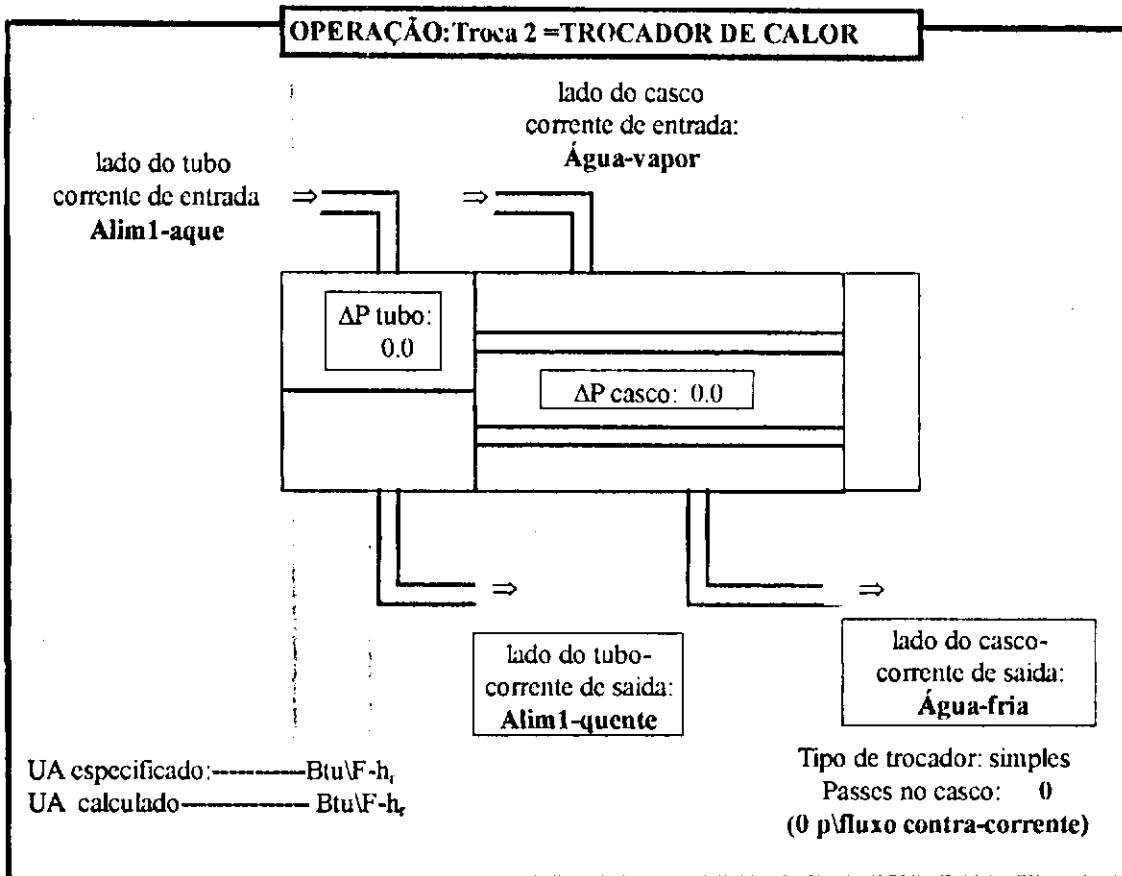


Figura 4.8 Configuração Básica da Operação Troca 2

4.6 Parâmetros Estudados durante a Otimização

Para determinar a melhor condição de operação das colunas em estudo e do sistema de integração térmica proposto, vários parâmetros foram analisados, bem como a sua influência sobre o consumo de energia. Os parâmetros estudados no decorrer da otimização são:

- a) pureza do produto final
- b) taxa de solvente
- c) localização do prato da alimentação
- d) localização do prato do solvente

- e) razão de refluxo
- f) número de estágios.

4.6.1 RAZÃO DE REFLUXO MÍNIMO

A filosofia de operar as colunas de destilação de forma a se obter a máxima eficiência de separação, com altas razões de refluxo, onde o valor dos custos dos produtos se sobressaem sobre os custos de energia provocados pela maior razão de refluxo torna-se, hoje em dia, obsoleta.

A redução da razão de refluxo diminui o consumo de energia e portanto a sua otimização é essencial na minimização dos custos de operação garantindo as especificações do produto. A razão de refluxo mínima é definida como sendo aquela que, quando diminuída infinitamente exige um número de estágios infinito para efetivar uma dada separação.

4.6.2 RAZÃO DE REFLUXO ÓTIMA (R_{OTM})

O ideal é conhecer a razão de refluxo ótima para diferentes condições de alimentações da coluna. A literatura recomenda uma faixa de operação para a razão de refluxo ótima, baseado sempre na razão de refluxo mínimo. **PERRY E CHILTON (1980)** recomendam para a destilação simples a faixa de aplicação de $R_{OTM} = 1.1$ a $1.3R_{MIN}$.

O efeito global da razão de refluxo sobre os custos fixos, os custos operacionais e o custo total, é que o mínimo na curva de custo total localiza-se numa faixa de razão de refluxo de 1.25 a $1.3R_{MIN}$, região considerada de refluxo ótimo para a destilação simples. Na prática, a maioria dos autores consideram o refluxo de operação 30% acima do mínimo.

Já nas destilações especiais (extrativa e/ou azeotrópica) a faixa de operação se torna mais ampla, devido a razão de refluxo ser aumentada.

KNAPP & DOHERTY (1994) utilizaram para a destilação extrativa uma faixa de operação de refluxo ótimo de $R_{\text{óTM}} = 1.2$ a $1.5R_{\text{MIN}}$ que foi adotada para este trabalho, cujo refluxo ótimo representa 36% do R_{MIN} .

4.6.3 NÚMERO DE ESTÁGIOS TEÓRICOS ÓTIMOS ($N_{\text{óTM}}$)

Para uma dada razão de refluxo ótima, a relação entre o número de estágios e a razão de refluxo fornece o número ótimo de estágios de operação da coluna. A **Figura 4.9** mostra as regiões inadequadas para a determinação do número de estágios ótimos e a região limitante deste parâmetro.

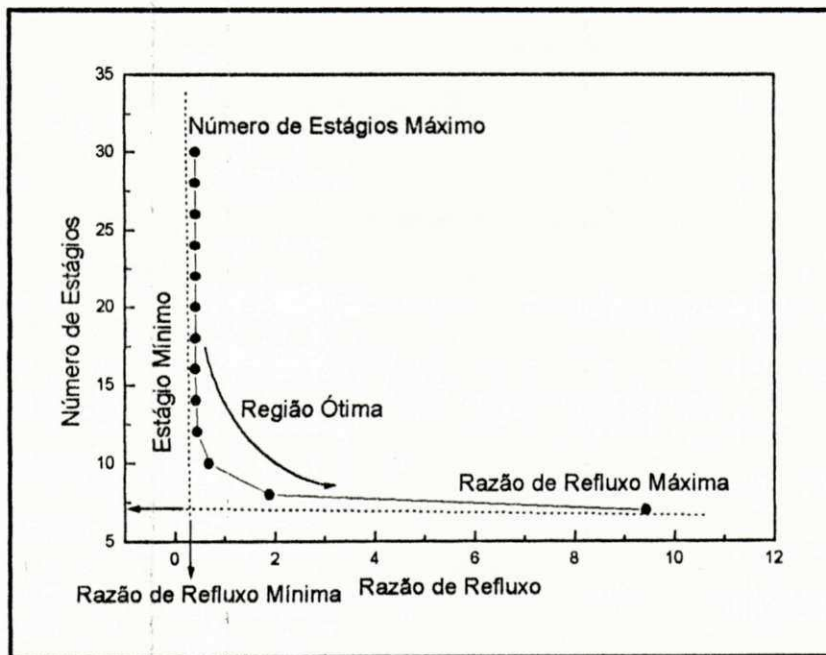


Figura 4.9 Variação do Número de Estágios com a Razão de Refluxo

Avaliando-se a **Figura 4.9**, o número de estágios requeridos aumenta com a razão de refluxo e, conseqüentemente com as cargas térmicas. O aumento da RR (**Figura 4.9**) diminui o número de estágios na coluna e conseqüentemente aumenta o consumo de energia. Portanto, para otimizar um

projeto de destilação visando a análise detalhada do processo e da viabilidade econômica é necessário considerar os custos de operação envolvidos. A estratégia a adotar baseada na **Figura 4.9** é de relacionar os custos utilitários (de energia) com os custos de capital, afim de procurar o ponto ótimo para o projeto econômico. O projeto ótimo, através de um levantamento econômico é baseado na otimização da razão de refluxo definida na literatura como aquela situada entre 10 e 50% do refluxo mínimo aceitável.

4.6.4 LOCALIZAÇÃO ÓTIMA DO PRATO DE ALIMENTAÇÃO (FA_{OTM})

A localização ótima da posição da alimentação principal é determinada em função das especificações apropriadas para a operação, tornando-se a separação mais ampla possível entre X_D e X_B , para um dado número de estágios especificado. Caso não seja especificado o número de estágios teóricos, é a localização da alimentação quem vai determinar o número de estágios para que a separação entre X_D e X_B seja realizada (**PERRY & CHILTON, 1980**).

O critério adotado por **GILLILAND (1950)** combina a simplificação de que a localização ótima do prato independe da razão de refluxo dando uma idéia aproximada do ponto ótimo de alimentação (**ROBINSON & GILLILAND, 1950**). Assim é importante que se faça testes seqüências do prato de alimentação da mistura percorrendo prato-a-prato ao longo da coluna de destilação. Com o número de estágios fixos, variando-se a posição de alimentação, é considerada ótima quando a separação máxima é alcançada com o grau de separação atingido tendo com função objetiva a carga térmica do refeedor o estágio ótimo é aquele cuja cargas térmicas são mínimas.

4.6.5 TAXA DE SOLVENTE ÓTIMA $(S/F)_{\text{ÓTM}}$

A taxa de solvente é uma variável de fundamental importância para a a coluna de destilação extrativa. É ela quem vai determinar o grau de separação da mistura e sua eficiência. É definida como a razão entre a vazão de solvente requerida e a vazão de alimentação da mistura original (S/F) . Pode-se manipular esta variável, bem como explorar sua influência em termos da vazão de solvente (S) preestabelecida para separação.

No entanto, existe um fluxo mínimo de solvente admissível para ocorrer a separação, que deve ser questionado bem como verificar o seu valor máximo. Por isso que é importante se determinar um valor ótimo de operação.

A avaliação da influência da taxa de solvente em relação às demais variáveis é de fundamental importância para o desempenho de uma coluna de destilação extrativa. Preliminarmente, se torna perceptível pelo projeto da coluna que elevadas razões de alimentação requerem maiores diâmetros e altas taxas de troca de energia tanto para a coluna extrativa quanto para a de recuperação do solvente, contribuindo para altos custos de capital e custos operacionais.

CAPÍTULO V

RESULTADOS DA SIMULAÇÃO

5. Introdução

A discussão e apresentação dos resultados da simulação será fundamentada através da análise das condições operacionais básicas das colunas individuais, seguida da otimização dos casos padrão e proposto. Sendo evidenciada também a sensibilidade paramétrica de parâmetros como: concentração de solvente na mistura, e consumo energético no refeedor, exaltando, portanto, o cálculo de economia de energia obtida com o auxílio da integração energética.

O resumo de alguns resultados do caso estudado no **Apêndice C** estão subdivididos de acordo com a metodologia adotada para aquisição dos dados de saída, ou seja, no caso padrão e no caso proposto, com e sem otimização. Os dados são mostrados no resumo da otimização não sequencial das colunas de extração e de recuperação do solvente, seguido dos dados do sistema interligado otimizado, tido como **caso padrão e do caso proposto**, cujo efeito comparativo é evidenciado. Contudo, com a comparação efetuada entre os dois casos, pode-se decidir o caso com o consumo de energia do sistema minimizado.

Os resultados serão apresentados adotando os seguintes procedimentos:

- **Simulação Preliminar** ⇒ **Coluna Extrativa/Coluna Convencional;**
- **Caso não sequencial** ⇒ **Melhorias Operacionais da coluna de Extração;**
- **Caso não sequencial** ⇒ **Melhorias Operacionais da coluna de recuperação do solvente;**

- **Caso seqüencial \Rightarrow Caso Padrão com otimização;**
- **Caso seqüencial \Rightarrow Caso Proposto com otimização.**

5.1 Simulação Preliminar

A simulação preliminar com os dados de saída consiste em identificar as variáveis mais relevantes para a busca das condições básicas operacionais da coluna, tais como: localizações dos estágios de carga, razão entre os fluxos de alimentação (S/F), razão de refluxo (R), escolha do modelo termodinâmico e o poder de atuação do solvente na coluna de destilação extrativa.

5.1.1 Coluna De Destilação Extrativa

Na simulação da coluna de destilação extrativa foram encontradas dificuldades básicas: convergência, devido as estimativas iniciais, e de otimização simultânea dos estágios de alimentação (dupla alimentação), em decorrência da forte dependência de sua localização.

A variação do número de estágios na coluna de destilação extrativa depende da razão de refluxo, envolvendo uma extensão de parâmetros como: taxa de solvente, variação da localização da alimentação original quanto do estágio de solvente, cujas simulações foram conduzidas com S/F testados de 1.35 a 1.65 e R variando entre 0.5 e 2.0.

5.1.1.1 Construção da Curva de Equilíbrio Pseudo-binário para o Sistema Ternário Etanol (1)-água (2)-etileno glicol (3);

O binário azeotrópico é composto pelo etanol (1), $T_b = 78.2 \text{ }^\circ\text{C}$, e a água (2), $T_b = 100 \text{ }^\circ\text{C}$. O etileno glicol (3) possui ponto de ebulição muito maior, $T_b = 197 \text{ }^\circ\text{C}$, do que os dos componentes originais. Para este sistema, a curva

de equilíbrio foi construída, utilizando o modelo termodinâmico **uniquac**, a temperatura calculada para o azeótropo foi de **78.2°C** com **89%** de etanol em base molar, confirmando a veracidade e exatidão do método com os valores encontrados na literatura cuja $T=78.15$ OC e composição molar de 0.89% (**PERRA & CHILENO, 1980**).

A **Figura 5.1** mostra a curva de equilíbrio líquido-vapor (ELV) para o sistema azeotrópico etanol (1)-água (2) (curva 1), e também o comportamento adverso das curvas 2 ,3 e 4 quando o azeótropo é quebrado tornando favorável à destilação. Como a taxa de transferência do solvente líquido de estágio para estágio é constante, em virtude da sua baixa volatilidade, a sua concentração na fase vapor pode ser negligenciada. Isto torna possível reduzir o sistema ternário a um pseudo-binário. Essa aproximação é confirmada por **VAN WINKLE (1967)** para a destilação extrativa com solventes pouco voláteis. No método pseudo-binário as composições são calculadas em base livre solvente. Com um solvente aceitável, como por exemplo, o etileno glicol, o etanol anidro pode ser produzido.

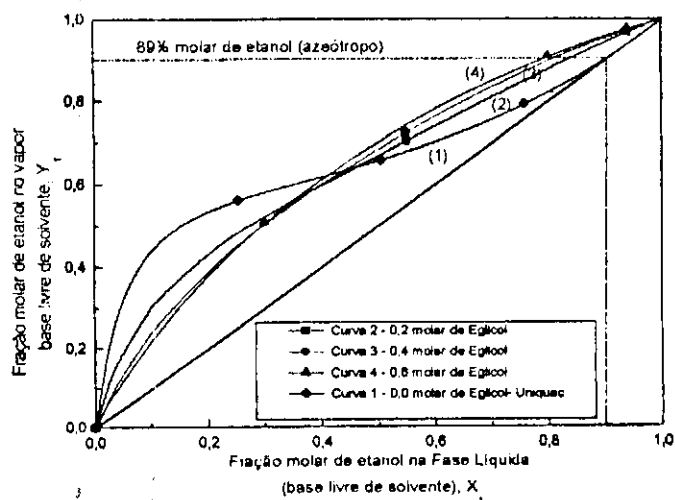


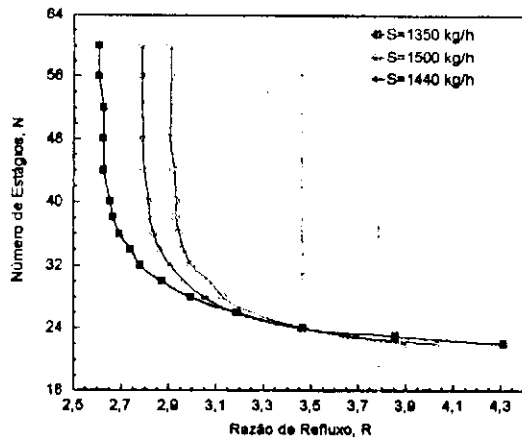
Figura 5.1 - Curva de Equilíbrio Pseudo-binário para o sistema etanol

(1)- água (2)-etileno glicol (3)

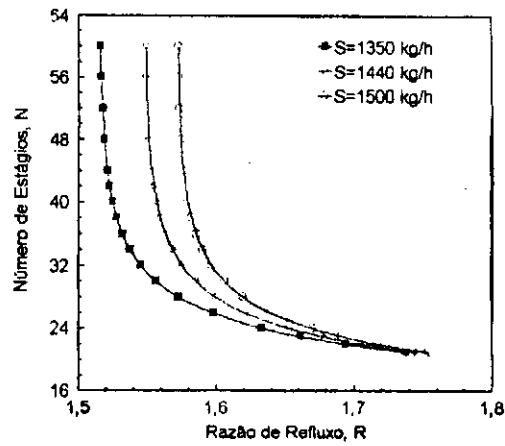
De acordo com a **figura 5.1**, o efeito da concentração de etileno glicol na curva de equilíbrio pseudo-binária da mistura etanol-água, modifica a volatilidade relativa dos componentes originais da mistura azeotrópica, fazendo desaparecer o ponto de azeotropia. Observando as curvas 3 e 4 para as concentrações de etileno glicol acima de 0.4, o efeito da concentração sobre a volatilidade relativa da mistura pseudo-binária já não é tão significativa, enquanto que para a mistura com base livre de solvente, esse valor se torna expressivo. Para concentrações mais elevadas de etileno glicol presentes na mistura, a fase vapor tem um valor de concentração relevante de solvente, não podendo ser tratada como uma mistura pseudo-binária. Este comportamento foi observado também por **BATISTA & MEIRELLES (1995)** sobre o efeito da concentração do solvente. O solvente tem uma forte tendência de atuar na região de concentração de etanol da coluna fracionadora, para eliminar o azeótropo etanol-água, mudando o comportamento da curva de equilíbrio líquido-vapor (ELV) indicado pela curva 1 da **Figura 5.1**, para uma condição de favorecimento à destilação. Portanto, o poder de atuação do solvente permite o aumento da volatilidade relativa dos componentes, melhorando a aparência da curva de equilíbrio da mistura etanol-água.

5.1.1.2 Comportamento do Número de Estágios em Relação à Razão de Refluxo;

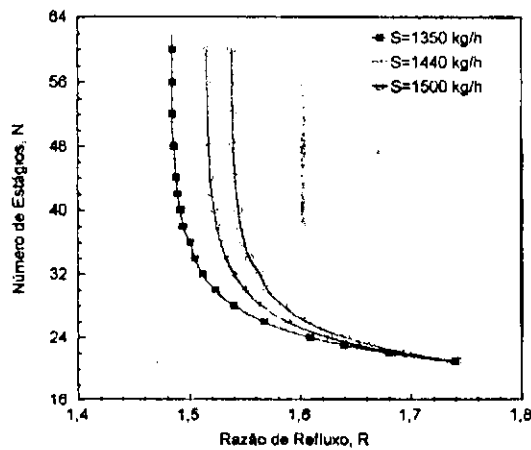
Os dados coletados para diversas purezas do produto final demonstrando sua influência com as taxas de solvente, número de estágios e estágios de alimentação, estão projetados nas **Figuras 5.2, 5.3, e 5.4**.



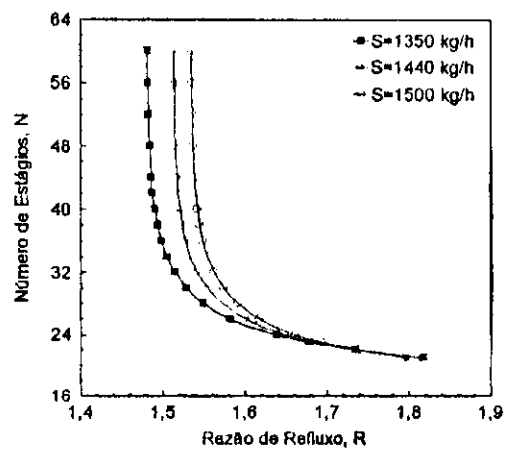
(a) FS=2



(b) FS= 3



(c) FS=4



(d) FS= 5

Figura 5.2- Comportamento do Número de estágios com a razão de refluxo para uma pureza de 99,4% em peso de etanol.

Razão (S/F): Podemos observar na **Figura 5.2**, que para a pureza de 99,4% baixas taxas de solvente são usadas e conseqüentemente vazões pequenas do agente extrativo. Assim, a melhor vazão de solvente encontrada foi de $S_{OTM}=1350$ Kg/h ou $S/F_{OTM} = 1.35$, pois esta apresentou as menores taxas de razão de refluxo e conseqüentemente menores cargas térmicas.

Estágio de alimentação do solvente (FS): Usou-se o segundo estágio para a alimentação do solvente, o mesmo estágio de alimentação do refluxo externo sendo possível obter a convergência numérica da coluna, e finalmente atingir a pureza de 99,4% (mássica). Pode-se concluir que esse

comportamento tornou-se viável porque não se tratava de uma convergência com purezas elevadas. Para a razão mínima de refluxo, o quinto estágio mostrou-se ideal para a entrada do solvente na coluna, $FS_{OTM} = 5$.

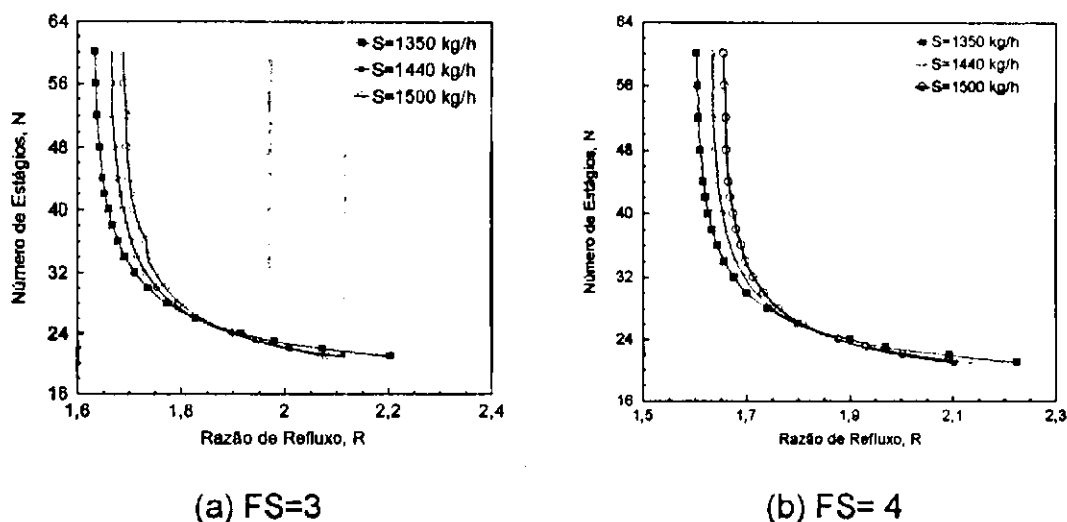
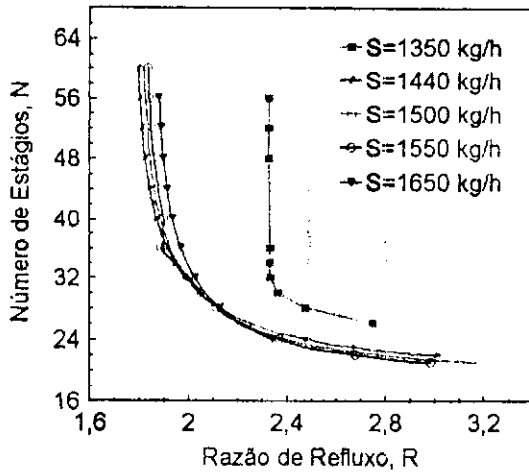


Figura 5.3 - Comportamento do número de estágios versus a razão de refluxo, com uma pureza de 99,6% em peso de etanol.

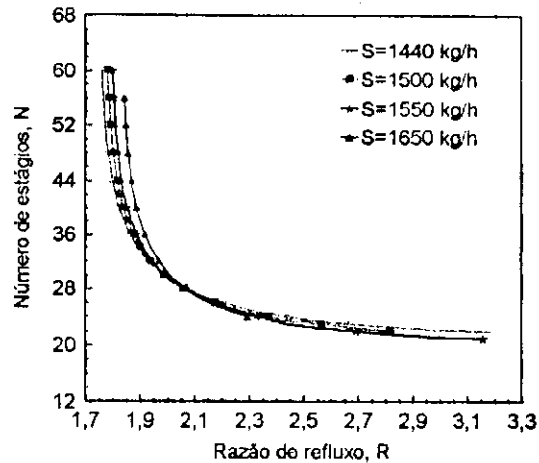
Vazão ótima de solvente: Semelhante ao caso onde a composição do destilado era de 99,4% em peso, a vazão ótima de solvente para esta pureza foi de $S_{OTM} = 1350$ Kg/h em relação a razão de refluxo mínima (**Figura 5.3**).

Localização do estágio de alimentação do solvente: O estágio de alimentação do solvente em função do grau de pureza especificado foi o quarto estágio, correspondente a uma razão mínima de refluxo, $FS_{OTM} = 4$.

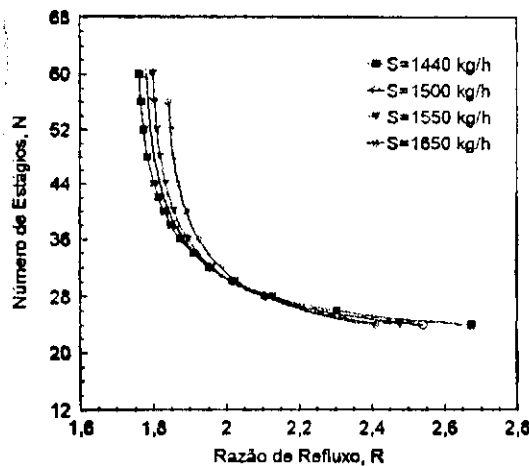
Pureza do etanol no destilado (X_D): Essa grandeza afeta a razão de refluxo máxima admissível e a quantidade mínima de solvente necessária para ocorrer a separação desejada. Quando a pureza do destilado aumenta, aumenta proporcionalmente o fluxo mínimo de solvente. Contudo, para uma razão de alimentação fixa (S/F), a razão de refluxo máxima decresce. Finalmente, quanto maior a pureza do destilado aumenta a dificuldade de separação e uma quantidade maior de solvente é requerida.



(a) FS=3



(b) FS= 4



(c) FS= 5

Figura 5.4 - Comportamento do Número de estágios versus Razão de refluxo, com uma pureza de 99,8% de etanol anidro e vazões adicionais de $S=1550$ kg/h e $S=1650$ kg/h

Vazão de solvente (S), ou taxa de solvente (S/F) ótima: Observa-se na **Figura 5.4**, que ao se trabalhar com purezas mais elevadas (99,8% em peso), aumentou-se as taxas de solventes para poder efetivar o grau de separação desejada. A vazão de solvente de 1350 kg/h considerada ótima para as purezas anteriores, tornou-se inadequada para este caso, o que levou a busca de taxas de solventes mais amplas verificando-se a tendência da vazão ótima de solvente encontrar-se entre 1440 e 1500 kg/h.

Localização do estágio de alimentação do solvente; Os estágios de alimentação do solvente examinados neste item são: 3, 4, e 5, sendo o segundo estágio com efeito desprezível devido o efeito diluidor do refluxo externo ter prevalecido. O poder de atuação do solvente diminuiu proporcionalmente a eficiência de separação para o alcance da especificação da pureza de 99.8% em peso. Observou-se igualmente que o estágio de alimentação muito próximo da posição da alimentação original e do topo da coluna propiciam uma redução na eficiência de separação.

Vazões de topo e de fundo da coluna, em função dos produtos da coluna: Nesta fase avaliou-se a vazão de destilado especificada mediante variação das vazões de solvente. O balanço de massa apresentou algumas diferenças, como era de se esperar, com vazões elevadas de solventes, geravam-se vazões de fundo ou de base maiores e, conseqüentemente vazões de topo menores. Assim, tomando como critério a vazão de destilado especificada, procurou-se como ponto de partida, por vazão de solvente ótima, aquela que mais se aproximasse do valor requerido de destilado.

CONCLUSÕES PRELIMINARES:

A pureza do produto final escolhida foi de 99.8% em peso de etanol no topo (99.5% em mol) que corresponde à mínima aceitável como pureza elevada (pureza mínima permissível requerida pela literatura, dependendo das condições climáticas **MEIRELLES ET AL.(1992)**).

Verificou-se a importância da quantidade de solvente adicionada ao processo. Quanto à razão S/F observou-se que a capacidade de separação depende fortemente desta relação, assim para que se possa atingir grau de pureza elevado o efeito desta grandeza é diretamente proporcional à razão S/F. Observou-se no decorrer da simulação que houve um intervalo de não convergência para S/F inferior a 1.35 e, às vezes, acima de 1.65, principalmente, para purezas mais elevadas. Finalmente foi evidenciada a importância da concentração do etanol na alimentação original e a sua

influência no processo de separação. Na Tabela 5.1 abaixo ilustra-se um resumo das principais variáveis para cada pureza avaliada.

Tabela 5.1 - Resumo das variáveis avaliadas em função da pureza

PUREZA ($X_D^{(1)}$)	VAZÃO DE SOLVENTE (S)	ALIMENTAÇÃO ORIGINAL (FA)	ALIMENTAÇÃO DO SOLVENTE (FS)
0,994	1350	$10 \leq 13$	5
0,996	1350	$10 \leq 13$	4
0,998	$1440 \leq 1500$	$12 \leq 16$	$3 \leq 5$

5.1.2 Coluna de Destilação Convencional

O conhecimento do comportamento da coluna de destilação convencional tornou-se mais simples do que da coluna de destilação extrativa, dificultando assim a convergência numérica do problema proposto. A análise Short Cut serviu como base para a solução aproximada de algumas estimativas iniciais da configuração básica da coluna.

A Tabela 5.2 mostra resumidamente os resultados obtidos com o auxílio do utilitário short-cut. Estes resultados permitiram a escolha dos parâmetros iniciais para a simulação tais como número de estágios (8) e o prato de alimentação sendo o sexto.

Tabela 5.2 - Resultado da análise short cut

CORRENTE de ALIMENTAÇÃO	ALIMENTAÇÃO	COMPOSIÇÕES MOLARES			
		ESPECIFICADAS		ATUAIS	
FLUXO (KGMOL/H)	25.3772				
RAZÃO DE REFLUXO	1.4	TOPO	BASE	TOPO	BASE
CHAVE LEVE	ÁGUA	-	0.00034	0.97073	0.00034
CHAVE PESADO	EGLICOL	0.00003	-	0.00003	0.99966
VARIÁVEIS MANIPULADAS	TEMPERATURA	-	-	80.987	175.51
	PRESSÃO(KPa)	50.65	50.65	50.65	50.65
	FLUXO DE DEST(KGMOL/H)	2.1695	-	2.1695	-
	FLUXO DE RES.(KGMOL/H)	-	-	-	23.207
TAXAS INTERNAS	FLUXO DE VAPOR (KGMOL/H)	FLUXO LIQUIDO (KGMOL/H)		CALOR TROCADO(GJ/H)	
	0.2052	0.1197		0.1281	
VARIÁVEIS PROCURADAS	ESTÁGIO MÍNIMO DE FENSKE	REFLUXO MÍNIMO DE UNDERWOOD		Nº DE ESTÁGIOS TEÓRICOS\ PRATO DE CARGA	
	5.3	0.3744		7.93 / 6.96	

5.2 OTIMIZAÇÃO NÃO SEQUENCIAL

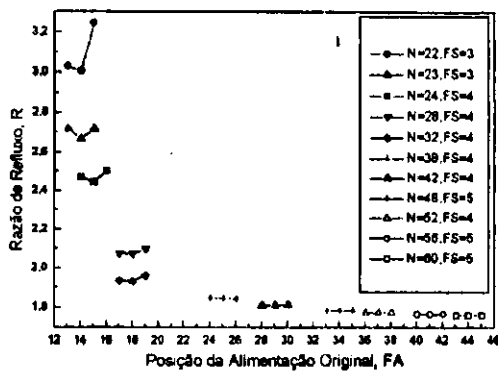
5.2.1 Destilação Extrativa

A discussão dos resultados está fundamentada na análise da otimização das condições operacionais básicas da coluna. Levando-se em consideração as observações feitas no decorrer da **simulação preliminar**, é fundamental interpretar os dados para a pureza de 99.8% em peso para buscar a otimização da coluna de destilação extrativa. Após ter-se decidido pela pureza máxima a ser atingida, encontra-se as variáveis ótimas, de importância fundamental para o processo. Baseando-se nas considerações acima, avaliou-se os resultados obtidos considerando:

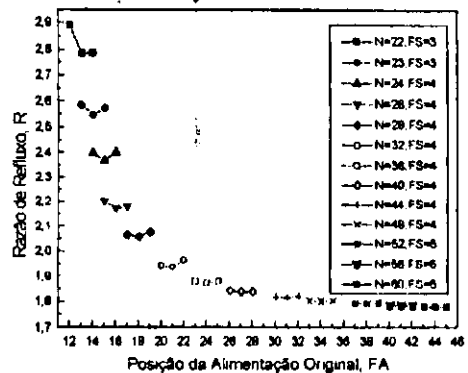
Vazão ótima de solvente (S_{OTM}) - Ao ilustrar os resultados das simulações através de gráficos do comportamento da razão de refluxo, em função do número de estágios (**Figuras 5.2, 5.3 e 5.4**). Com uma taxa de solvente **1.44** correspondente a vazão de **1440 kg/h**, obteve-se uma melhor razão de refluxo, comparada com as demais taxas de solventes. A vazão de solvente foi determinada necessariamente em função do efeito desta sobre a eficiência do processo extrativo. Por isso, o parâmetro S/F é uma variável de otimização do processo, pois é usada para extração máxima da quantidade de etanol da solução de alimentação, consumindo o mínimo de energia possível na coluna de destilação extrativa.

Localização do estágio da alimentação da mistura original e do estágio de carga do solvente ótimos - Foi adotado como critério de localização do estágio ótimo de alimentação se fixar o estágio de alimentação da mistura original variando-se a localização do estágio de entrada do solvente cujo parâmetro de avaliação é a razão de refluxo.

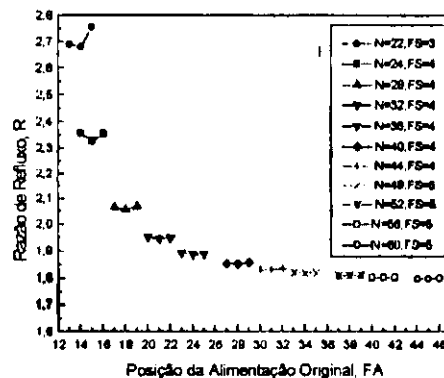
Os itens a, b e c da Figura 5.5 representam o comportamento da razão de refluxo em função das posições de alimentação ao longo da coluna para diversos estágios.



(a) S=1440 kg/h



(b) S=1500 kg/h



(c) S=1550 kg/h

Figura 5.5 - Posição das alimentações em função da Razão de Refluxo para a pureza de 99,8% em peso de etanol

Observando o comportamento da posição de alimentação do solvente em função da razão de refluxo (Figuras 5.2, 5.3 e 5.4, 5.5a, 5.5b e 5.5c), pode-se concluir que entre as posições de alimentações 3, 4 e 5, o estágio 4 é a que apresentou menor razão de refluxo para a razão de 1440 kg/h, portanto $FS_{OTM} = 4$. Para VAN WINKLE (1967) o ponto de introdução ou adição do solvente na coluna fracionadora influencia no gradiente de concentração ao longo da coluna. Geralmente quando o agente extrativo (solvente) tem a mesma volatilidade que a alimentação original, ambas podem ser adicionadas no mesmo estágio de alimentação. Quando o solvente é

menos volátil que alimentação principal é adicionado acima da alimentação (próximo do topo da coluna). Finalmente, quando o solvente é mais volátil que a mistura original é adicionado abaixo do ponto de introdução da alimentação.

Neste caso estudo, a mistura etanol - água é mais volátil que o solvente, as posições de alimentação estão de acordo com as conclusões de **BENEDICT & RUBIN (1945)**. Estes autores realizaram um estudo matemático visando a localização do ponto ótimo de adição do solvente, utilizando algumas suposições simplificadas. Concluíram que a adição do solvente na seção superior da coluna (na proximidade do topo) é mais desejável que a alimentação combinada. Portanto, diante desses fatos, pode-se constatar que o estágio de alimentação do solvente (número 4) é compatível com as considerações literárias, e finalmente o estágio da alimentação original é o 15 (FA_{OTM}) que corresponde ao par ordenado conseguido pela otimização.

Nas **Figuras 5.5a, 5.5b e 5.5c**, pode-se observar com o aumento do número de estágios ocorre uma estabilidade na razão de refluxo. Diminuindo-se o número de estágios aumenta-se a razão de refluxo tornando o processo desfavorável devido ao consumo excessivo de energia. Portanto, a região compreendida entre **2.1 e 2.6 de razão de refluxo** que corresponde ao resultado da faixa ótima operacional de 1.2 a $1.5R_{MIN}$ utilizada por **KNAPP & DOHERTY (1994)** é a escolhida. O consumo de energia é diretamente proporcional à razão de refluxo. Para minimizar a quantidade de energia, deve ser escolhida uma posição de alimentação do solvente que produza a menor razão de refluxo, mas instabilidade nos fluxos internos de líquido e de vapor podem reduzir a eficiência do processo.

Razão de refluxo ótima (R_{OTM}) e Número de Estágio ótimo correspondente (N_{OTM}) - Com os dados plotados, baseados na especificação do destilado com pureza de 99,8% de etanol e do número de estágios em função da razão de refluxo correspondente, fez-se a avaliação dos demais parâmetros de operação. pode-se calcular a razão de refluxo ótima (R_{OTM}) que levará, conseqüentemente, a um número de estágios ótimo para a taxa de solvente escolhida.

A simulação da coluna com 60 estágios gerou um refluxo mínimo (R_{min}) de 1,76224. Com o resultado obtido, pode-se determinar os limites de operação baseados na razão de refluxo mínima e na faixa operacional desta especificada por **KNAPP & DOHERTY (1994)** para a destilação extrativa.

◆ Limite Inferior $\Rightarrow 1.2 \times 1,76224=2,11$

◆ Limite Superior $\Rightarrow 1.5 \times 1,76224=2,64$

Portanto, o estágio ótimo situou-se na região entre os estágios **23 e 28** ao longo da coluna, admitindo 36% de R_{min} como refluxo ótimo tem-se $R_{OTM} = 2.39 \approx 2.4$ o que resulta um número de **24 estágios teóricos (N_{OTM})**.

A **Tabela 5.3** mostra um resumo das condições ótimas de operação para a simulação da coluna de Destilação Extrativa.

Tabela 5.3 - Resumo da otimização das variáveis para a configuração da coluna.

Variáveis Manipuladas	Condições Estimadas	Condições Otimizadas
Taxa de Solvente (S/F)	1.35 a 1.65	1.44
Vazão de Solvente (S)	1350 a 1650 kg/h	1440 kg/h
Alimentação original (FA)	14	15
Alimentação do Solvente (FS)	3	4
Razão de Refluxo (R)	1.6	2.4
Nº de Estágios teóricos (N)	20 a 60	24
Composição mássica do etanol no topo ($X_D^{(1)}$)	0.998	0.998
Fluxo da alimentação original (F)	1000 kg/h	1000 kg/h

5.2.2 Destilação Convencional - parâmetros otimizados

Razão de Refluxo Ótima (R_{OTM}) - Como a razão de refluxo é uma função do número de estágios o seu comportamento foi avaliado na **Figura 5.6**.

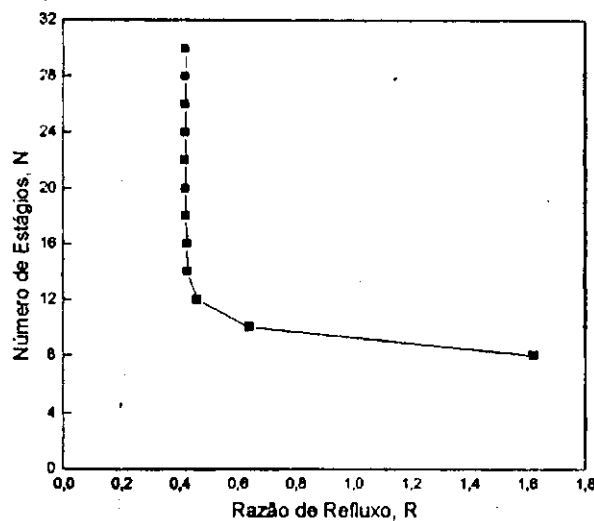


Figura 5.6 - Razão de refluxo em função do número de estágios para a coluna convencional.

Na **Figura 5.6**, para um número de estágios fixo (30), o R_{MIN} (razão de refluxo mínima) corresponde a 0.42032. A razão de refluxo ótimo ($R_{\text{ÓTIM}}$) calculada na faixa definida na literatura para a destilação simples como $R_{\text{ÓTIM}} = 1.1 \text{ a } 1.5R_{\text{MIN}}$ (PERRY & GREEN, 1984) situa-se entre 0.46235 e 0.63048. Portanto, a partir desta região o número de estágios ótimos correspondente encontra-se entre 10 e 12 estágios. O limite inferior de aplicabilidade de $R_{\text{ÓTIM}} = 0.46$ corresponde ao estágio 12. Determina-se o estágio de alimentação da coluna como o estágio de número 8. A **Tabela 5.4** ilustra resumidamente o resultado da simulação de alguns parâmetros para a otimização não seqüencial das duas colunas.

Tabela 5.4 - Dados operacionais ótimos - sistema convencional

Sistema Convencional	Colunas de Destilação	
	Destilação Extrativa	Destilação Simples
Variáveis Manipuladas		
N_{OTM}	24	12
$Q_{CÓTM}$ (KJ/h)	2,765	0,135
$Q_{RÓTM}$ (KJ/h)	2,524	0,265
FS_{OTM}	4	8
FA_{OTM}	15	8
S_{OTM} (KG/H)	1440	1440
R_{OTM}	2,45668	0,46658
T_{TOTM} (° C)	78,15	75,52
T_{BOTM} (° C)	146,22	175,51

5.3 Otimização Seqüencial

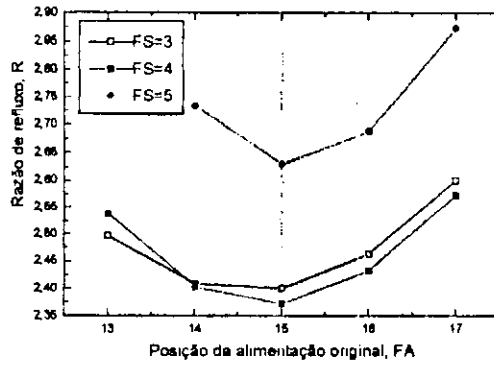
5.3.1 Melhorias Operacionais do Caso Padrão

São apresentados agora e analisados os resultados de simulações e otimização do caso padrão. As variáveis especificadas foram mencionadas na metodologia seqüencial. Assim, com o conhecimento das condições ótimas de operação das duas colunas simuladas individualmente e utilizando o procedimento de sua otimização descrito anteriormente. Calculou-se os dados de operação ótimos para a simulação seqüencial detalhados na Tabela 5.5 para o sistema padrão.

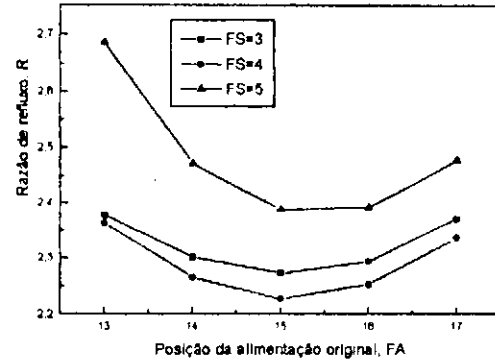
Os dados gerais de otimização para o caso padrão, em função das posições de alimentação, razão de refluxo, cargas térmicas e vazão de

solvente são apresentados na Tabela A-3 do Apêndice A.

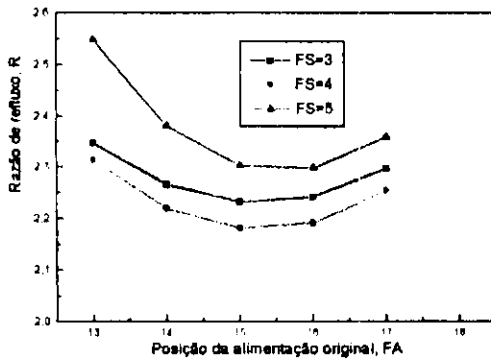
O comportamento do estágio de alimentação em relação a razão de refluxo, para diversas vazões de solvente, é mostrado na Figura 5.7.



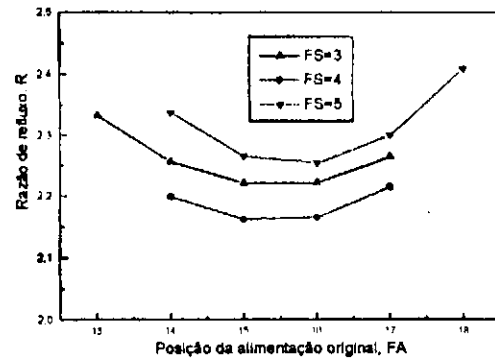
(a) S= 1440 kg/h



(b) S= 1550 kg/h



(c) S= 1650 kg/h



(d) S=1750 kg/h

Figura 5.7 - Influência dos estágios de alimentação na da razão de refluxo para o caso padrão com $N=24$ e pureza máxima de 99,8% em peso de etanol.

A localização das alimentações da mistura original e do solvente são 15/4 para a vazão correspondente de 1440 kg/h. A Figura 5.7 mostra que as localização destas alimentações apresentaram a menor razão de refluxo e cargas térmicas também.

Quanto a vazão de solvente (**figura 5.7**), pode-se observar que mesmo com taxas de solventes elevadas e baixas razões de refluxo, não foi possível decidir a vazão ótima para o caso padrão. Avaliou-se assim as vazões internas de líquido e de vapor ao longo da coluna. Para taxas de solventes mais elevadas a vazão de destilado no topo da coluna foi comprometida, já que as vazões de líquido na base da coluna aumentaram com o aumento da vazão de solvente. Optou-se pela vazão de solvente que mais caracterizou a vazão do destilado, determinada pelo balanço material de $S = 1440$ kg/h.

Tabela 5.5 - Resumo dos dados operacionais ótimos para o caso padrão

Variáveis otimizadas	Valores operacionais ótimos
N_{OTM}	24
S/F_{OTM}	1.44
$S_{OTM}=KG/H$	1440
FA_{OTM}	15
FS_{OTM}	4
R_{OTM}	2.3720
Q_{COTM} (GJ/H)	2,69
Q_{ROTm} (GJ/H)	2,56

5.3.2 Melhorias Operacionais do Caso Proposto

Neste tópico serão apresentados e discutidos os resultados das simulações de colunas de destilação para o caso proposto para o sistema etanol (1) - água (2) - etileno glicol (3).

Os dados necessários para as especificações da operação **troca1** (**Figura 4.7**) encontram-se na **Tabela 5.6**.

Tabela 5.6 - Resumo das correntes do trocador de calor-1

CORRENTES VARIÁVEIS	ENTRADAS		SAIDAS	
	ALIM1	ETANOL- VAPOR	ALIM1- AQUE	ETANOL- FRIO
FRACÃO DE VAPOR	0*	1*	0.8968	0*
PRESSÃO(KPa)	101.3*	101.3*	101.3	101.3*
FLUXO (KG/H)	1000*	958.9879*	1000	958.9615*
ETANOL(1)% MOL	0.9037*	0.9949*	0.9037	0.9949*
ÁGUA(2)% MOL	0.0963*	0.0051*	0.0963	0.0051*
EGLICOL% MOL	0.0000*	0.0000*	0.000	0.000*

Os dados da **Tabela 5-7** são as especificações das correntes do trocador de calor- troca 2 (**Figura 4.8**)- vaporização completa da alimentação original (vapor saturado).

Tabela 5.7 - Resumo das correntes do trocador de calor-2

CORRENTES VARIÁVEIS	ENTRADAS		SAIDAS	
	ALIM1- AQUE	ÁGUA- VAPOR	ALIM1- QUENTE	ÁGUA- FRIA
FRAÇÃO DE VAPOR	0.8968	1*	0.9892	0*
TEMPERATURA(°C)	78.0308	80.9771	78.0308	78.0308*
PRESSÃO(KPa)	101.3	50.65*	101.3	50.65
FLUXO (KG/H)	1000	41.0139*	1000	41.0075
ETANOL(1)% MOL	0.9037	0.0292*	0.9037	0.0292
ÁGUA(2)% MOL	0.0963	0.9708*	0.0963	0.9708
EGLICOL % MOL	0.000	0.0000*	0.000	0.000

A apresentação e discussão dos resultados serão evidenciados pela otimização das condições operacionais básicas para o caso proposto. Em seguida, a discussão se concentrará nos impactos em termos de economia de energia que a técnica de integração energética pode proporcionar. Finalmente, serão avaliados os efeitos da integração térmica sobre os perfis de temperatura, composição e vazão comparando-os com o processo padrão.

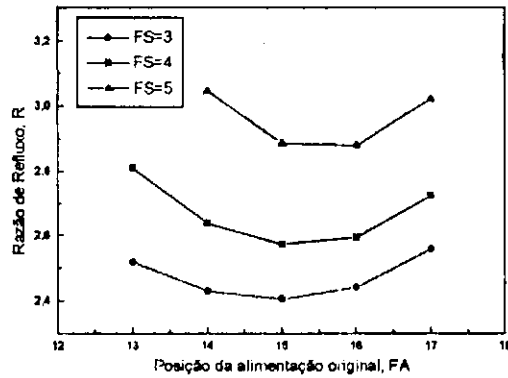
5.3.2.1 Otimização do Caso Proposto.

Em função dos dados operacionais ótimos do caso padrão e do mesmo procedimento metodológico, foram estabelecidas as condições da simulação para este caso e melhorias operacionais foram obtidas. Os dados gerais de otimização para o caso proposto, em função das posições de alimentação, razão de refluxo, cargas térmicas e vazão de solvente são apresentados na **Tabela A-4 do Apêndice A.**

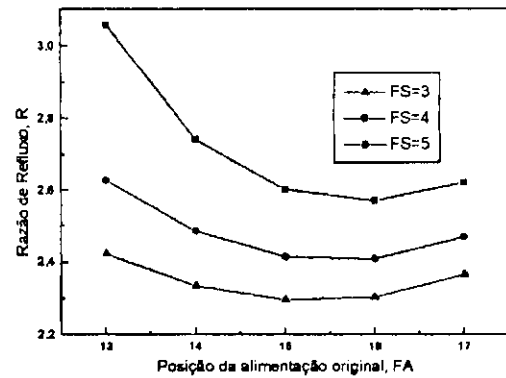
Comportamento da Localização ótima das alimentações;

Observando a **Figura 5.8**, para cada vazão de solvente, existe uma localização ótima na coluna para o prato de alimentação. De acordo com **(KING, 1971)**, o ponto ótimo de alimentação, que requer um número total de estágios de equilíbrio para um dado refluxo, depende da composição do líquido no estágio da alimentação. Se a alimentação é líquido saturado, a sua localização ótima situa-se no estágio onde a composição do líquido de entrada se aproxima da composição da alimentação principal; no entanto, para outras fases da alimentação, a localização do ponto ótimo de alimentação é bastante variada. No caso de uma coluna com dupla alimentação, o projeto ótimo é função não apenas da condição térmica da alimentação, mas da composição do líquido para diferentes pontos de alimentação **(KING, 1971)**. Portanto, o autor referenciado concluiu que, para um mesmo grau de separação, a

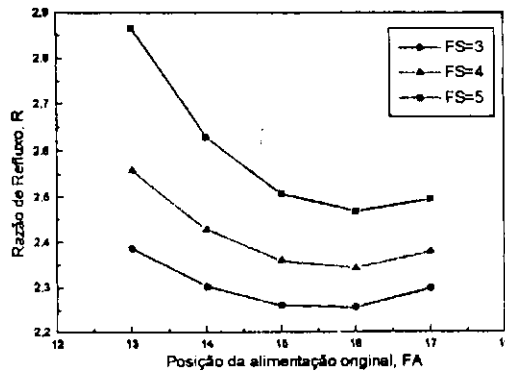
desvantagem de introduzir a alimentação em vários pontos numa coluna sem antes verificar a sua combinação acarreta dificuldades no processo de separação. Destas observações e analisando a **Figura 5.8**, para a vazão de solvente escolhida, a ordem da localização da alimentação principal e do solvente são os estágios 15 e 3 respectivamente.



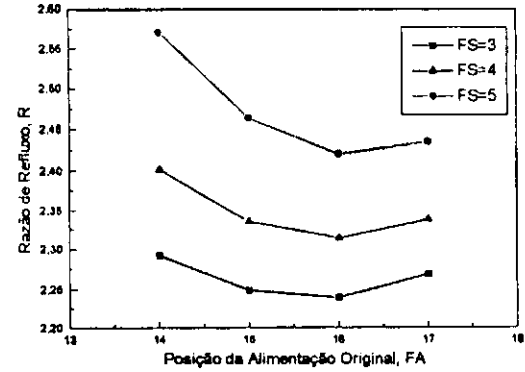
(a) S=1440 kg/h



(b) S=1550 kg/h



(c) S=1650 kg/h



(d) S=1750 kg/h

Figura 5.8 - Posição dos Estágios de Carga em Relação a Razão de Refluxo para o caso Proposto com N=24 e 0,998 em peso de etanol no topo.

A **Tabela 5.8** mostrada a seguir, resume os valores operacionais ótimos para o caso proposto.

Tabela 5.8 - Resumo dos dados operacionais ótimos para o caso proposto

Variáveis otimizadas	Valores operacionais ótimos
N_{OTM}	24
S/F_{OTM}	1.44
$S_{OTM}(KG/H)$	1440
FA_{OTM}	15
FS_{OTM}	3
R_{OTM}	2.4034
$Q_{COTM}(GJ/H)$	1.92
$Q_{ROTM}(GJ/H)$	1.709

5.3.2.2 Sensibilidade Paramétrica:

Neste tópico é explorada a sensibilidade dos resultados da simulação com a variação dos parâmetros de operação tais como: taxas de solvente, consumo energético, razão de refluxo, e cargas térmicas. O objetivo é explorar os efeitos desses parâmetros sobre a razão de refluxo e o fluxo mínimo de solvente. Dos parâmetros remanescentes, somente os efeitos da razão entre as alimentações (S/F) e das cargas térmicas (consumo energético - Q_R) tem sido examinados.

Consumo Energético - Q (GJ/H): Neste tópico são apresentados os resultados da simulação relacionados com o consumo de energia. O efeito comparativo é evidenciado em relação ao consumo de energia no "refervedor" tanto para o caso padrão como para o caso proposto.

Na **Figura 5.9** destaca-se a influência da vazão de solvente (S) e da razão de Refluxo externa (R) no consumo de energia no "Reboiler".

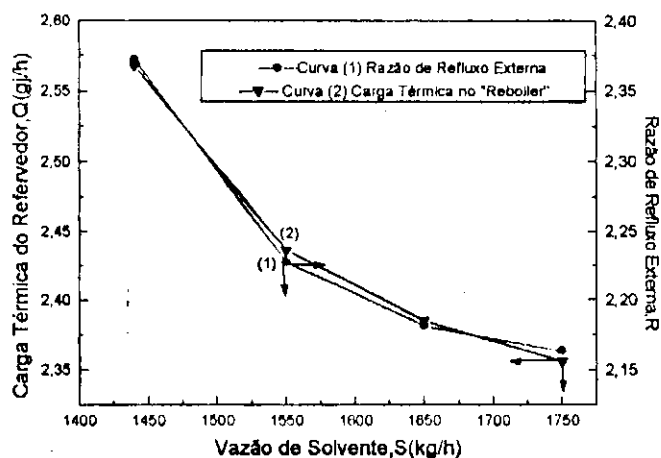


Figura 5.9 - Consumo de Energia no "reboiler" de etanol, Q (GJ/H) e Razão de Refluxo Externa com a Vazão de Solvente (S) para o Caso Padrão.

Observa-se na **Figura 5.9**, que a razão de refluxo externa é proporcional ao consumo energético no revedor, ou seja, a medida que o consumo de energia aumenta, também aumentam os valores da razão de refluxo. Já com a vazão de solvente, um comportamento inverso é observado, isto é, quanto maiores as cargas térmicas e a razão de refluxo menores serão as vazões de solvente requeridas para a separação. Este conceito é válido para o caso proposto de integração energética conforme mostra a **Figura 5.10**.

O aumento da vazão de vapor é proporcionado pela qualidade da alimentação principal ou estado térmico da mesma. Observa-se na **Figura 5.10**, que a razão de refluxo tem influência mais acentuada sobre o consumo de energia, não produzindo efeito significativo na pureza do produto final. Já para a razão entre as alimentações, sua influência é significativa sobre a razão de refluxo, que por sua vez, proporciona um aumento do consumo energético (KNAPP & DOHERTY, 1994).

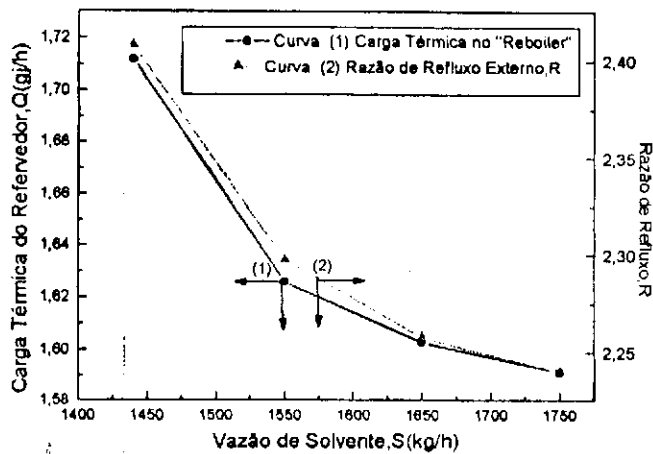


Figura 5.10 - Consumo de Energia no "reboiler" (Q) com a Razão de Refluxo Externa (R) e a Vazão de Solvente (S) para o caso Proposto.

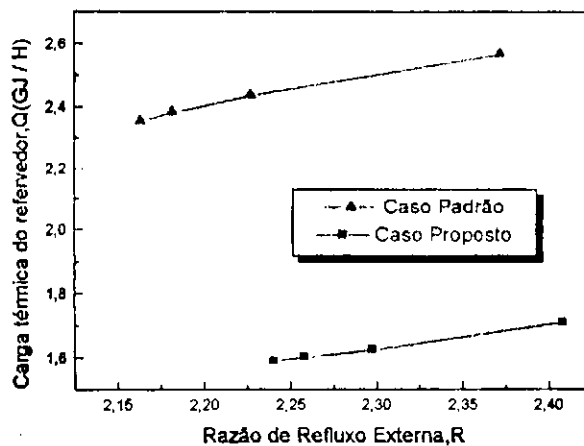


Figura 5.11 - Variação do Consumo de Energia no "reboiler" (Q) com a Razão de Refluxo Externa (R) para os dois casos estudados.

Na **Figura 5.11** compara-se o consumo de energia no "reboiler" para as colunas interligadas e para o sistema integrado energeticamente. Observa-se que, o sistema integrado termicamente pode ser operado com razões de refluxo razoavelmente baixas, sem comprometer o grau de pureza mínimo do produto de topo, diminuindo de maneira considerada o consumo excessivo de energia do caso padrão.

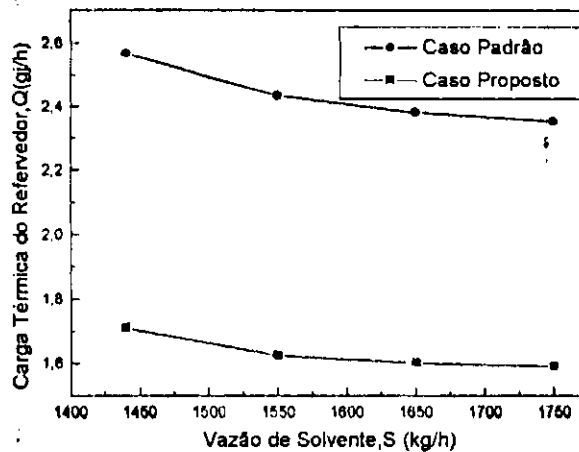


Figura 5.12 - Consumo de Energia no "Reboiler" (Q) com a Vazão de Solvente (S) para os dois casos estudados.

Na **Figura 5.12**, para o caso proposto, pode-se observar que houve uma significativa redução do consumo energético evidenciando apenas que na medida que a vazão de solvente (S) aumentava a carga térmica do "reboiler" apresentava uma queda, para cada vazão correspondente.

5.4 Cálculo de Economia de Energia:

A economia conseguida com a integração energética é avaliada pela equação (Pinto & Pereira, 1988) :

$$E_R = 100 * \frac{(Q_R - Q_R^K)}{Q_R} \quad (5.1)$$

onde:

- ▲ E_R ⇒ Economia conseguida, medida de economia em porcentagem no refervedor;
- ▲ Q_R ⇒ Energia requerida pelo refervedor;
- ▲ Q_R^K ⇒ Energia requerida no refervedor - modelo proposto.

Assim, a economia obtida entre o caso padrão e o caso proposto otimizados foi de aproximadamente 30% conforme a **Tabela 5.9** apresentada a seguir. Finalmente, com as mesmas especificações de pureza e número de estágios, o caso padrão otimizado apresentou um consumo na vazão de etanol de **2812,90 KJ/KG** e o sistema proposto um consumo específico de **2007,29 KJ/KG** também mostrados na **Tabela 5.9**.

Tabela 5.9 - Sumário da avaliação energética

CONSUMO DE VAPOR (KJ/KG ETANOL)	SEQÜÊNCIA	ECONOMIA DE VAPOR (KJ/KG ETANOL)	ECONOMIA DE VAPOR-E_R (%)
2812,90	Caso padrão otimizado	-	20
2142,85	Caso proposto	670,05	28,31
2007,29	Caso proposto otimizado	805,61	33,41

5.5 - Influência dos Perfis-Efeito Comparativo:

5.5.1 Efeitos da integração energética no perfil de temperatura: Caso Padrão e Caso Proposto;

A **Figura 5.13** mostra o perfil de temperatura do sistema etanol (1)-água (2)-etileno glicol (3).

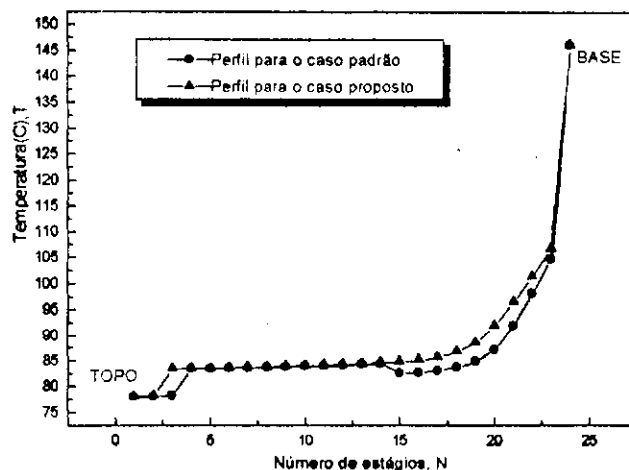


Figura 5.13 - Perfil de Temperatura para o sistema etanol (1)-água (2)-Etileno glicol (3) para ambos os casos otimizados.

Tanto na destilação convencional (caso padrão) quanto na destilação com a integração energética (**Figura 5.13**), a concentração de solvente em cada uma das seções da coluna é constante, levando ao perfil de temperatura entre os estágios de alimentação também a valores relativamente constantes ao longo da seção de enriquecimento, com uma leve tendência de decréscimo no ponto de injeção da mistura (estágio de número 15). Por outro lado, a técnica de integração energética múltiplo efeito (caso proposto), apresenta forte tendência de diluição do solvente, especialmente na região próxima da alimentação da mistura. Com a integração energética, o comportamento manteve-se o mesmo até a seção de enriquecimento. A partir do ponto do estágio de alimentação, os valores de temperatura são mais acentuados na seção de esgotamento, justificado pela maior concentração do solvente nesta região.

O perfil de temperatura no caso padrão, mostrou-se similar ao perfil encontrado por **MEIRELLES ET AL. (1992)** e **BATISTA & MEIRELLES (1997)**,

concordando com o perfil experimental e simulado para a destilação extrativa de MEIRELLES ET AL. (1992). Portanto, a diferença de temperatura entre as duas seções da coluna depende da taxa de solvente (S/F) e da razão de refluxo (R), apresentando comportamento idêntico ao da concentração de etileno glicol, que diminuiu com o aumento de R e aumenta com a elevação da taxa de solvente (S/F).

5.5.2 Efeitos da integração energética nos Perfis de fluxo total de líquido e de vapor: Caso Padrão e Caso Proposto;

A Figura 5.14 mostra os perfis de fluxo total de líquido e de vapor para o sistema etanol-água-etileno glicol.

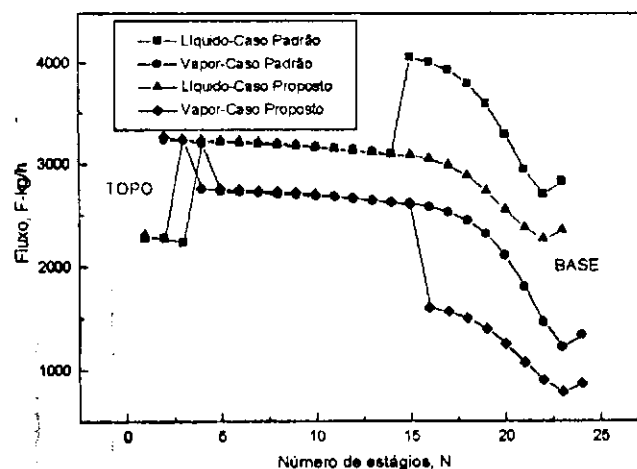


Figura 5.14 - Perfis de Vazão Total de líquido e de vapor para o Sistema etanol/água/etileno glicol.

Para a fase líquida: observa-se na Figura 5.14 pontos de descontinuidade para o caso padrão. A injeção do solvente e da alimentação principal provocam mudanças bruscas de fluxos nesses pontos, devido ao aumento da concentração de solvente na coluna. A vazão de líquido é

aumentada, mantendo-se constante entre os estágios de alimentação, após o estágio da alimentação principal em direção a seção de exaustão da coluna vazão de líquido continua aumentando consideravelmente. Com a integração energética, o comportamento foi invertido em relação ao caso padrão. Embora a vazão de líquido tenha aumentado consideravelmente na seção de retificação da coluna, sua vazão em direção a seção de esgotamento da coluna foi diminuindo gradativamente até atingir o estágio do refeedor, provocada pelo aquecimento da alimentação principal.

Para a fase Vapor: Pela **Figura 5.14**, o comportamento foi análogo ao da fase líquida para ambos os casos quanto aos pontos de descontinuidades que continuaram existindo entre estágios de alimentações. Com o aumento da concentração do solvente na coluna para a caso padrão, houve uma diminuição relativa no fluxo de vapor, mantendo-se constante entre os estágios de alimentações e na direção da seção de esgotamento tornou a decrescer gradativamente. Já para o caso proposto de integração energética, obteve-se um comportamento adverso para esta fase, ou seja, Embora os pontos de descontinuidades ainda continuem existindo, comparado com o caso padrão, houve um aumento considerável no fluxo de vapor na seção de retificação da coluna, mantendo-se constante entre os estágios de alimentações e diminui gradativamente ao longo da seção de exaustão da coluna.

5.5.3 Efeitos da integração energética nos perfis de Composições para cada componente: Caso Padrão e Caso Proposto.

Nas figuras que se seguem são apresentados separadamente os perfis de concentrações dos componentes da mistura etanol/água/etileno glicol na fase líquida e na fase vapor.

5.5.3.1 Perfil de Concentração para o etanol:

A **Figura 5.15** mostra o comportamento da composição mássica do etanol ao longo da coluna de destilação.

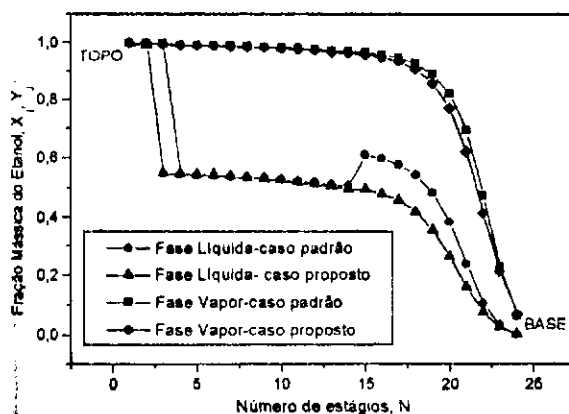


Figura 5.15 - Perfil de Composição do etanol ao longo da coluna nas fases líquida e vapor

Na Fase Líquida: há uma mudança brusca nas posições de alimentação do solvente e da alimentação principal para o caso padrão (**Figura 5.15**). Com a injeção do solvente, houve uma diminuição da concentração do etanol nessa fase, permanecendo constante entre os estágios de carga e aumentando em seguida logo após a alimentação principal para no final continuar em declínio ao longo da seção de esgotamento. Para a integração energética, a concentração do etanol na fase líquida na seção de retificação e por toda a seção de esgotamento permaneceu decrescente, justificado pelo poder de interação do líquido com o vapor após o aquecimento da alimentação, aumentando os coeficiente de transferência de massa e de calor e, conseqüentemente a eficiência de separação, gerando economia de energia.

Na fase Vapor: a concentração do etanol ao longo da coluna de destilação extrativa diminui em direção a seção de esgotamento para ambos

os casos (figura 5.15). No entanto, a seção de enriquecimento é mais rica nesse componente. Já com a técnica de integração energética, ocorreu um ligeiro decréscimo da composição do etanol na seção de exaustão, ocasionada pela baixa vazão de vapor nesta região reduzindo a intensidade de mistura e consequentemente a capacidade de separação do mesmo na base da coluna. Portanto, o poder de separação do etanol é intensificado na seção de retificação justificada pela alta vazão de vapor.

5.5.3.2 Perfil de Concentração da Água:

Na Fase Líquida: A Figura 5.16 mostra o comportamento desse constituinte em toda a coluna para os casos padrão e proposto. A concentração da água a partir da seção de retificação vem crescendo e atingindo o seu ápice na seção de esgotamento tanto para o caso padrão quanto para o proposto, no entanto, para o caso padrão atinge patamares menores de sua concentração. Com a integração energética (caso Proposto), a água tendo seu ponto de ebulição maior que o etanol aumentando consideravelmente sua composição na seção de esgotamento da coluna e, consequentemente tende para um valor mínimo na seção de retificação da coluna.

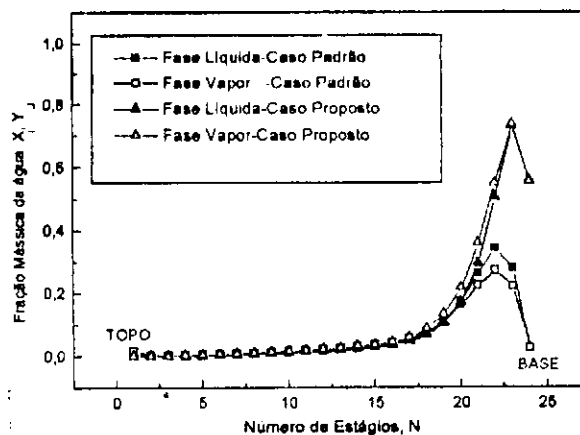


Figura 5.16 - Perfil de Composição da água ao longo da coluna nas fases líquida e vapor

Na Fase Vapor : Pode-se observar na **Figura 5.16**, que o comportamento da fase vapor se torna praticamente análogo ao da fase líquida, no entanto, a composição da água ao longo da seção de esgotamento foi ligeiramente aumentada com a integração energética. De modo geral, o fato da concentração da água atingir valores elevados no caso proposto tanto para a fase líquida quanto para a fase vapor é justificado pela intensidade de transferência de massa e de calor entre o líquido e o vapor aumentar, em virtude do aquecimento da alimentação principal.

5.5.3.3 Perfil de Concentração do Etileno glicol:

Na Fase Líquida: Existem pontos de descontinuidades mais acentuados para o caso padrão representados na **Figura 5.17**. Entre os estágios de alimentação a concentração do etileno glicol é praticamente constante, com uma queda no ponto de entrada da alimentação principal e cresce na seção de esgotamento da coluna, alcançando o seu valor máximo no estágio do refeedor. Com a introdução da integração energética, para a fase líquida, a concentração do etileno glicol mantém-se praticamente constante na seção de enriquecimento da coluna, aumentando gradativamente a partir da parte superior da seção de exaustão, até alcançar o estágio do refeedor, em função do efeito de mistura ser maior para este caso.

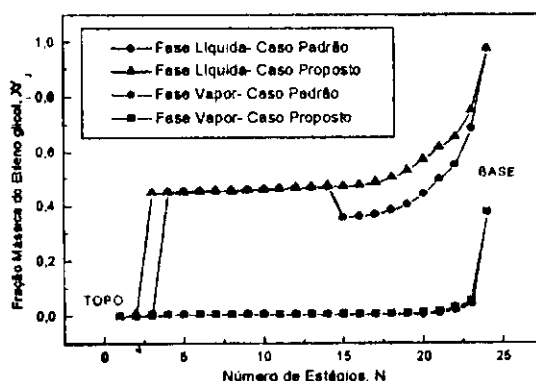


Figura 5.17- Perfil de Composição do etileno glicol ao longo da coluna nas fases líquida e vapor

Na Fase Vapor : (Figura 5.17), os perfis de concentração para o etileno glicol praticamente se igualam para os dois casos estudados cuja concentração do solvente é praticamente desprezível na fase vapor. O etileno glicol com baixa volatilidade, praticamente não se vaporiza e a fase vapor é constituída na sua totalidade por água/etanol devido o seu ponto de ebulição ser elevado e os pontos de ebulição da água e do etanol serem próximos um do outro favorecendo à vaporização dos mesmos, ao mesmo tempo que a fase líquida na seção de esgotamento é enriquecida pelo etileno glicol.

As Figuras 5.18a e 5.18b, 5.19a e 5.19b mostram respectivamente, o comportamento dos perfis de composições de todos os componentes para a fase líquida e para a fase vapor para os casos padrão e proposto.

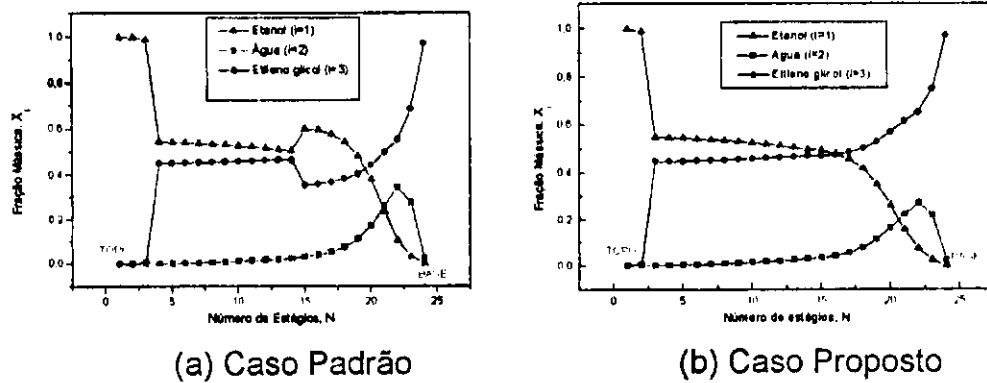


Figura 5.18 - Perfis de Composição na fase líquida

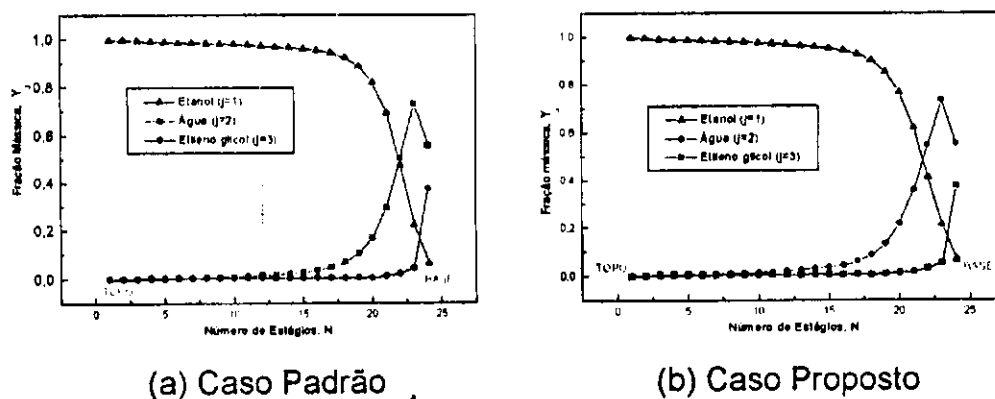


Figura 5.19 - Perfis de Composição na fase vapor.

Os perfis apresentados nas Figuras 5.15, 5.16, 5.17, 5.18 a e b e 5.19 a e b, mostram as composições dos componentes da mistura ternária para o caso padrão na fase líquida e vapor e evidenciam as similaridades do caso padrão com dados obtidos por **MEIRELLES ET AL. (1992)** e comportamento adverso dos perfis para o caso proposto que se assemelham aos encontrados por **BATISTA & MEIRELLES (1997)**. Esses perfis concordam plenamente com os encontrados tanto experimentalmente quanto através da simulação obtidos por **MEIRELLES ET AL. (1992)**.

Nas Figuras 5.18 a e 5.19 b é apresentado o perfil de concentração para o etanol ao longo da coluna, que sofre abruptas mudanças nos dois estágios de alimentação superior e inferior, e diminui bastante na seção de esgotamento da coluna. No caso da água, a sua concentração vem gradativamente se elevando, a partir de concentrações muito baixas no topo, com um ápice próximo ao fundo da coluna. A concentração do etileno glicol é aproximadamente constante tanto entre os dois estágios com alimentação, quanto na maior parte da seção de exaustão da coluna.

Para o caso da integração térmica ilustrada nas Figuras 5.18 b e 5.19 b, a mudança brusca no comportamento das curvas em relação ao caso padrão, também foi notado e plenamente justificado por **BATISTA & MEIRELLES (1997)**, Embora sua constatação tenha sido com o auxílio de outra alternativa de economia de energia, o que deve-se ressaltar é que com o aumento da troca térmica aumenta o fluxo de vapor na seção de retificação da coluna e conseqüentemente também uma elevação no fluxo de líquido na seção de esgotamento da mesma. Estes efeitos perturbaram o comportamento das curvas para o caso proposto. O aumento observado no fluxo de vapor permite a redução do mesmo na base da coluna, contribuindo apenas para melhorar a pureza do destilado. Portanto, a magnitude dessas modificações gera um vapor no refeedor significativamente menor que o fluxo gerado para o caso padrão, contribuindo para uma redução no consumo de energia.

mesmas especificações. Isto decorre pelo fato de que o condensador parcial participa como um estágio de equilíbrio na coluna.

e) Os resultados mostraram que a otimização da unidade reduziu o consumo de energia em torno de 20% em relação ao caso padrão sem otimização e o arranjo obtido pela integração energética, como proposta de trabalho, apresentou uma economia de energia de 33% em relação ao caso padrão otimizado.

CAPÍTULO VII

SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

7.1- Haja vista a importância da concentração do etanol na mistura principal, observada na simulação e constatada pelos problemas apresentados na convergência numérica na coluna extrativa, ao se trabalhar com uma concentração igualmente azeotrópica (onde para fins acadêmicos essa composição é viável teoricamente se distanciando apenas daquela utilizada na realidade prática). Sugere-se, para trabalhos posteriores, utilizar uma concentração de etanol para a alimentação original bem abaixo do ponto de azeotropia, como por exemplo, 85% molar de etanol.

7.2- Fazer um estudo rigoroso levando em consideração a viabilidade econômica da integração energética proposta, a fim de definir com maior segurança a relação entre o investimento necessário e a economia a ser obtida sobre o custo total anual, investigando a viabilidade desta economicamente, tendo em vista que o presente trabalho deteve-se apenas na viabilidade energética.

7.3- Mesmo com os estudos de **MEIRELLES ET AL. (1992) & LYNN & HANSON (1986)** mostrando e comprovando que a destilação extrativa é mais favorável energeticamente comparado com a tradicional destilação azeotrópica com benzeno, é importante realizar um estudo comparativo da viabilização econômica envolvendo o custo total anual, tempo e taxa de retorno do caso proposto. Como também, comparar com a destilação azeotrópica, verificando se realmente a destilação extrativa múltiplo efeito é mais favorável economicamente.

7.4- Apesar da otimização da razão de refluxo e do número de estágio ter sido feita utilizando a faixa operacional ótima preestabelecida pela literatura, é interessante fazer um levantamento econômico para cada número de estágios, afim de definir com maior clareza, quais seriam os valores operacionais ótimos das grandezas em questão.

7.5- Com o auxílio do utilitário **"TRAYCALC"** ou o **"HYPROP"**, complementos do simulador **HYSIM**, propõe-se elaborar um programa prático e rigoroso de otimização do número de estágios e principalmente dos pontos de alimentações da coluna de produção do etanol anidro, que gerem facilidades e superem as dificuldades e o trabalho exaustivo encontrados na busca de melhorias operacionais dessas grandezas, ou recorrer à outros simuladores como o **"PROSIM"**, **"PROCESS" (PRO II)** e **"ASPEN"**.

7.6- Fazer uma avaliação da diferença de temperatura entre o topo e a base da coluna e verificar a viabilização do ponto de vista econômico e energético, para a implantação de bombas de calor (recompressão mecânica de vapor) no sistema de destilação extrativa.

7.7- Fazer uma análise do sistema de integração energética proposto, utilizando a **tecnologia "pinch"**, no sentido de melhorar a recuperação de energia no processo, tornando-o energeticamente mais eficiente.

CAPÍTULO VIII

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ABRAMS, D. S. & PRAUSNITZ, G. M.;** *AIChE J.*, v. 21, p. 116, 1975.
- ANDRECOVICH, M. J. & WESTERBERG, A. W.;** A simple Synthesis Method Based on Utility Bounding for Heat-Integrated Distillation Sequences, *AIChE J.*, v. 3, p 363-375, 1985.
- AHÓN, V. R. ; & MEDEIROS, J. L.;** Projeto de colunas de destilação azeotrópica homogênea in: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 11. Rio de Janeiro, 17a 20 set. 1996. **Anais.** Rio de Janeiro, ABEQ, 1996. v.1, p.1-6.
- BATISTA, E. & MEIRELLES, A.;** Simulation and Thermal Integration SRV in Extrative Distillation Column, *Chem. Eng. Japan J.*, v. 30 (1), p.45-51, 1997.
- BAUER, M. H. & STICHLMAIR, J.;** Syntheses and Optimization of Distillation Sequences for the Separation of azeotropic Mixtures, *Comp. Chem. Eng.*, v. 19, p. 515-520, 1995.
- BLACK, C.;** Simulation Applied to Special Industrial Problems, *Chem. Eng. Progr.* v. 67, p. 53-60, 1982.
- BLACK, C.;** Distillation Modeling of Ethanol Recovery e Dehydration Processes for Ethanol e Gasohol, *Chem. Eng. Progr.*; v. 76, p. 78-85, 1980.

- BLACK, C. & DISTSLER, D. E.;** Dehydration Aqueous of Ethanol Mixtures by Extractive Distillation, Azeotropic and Extractive Distillation , *Adv. Chem. Ser.*; v. 115(1), , 1972.
- BRITO, R. P.;** Simulação de Modelos para Produção de Etanol Anidro via Destilação Extrativa, *Dissertação de Mestrado*, v. 1, UFPB. Campina Grande-PB- Brasil ,1992.
- BENEDICT, M. & RUBIN, D. R. ;** Extractive and Azeotropic Distillation, *Chem. Eng.*, v. 41, p.353-370, 1945.
- COLLURA, M. A. & LUYBEN, W. L. ;** Energy-Saving distillation designs in ethanol production, *Ind. Eng. Chem. Res.* , v. 27 (9), p. 1686-1996, 1988.
- COSTA, N. A.;** Simulação do Processo de Destilação com Recompressão Mecânica de vapor para produção de etanol, *Dissertação de Mestrado*, v. 1, UFPB. Campina Grande-PB- Brasil ,1993.
- DOUGLAS, L. & FEINBERG, D. ;** Evaluation of Nondistillation Ethanol Separation Processes, *Dept. of Enegy.* , v. 27 (9), p. 231, 1983.
- FIDKOWSKI, Z. T., DOHERTY, M. F. & MALONE, M. F.;** Feasibility of Separations for Distillation of Nonideal Ternary Mixtures, *AIChE J.* , v. 39 (8), p. 1303, 1993. .
- FISHER, W. R., DOHERTY, M. F. & DOUGLAS, J. M.;** Evaluating Significant Economic Trad-offs for Process Design e Steady-state Control Optmization Probelms, *AIChE J.* , v. 31 (9), p. 1538, 1985.
- FOUCHER, E. R., DOHERTY, M. F. & MALONE, M. F. ;** Automatic Screening of Entrainers for Homogeneous Azeotropic Distillation, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.30 (4), p.760-762, 1991.

GUIMARÃES, FLÁVIO M. DE Q.; MEDEIROS, J. L.; & PERLINGEIRO, C. A.

G.; A: Otimização e Integração Energética de uma Unidade de Destilação Azeotrópica de Água e Etanol in: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 11. Rio de Janeiro, 17 a 20 de set. 1996. **Anais.** Rio de Janeiro, ABEQ, 1996. v.1, p.1235-1240.

GUIMARÃES, FLÁVIO M. DE Q.; MEDEIROS, J. L.; & PERLINGEIRO, C. A.

G.; B: Determinação de Azeótropos homogêneos e de suas pressões de bifurcação em misturas multicomponentes in: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 11. Rio de Janeiro, 17 a 20 de set. 1996. **Anais.** Rio de Janeiro, ABEQ, 1996. v.1, p.1223-1228.

GUIMARÃES, FLÁVIO M. DE Q.; MEDEIROS, J. L.; & PERLINGEIRO, C. A.

G.; C: Análise energética de uma unidade de destilação azeotrópica heterogênea com reação química in: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 11. Rio de Janeiro, 17 a 20 de set. 1996. **Anais.** Rio de Janeiro, ABEQ, 1996. v.1, p.1229-1234.

HYSIM USER'S GUIDE, Versão C1.50, Hyprotech Ltda., 1991

KNAPP, J. P. & DOHERTY, M. F.; Thermal Integration of Homogeneous Azeotropic Distillation Sequences, *AIChE J.*; v. 36 (7), p. 969-975, 1990.

KNAPP, J. P. & DOHERTY, M. F.; Minimum Entrainer Flows for Extractive Distillation: a Bifurcation Theoretic Approach, *AIChE J.*, v.40 (2), 1994.

KNAPP, J. P. & DOHERTY, M. F.; A New Pressure-Swing-Distillation Process for Separating Homogeneous Azeotropic Mixtures, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.31, p.346-357, 1992.

KNIGHT, J. R. & DOHERTY, M. F.; Optimal design and synthesis of homogeneous azeotropic distillation sequences, *Ind. Eng. Chem. Res.*, v.28, p.564-572, 1989.

KING, C. J.; *Separation processes*. New York, McGraw - Hill, 1971, p. 236-245, 809.

LADISCH, M. R. & DYCK, K.; Dehydration of ethanol : New Approach Gives Positive Energy Balance, *Sci.*; v.205, p. 898, 1979.

LAROCHE, L., BEKIARIS N., ANDERSEN, H. W. & MORARI, M.; Homogeneous Azeotropic Distillation: Comparing Entrainers, *Can. J. Chem. Eng.*; v.69, p. 1302-1319, 1991.

LECAT, M., L'azeotropisme, Donnees Experimentales, Bibliographie, Bruxelles (1918).

LEE, F.M. & PAHL, R. H.; Solvent Screening Study Conceptual Extrative Distillation Process to Produce Anhydrous Ethanol from Fermentation Broth, *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev.*; v.24, p. 168-172, 1985.

LYNN, S. & HANSON, D. N.; Multieffect Extrative Distillation for Separation Aqueous Azeotropes. *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev.*, v. 25 p. 936-941, 1986.

LYND, L. R. & GRETHLEIN, H. E.; Ihsor/ Extrative Distillation for ethanol Separation, *Chem. Eng. Progr.*, v. 81, p. 59-62, 1984.

Manual do Simulador de processos **HYSIM : HYSIM USER'S QUIDE &HYSIM SPECIAL FEATURES QUIDE**, Versão C1.50, desenvolvido pela HYPROTECH Ltda., 1991.

MEIRELLES, J. A.; WEISS, S. & HERFURTH, H.; Ethanol Dehydration by Extrative distillation, *J. Chem. Tech. Biotechnol.*; v. 53, p. 416 - 424, 1992.

MEIRELLES, J. A.; HERFURTH, H.; & WEISS, S.; Destilação Extrativa: Uma alternativa Viável na Obtenção do Etanol Anidro in: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 8. São Paulo, 24 A 27 jul. 1988. *Anais.* São Paulo, ABEQ, 1988. v.1, p.211-224.

MEIRELLES, J. A.; HERFURTH, H.; & WEISS, S.; Etanol anidro: como produzi-lo com menor consumo energético ? in: PRÊMIO JOVEM CIENTISTA; CONSERVAR ENERGIA: UM DESAFIO DOS ANOS 90, Rio de Janeiro, Fundação Roberto Marinho/ CNPq/ grupo Gerdau, 1991. p.10-22.

NAPHTALI, L. M. & SANDHOLM, D. P.; Multicomponent Separation Calculations by Linearization, *AIChE J.*; V.17 (1), p. 148-153, 1971.

NETO, P. P. & MORI, M. .; Simulação e Otimização da Seção de Fracionamento e Recuperação de Produtos da Unidade de Craqueamento Catalítico fluido. *B. Téc. da PETROBRÁS.*, v. 32 (1/2), p. 87-106, 1995.

PERRY, R. H. & GREEN, D. W.; *Chemical Engineers Handbook* , Guanabara Dois, 1984.

PERRY, R. H. & CHILTON, C. H.; *Manual de Engenharia Química* , Guanabara Dois, 5ª ed., p. 13-1 a 13-50, 1980.

PINTO, L. T.; & PEREIRA, J. A. F. da ROCHA.; Aplicação de Colunas de Múltiplo-efeito na Economia de Energia in: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 8. São Paulo, 24 A 27 jul. 1988. *Anais.* São Paulo, ABEQ, 1988. v.1, p.251-260.

PROKOPAKIS, G. J. & SEIDER, W. D.; Feasible Specifications in Azeotropic Distillation, *AIChE J.* ,v. 29, p. 49-53, 1983.

BIBLIOGRAFIA ADICIONAL

- BRITO, R. P. ; & MACIEL, M. R. W.;** Desenvolvimento de um modelo reduzido para simulação de colunas de destilação extrativa in: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 11. Rio de Janeiro, 17 a 20 de set. 1996. *Anais*. Rio de Janeiro, ABEQ, 1996. v.1, p.421-426.
- BATISTA, E. A. C. & MEIRELLES, J. A. ;** Simulação e Integração Térmica SRV em Colunas de Destilação Extrativa, *Dissertação de Mestrado*, v. 1, Universidade Estadual de Campinas- UNICAMP, Campinas-SP ,1995.
- BIDNER, M. S. & GABBANELLI, S. C.. ;** Simulação Numérica de Processos Convencionais de Recuperação de Petróleo- Uma Revisão, *B. Téc. PETROBRÁS*, v.30 (2/3), p.137-150, Rio de Janeiro, abr./set., 1987.
- COULSON, J. M. & RICHARDSON, J. F. .;** *Tecnologia Química*; Fundação Calouste Gulbenkian, v.6, 2ª ed. Lisboa, 1968.
- CUTLIP, M. B. ; SHACHAM, M.; & BRAUNER, N. ;** Computational Results How Reliable are they? A Sistematic Approach to Model Validation, *Chem. Eng. Educ.* p.20-25, 1996.
- DOUGLAS, J. M.;** *Conceptual Design of Chemical Processes*; New York, McGraw - Hill, 1988.
- EDGAR, T. F. & HIMMEBLAU, D. M.;** *Optimization of Chemical Processes*; New York, McGraw - Hill, 1988.
- FEITOSA, V. C. .;** *Redação de Textos Científicos*. 2ª ed. Campinas, SP: Papirus, 1995.
- FOUST, A. S; WENZEL, L. A.; CLUMP, W. C.; MAUS, L. & ANDERSEN, L. B.;** *Princípios das Operações Unitárias*, Guanabara Dois, 2ª ed; 1982, p. 116-132.

- GAUSSENT, P.;** Economia de energia em Destilação , *Rev. Br. Eng. Quím...*, p.25-32,
- GLASSCOCK, D. A.; & HALE, J. C.;** Process Simulation: The art e Science of Modeling, *Chem. Eng.* ,p.82-89, 1994.
- GOMIDE, R.;** *Operações Unitárias; Ed. do autor*, v.4, São Paulo, 1988.
- HOROWITZ, A.;** Álcool: produção competitiva com a gasolina. *Rev. Br. Eng. Quím.*, p. 3-7,1994.
- JIQUN, F.;** Salt-Containing Model for Simulation of Salt-containing Extrative Distillation. *AIChE J.*, v.42(12), p. 3364-3371,1996.
- JACOBSEN, E. W. & SKOGESTAD, S.;** Instability of Distillation Columns. *AIChE J.*, v.40(9), p. 1466-1478,1994.
- KOOIJMAN, H. A.. & TAYLOR, R.;** A Nonequilibrium Model for Dynamic Simulation of Tray Distillation Columns. *AIChE J.*, v.41(8), p. 1852-1863,1995
- KISTER, H. Z..** *Distillation Design*. USA: McGraw-Hill, 1992.
- LEVY, S. G. & DOHERTY, M. F.;** Design and Synthesis of Homogeneous Azeotropic Distillations. 4- Minimum Reflux Calculations for Multiple-Feed Columns , *Ind. Eng. Chem. Fundam.*, v. 25, p. 269-279, 1986.
- MEHTA, G. D. & FRASER, M. D.;** A Novel Extraction Process for Separating Ethanol and Water , *Ind. Eng. Chem. Proc. Des. Dev.*, v. 24, p. 556-560, 1985.

- MACIEL, M. R. W. ; & MARTINS, L. Z. O.;** Simulação e otimização do processo completo de extração líquido-líquido utilizando simulador comercial de processos in: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 11. Rio de Janeiro, 17 a 20 de set. 1996. **Anais.** Rio de Janeiro, ABEQ, 1996. v.1, p.427-432.
- MOREIRA, J. A. & GOLDEMBERG, J. ;** O Programa Nacional do Alcool em 1988, *Revista Brasileira de Energia*, v. 1 , p. 25-45, 1989.
- MOURA, C. A. D.;** Uso Eficiente de Programas de Computador na Simulação de Colunas de Destilação. *B. téc. PETROBRÁS*, v. 24(3), p. 195-200, jul./set. 1981. |
- NULL, H. R.;** Energy Economy In Separation Processes. *Chem. Eng. Progr...*, v. 76(8) p. 42-49, 1980.
- JUNIOR, L. P.. & DIAS, J. M. C.;** Fermentação Alcólica Contínua, *Rev. Br. Eng. Quim...*; v. 2 (4), p.47-49, 1980.
- PESCARINI, M. H.; BARROS, A. A. C.; & MACIEL, M. R. W.;** Modelagem de estágios de não equilíbrio aplicada à simulação de uma coluna de destilação de pratos multicomponente in: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 11. Rio de Janeiro, 17a 20 set. 1996. **Anais.** Rio de Janeiro , ABEQ, 1996. v.1, p.439-444.
- PRAUSNITZ, J. M.;** *Molecular Thermodynamics of Fluid-Phase Equilibrium*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1986.
- PITERS, M. S. & TMMERHAUS, K. D.;** *Plant Design and Economics for Chemical Engineers*, Mcgraw-hill, New York., 1991.
- RUSH, F. E.;** Energy Saving Alternatives to Distillation, *Chem. Eng. Progr.*; v. 65, p. 44-49, 1980.

- REGO, MARIA TEREZA MONTENEGRO.;** *Estrutura e apresentação de dissertação e tese. ed. universitária, João Pessoa, PB: 1983.*
- REIS, P. R. A. ; & RAVAGNANI, S. P.;** Modelo de ordem reduzida de uma coluna de destilação extrativa salina em estado estacionário in: CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 11. Rio de Janeiro, 17 a 20 set. 1996. *Anais.* Rio de Janeiro, ABEQ, 1996. v.1, p.601-606.
- SERGIO, M. M. F.;** Simulação de Sistemas e sua Importância em Projetos e Planejamento, *B. Téc. PETROBRÁS*, v.29 (1), p.107-111, Rio de Janeiro, jan./mar., 1986.
- SHINSKEY, F. G.** *Distillation Control for Productivity and Energy Conservation*, 2ª ed. McGraw-Hill, New York, 1984.
- SILVA, C. A. L.;** Estudo da Viabilidade Econômica da Separação do Etilbenzeno-Estireno através do Processo de Destilação auxiliado por bombas de calor com recompressão de vapor e com fluidos intermediários água (718) e triclorometano (R20), *Dissertação de Mestrado*, v. 1, UFPB. Campina Grande-PB- Brasil ,1996.
- STEPHENSON, R. M. & ANDERSEN, T. F.;** Energy Conservation in Distillation, *Chem. Eng. Progr.*; v. 76 (8), p. 68-71, 1980.
- TEDDER, D. W.;** Optimization for Energy Conservation. *Chem. Eng. Progr.*, v. 76(8) p. 63-67, 1980.
- COUTINHO, P. H. A. & SANTOS, M. L. .;** Aplicações do Álcool Etílico para fins energéticos e Não- Energéticos. *B. Téc. da PETROBRÁS.*, v. 23 (2) p. 129-138, abr./jun. 1980.
- VIEIRA, S.;** *Como Escrever Uma Tese.* New York, McGraw - Hill, 1971, p. 809.

VALDMAN, B. & PEREIRA, J. M. M.; Simulação e Controle de Processos,
Rev. Br. Eng. Quim., v.3, Maio ,1989.

WEINSTEIN, E.; Economia de Energia em Destilação, *Rev. Br. Eng. Quim.*, v.8
(1), p.11-23,1985.

APÊNDICE A

Apêndice A

Tabela A.1 Estimativas iniciais das variáveis operacionais e especificações usadas na simulação da unidade de destilação extrativa para a otimização do sistema etanol(1)-água(2)-etileno glicol(3).

Variáveis Operacionais			
Variáveis	Referência	Valores Operacionais	
		Coluna de Dest. Extrativa	Coluna de Recup. do solvente
F(KGH)	alimentação, liq. saturado	1000	1480
D(KGH)	vazão do Destilado	960	40
S(KGH)	vazão do solvente	1440	1440
R(KGH)	Resíduo da base	1480	1440
$X_F(\text{ETOH})$	fraç. máss. na aliment.	0,96	
$X_D(\text{ETOH})$	fraç. máss. no destilado	0,998	
$T_T(\text{OC})$	temperatura do topo	78,0	100
$T_B(\text{OC})$	temperatura da base	197	197
DELTA T(OC)	diferença de temperatura	0	0
$P_T(\text{KPA})$	pressão do topo	101,3	50,65
$P_B(\text{KPA})$	pressão da base	101,3	50,65
DELTA P(KPA)	diferença de pressão	0	0
R	razão de Refluxo	1,6	1,4
N	número de estágios	24	12
FA	prato da alim. da mistura	14	3
FS	prato da alim. do solvente	3	
$Q_C(\text{KJH})$	carga do condensador		
$Q_R(\text{KJH})$	carga do refeedor		
	eficiência de Murphree dos estágios	1	1
	razão da fraç. máss. de etanol (1) e água (2) da mistura $= X_T(\text{ETOH}) / X_T(\text{H}_2\text{O})$	0,96/0,04	
E_C	estágio do condensador total	1	1
E_R	estágio do refeedor	24	12
(SVF)	razão entre as alimentações	1,44	
F_D	fator Damping(azeotropia)	0,5	1
	Especificações	COLUNA DE DESTILAÇÃO EXTRATIVA	
V(KGH)	vazão de vapor(cond. total)	0	
$X_{1T}(\% \text{MÁSSICA})$	composição de (1) topo	0,998	
$X_{1B}(\% \text{MÁSSICA})$	composição de (3) base	0,9723	
	Especificações	COLUNA DE RECUPERAÇÃO DO SOLVENTE	
V(KGH)	vazão de vapor(cond. total)	0	
$X_{2B}(\% \text{MÁSSICA})$	composição de (2) base	0,0001	
$X_{2T}(\% \text{MÁSSICA})$	composição de (3) topo	0,0001	

Tabela A.2 Modificações das variáveis operacionais e das especificações para o caso de integração energética múltiplo efeito (caso proposto).

Variáveis Operacionais			
Variáveis	Referência	Valores Operacionais	
		Coluna de Dest. Extrativa	Coluna de Recup. do solvente
F(KG/H)	alimentação, vapor saturado	1000	1480
D(KG/H)	vazão do Destilado	960	40
S(KG/H)	vazão do solvente	1440	1440
R(KG/H)	resíduo da base	1480	1440
X _F (ETOH)	fraç. máss. na aliment.	0,96	
X _b (ETOH)	fraç. máss. no destilado	0,998	
T _T (OC)	temperatura do topo	78,0	100
T _B (OC)	temperatura da base	197	197
DELTA T(OC)	diferença de temperatura	0	0
P _T (KPA)	pressão do topo	101,3	50,65
P _B (KPA)	pressão da base	101,3	50,65
DELTA P(KPA)	diferença de pressão	0	0
R	razão de Refluxo	1,6	1,4
N	número de estágios	24	12
FA	prato da alim. da mistura	15	4
FS	prato da alim. do solvente	4	
Q _c (KJ/H)	carga do condensador		
Q _R (KJ/H)	carga do refeedor		
	eficiência de Murphree dos estágios	1	1
	razão da fraç. máss. de etanol (1) e água (2) da mistura azeotrópica -X _F (ETOH), X _R (H ₂ O)	0,96/0,04	
E _C	estágio do condensador parcial	1	1
E _R	estágio do refeedor	24	12
(S/F)	razão entre as alimentações	1,44	
F _D	fator Damping (azeotropia)	0,5	1
	Especificações	COLUNA DE DESTILAÇÃO EXTRATIVA	
V(KG/H)	vazão de vapor(cond. parcial)	960	
X _b (%MÁSSICA)	composição de (1) topo	0,998	
X _B (%MÁSSICA)	composição de (3) base	0,9723	
	Especificações	COLUNA DE RECUPERAÇÃO DO SOLVENTE	
V(KG/H)	vazão de vapor(cond. parcial)	40	
X _B (%MÁSSICA)	composição de (2) base	0,0001	
X _T (%MÁSSICA)	composição de (3) topo	0,0001	

Tabela A.3 - Dados gerais de otimização das variáveis operacionais para o caso padrão, pureza do etanol anidro de 99,8% em peso e número de estágios: 24.

Alimentações (FA/FS)	Razão de Refluxo, R	Q _C (GJ/h)	Q _R (GJ/h)	Vazão de Solvente(Kg/h)
13/3	2	2,798	2,669	1440
14/3	2,4091	2,728	2,598	"
15/3	2,4008	2,721	2,591	"
16/3	2,46323	2,771	2,64	"
17/3	2,60083	2,881	2,75	"
13/4	2,53759	2,83	2,7	"
14/4	2,40346	2,723	2,6	"
15/4	2,37209	2,698	2,568	"
16/4	2,43235	2,746	2,616	"
17/4	2,57284	2,859	2,729	"
14/5	2,7345	2,988	2,859	"
15/5	2,63004	2,904	2,775	"
16/5	2,68868	2,951	2,821	"
17/5	2,87401	3,099	2,969	"
13/3	2,37821	2,694	2,558	1650
14/3	2,3023	2,634	2,495	"
15/3	2,27311	2,61	2,472	"
16/3	2,29438	2,627	2,489	"
17/3	2,37114	2,689	2,551	"
13/4	2,3633	2,682	2,546	"
14/4	2,26605	3	2,466	"
15/4	2,22727	2,574	2,436	"
16/4	2,25344	2,595	2,456	"
17/4	2,33669	2,661	2,523	"
13/5	2,68723	2,94	2,804	"
14/5	2,47352	2,77	2,632	"
15/5	2,38867	2,702	2,564	"
16/5	2,39287	2,706	2,568	"
17/5	2,47877	2,774	2,637	"
18/5	2,65619	2,916	2,779	"
13/3	2,34735	2,662	2,516	1650
14/3	2,26662	2,597	2,452	"
15/3	2,23296	2,571	2,426	"
16/3	2,24177	2,578	2,433	"
17/3	2,29767	2,622	2,477	"
18/3	2,40901	2,711	2,566	"
13/4	2,31414	2,635	2,491	"
14/4	2,21967	2,56	2,415	"
15/4	2,18167	2,53	2,385	"
16/4	2,19146	2,538	2,393	"
17/4	2,25424	2,587	2,443	"
13/5	2,54892	2,822	2,679	"
14/5	2,38137	2,689	2,543	"
15/5	2,30413	2,627	2,482	"
16/5	2,29865	2,623	2,478	"
17/5	2,35931	2,671	2,527	"
13/3	2,33364	2,643	2,491	1750
14/3	2,25751	2,583	2,431	"
15/3	2,22154	2,554	2,402	"
16/3	2,22276	2,555	2,403	"
17/3	2,2656	2,589	2,438	"
14/4	2,19983	2,537	2,387	"
15/4	2,18315	2,508	2,356	"
16/4	2,16613	2,51	2,359	"
17/4	2,21539	2,549	2,398	"
14/5	2,33856	2,647	2,495	"
15/5	2,26678	2,59	2,438	"
16/5	2,25526	2,581	2,429	"
17/5	2,30098	2,617	2,466	"
18/5	2,41066	2,704	2,553	"

Tabela A.4 - Dados gerais de otimização das variáveis operacionais para o caso proposto.

(continua)

OTIMIZAÇÃO DO ARRANJO DE INTEGRAÇÃO TÉRMICA				
Pureza do Etanol Anidro de 99,8% em Peso e Número de Estágios: 24				
Alimentações (FA/FS)	Razão de Refluxo	Q _C (GJ/h)	Q _R (GJ/h)	Vazão de Solvente(Kg/h)
133	3	2,019	1,805	1440
143	2,43114	1,946	1,731	"
153	2,40804	1,927	1,712	"
163	2,44321	1,956	1,742	"
173	2,56	2,049	1,835	"
134	2,81283	2,25	2,036	"
144	2,6389	2,111	1,896	"
154	2,5753	2,06	1,845	"
164	2,59519	2,076	1,862	"
174	2,7256	2,18	1,966	"
145	3,04713	2,437	2,224	"
155	2,8891	2,311	2,096	"
165	2,8836	2,307	2,092	"
175	3,02245	2,418	2,204	"
133	2,42348	1,933	1,727	1550
143	2,33647	1,864	1,657	"
153	2,29759	1,833	1,626	"
163	2,30508	1,839	1,633	"
173	2,36823	1,889	1,683	"
134	2,62968	2,097	1,891	"
144	2,48613	2	1,775	"
154	2,41583	1,926	1,719	"
164	2,41086	1,922	1,715	"
174	2,46972	1,969	1,763	"
135	3,05854	2,439	2,233	"
145	2,74233	2,186	1,979	"
155	2,60429	2,076	1,869	"
165	2,57221	2,051	1,844	"
175	2,62401	2,092	1,886	"
185	2,7871	2,222	2,016	"
133	2,38637	1,898	1,705	1650
143	2,30313	1,832	1,638	"
153	2,26109	1,799	1,605	"
163	2,25809	1,796	1,603	"
173	2,2995	1,829	1,636	"
183	2,39995	1,909	1,716	"
134	2,55898	2,034	1,841	"
144	2,42825	1,93	1,736	"
154	2,35958	1,876	1,682	"
164	2,34356	1,863	1,669	"
174	2,3806	1,892	1,699	"
184	2,48618	1,976	1,783	"
135	2,86658	2,279	2,086	"
145	2,6294	2,09	1,896	"

(conclusão)

OTIMIZAÇÃO DO ARRANJO DE INTEGRAÇÃO TÉRMICA				
Pureza do Etanol Anidro de 99,8% em Peso e Número de Estágios: 24				
1615	2,50826	1,994	1,8	"
165	2,46893	1,963	1,768	"
175	2,49696	1,965	1,792	"
133		1,882	1,696	1750
143	2,29351	1,819	1,633	"
153	2,24963	1,784	1,598	"
1613	2,2403	1,777	1,691	"
173	2,26983	1,8	1,615	"
144	2,40182	1,904	1,718	"
154	2,33634	1,852	1,666	"
1614	2,31482	1,836	1,649	"
174	2,33913	1,854	1,669	"
184	2,42126	1,919	1,734	"
145	2,57163	2,038	1,8523	"
155	2,46457	1,953	1,767	"
1616	2,42121	1,919	1,733	"
175	2,43653	1,931	1,746	"
185	2,52075	1,998	1,813	"

APÊNDICE B

APÊNDICE B

Métodos Rigorosos de Destilação

O projeto final de equipamentos multicomponentes, multiestágios requer determinações rigorosas das temperaturas, pressões, vazões, composições e taxa de transferência de calor em cada estágio. Estas determinações são feitas resolvendo simultaneamente as equações de balanço material, balanço de energia e relações de equilíbrio para cada estágio.

Estrutura do Problema - Equação MESH

As equações que aparecem no modelo de estágio de equilíbrio, conforme Figura B.1, são:

TIPO I - Equação M - Balanço material para cada componente ($C^{(1)}$ equações para cada estágios)

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

TIPO II - Equação E - Relações de equilíbrio para cada componente (C equações para cada estágio).

$$E_{i,j} = y_{i,j} - k_{i,j} \cdot x_{i,j} = 0 \quad (B.2)$$

TIPO III - Equação S - Somatório das frações molares (uma equação para cada estágio)

$$(S_y)_j = \sum_{i=1}^c y_{i,j} - 1 = 0 \quad (B.3)$$

$$(S_x)_j = \sum_{i=1}^c x_{i,j} - 1 = 0 \quad (B.4)$$

TIPO IV - Equação H - Balanço de energia (uma equação para cada estágio).

$$H_j = H_{L,j-1} \cdot L_{j-1} + H_{V,j+1} \cdot V_{j+1} + F_j \cdot H_{F,j} - (L_j + U_j) \cdot H_{L,j} - (W_j + V_j) \cdot H_{V,j} - Q_j = 0 \quad (B.5)$$

⁽¹⁾ C - é o número de componentes do sistema.

A equação de balanço material total pode ser usada no lugar de (B.3) ou (B.4). Então, escrevendo o balanço global do estágio 1 até j,

$$L_j = V_{j+1} + \sum_{m=1}^j (F_m - U_m - W_m) - V_1 \quad (\text{B.6})$$

Para um único estágio de equilíbrio pode-se escrever $(2 \cdot C + 3)$ equações MESH. Portanto, a cascata contracorrente com N estágios de equilíbrio (Figura B.1), é representada por $N \cdot (2 \cdot C + 3)$ equações MESH.

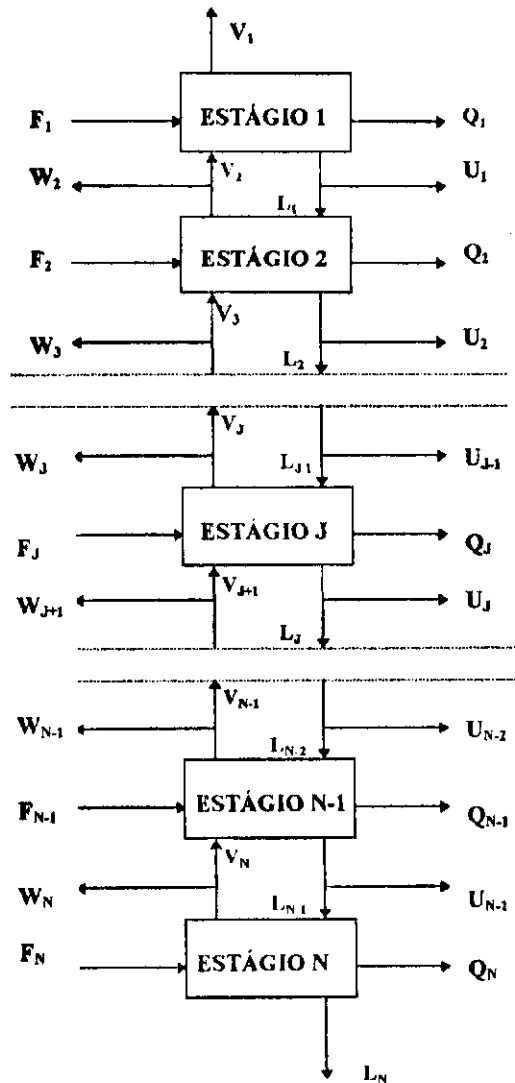


Figura B.1 - Esquema Geral de uma Cascata Contracorrente

Variáveis de Projeto

Segundo PERRY & GREEN (1985), o número total de variáveis de projeto para a cascata contracorrente representada na Figura B.1 é dado por:

APÊNDICE B

Métodos Rigorosos de Destilação

O projeto final de equipamentos multicomponentes, multiestágios requer determinações rigorosas das temperaturas, pressões, vazões, composições e taxa de transferência de calor em cada estágio. Estas determinações são feitas resolvendo simultaneamente as equações de balanço material, balanço de energia e relações de equilíbrio para cada estágio.

Estrutura do Problema - Equação MESH

As equações que aparecem no modelo de estágio de equilíbrio, conforme Figura B.1, são:

TIPO I - Equação M - Balanço material para cada componente ($C^{(1)}$ equações para cada estágios)

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

TIPO II - Equação E - Relações de equilíbrio para cada componente (C equações para cada estágio).

$$E_{i,j} = y_{i,j} - k_{i,j} \cdot x_{i,j} = 0 \quad (B.2)$$

TIPO III - Equação S - Somatório das frações molares (uma equação para cada estágio)

$$(S_y)_j = \sum_{i=1}^c y_{i,j} - 1 = 0 \quad (B.3)$$

$$(S_x)_j = \sum_{i=1}^c x_{i,j} - 1 = 0 \quad (B.4)$$

TIPO IV - Equação H - Balanço de energia (uma equação para cada estágio).

$$H_j = H_{L,j-1} \cdot L_{j-1} + H_{V,j+1} \cdot V_{j+1} + F_j \cdot H_{F_j} - (L_j + U_j) \cdot H_{L_j} - (W_j + V_j) \cdot H_{V_j} - Q_j = 0 \quad (B.5)$$

⁽¹⁾ C - é o número de componentes do sistema.

$$N_V^U = N_R + \sum N_i^o \quad (B.7)$$

onde N_V^U é o número total de variáveis de projeto da unidade; N_R é o grau de liberdade que o engenheiro de projeto utiliza quando especifica o número de vezes que um elemento particular será repetido em uma unidade; por exemplo, uma cascata contracorrente possui uma única seção ($N_R = 1$), enquanto que uma coluna de destilação possui duas seções: retificação e esgotamento ($N_R = 2$); $\sum N_i^o$ é o somatório das variáveis de projeto dos estágios de equilíbrio com correntes laterais.

As variáveis de projeto para um estágio de equilíbrio são dadas por:

$$N_i^o = N_V^o - N_C^o \quad (B.8)$$

onde N_i^o são as variáveis de projeto de um estágio de equilíbrio; N_V^o é o número total de variáveis do estágio; N_C^o são relações de restrição para o estágio de equilíbrio (equações independentes).

A Figura B.2 abaixo mostra as correntes de massa e de energia que são utilizadas para contagem do número total de variáveis de projeto:

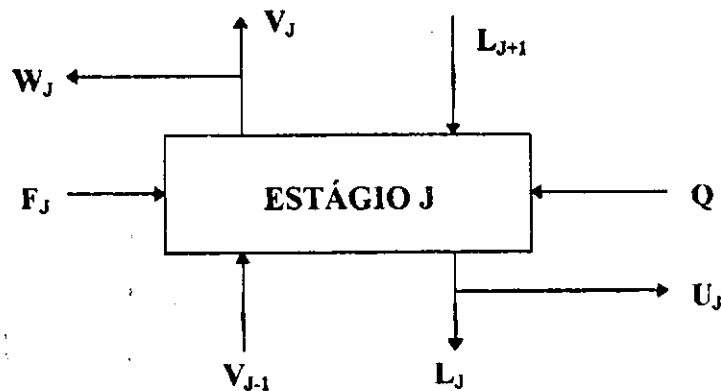


Figura B.2- Esquema de um Prato Teórico com Correntes Laterais

Portanto, o elemento possui sete correntes homogêneas de massa cada uma contribuindo com $(C+2)$ variáveis, e uma corrente térmica que contribui com uma variável. Então:

$$N_V^o = 7 \cdot (C+2) + 1 \rightarrow N_V^o = 7 \cdot C + 15 \quad (B.9)$$

As relações de restrições são mostradas na Tabela B.1:

Tabela B.1- Relações de Restrições para a Cascata Contracorrente

Intrínsecas	
Identidade de T e P entre V_j e W_j	2
Identidade de T e P entre L_j e U_j	2
Identidade de Concentração entre V_j e W_j	C-1
Identidade de Concentração entre U_j e L_j	C-1
As correntes V_j e L_j estão em equilíbrio, $T^V=T^L$ e $P^V=P^L$	2
Balanco Material.	C
Balanco de energia	1
Distribuição entre Fases	C
	4C+5

• Fonte: PERRY & GREEN, (1985)

O número de variáveis de projeto do elemento é obtido da Equação (B.8),

$$N_i^e = (7 \cdot C + 15) - (4 \cdot C + 5) \rightarrow N_i^e = 3 \cdot C + 10 \quad (\text{B.10})$$

como a cascata contracorrente possui N estágios, o número total de variáveis de projeto é dado por,

$$\sum N_i^e = N \cdot (3 \cdot C + 10) \quad (\text{B.11})$$

substituindo a Equação (B.11) na Equação (B.7), temos o número total de variáveis para a cascata contracorrente,

$$N_V^U = 1 + N \cdot (3 \cdot C + 10) \quad (\text{B.12})$$

O modelo é representado por $N \cdot (2 \cdot C + 3)$ Equações MESH em $[N \cdot (3 \cdot C + 10) + 1]$ variáveis. A diferença entre o número total de variáveis e o número de equações MESH fornece a quantidade de variáveis que devem ser especificadas para a solução do projeto,

$$\text{Especificações} = [N \cdot (3 \cdot C + 10) + 1] - [N \cdot (2 \cdot C + 3)]$$

rearranjando,

$$\text{Especificações} = N \cdot C + 7 \cdot N + 1$$

Então, se N e todos $F_{j,l}$, $z_{i,j}$, T_{Fj} , P_{Fj} , P_j , U_j e W_j são especificados, o modelo é representado por $N \cdot (2 \cdot C + 3)$ equações algébricas simultâneas em $N \cdot (2 \cdot C + 3)$ variáveis desconhecidas. Estas especificações estão resumidas na Tabela B.2:

Tabela B.2 - Especificações para o Projeto de uma Cascata Contracorrente

Entrada		Saída	
Variáveis	Quantidade	Variáveis	Quantidades
N	1	$x_{i,j}$	N.C
F_j	N	$y_{i,j}$	N.C
$z_{i,j}$	N.C	L_j	N
P_{Fj}	N	V_j	N
P_j	N	T_j	N
T_{Fj}	N		
U_j	N		
W_j	N		
Q_j	N		
	$N.C+7.N+1$		$2.N.C+3.N=N.(2.C+3)$

As especificações consistem de: todas as condições e localizações das alimentações, pressão para cada estágio, fluxo total de todas as correntes laterais, taxa de calor para todos os estágios exceto o estágio 1 (condensador) e estágio N (refervedor), número total de estágios, taxa de refluxo externo e taxa de vapor destilado.

Para início dos cálculos, o perfil de temperatura e as vazões de vapor ao longo da torre devem ser previamente admitidos, pois são necessários para o cálculo das constantes da equação tipo M modificada. As temperaturas em cada estágio T_j são consideradas como uma variação linear em relação ao ponto de bolha do componente mais leve no topo e o ponto de bolha do componente mais pesado no fundo. Para a vazão de vapor admite-se um perfil constante ao longo da torre.

APÊNDICE C

APÊNDICE C1 - CASO NÃO SEQUÊNCIAL

**MELHORIAS OPERACIONAIS DA COLUNA
DE PRODUÇÃO DO ETANOL**

**** Stage Variables ****

Reflux Ratio 2.45668

Stg No	Press atm	Temp C	Flow Rates		(kgmole/h)		Duty GJ/h
			Liquid	Vapour	Feed	Draws	
1	1.0	78.2	51.3				0.0 V 20.9 L
2	1.0	78.2	51.3	72.2			
3	1.0	78.3	50.3	72.1			
4	1.0	83.7	60.7	71.2	23.2		
5	1.0	83.8	60.7	58.4			
6	1.0	83.8	60.7	58.4			
7	1.0	83.9	60.6	58.3			
8	1.0	84.0	60.6	58.3			
9	1.0	84.1	60.6	58.3			
10	1.0	84.2	60.6	58.3			
11	1.0	84.3	60.5	58.2			
12	1.0	84.4	60.5	58.2			
13	1.0	84.6	60.4	58.2			
14	1.0	84.7	60.7	58.1			
15	1.0	82.7	83.5	58.3	23.1		
16	1.0	82.9	83.4	58.1			
17	1.0	83.2	83.1	58.0			
18	1.0	83.8	82.8	57.8			
19	1.0	85.0	82.2	57.4			
20	1.0	87.3	81.5	56.8			
21	1.0	91.9	80.9	56.1			
22	1.0	98.0	80.8	55.6			
23	1.0	104.6	76.2	55.5			
24	1.0	146.2		50.8			25.4 L 2.524

Hyprotech's Process Simulator HYSIM - Licensed to UFPB
 Date 98/03/06 Version C2.54 Case Name DDELBA.SIM
 Time 15:00:40 Prop Pkg UNIQUAC-PR/POY Column Name coluna

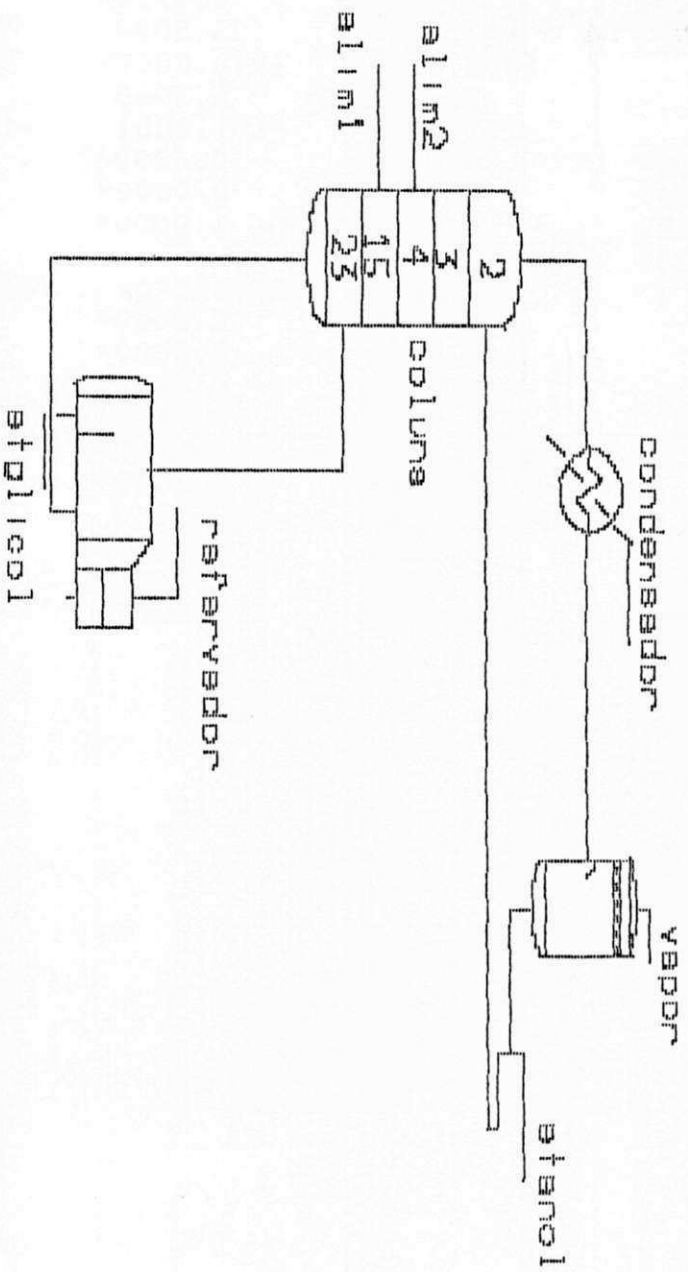
**** Products ****

Leaving from stage	1	24
Product Phase	Liquid	Liquid
Assigned to Stream Name	etanol	etglicol
Temperature - C	78.15	146.22
Pressure - atm	1.00	1.00
Ethanol - Mole Frac	0.994940	0.002493
H2O - Mole Frac	0.005042	0.083343
EGlycol - Mole Frac	0.000018	0.914164
Total Flow - kgmole/h	20.88	25.38

Stream		alim1	alim2	etanol	vapor
Vapour frac.		0.0000*	0.0000*	0.0000	1.0000
Temperature C		78.0305	197.3619	78.1519	78.1519
Pressure atm		0.9998*	0.9998*	0.9998	0.9998
Molar Flow kgmole/h		23.0583	23.2000	20.8803	0.0000
Mass Flow kg/h		1000.0000*	1440.0000*	959.0045	0.0000
LiqVol Flow m3/h		1.2461	1.2965	1.2043	0.0000
Enthalpy kW		-153.9296	-161.5861	-135.4108	0.0000
Ethanol mole frac.		0.9037*	0.0000*	0.9949	0.9944
H2O mole frac.		0.0963*	0.0000*	0.0050	0.0056
EGlycol mole frac.		0.0000*	1.0000*	0.0000	0.0000

Stream		etglicol	condensador	refervedor
Vapour frac.		0.0000	2.0000*	2.0000*
Temperature C		146.2193	0.0000*	0.0000*
Pressure atm		0.9998	0.0000*	0.0000*
Molar Flow kgmole/h		25.3780	0.0000*	0.0000*
Mass Flow kg/h		1480.9956	0.0000*	0.0000*
LiqVol Flow m3/h		1.3383	0.0000*	0.0000*
Enthalpy kW		-246.9940	768.1063	701.0929
Ethanol mole frac.		0.0025	0.0000*	0.0000*
H2O mole frac.		0.0833	0.0000*	0.0000*
EGlycol mole frac.		0.9142	0.0000*	0.0000*

MODELO NAO SEQUENCIAL, SIMULACAO E OTIMIZACAO DA COLUNA DE DESTILACAO EXTRATIVA



APÊNDICE C2 - CASO NÃO SEQUENCIAL

MELHORIAS OPERACIONAIS DA COLUNA DE RECUPERAÇÃO DO SOLVENTE

**** Column Input ****

Number of Ideal Stages 12
Stage 1 Pressure 0.500 atm
Stage 12 Pressure 0.500 atm
Stage 1 Temperature Estimate 100.000 C
Stage 12 Temperature Estimate 197.000 C
Feed stream feed enters on stage 8
Estimated top stage reflux ratio is 1.4000
Side Liquid draw from stage 1 to stream agua
Estimated Flow 40.0000 kg/h
Side Exchanger on stage 1 is energy stream condensador
Side Exchanger on stage 12 is energy stream refervedor
Overhead vapour product goes to stream vapor
Bottom liquid product goes to stream eglicol

**** Specifications ****

1: Flow of the stage 1 Vapour is to be 0.0000E+00 kg/h
2: Mass Fraction of EGlycol
in the stage 1 Liquid is to be 0.000100
3: Mass Fraction of H2O
in the stage 12 Liquid is to be 0.000100

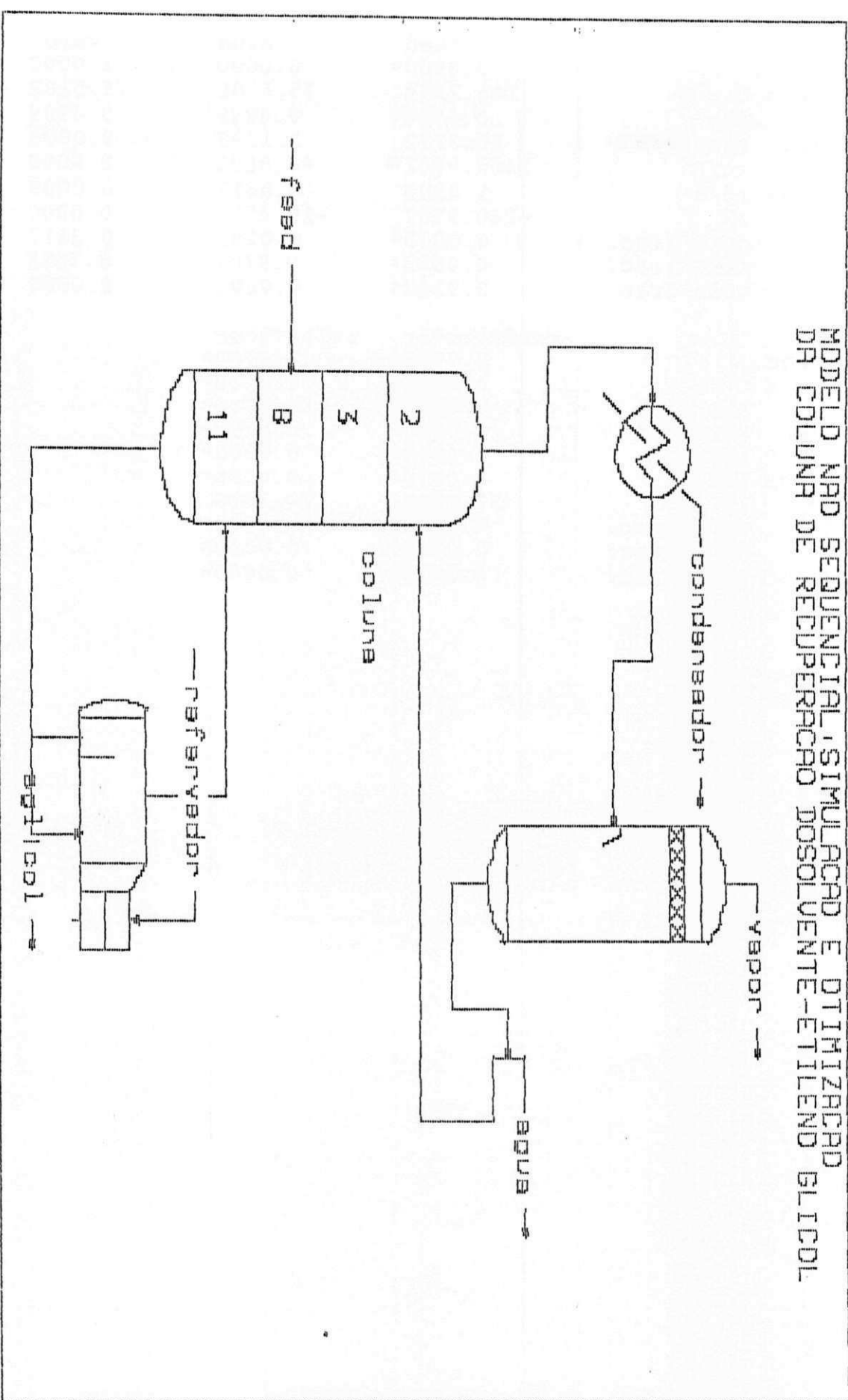
**** Products ****

Leaving from stage	1	12
Product Phase	Liquid	Liquid
Assigned to Stream Name	agua	eglicol
Temperature - C	75.52	175.50
Pressure - atm	0.50	0.50
Ethanol - Mole Frac	0.029229	1.52E-06
H2O - Mole Frac	0.970739	0.000349
EGlycol - Mole Frac	0.000032	0.999650
Total Flow - kgmole/h	2.17	23.21

Stream		feed	agua	vapor	eglicol
Vapour frac.		0.0000*	0.0000	1.0000	0.0000
Temperature C		146.2291	75.5182	75.5182	175.5004
Pressure atm		0.9998*	0.4999	0.4999	0.4999
Molar Flow kgmole/h		25.3772	2.1693	0.0000	23.2079
Mass Flow kg/h		1480.9941*	40.8622	0.0000	1440.1320
LiqVol Flow m3/h		1.3383	0.0417	0.0000	1.2966
Enthalpy kW		-246.9757	-18.4507	0.0000	-192.4924
Ethanol mole frac.		0.0025*	0.0292	0.2417	0.0000
H2O mole frac.		0.0833*	0.9707	0.7583	0.0003
EGlycol mole frac.		0.9142*	0.0000	0.0000	0.9996

Stream		condensador	refervedor
Vapour frac.		2.0000*	2.0000*
Temperature C		0.0000*	0.0000*
Pressure atm		0.0000*	0.0000*
Molar Flow kgmole/h		0.0000*	0.0000*
Mass Flow kg/h		0.0000*	0.0000*
LiqVol Flow m3/h		0.0000*	0.0000*
Enthalpy kW		37.6509	73.7508
Ethanol mole frac.		0.0000*	0.0000*
H2O mole frac.		0.0000*	0.0000*
EGlycol mole frac.		0.0000*	0.0000*

MODELO MAD SEQUENCIAL, SIMULACAO E OTIMIZACAO
DA COLUNA DE RECUPERACAO DO SOLVENTE ETILENO DICLORADO



APÊNDICE C3 - CASO SEQÜENCIAL

OTIMIZAÇÃO DO CASO PADRÃO

Hyprotech's Process Simulator HYSIM - Licensed to UFPB
Date 98/03/05 Version C2.54 Case Name TESE3.SIM
Time 16:20:44 Prop Pkg UNIQUAC-PR/POY Column Name C.Extrativa

**** Column Input ****

Number of Ideal Stages 24
Stage 1 Pressure 1.000 atm
Stage 24 Pressure 1.000 atm
Stage 1 Temperature Estimate 78.000 C
Stage 24 Temperature Estimate 197.000 C
Feed stream alim1 enters on stage 15
Feed stream residuo3 enters on stage 4
Estimated top stage reflux ratio is 1.6000
Side Liquid draw from stage 1 to stream Etanol
Estimated Flow 960.0000 kg/h
Side Exchanger on stage 1 is energy stream condensador
Side Exchanger on stage 24 is energy stream refervedor
Overhead vapour product goes to stream vapor
Bottom liquid product goes to stream Eglycol/h2o
Damping Factor is -0.50000

**** Specifications ****

1: Flow of the stage 1 Vapour is to be 0.0000E+00 kg/h
2: Mass Fraction of Ethanol
in the stage 1 Liquid is to be 0.9980
3: Mass Fraction of EGlycol
in the stage 24 Liquid is to be 0.9723

Hyprotech's Process Simulator HYSIM - Licensed to UFPB
 Date 98/03/05 Version C2.54 Case Name TESE3.SIM
 Time 16:26:12 Prop Pkg UNIQUAC-PR/POY Column Name C.Extrativa

**** Products ****

Leaving from stage	1	24
Product Phase	Liquid	Liquid
Assigned to Stream Name	Etanol	Eglycol/h2o
Temperature - C	78.15	146.19
Pressure - atm	1.00	1.00
Ethanol - Mass Frac	0.998000	0.001871
H2O - Mass Frac	0.001976	0.025829
EGlycol - Mass Frac	0.000024	0.972300
Total Flow - kg/h	959.15	1480.85

Stream		alim1	alim2	Etanol	vapor
Vapour frac.		0.0000*	0.0000*	0.0000	1.0000
Temperature C		78.0305	197.3619	78.1519	78.1519
Pressure atm		0.9998*	0.9998*	0.9998	0.9998
Molar Flow kgmole/h		23.0583	23.2000	20.8834	0.0000
Mass Flow kg/h		1000.0000*	1440.0000*	959.1494	0.0000
LiqVol Flow m3/h		1.2461	1.2965	1.2045	0.0000
Enthalpy kW		-153.9296	-161.5861	-135.4307	0.0000
Ethanol mole frac.		0.9037*	0.0000*	0.9949	0.9944
H2O mole frac.		0.0963*	0.0000*	0.0050	0.0056
EGlycol mole frac.		0.0000*	1.0000*	0.0000	0.0000

Stream		Eglycol/h2o	condensador	refervedor	solvente/h2o
Vapour frac.		0.0000	2.0000*	2.0000*	0.0471
Temperature C		146.1903	0.0000*	0.0000*	135.5381
Pressure atm		0.9998	0.0000*	0.0000*	0.4999*
Molar Flow kgmole/h		25.3805	0.0000*	0.0000*	25.3805
Mass Flow kg/h		1480.8506	0.0000*	0.0000*	1480.8506
LiqVol Flow m3/h		1.3381	0.0000*	0.0000*	1.3381
Enthalpy kW		-247.0565	749.6011	713.4674	-247.0565
Ethanol mole frac.		0.0024	0.0000*	0.0000*	0.0024
H2O mole frac.		0.0837	0.0000*	0.0000*	0.0837
EGlycol mole frac.		0.9140	0.0000*	0.0000*	0.9140

Stream		vapour	destilado	residuo	condensador-
Vapour frac.		1.0000	0.0000	0.0000	2.0000*
Temperature C		75.7678	75.7678	175.5058	0.0000*
Pressure atm		0.4999	0.4999	0.4999	0.0000*
Molar Flow kgmole/h		0.0000	2.1753	23.2052	0.0000*
Mass Flow kg/h		0.0000	40.8778	1439.9728	0.0000*
LiqVol Flow m3/h		0.0000	0.0417	1.2965	0.0000*
Enthalpy kW		0.0000	-18.4969	-192.4637	37.7254
Ethanol mole frac.		0.2328	0.0276	0.0000	0.0000*
H2O mole frac.		0.7672	0.9723	0.0003	0.0000*
EGlycol mole frac.		0.0000	0.0000	0.9997	0.0000*

Stream		refervedor-q	residuo2	residuo3	q-bomba
Vapour frac.		2.0000*	0.0000	0.0000	2.0000*
Temperature C		0.0000*	175.5057*	175.5257	0.0000*
Pressure atm		0.0000*	0.4999*	0.9998*	0.0000*
Molar Flow kgmole/h		0.0000*	23.2057	23.2057	0.0000*
Mass Flow kg/h		0.0000*	1440.0000*	1440.0000	0.0000*
LiqVol Flow m3/h		0.0000*	1.2965	1.2965	0.0000*
Enthalpy kW		73.8207	-192.4682	-192.4409	0.0273
Ethanol mole frac.		0.0000*	0.0000*	0.0000	0.0000*
H2O mole frac.		0.0000*	0.0003*	0.0003	0.0000*
EGlycol mole frac.		0.0000*	0.9997*	0.9997	0.0000*

Unit Operations

Colu	C.Extrativa:	alim1	residuo3	-vapor	-Eglycol/h2o
		-Etanol	-condensador	refervedor	
Valv	cv-1:	Eglycol/h2o	-solvente/h2o		
Colu	C.recup:	solvente/h2o	-vapor	-residuo	-destilado
		-condensador-	refervedor-q		
Recy	reciclo:	residuo	-residuo2		
		Max Numb Iter:	5	Type:	Nested
		Wegstein Cnt:	3		
		VapFr Sens:	10.0000	Temp Sens:	10.0000
		Press Sens:	10.0000	Enth Sens:	10.0000
		Rel Flow Sens:	10.0000	Comp Sens:	10.0000
Pump	bomba:	residuo2	-residuo3	q-bomba	
		Efficiency:	75.00%		

Hyprotech's Process Simulator HYSIM - Licensed to UFPB
Date 97/05/13 Version C2.54 Case Name TESE3.SIM
Time 11:24:27 Prop Pkg UNIQUAC-PR/POY

PROCESS FLOWSHEET SPECIFICATIONS

Default Units: SI
Equilibrium Package: UNIQUAC-PR/POY
Enthalpy Package: Cavett

Stream		residuo2	alim2	alim1
Vapour frac.			0.0000*	0.0000*
Temperature C		175.5057*		
Pressure	kPa	50.6500*	101.3000*	101.3000*
Mass Flow	kg/h	1440.0000*	1440.0000*	1000.0000*
Ethanol	mole frac.	0.0000*	0.0000*	0.9037*
H2O	mole frac.	0.0003*	0.0000*	0.0963*
EGlycol	mole frac.	0.9997*	1.0000*	0.0000*

Component Energy Parameters $a(i,j) = A_{ij} + B_{ij} * t$ page - 1

Component i	ID	R	Q
Ethanol	451	2.10540	1.97200

Component j	ID	A _{ij} cal/gmol	A _{ji} cal/gmol	B _{ij} cal/gmolK	B _{ji} cal/gmolK
H2O	19	50.8846	232.0090	0.0000	0.0000
EGlycol	30	818.0930	-200.1566	0.0000	0.0000

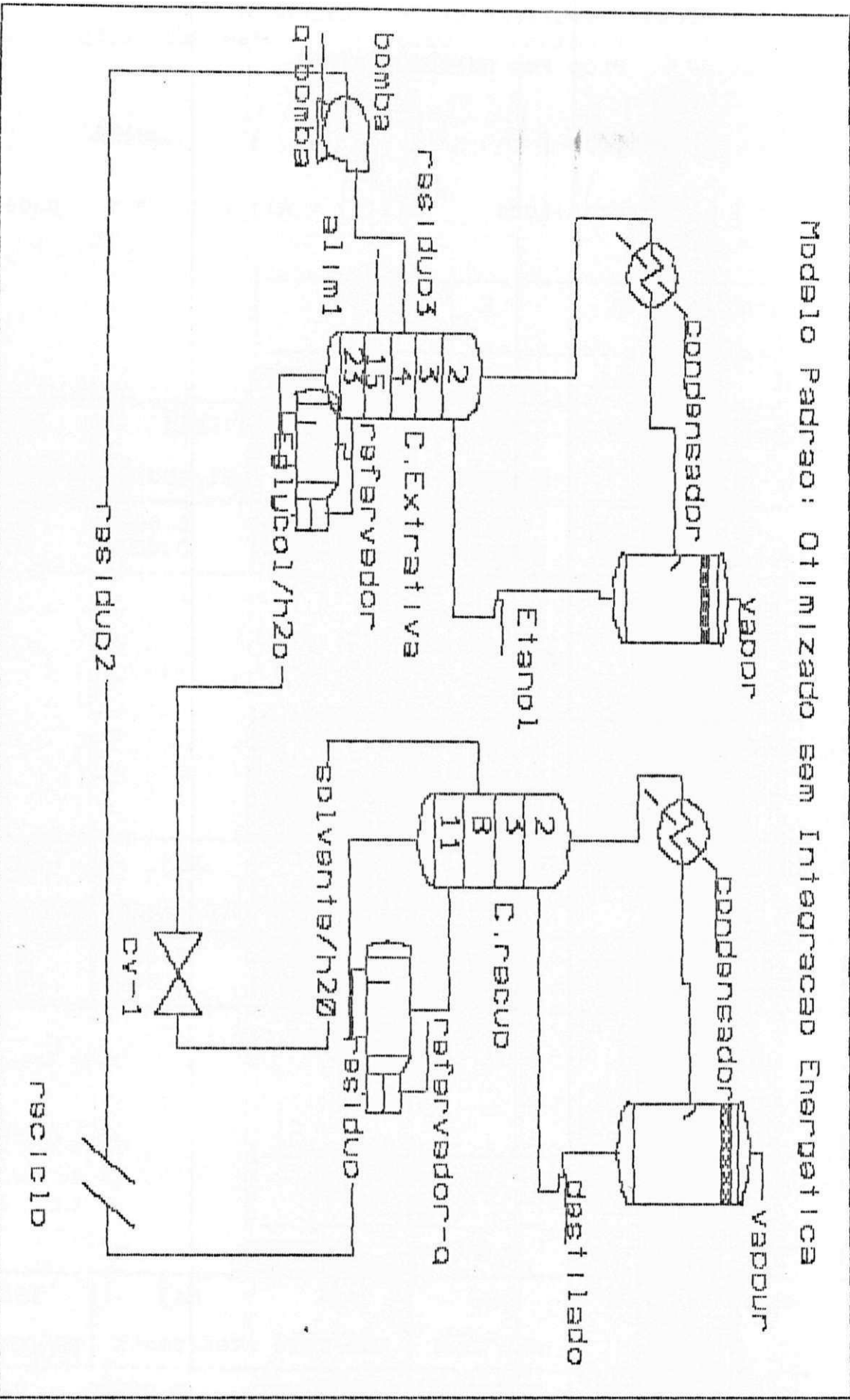
Component i	ID	R	Q
H2O	19	0.92000	1.39970

Component j	ID	A _{ij} cal/gmol	A _{ji} cal/gmol	B _{ij} cal/gmolK	B _{ji} cal/gmolK
Ethanol	451	232.0090	50.8846	0.0000	0.0000
EGlycol	30	-186.2471	563.1809	0.0000	0.0000

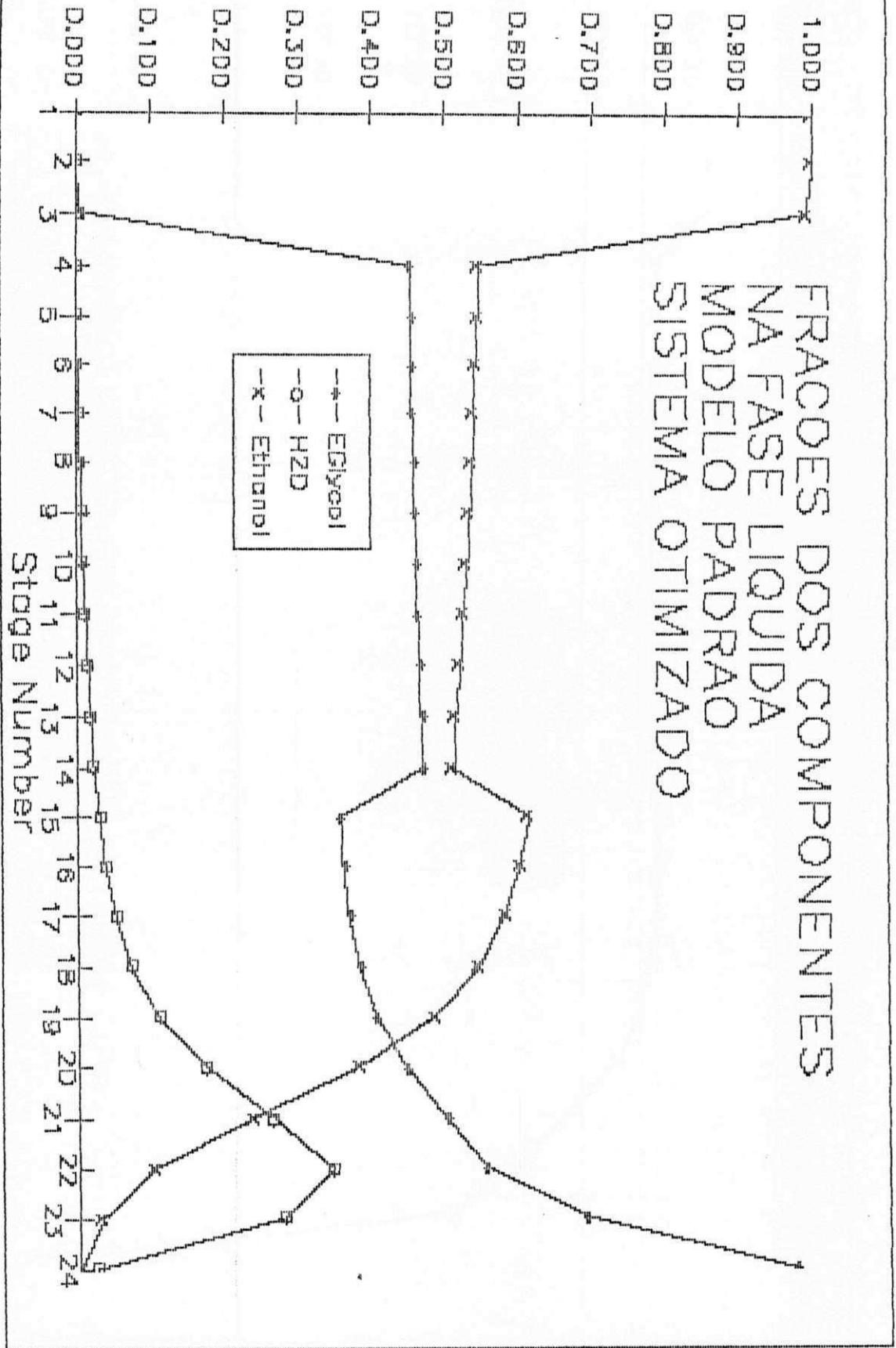
Component i	ID	R	Q
EGlycol	30	2.40860	2.24790

Component j	ID	A _{ij} cal/gmol	A _{ji} cal/gmol	B _{ij} cal/gmolK	B _{ji} cal/gmolK
Ethanol	451	-200.1566	818.0930	0.0000	0.0000
H2O	19	563.1809	-186.2471	0.0000	0.0000

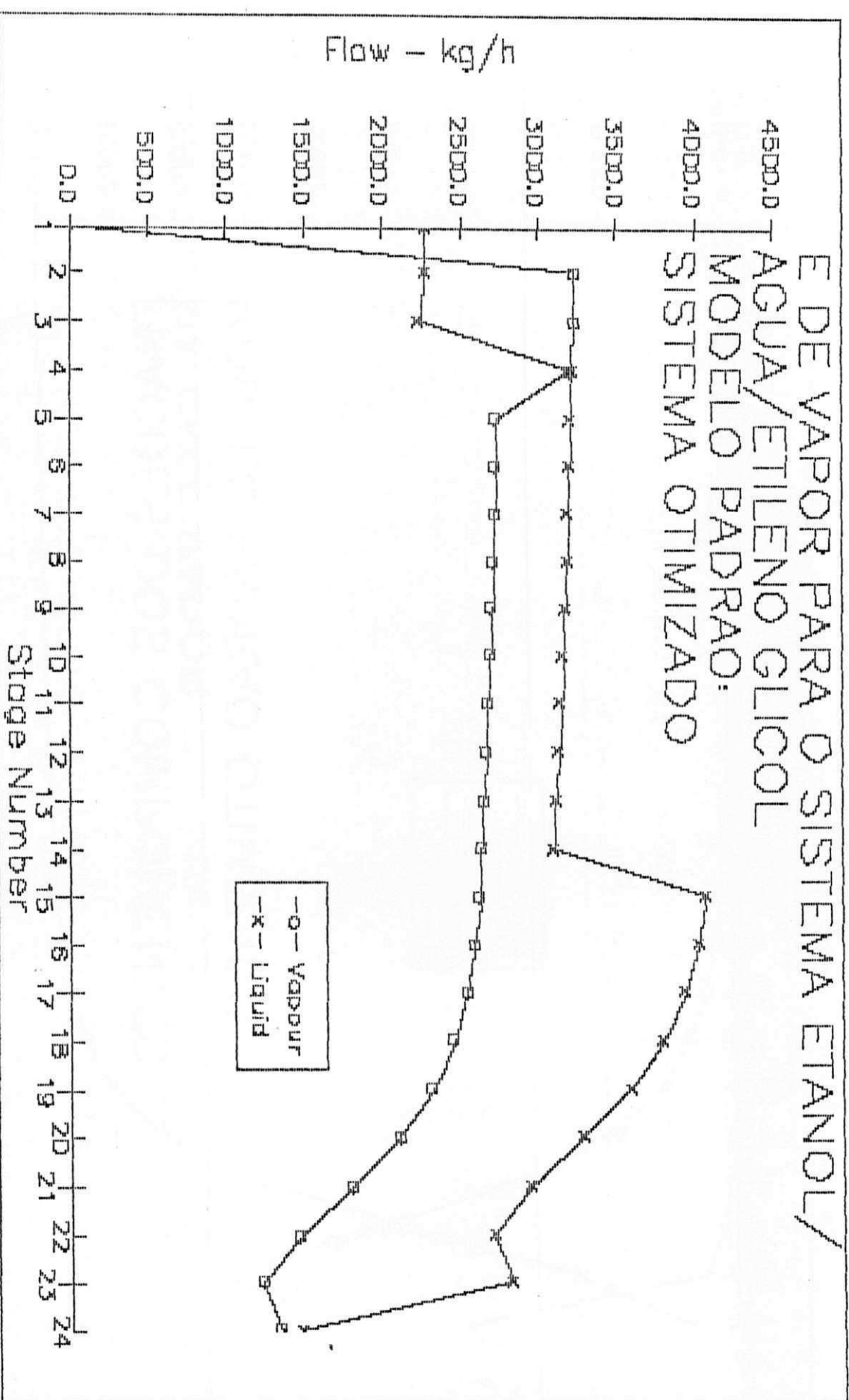
Modelo Padrão: Otimizado sem Integração Energética



Liquid - Mass Fraac

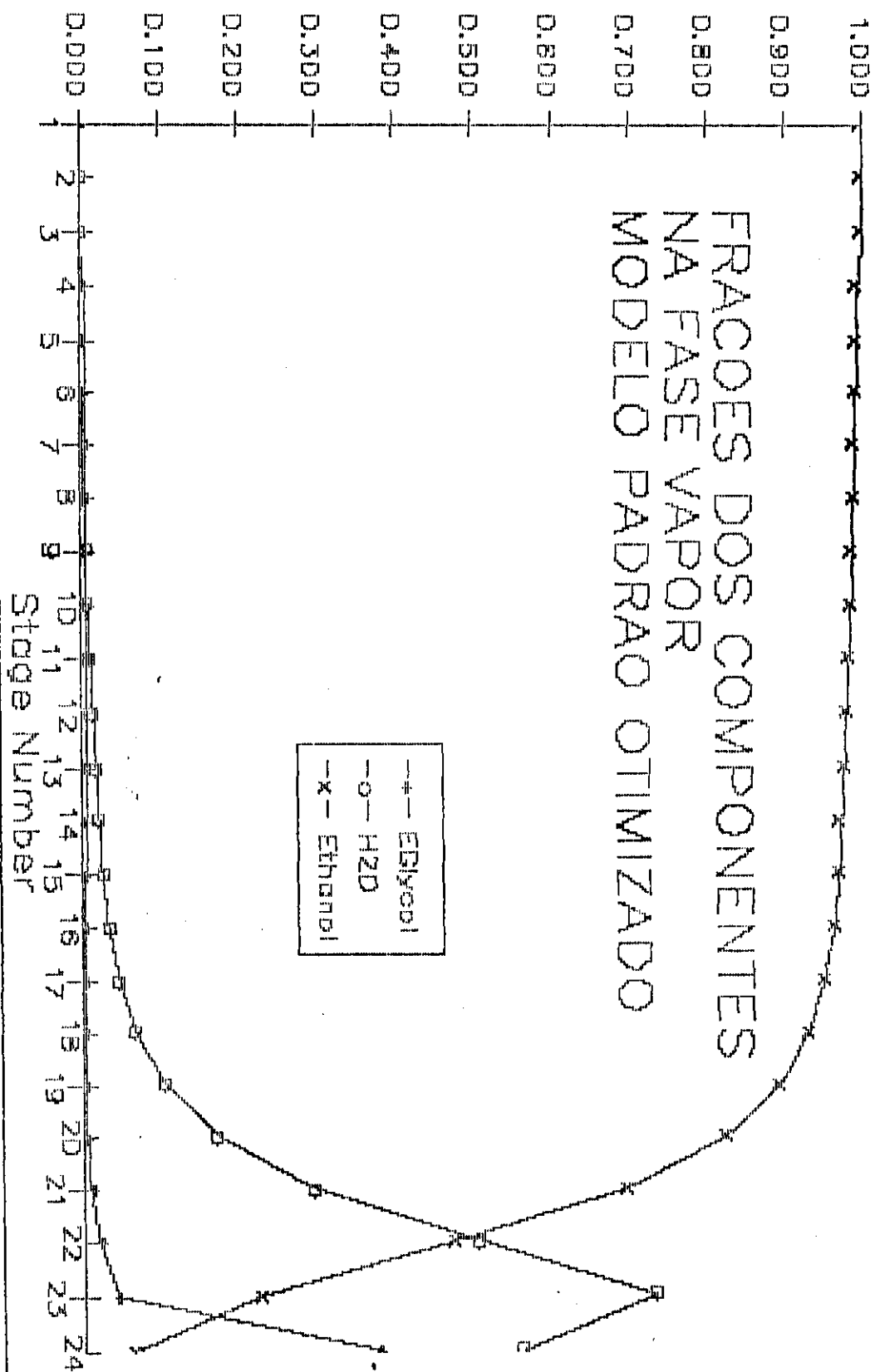


E DE VAPOR PARA O SISTEMA ETANOL/
 AGUA/ETILENO GLICOL
 MODELO PADRAO:
 SISTEMA OTIMIZADO



Vapour - Mass Fraac

FRACOES DOS COMPONENTES
 NA FASE VAPOR
 MODELO PADRAO OTIMIZADO



APÊNDICE C4 - CASO SEQÜENCIAL

OTIMIZAÇÃO DO CASO PROPOSTO

Hyprotech's Process Simulator HYSIM - Licensed to UFPB
Date 98/03/05 Version C2.54 Case Name TESEFINA.SIM
Time 15:59:39 Prop Pkg UNIQUAC-PR/POY Column Name C.Extrativa

**** Column Input ****

Number of Ideal Stages 24
Stage 1 Pressure 1.000 atm
Stage 24 Pressure 1.000 atm
Stage 1 Temperature Estimate 78.000 C
Stage 24 Temperature Estimate 197.000 C
Feed stream alim1-quente enters on stage 15
Feed stream eglycol3 enters on stage 3
Overhead Vapour Estimated Flow 960.0000 kg/h
Estimated top stage reflux ratio is 1.6000
Side Exchanger on stage 1 is energy stream condensador-
Side Exchanger on stage 24 is energy stream refervedor-q
Overhead vapour product goes to stream etanol
Bottom liquid product goes to stream eglycol/h2o
Damping Factor is -0.50000

**** Specifications ****

- 1: Mass Fraction of Ethanol
in the stage 1 Vapour is to be 0.9980
- 2: Mass Fraction of EGlycol
in the stage 24 Liquid is to be 0.9723

**** Stage Variables ****

Reflux Ratio 2.40713

Stg No	Press atm	Temp C	Flow Rates		(kg/h)		Duty GJ/h
			Liquid	Vapour	Feed	Draws	
1	1.0	78.2	2309.4				959.0 V -1.927
2	1.0	78.3	2274.7	3268.5			
3	1.0	83.5	3247.4	3233.7	1440.0		
4	1.0	83.6	3240.8	2766.4			
5	1.0	83.6	3233.2	2759.8			
6	1.0	83.7	3224.5	2752.3			
7	1.0	83.8	3214.3	2743.5			
8	1.0	83.9	3202.4	2733.3			
9	1.0	84.0	3188.8	2721.4			
10	1.0	84.1	3173.2	2707.8			
11	1.0	84.2	3155.6	2692.2			
12	1.0	84.4	3135.9	2674.6			
13	1.0	84.5	3114.2	2654.9			
14	1.0	84.7	3091.1	2633.2			
15	1.0	84.8	3088.0	2610.1	1000.0		
16	1.0	85.2	3049.8	1607.0			
17	1.0	85.7	2986.6	1568.8			
18	1.0	86.8	2886.4	1505.6			
19	1.0	88.7	2739.8	1405.4			
20	1.0	91.9	2555.7	1258.9			
21	1.0	96.5	2379.7	1074.7			
22	1.0	101.3	2266.3	898.7			
23	1.0	106.7	2352.5	785.3			
24	1.0	146.2		871.5		1481.0 L	1.712

**** Products ****

Leaving from stage	1	24
Product Phase	Vapour	Liquid
Assigned to Stream Name	etanol	eglycol/h2o
Temperature - C	78.16	146.22
Pressure - atm	1.00	1.00
Ethanol - Mass Frac	0.997997	0.001963
H2O - Mass Frac	0.001979	0.025731
EGlycol - Mass Frac	0.000024	0.972306
Total Flow - kg/h	959.01	1480.99

Hyprotech's Process Simulator HYSIM - Licensed to UFPB
 Date 98/03/05 Version C2.54 Case Name TESEFINA.SIM
 Time 16:02:46 Prop Pkg UNIQUAC-PR/POY Column Name C.Extrativa

**** Products ****

Leaving from stage	1	24
Product Phase	Vapour	Liquid
Assigned to Stream Name	etanol	eglycol/h2o
Temperature - C	78.16	146.22
Pressure - atm	1.00	1.00
Ethanol - Mass Frac	0.997997	0.001963
H2O - Mass Frac	0.001979	0.025731
EGlycol - Mass Frac	0.000024	0.972306
Total Flow - kg/h	959.01	1480.99

**** Products ****

Leaving from stage Product Phase Assigned to Stream Name	1 Vapour aqua	12 Liquid eglycol
Temperature - C	80.98	175.93
Pressure - atm	0.50	0.50
Ethanol - Mass Frac	0.071284	1.71E-08
H2O - Mass Frac	0.928709	2.31E-06
EGlycol - Mass Frac	7.20E-06	0.999998
Total Flow - kg/h	41.00	1440.04

Stream		alim1	alim1-aque	alim1-quente	alim2
Vapour frac.		0.0000*	0.8968	0.9892	0.0000*
Temperature C		78.0305	78.0308	78.0308	197.3619
Pressure atm		0.9998*	0.9998	0.9998	0.9998*
Molar Flow kgmole/h		23.0584	23.0584	23.0584	23.2000
Mass Flow kg/h		1000.0000*	1000.0000	1000.0000	1440.0000*
LiqVol Flow m3/h		1.2461	1.2461	1.2461	1.2965
Enthalpy kJ/h		-554150.2856	245787.8343	328200.0244	-581710.1859
Ethanol mole frac.		0.9037*	0.9037	0.9037	0.0000*
H2O mole frac.		0.0963*	0.0963	0.0963	0.0000*
EGlycol mole frac.		0.0000*	0.0000	0.0000	1.0000*

Stream		aqua	aqua-fria	condensador	condensador-
Vapour frac.		1.0000*	0.1061	2.0000*	2.0000*
Temperature C		80.9771	78.0308*	0.0000*	0.0000*
Pressure atm		0.4999*	0.4999	0.0000*	0.0000*
Molar Flow kgmole/h		2.1773	2.1773	0.0000*	0.0000*
Mass Flow kg/h		41.0139*	41.0075	0.0000*	0.0000*
LiqVol Flow m3/h		0.0418	0.0418	0.0000*	0.0000*
Enthalpy kJ/h		25808.8162	-56603.0993	73998.8203	1.92668E+06
Ethanol mole frac.		0.0292*	0.0292	0.0000*	0.0000*
H2O mole frac.		0.9708*	0.9708	0.0000*	0.0000*
EGlycol mole frac.		0.0000*	0.0000	0.0000*	0.0000*

Stream		eglycol	eglycol/h2o	eglycol2	etanol
Vapour frac.		0.0000*	0.0000	0.0000*	1.0000*
Temperature C		175.9398	146.2220	175.9301	78.1626
Pressure atm		0.4999*	0.9998	0.4999*	0.9998*
Molar Flow kgmole/h		23.2008	25.3780	23.2001*	20.8805
Mass Flow kg/h		1439.9999*	1481.0443	1440.0016	958.9879*
LiqVol Flow m3/h		1.2965	1.3383	1.2965	1.2043
Enthalpy kJ/h		-690632.1555	-889177.4325	-690660.1250	312461.3196
Ethanol mole frac.		0.0000*	0.0025*	0.0000*	0.9949*

H2O	mole frac.	0.0000*	0.0833*	0.0000*	0.0051*
EGlycol	mole frac.	1.0000*	0.9142*	1.0000*	0.0000*

Stream		etanol-frio	refervedor	refervedor-g	solvente/h2o
Vapour frac.		0.0000*	2.0000*	2.0000*	0.0470
Temperature	C	78.1506	0.0000*	0.0000*	135.5895
Pressure	atm	0.9998	0.0000*	0.0000*	0.4999*
Molar Flow	kgmole/h	20.8802	0.0000*	0.0000*	25.3780
Mass Flow	kg/h	958.9615	0.0000*	0.0000*	1481.0443
LiqVol Flow	m3/h	1.2043	0.0000*	0.0000*	1.3383
Enthalpy	kJ/h	-487480.7737	298305.9063	1.71196E+06	-889177.4325
Ethanol	mole frac.	0.9949	0.0000*	0.0000*	0.0025
H2O	mole frac.	0.0051	0.0000*	0.0000*	0.0833
EGlycol	mole frac.	0.0000	0.0000*	0.0000*	0.9142

Stream		eglycol3	q-bomba
Vapour frac.		0.0000	2.0000*
Temperature	C	175.9501	0.0000*
Pressure	atm	0.9998*	0.0000*
Molar Flow	kgmole/h	23.2001	0.0000*
Mass Flow	kg/h	1440.0016	0.0000*
LiqVol Flow	m3/h	1.2965	0.0000*
Enthalpy	kJ/h	-690561.7510	98.3740
Ethanol	mole frac.	0.0000	0.0000*
H2O	mole frac.	0.0000	0.0000*
EGlycol	mole frac.	1.0000	0.0000*

PROCESS FLOWSHEET SPECIFICATIONS

Default Units: SI
 Equilibrium Package: UNIQUAC-PR/POY
 Enthalpy Package: Cavett

Stream		aqua	etanol	alim2	eglycol
Vapour frac.		1.0000*	1.0000*	0.0000*	0.0000*
Pressure	kPa	50.6500*	101.3000*	101.3000*	50.6500*
Mass Flow	kg/h	41.0139*	958.9879*	1440.0000*	1439.9999*
Ethanol	mole frac.	0.0292*	0.9949*	0.0000*	0.0000*
H ₂ O	mole frac.	0.9708*	0.0051*	0.0000*	0.0000*
Glycol	mole frac.	0.0000*	0.0000*	1.0000*	1.0000*

Stream		alim1	eglycol2	eglycol/h2o
Vapour frac.		0.0000*	0.0000*	
Pressure	kPa	101.3000*	50.6500*	
Molar Flow	kgmole/h		23.2001*	
Mass Flow	kg/h	1000.0000*		
Ethanol	mole frac.	0.9037*	0.0000*	0.0025*
H ₂ O	mole frac.	0.0963*	0.0000*	0.0833*
Glycol	mole frac.	0.0000*	1.0000*	0.9142*

== HYSIM HEAT EXCHANGER SPECIFICATION SHEET ==

HYSIM Version C2.54 Date 98/03/05
 Case Name: C:\HYSIM\TESEFINA.SIM Time 16:12:16

Operation Name: troca1
 Note:

= Performance =			
Duty	799945.2500 kJ/h	LMTD	0.1259 C
weighted LMTD	0.1211 C	UA	6.35561E+06 kJ/C-h
weighted UA	6.60630E+06 kJ/C-h	FT Factor	1.0000
		Shell Passes	0.

= Duties kJ/h		===== Hot Side =====		===== Cold Side =====	
Vapour		0.0028		0.0000	
Two Phase		799940.5000		799948.3125	
Liquid		4.7368		0.0060	

= Inlet		===== Hot Side =====		===== Cold Side =====	
Stream Name		etanol		alim1	
From Operation		C.Extrativa		---	
Mass frac vap		1.0000		0.0000	
Temperature C		78.1626		78.0305	
Pressure atm		0.9998		0.9998	
Mass flow kg/h		958.9879		1000.0000	
Molar flow kgmole/h		20.8803		23.0584	

= Outlet		===== Hot Side =====		===== Cold Side =====	
Stream Name		etanol-frio		alim1-aque	
To Operation		---		troca2	
Mass frac vap		0.0000		0.8968	
Temperature C		78.1506		78.0308	
Pressure atm		0.9998		0.9998	

Fluid Properties		Hot Side		Cold Side	
		===== Liquid =====		===== Vapour =====	
Ref Temp 1 C		78.1506	78.1506	78.0305	78.0305
Ref Pres 1 atm		0.9998	0.9998	0.9998	0.9998
Heat Cap kJ/kg-C		3.5569	1.6273	3.5805	1.6369
Viscosity cP		0.4264	0.0072	0.4333	7.080E+06
Therm Cond W/m-K		0.1390	0.0169	0.1671	324.4028
Density kg/m3		736.3901	1.6289	751.1669	2409.3369
Mole Wt		45.9268	45.9116	43.3682	43.3681
Z Factor			0.9776		0.0006
Ref Temp 2 C		78.1528	78.1626	78.0308	78.0308
Ref Pres 2 atm		0.9998	0.9998	0.9998	0.9998
Heat Cap kJ/kg-C		3.5568	1.6272	3.5805	1.6369
Viscosity cP		0.9764	0.0072	0.4333	0.0073
Therm Cond W/m-K		0.1388	0.0169	0.1671	0.0173
Density kg/m3		2552.2563	1.6294	751.1715	1.5371
Mole Wt		45.9406	45.9268	43.3674	43.3691
Z Factor			0.9775		0.9789

Heat Curve Hot Side			Heat Curve Cold Side		
Duty	Temp	Mass Fct Vap	Duty	Temp	Mass Fct Vap
kJ/h	C		kJ/h	C	
799940.3750	78.15	1.0000	799949.1250	78.03	0.8968
599955.1250	78.15	0.7499	599961.3750	78.03	0.6726
399969.6563	78.15	0.4999	399975.5313	78.03	0.4484
199984.1875	78.15	0.2499	199986.8750	78.03	0.2242
-0.0001	78.15	0.0000	0.9777	78.03	0.0000

====HYSIM-HEAT-EXCHANGER-SPECIFICATION-SHEET=====

HYSIM Version C2.54 Date 98/03/05
 Case Name: C:\HYSIM\TESEFINA.SIM Time 16:12:16

Operation Name: troca2
 Note:

= Performance =====

Duty	82412.1250 kJ/h	LMTD	0.2567 C
weighted LMTD	0.5635 C	UA	321053.1563 kJ/C-h
weighted UA	146251.5938 kJ/C-h	FT Factor	1.0000
		Shell Passes	0.

= Duties kJ/h ===== Hot Side ===== Cold Side =====

Vapour	0.0006	0.0000
Two Phase	82412.1250	82411.9219
Liquid	0.0000	0.0000

= Inlet ===== Hot Side ===== Cold Side =====

Stream Name	aqua	alim1-aque
From Operation	Rec.Solvente	troca1
Mass frac vap	1.0000	0.8968
Temperature C	80.9771	78.0308
Pressure atm	0.4999	0.9998
Mass flow kg/h	41.0139	1000.0000
Molar flow kgmole/h	2.1773	23.0584

= Outlet ===== Hot Side ===== Cold Side =====

Stream Name	aqua-fria	alim1-quente
To Operation	---	C.Extrativa
Mass frac vap	0.1249	0.9892
Temperature C	78.0308	78.0308
Pressure atm	0.4999	0.9998

==== Fluid Properties =====

Fluid Properties	Hot Side		Cold Side	
	Liquid	Vapour	Liquid	Vapour
Ref Temp 1 C	78.0308	78.0308	78.0308	78.0308
Ref Pres 1 atm	0.4999	0.4999	0.9998	0.9998
Heat Cap kJ/kg-C	4.1702	1.8058	3.5805	1.6369
Viscosity cP	0.3838	0.0086	0.4333	0.0073
Therm Cond W/m-K	0.6570	0.0211	0.1671	0.0173
Density kg/m3	961.0100	0.3870	751.1715	1.5371
Mole Wt	18.4374	22.1787	43.3674	43.3691
Z Factor		0.9943		0.9789
Ref Temp 2 C	80.9750	80.9771	78.0308	78.0308
Ref Pres 2 atm	0.4999	0.4999	0.9998	0.9998
Heat Cap kJ/kg-C	4.1906	1.8731	3.5805	1.6369
Viscosity cP	0.3622	0.0087	0.4333	0.0073
Therm Cond W/m-K	0.6695	0.0222	0.1671	0.0173
Density kg/m3	962.8099	0.3256	751.1715	1.5371
Mole Wt	18.0843	18.8343	43.3674	43.3691
Z Factor		0.9950		0.9789

==== Heat Curve =====

Hot Side			Cold Side		
Duty kJ/h	Temp C	Mass Fct Vap	Duty kJ/h	Temp C	Mass Fct Vap
82411.9609	80.97	1.0000	82412.2344	78.03	0.9892
61808.9688	80.80	0.7844	61809.3672	78.03	0.9661
41206.0000	80.49	0.5682	41207.8281	78.03	0.9430
20603.1484	79.87	0.3504	20603.6914	78.03	0.9199
-0.0409	78.03	0.1249	0.8424	78.03	0.8968

Unit Operations

Colu C.Extrativa: alim1-quente eglycol3 -etanol -eglycol/h2o
-condensador- refervedor-q

Colu Rec.Solvente: solvente/h2o -aqua -eglycol -condensador
refervedor

Valv cv-1: eglycol/h2o -solvente/h2o

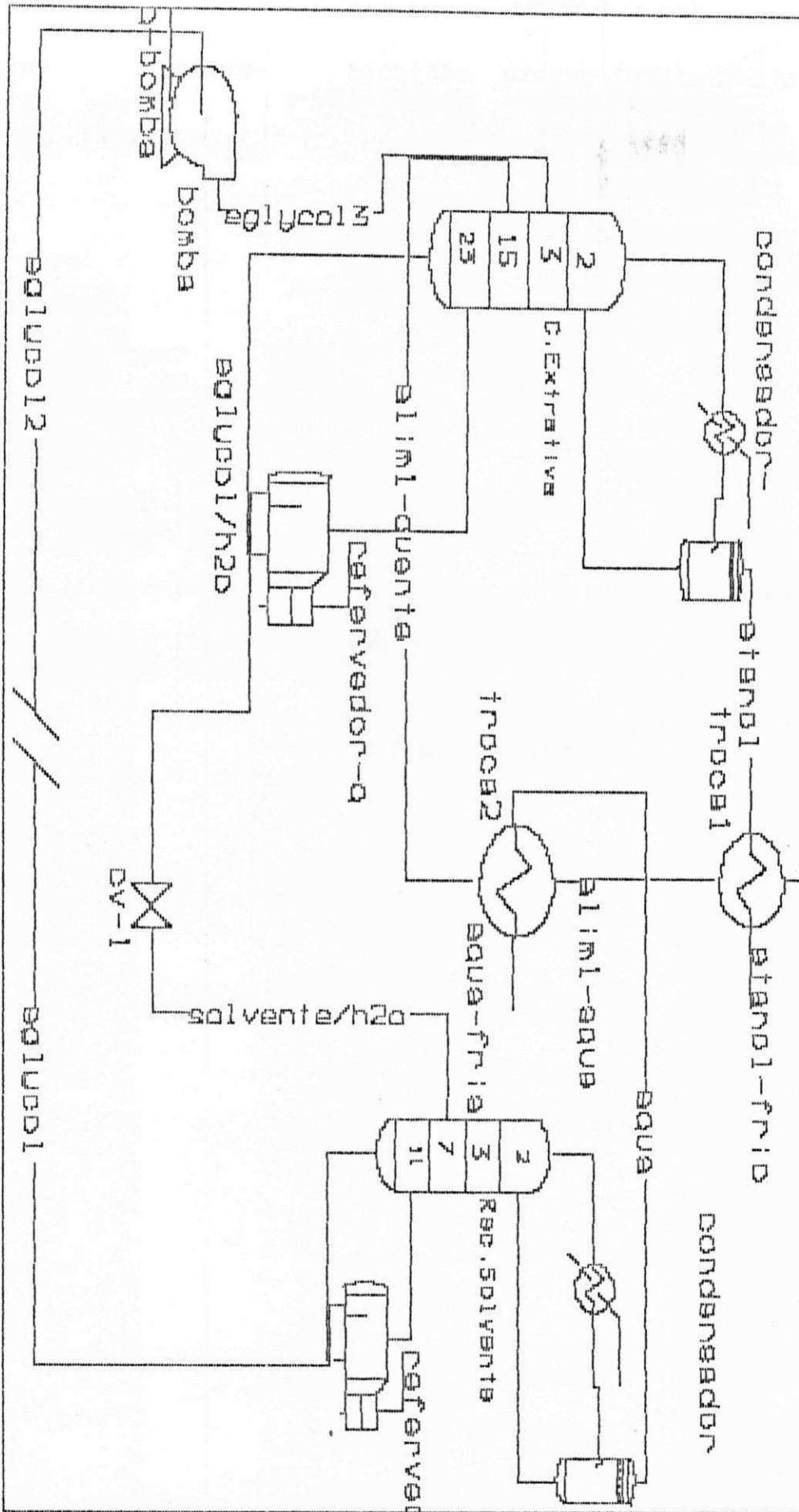
Recy reciclo: eglycol -eglycol2
Max Numb Iter: 5 Type: Nested
Wegstein Cnt: 3
VapFr Sens: 10.0000 Temp Sens: 10.0000
Press Sens: 10.0000 Enth Sens: 10.0000
Rel Flow Sens: 10.0000 Comp Sens: 10.0000

Heat troca1: etanol -etanol-frio alim1 -alim1-aque
DP1: 0.0000 atm DP2: 0.0000 atm
UA Clc: 6354970.50 kJ/C-h Shell Passes: 0
UA Spc: --- kJ/C-h Type: Simple

Heat troca2: aqua -aqua-fria alim1-aque -alim1-quente
DP1: 0.0000 atm DP2: 0.0000 atm
UA Clc: 321056.59 kJ/C-h Shell Passes: 0
UA Spc: --- kJ/C-h Type: Simple

Pump bomba: eglycol2 -eglycol3 q-bomba
Efficiency: 75.00%

MODELO FINAL: INTEGRACAO ENERGETICA COM OTIMIZACAO



PERFIL DE TEMPERATURA PARA O SISTEMA
DE INTEGRACAO ENERGETICA
MODELO OTIMIZADO

