

MODELAGEM E SIMULAÇÃO DE UMA COLUNA DE DESTILAÇÃO PARA A SEPARAÇÃO DA MISTURA BTX BASEADA NA RESOLUÇÃO DO SISTEMA DE EQUAÇÕES MESH.

Edberg José Araújo dos Santos¹; Hiuquem Monteiro Lopes¹; David Oliveira Damasceno²;
Ruan Santos Neves²; Antonio Tavernard Pereira Neto²

^{1,2}Universidade Federal de Campina Grande, Unidade Acadêmica de Engenharia Química.
¹edberg.santos@eq.ufcg.edu.br; ¹hiuquem.lopes@gmail.com;

Resumo: As colunas de destilação ocupam uma posição de destaque na engenharia química, sendo extensivamente utilizadas na indústria química e petroquímica. A modelagem e simulação de processos é uma grande aliada para o aprendizado e desenvolvimento técnico-científico de alunos e pesquisadores do ramo da engenharia, proporcionando um ambiente imersivo para os mesmos. Diante disto, o presente trabalho foi desenvolvido com o intuito de avaliar os resultados obtidos a partir de algoritmos de resolução sequencial das equações de equilíbrio que governam um processo de separação por destilação (equações MESH) através do software MATLAB® e realizar uma análise comparativa com os resultados obtidos na literatura, mas também com aqueles oriundos de uma simulação por meio da utilização de um simulador comercial de processos, cujo escolhido foi o Aspen Plus®. Para tanto, foram implementados dois algoritmos, sendo o primeiro uma modificação do método Bubble-Point, cujo qual foi responsável pela geração de estimativas iniciais minimamente plausíveis para a inicialização do segundo algoritmo implementado, que consistiu na utilização do método de Newton-Raphson para resolução das equações MESH via procedimento de eliminação matricial. Para a análise do modelo proposto, tomou-se como base o estudo de caso de um processo de destilação da mistura BTX. Inicialmente, foi simulado o processo utilizando o Aspen Plus®, que serviu de comparativo para os resultados obtidos via metodologia proposta no presente trabalho. Por fim, realizou-se a simulação utilizando os algoritmos de resolução propostos e, após isso, comparou-se os resultados obtidos, verificando satisfatória concordância destes em relação aos resultados obtidos via simulador comercial.

Palavras-chave:

Separação, Modelagem, Equações MESH, BTX.

1 INTRODUÇÃO

A modelagem e simulação de processos é uma grande aliada para o aprendizado e desenvolvimento técnico-científico de alunos e pesquisadores do ramo da engenharia química. Ao passo que é feita a implementação da simulação do processo, todas as grandes áreas da engenharia química podem ser abordadas, tais como: operações unitárias, termodinâmica, métodos numéricos, otimização de processos, etc (CHEMMANGATTUVALAPPIL, et al., 2017).

Os separadores mais comuns nas plantas industriais são as colunas – sejam de destilação, absorção ou extração. Entretanto, as operações unitárias de separação não são utilizadas tão somente para separar os componentes de uma corrente de alimentação em outras misturas e espécies relativamente puras, para recuperar solventes

(83) 3322.3222

contato@conepetro.com.br

www.conepetro.com.br

que serão reprocessados e, assim, diminuir os desperdícios, mas também, quando aliadas a outras operações unitárias e equipamentos - como, por exemplo, o uso conjunto com reatores químicos, a fim de purificar a alimentação do reator, recuperar reagentes não convertidos, recuperar espécies indesejadas e purificar os produtos de reação (SEADER e HENLEY, 2006).

Friday e Smith (1967), analisaram diversas técnicas de separação de equações para a resolução do sistema de equações MESH. Em seu trabalho, ficou evidenciado que, a depender da natureza das espécies químicas presentes no processo de separação, diferentes abordagens para o procedimento de “quebra” das equações devem ser adotadas.

Wang e Henke (1966), desenvolveram um procedimento de quebra de equações denominado método *Bubble-Point* (ou método BP), o qual pode ser usado em processos de destilação onde os componentes participantes volatilidades similares.

Em contrapartida, Burningham e Otto (1967) avaliaram a influência das temperaturas em cada estágio da coluna na composição da fase líquida das espécies, observando que para misturas de compostos com faixas de volatilidade bastante diferentes, o método BP se mostrava sujeito a falhas de convergência e, propuseram um novo método de resolução, chamado de método *Sum-Rates* (ou método SR).

Naphtali e Sandholm (1971), desenvolveram uma metodologia de cálculos para os separadores de misturas líquido-vapor baseada na linearização das equações de conservação de massa e energia e das relações de equilíbrio (equações MESH) ao longo de cada um dos estágios teóricos de separação, utilizando o método de Newton-Raphson.

Os métodos de Newton-Raphson e Inside-Out são os mais utilizados para a resolução de problemas envolvendo processos de separação multicomponente e multiestágios, por apresentarem grande flexibilidade em relação à escolha de variáveis especificadas e por serem eficazes na resolução da maioria dos problemas.

Estes dois métodos estão disponíveis em softwares simuladores de processos como Aspen Plus®, PRO/II e HYSIS. Porém, é comum fazer uso da primeira iteração dos métodos BP ou SR para gerar as estimativas iniciais do método de Newton-Raphson ou do método *Inside-Out* (SEADER e HENLEY, 2006).

É sabido que existem diversos softwares comerciais para a simulação de processos químicos, porém para alunos que não tem grande familiaridade com tais ferramentas (como alunos dos períodos iniciais de graduação), o fato de desenvolver a modelagem e simulação de processos utilizando linguagens de programação como o MATLAB® promove um maior aprendizado de toda a metodologia que está por trás das

interfaces gráficas sofisticadas, comumente presentes em softwares comerciais.

Objetivo geral

Realização de modelagem e simulação de colunas de destilação rigorosas utilizando o método de Newton-Raphson para a resolução das equações MESH com o auxílio do software MATLAB®.

Objetivos específicos

- Com base na literatura, utilizar os modelos termodinâmicos adequados para os casos de estudo do trabalho;
- Desenvolver um modelo que preveja o comportamento de colunas de destilação rigorosas utilizando o software MATLAB®;
- Buscar uma melhor performance de resolução por meio de rotinas de otimização;
- Comparar os resultados obtidos no trabalho com os resultados de simulações realizadas em software comercial (Aspen Plus®).

2 METODOLOGIA

No presente trabalho foi desenvolvida, através do Software MATLAB®, a modelagem e simulação do processo de separação por destilação utilizando o método de Newton-Raphson para a resolução do sistema de equações MESH.

O estudo de caso tomado como base para este trabalho consiste na análise da primeira coluna de destilação do trem de separação da mistura BTX estudado por Tututi-Avila et. al. (2017), mostrado na Figura 1.

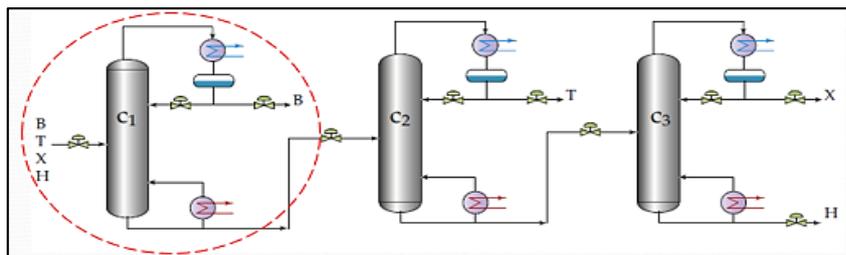


Figura 1 - Trem de separação convencional utilizado para a mistura BTX proposto por Tututi-Avila et. al. (2017).

Metodologia de resolução

O diagrama de blocos referente ao procedimento desenvolvido no presente trabalho para a resolução de processos de separação multicomponente e multiestágios via método de Newton-Raphson é apresentado na Figura 2.

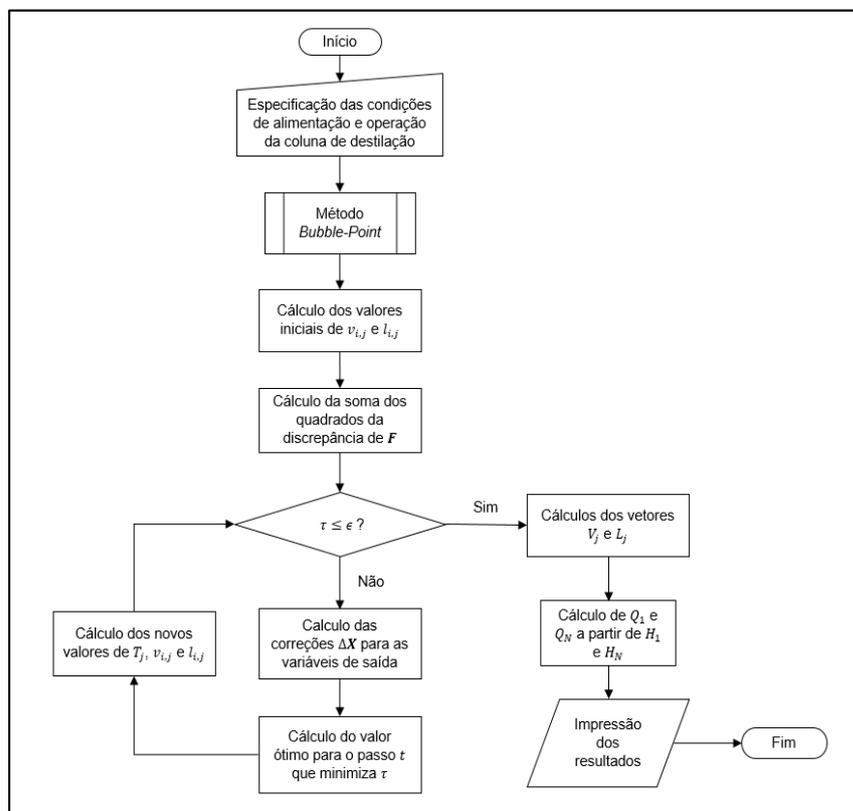


Figura 2 - Algoritmo proposto para o método de Newton-Raphson para processos de separação líquido/vapor

Estudo de caso

No desenvolvimento do estudo de caso I foi feita a análise da primeira coluna de destilação do trem de destilação estudado por Tututi-Avila et. al. (2017), utilizada para a separação da mistura BTX (benzeno/tolueno/o-xileno/pesados), onde os compostos pesados foram representados pelo 1-3-5-trimetilbenzeno. As especificações de operação da coluna de destilação são listadas na Tabela 1.

A mistura formada por benzeno, tolueno e o-xileno apresenta comportamento semelhante ao de uma mistura ideal, logo, os valores K foram calculados a partir da aplicação da lei de Raoult para sistemas ideais.

Tabela 1 - Condições operacionais utilizadas no estudo de caso

Parâmetro	Valor
Número de estágios	40
Estágio de alimentação	12
Razão de refluxo	2.53
Pressão de operação (bar)	1.0
Fluxo molar de alimentação (kmol/h)	145.0
Temperatura na alimentação (K)	399.5
Fração molar de benzeno na alimentação (%)	28.4
Fração molar de tolueno na alimentação (%)	31.7
Fração molar de o-xileno na alimentação (%)	28.1
Fração molar de pesados na alimentação (%)	11.8

3 RESULTADOS E DISCUSSÃO

A partir das configurações de design e operação da coluna de destilação, mostrados na Tabela 1, foi implementada a simulação do processo de separação em ambiente Aspen Plus®, na qual foi utilizado o modelo termodinâmico IDEAL, considerando-se uma pressão de alimentação de 1 bar e perda de carga desprezível ao longo dos estágios da coluna. Além disso, foi considerado adotado um condensador parcial, com o intuito de se obter uma corrente de destilado na fase vapor.

Após a realização da simulação no Aspen Plus®, foi realizada a simulação do processo por meio da metodologia de resolução via método de Newton-Raphson através software MATLAB®.

A Figura 3 apresenta o comparativo entre os perfis de fração molar da fase líquida ao longo da coluna de destilação encontrados nas simulações utilizando o Aspen Plus® e o método de Newton-Raphson implementado no MATLAB®.

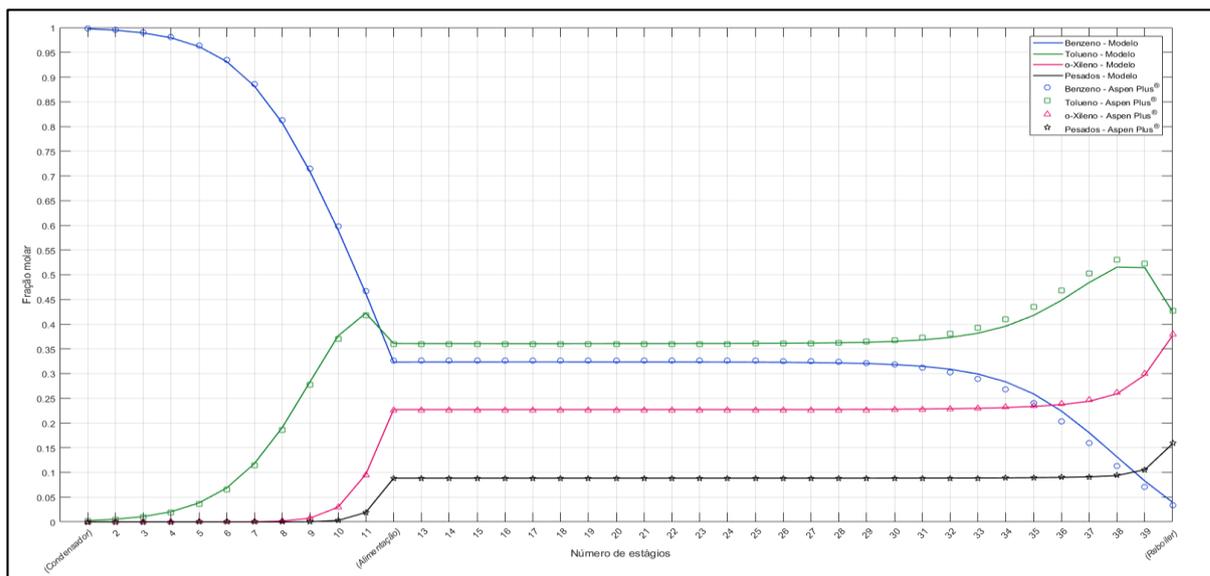


Figura 3 - Análise comparativa dos perfis de composição da fase líquida da coluna BTX

A partir da análise das Figuras 3, é possível perceber que o comportamento das curvas dos perfis de composição em ambos os casos apresentou grande concordância, com exceção de pequenos desvios numéricos ao passo que se aproximava do refeedor da coluna, onde os maiores gradientes de temperatura são encontrados, sendo a área mais numericamente sensível para o cálculo das equações de balanços.

A Tabela apresenta o comparativo entre os valores simulados e o valor especificado por Tututi-Avila et. al. (2017) em seu trabalho para a composição no destilado do benzeno, que é o produto de interesse na primeira coluna de destilação do processo estudado por de separação BTX proposto.

Tabela 3 - Análise comparativa das composições de benzeno na corrente de destilado da coluna BTX

Fonte de dados	Pureza de benzeno no destilado (%)
Tututi-Avila et. al. (2017)	99.00
Simulação no Aspen Plus®	99.86
Simulação via método de Newton-Raphson	99.90

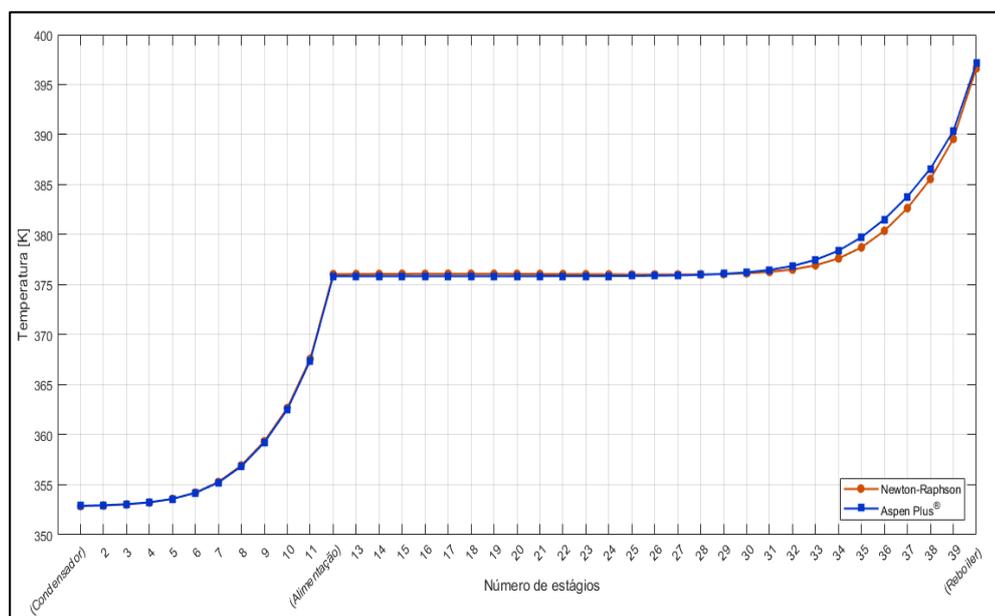
Mediante análise dos dados da Tabela, é possível perceber que os valores de pureza encontrado tanto para a simulação utilizando o simulador comercial, quanto para a simulação via método de Newton-Raphson foi maior que o valor especificado no estudo de Tututi-Avila et. al. (2017). Tais resultados eram esperados, devido ao fato de Tututi-Avila et. al. (2017) terem utilizado o modelo termodinâmico *NRTL-RK*, para o

(83) 3322.3222

contato@conepetro.com.br

www.conepetro.com.br

cálculo rigoroso das propriedades termodinâmicas das espécies, enquanto na metodologia adotada neste trabalho utilizou-se o modelo ideal (segundo a lei de Raoult). Na Figura 4 são confrontados os perfis de temperatura da coluna de destilação BTX resultantes das duas metodologias de simulação adotadas.



Conforme visualizado na Figura 4, os perfis de temperatura para ambas as abordagens de solução foram similares, apresentando apenas uma pequena variação nos estágios finais da coluna de destilação, região onde há os maiores gradientes de temperatura e onde os cálculos das equações que são fortemente dependentes desta variável serão diretamente influenciados.

Exemplos de variáveis que estão diretamente ligadas ao balanço de energia são as cargas térmicas do condensador e refeedor. A Tabela 4 apresenta os valores calculados para as referidas variáveis e os valores obtidos no trabalho de Tututi-Avila et. al. (2017).

Tabela 4 - Análise comparativa dos valores das cargas térmicas do condensador e refeedor da coluna BTX

Fonte de dados	Q_C (kJ/kmol)	Q_R (kJ/kmol)
Tututi-Avila et. al. (2017)	-2.4510×10^6	2.3804×10^6
Simulação no Aspen Plus®	-2.3203×10^6	2.9578×10^6
Simulação via método de Newton-Raphson	-2.2843×10^6	2.9419×10^6

4 CONCLUSÕES

O modelo de resolução proposto no presente trabalho demonstrou comportamento satisfatório no que diz respeito à previsão do comportamento de processos de separação, mesmo quando métodos termodinâmicos rigorosos (como o método NRTL) e diferentes tipos de misturas multicomponentes foram utilizados.

Ao comparar os resultados obtidos nas simulações utilizando o Aspen Plus® e o método de Newton-Raphson, observa-se que a metodologia proposta conseguiu se aproximar bastante dos resultados do software comercial, entretanto algumas discrepâncias ficaram mais evidenciadas quando foi necessária a utilização de modelos termodinâmicos rigorosos e misturas não-ideais, como o processo de destilação extrativa do sistema etanol/água.

Logo, conclui-se que com a aplicação da metodologia abordada neste trabalho, foi possível aprofundar-se nos conhecimentos de termodinâmica e operações unitárias, além de demonstrar o que está por traz das interfaces gráficas sofisticadas dos softwares comerciais.

REFERÊNCIAS

BURNINGHAM, D. W.; OTTO, F. D. Which Computer Design for Absorbers. **Hydrocarbon Processing**, v. 40, p. 163-170, 1967.

CHEMMANGATTUVALAPPIL, N. CHON, C. SUM D. N. K.; ELYAS R.; CHEN C.; CHIEN I. L. C.; LEE. H.; ELMS R. **Chemical Engineering Process Simulation**. 1ª. ed. Elsevier, 2017, 464 p.

FRIDAY, J. R.; SMITH, S. D. An Analysis of the Equilibrium Stage Separations Problem - Formulation and Convergence. **AIChE Journal**, v. 10, p. 698-707, 1964.

NAPHTALI M. L.; SANDHOLM, M. L. Multicomponent Separation Calculations by Linearization. **AIChE Journal**, v. 17, p. 148-153, 1971.

SEADER, J. D.; HENLEY, E. J. **Separation Process Principles**. 2ª. ed. United States: Jhon Wiley & Sons, Inc., 2006, 756 p.

TUTUTI-AVILA, S.; DOMÍGUEZ-DÍAZ, L. A.; MEDINA-HERRERA, N.; JIMÉNEZ-GUTIÉRREZ, A.; HANH, J. Dividing-Wall Columns: Design and Control of a Kaibel and a Satellite Distillation Column for BTX separation. **Chemical Engineering and Processing**, Elsevier, v. 114, p. 1-15, 2017.

WANG, J. C.; HENKE, G. E. Tridiagonal Matrix for Distillation. **Hydrocarbon Processing**, v. 45, p. 155-163, 1966.