



Resumo

Programa Institucional de Bolsas de Iniciação Científica – PIBIC/CNPq

Projeto: Modelagem e validação da simulação em estado transiente de uma coluna de destilação

Bolsista: Ricardo De Moraes Cezar

RA: 205388

Orientador: Roger Josef Zemp

Local de execução: Faculdade de Engenharia Química – Universidade Estadual de Campinas

Vigência: Agosto de 2019 a Setembro de 2020

Este trabalho de iniciação científica objetivou o estudo, modelagem e a identificação do comportamento transiente de um protótipo de uma coluna de destilação por recheio presente em um dos laboratórios de graduação da faculdade de engenharia química. Deste modo, seria possível uma expansão no uso da coluna, possibilitando estudos no comportamento transiente e abordando mais assuntos na área de processos de separação.

O método de separação de mistura por colunas de destilação é, provavelmente o mais popular e importante processo estudado na literatura de engenharia química. A destilação é usada em muitos processos químicos para a separação de uma corrente de alimentação e para a purificação de correntes de produtos finais e intermediários.

A maioria das colunas lida com correntes multicomponentes, mas muitas podem ser aproximadas para misturas binárias ou pseudobinárias.

Na destilação, os estados físicos existentes são os estados de vapor e líquido, os quais existem na mesma temperatura e pressão para cada zona dentro da coluna de destilação.

Dentro de cada coluna pode haver estruturas denominadas pratos teóricos ou recheios, que são utilizados para fazer um contato íntimo entre as duas fases. Qualquer que seja a coluna, o vapor sobe e o líquido desce, de modo que se tem um contato entre as fases.

Na base da coluna há um refeedor, que faz com que o líquido que atinja esta parcela da coluna entre em ebulição e retorne a coluna na forma de vapor. Parte deste líquido, no entanto, é retirado como produto de fundo, e majoritariamente deve ser composto pelos compostos menos voláteis ou de maior ponto de ebulição (chamados produtos pesados). O vapor que atinge o topo da coluna entra em contato com um equipamento chamado de condensador, o qual liquefaz o vapor e faz com que este líquido retorne a coluna (processo chamado de refluxo) e entre em contato novamente com o vapor, aumentando a eficiência do processo. Parte do vapor liquefeito é retirado como produto de topo, composto pelo produto mais volátil (chamado comumente de produto leve).

Na coluna como um todo, ainda pode-se definir parâmetros importantes que determinam o comportamento da mesma. Ao variar estes parâmetros, a coluna apresentará variações em grandezas a serem quantificadas, como na temperatura de topo, vazão de retirada dos produtos e composição das correntes de retirada. Alguns parâmetros importantes são:

Número de pratos teóricos (NT): são definidos como elementos da coluna na qual líquido e vapor estejam em equilíbrio, de modo que o vapor ascendente e o líquido descendente apresentem composições em equilíbrio.

Eficiência de Murphree (ϵ): é definido como a razão entre a diferença na composição do vapor ao mudar de prato pela diferença que teria caso o vapor estivesse em equilíbrio com o líquido.

Hold-up: o hold-up é o volume de líquido e vapor que fica retido ao longo da coluna, podendo ser diferente para o fundo da coluna (hold-up de fundo - mbo), para cada prato (hold-up para cada prato - mo) e para o topo da coluna (hold-up de topo - mdo).

Para o projeto, propõe-se a modelagem de um sistema que reaja a perturbações causadas por modificações nos parâmetros que regem o comportamento da coluna de destilação.

Tendo uma noção do processo de destilação, este projeto de iniciação científica objetiva a modelagem transiente de uma coluna de destilação de recheio que opera em regime contínuo, presente em um laboratório da faculdade de engenharia química e ilustrada na Figura 1, bem como a validação das simulações.

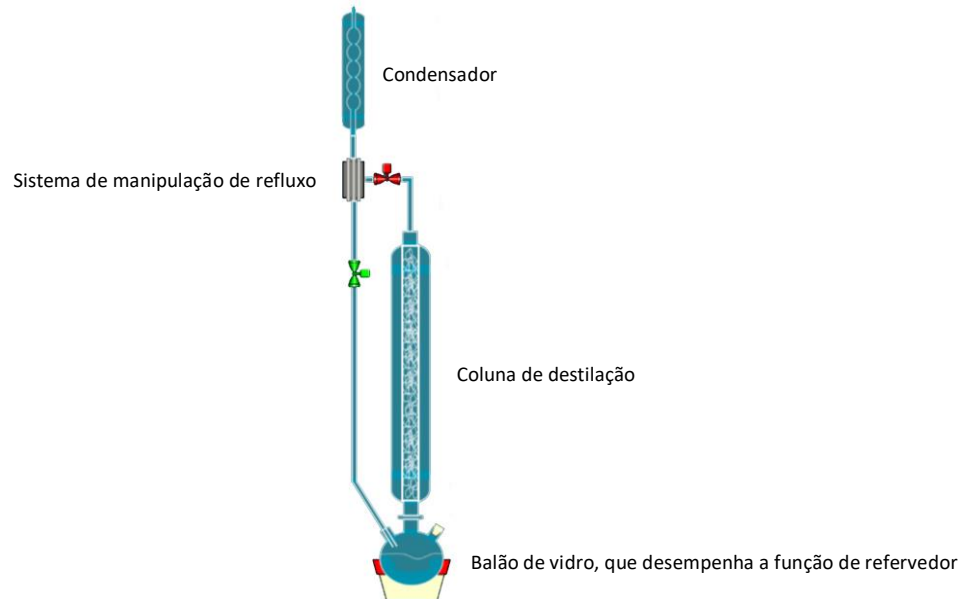


Figura 1 - Ilustração da coluna do laboratório da FEQ.

Para a modelagem de uma coluna de recheio, a abordagem que vem sendo mais comumente utilizada é a de pratos teóricos equivalentes. O método consiste em aproximar o comportamento de todo o comprimento de uma coluna de recheio em uma determinada quantidade aproximada de pratos de equilíbrio (ou pratos teóricos), ajustando também os demais parâmetros, como o hold-up para cada estágio.

No entanto, ao se equacionar todos os balanços de massa, o que se obtém é a presença de várias equações diferenciais ordinárias. Além disto, há a necessidade de poder se equacionar o equilíbrio líquido-vapor presente (ELV). A termodinâmica é responsável por se determinar a composição de fases e outros dados como pressão e temperatura através de modelos, ela é quem oferece a fundamentação matemática para que se possa ter uma avaliação, extensão e interpretação dos dados. Para isso, o que se tem são complexos modelos propostos para se entender o comportamento de um ELV.

Tendo em mente a quantidade de equações a serem resolvidas simultaneamente e a dificuldade de se utilizar uma expressão confiável para representar o equilíbrio de fases, fez-se o uso de dois softwares para auxiliar no desenvolvimento do projeto, os quais são o SciLab, na qual que engloba a resolução dos dados do sistema e o COCO, que apresenta uma ferramenta na qual é possível a criação de pacotes com o conjunto desejado de substâncias, utilizando para isto um modelo termodinâmico apropriado para tal sistema.

Utilizando os softwares e desenvolvendo um código que resolvesse as equações que abrangiam o problema, o que se obteve foi um programa capaz de simular as condições da coluna, podendo-se alterar e ajustar os parâmetros e as condições iniciais do sistema. Como resultado, o programa imprime uma tabela com as variações de qualquer propriedade desejada e fornece gráficos com o perfil dos comportamentos.

Fixado os parâmetros da Tabela 1 por exemplo, o código apresenta os gráficos de temperatura de topo, vazão de topo e composição de topo e de fundo, como ilustrado aqui na Figura 2. As unidades consideradas aqui foram as presentes no sistema internacional de unidades.

Tabela 1 – Valores base para visualização dos resultados do programa.

Número de pratos teóricos (N_T)	11
Pressão (P)	100000
Hold-up de topo (MDO)	10
Hold-up de fundo (MBO)	500
Hold-up de cada prato (MO)	10
Refluxo (R)	10
Vapor (V)	10
Eficiência de Murphree (ϵ)	0,7
Fração molar do leve no fundo (X_B)	0,6
Fração molar do leve no topo (X_D)	0,98

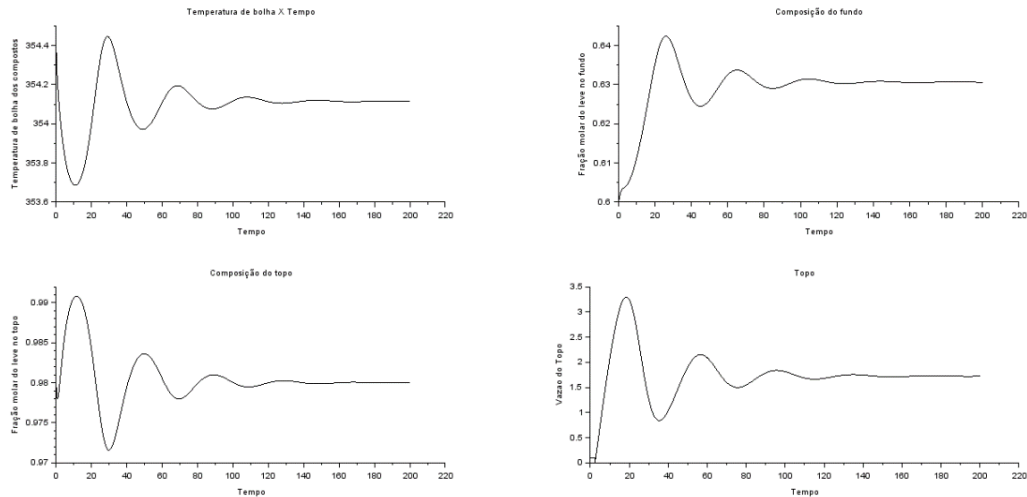


Figura 2 – Resultados obtidos através da simulação com valores pré-determinados.

Importunamente, devido a pandemia de Covid 19, não foi possível estar presente no laboratório de graduação para operar a coluna de destilação e coletar dados para que se pudesse fazer os ajustes necessários. Para contornar esta situação, foi feito diversas análises do comportamento dos resultados obtidos pelo código com diversos autores.

Fixado certas condições de operações da coluna, o perfil se assemelha a este obtido por uma outra bolsista. Aqui cabe lembrar que as colunas e modelos adotados são distintos, mas a semelhança entre os comportamentos já indica o bom comportamento dos resultados.

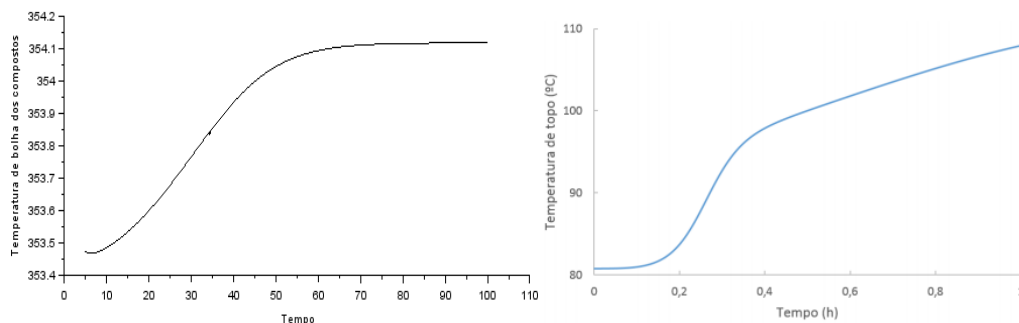


Figura 3 – Gráfico obtido pelo programa (a esquerda) e gráfico obtido por Suzane (a direita).

Alterando-se o hold-up, de modo que se tenha 4% do hold-up da coluna contida nos pratos teóricos e 10% do hold-up total da coluna contida nos pratos, pode-se observar a comparação na Figura 18. Os autores Mujtba e Macchieto escrevem que maiores valores de hold-up ao longo da coluna acarreta numa resposta dinâmica mais lenta do sistema, o que é observado aqui, visto que ambas convergem no mesmo valor, sendo a curva de 10% levando mais tempo.

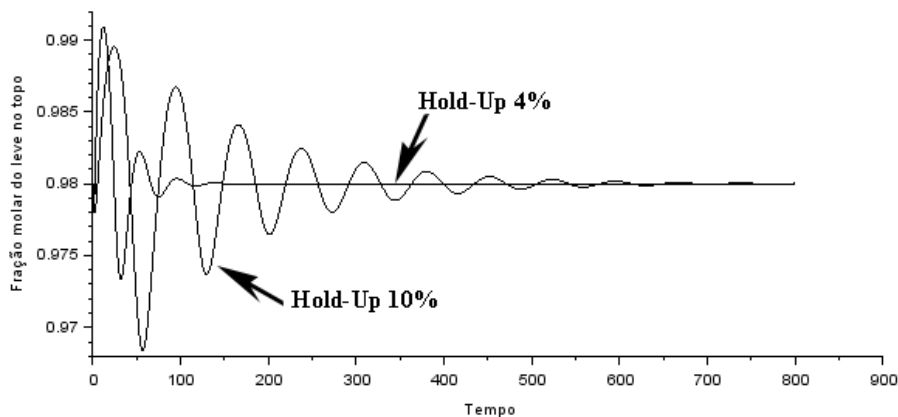


Figura 4 – Gráfico com o comportamento da coluna com hold-ups diferentes.

Tendo um comportamento permanente nas condições da Tabela 1, ao se aumentar hipoteticamente o refluxo da coluna, causará uma perturbação no sistema. O perfil desta perturbação é simulado e ilustrado na Figura 5, num gráfico de temperatura por tempo.

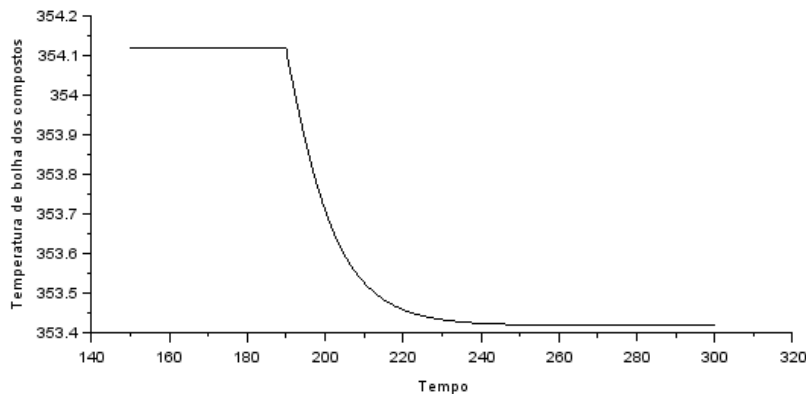


Figura 5 – Gráfico de temperatura no perfil transiente da coluna.

Observa-se que a temperatura de topo dos componentes decai após o aumento. Interpreta-se este resultado levando-se em conta que há um aumento de líquido que retorna a coluna (que é o que caracteriza o refluxo). Termodinamicamente, a redução da temperatura de bolha no topo pode ser interpretada com a maior presença do componente leve, de modo que sendo sua presença maior, há no sistema uma melhor separação entre os componentes. Além disto, o aumento do refluxo permite uma melhor separação da mistura, visto que há uma maior retenção dos compostos pesados contidos no vapor que sobe no líquido descendente, sendo também este resultado coerente.

Graças ao COCO, o programa permite com que se faça simulações para diferentes sistemas binários. Os gráficos apresentados anteriormente são referentes ao sistema ciclohexano-tolueno. Dentro do simulador, é possível a criação de outros pacotes, os quais foram feitos e testados no programa em SciLab. Testou-se os sistemas benzeno/tolueno e etanol/butanol, sendo ambos funcionais.

Também é possível realizar a análise do comportamento do sistema sob variações na razão de refluxo, definida como a razão entre a vazão molar que retorna a coluna e a vazão molar de destilado. Devido ao código ter sido desenvolvido de modo que a razão de refluxo varie, a composição de topo já pré-estabelecida deveria se manter constante. E como não há variações na composição de topo, a temperatura associada também deveria se manter constante.

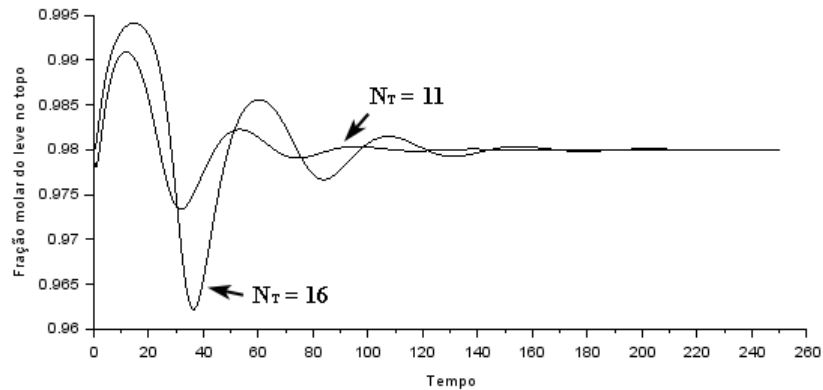


Figura 6 – Gráfico ilustrando a diferença no comportamento da fração molar de leve no topo obtido utilizando-se razões de refluxos variáveis.

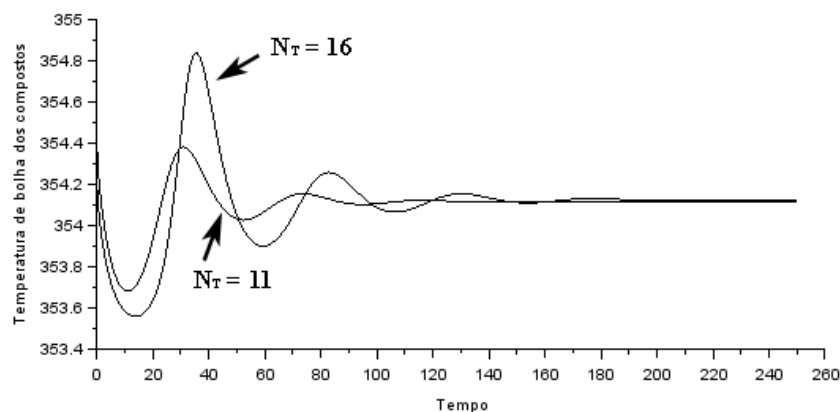


Figura 7 – Gráfico ilustrando a diferença no comportamento das temperaturas obtido utilizando-se razões de refluxos variáveis.

Executando a simulação para a quantidade de pratos teóricos igual a 11 e 16, ambos os sistemas variam, de modo que a curva com $N_T = 11$ varia a razão de refluxo até que no estado estacionário se estabiliza no valor $RR = 4,01$. Neste valor a composição do topo se mantém em $X_D = 0,98$ e a temperatura se aproxima da temperatura de ebulição do mais leve. Já a curva com $N_T = 16$ varia a razão de refluxo até que o valor de $RR = 2,76$ seja atingido. Neste ponto, as mesmas condições de composição e temperatura já citadas são válidas. Assim, os resultados obtidos mais uma vez corroboram com o que apresenta a literatura.

Com base nos resultados obtidos para o comportamento da coluna na simulação e nos resultados apresentados por fontes na literatura, concluiu-se que o modelo apresenta boa confiança nos resultados, mostrando dados e perfis pertinentes de temperatura, composição e vazão.

Uma das vantagens apresentada pelo programa é a facilidade de modificar os parâmetros e apresentar com relativa velocidade valores confiáveis que a princípio podem servir para se tomar com base frente aos valores reais. Além de tais parâmetros, o código permite a simulação do processo de destilação de várias misturas, aumentando o leque de possibilidades para a coluna original.