

## MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO SISTEMA ACETONA-METANOL PARA OBTENÇÃO DE METANOL EM COLUNAS DE DESTILAÇÃO

SILVA J. O (1); MARCELINO T. O. A. C (1); SILVA M. C (2) e RAMOS B. W (4)

Universidade Federal de Campina Grande, [jessicaengenhairaquimica@outlook.com](mailto:jessicaengenhairaquimica@outlook.com)

**Resumo:** A coluna de destilação é o equipamento de separação mais utilizado nas indústrias químicas, petroquímicas e agroindustriais, incorporadas a processos que são, por natureza, dinâmicos, isto é, variam continuamente no tempo, seja por interferências externas seja por mudanças - voluntárias e/ou involuntárias - na operação. Em uma coluna de destilação, há a transferência de massa e de energia através dos pratos em seu interior. Considera-se que em cada prato há o equilíbrio entre as fases líquida e vapor. As fases realizam a troca de massa e energia em contracorrente: o líquido desce ao longo da coluna e o vapor sobe; ocorrendo então a transferência de massa e energia no processo. O presente trabalho tem como objetivo modelar e simular em estado estacionário o sistema acetona-metanol de modo a obter metanol com alto grau de pureza, utilizando o software comercial *Aspen Plus®* da *AspenTech*.

**Palavras-chave:** Coluna, Destilação, Metanol, Acetona, Aspen.

### Introdução

A destilação da mistura metanol-acetona é bastante atrativa devido a sua viabilidade econômica, visto que estes compostos podem ser utilizados posteriormente para inúmeros fins. A mesma representa um azeótropo de mínimo, isto é, dada uma composição específica, a mistura apresenta ponto de ebulição constante e comporta-se como uma substância pura (VAZ MANGILI, 2016). Além disso, caracteriza-se pelo seu ponto de ebulição ser atingido a temperaturas inferiores à dos componentes puros. Este azeótropo é sensível à pressão, desde modo, é possível aplicar os métodos de destilação por *Pressure Swing* ou destilação extrativa, este último, utilizando água como solvente (EBERHARDT AZAMBUJA, 2013). No presente trabalho optou-se pela utilização do método *Pressure Swing* tomando como base o processo proposto por Luyben (2008).

A coluna de destilação é o equipamento de separação mais utilizado nas indústrias químicas, petroquímicas e agroindustriais, incorporadas a processos que são, por natureza, dinâmicos, isto é, variam continuamente no tempo, seja por interferências externas seja por mudanças - voluntárias e/ou involuntárias - na operação. A separação do sistema acetona-metanol utilizando colunas de destilação é instigante devido ao custo relativamente baixo, sua facilidade e pela obtenção dos compostos com elevado grau de pureza.

O metanol – produto do processo de destilação – possui papel fundamental para a produção de biodiesel, fonte de energia renovável, sendo utilizado na transesterificação com triglicerídeos. Segundo a ANP (2017) esse composto orgânico da família dos álcoois é produzido atualmente, em escala industrial, predominantemente a partir do gás natural pelo processo de reforma a vapor ou gaseificação do carvão, onde obtêm-se o gás de síntese na proporção exata para a síntese do metanol. O presente trabalho tem como foco a modelagem e simulação do sistema acetona-metanol utilizando o software comercial *Aspen Plus®* da *AspenTech*, tendo em vista a obtenção do metanol voltado para produção de biodiesel, por meio da separação em colunas de destilação.

## **Metodologia**

O software *Aspen Plus®* da *AspenTech* foi utilizado para realizar as análises do processo no estado estacionário. O fluxograma do processo (Figura 1) foi configurado de acordo com Eberhardt Azambuja (2013). Para separação da mistura azeotrópica metanol-acetona são necessárias duas colunas de destilação. O modelo utilizado para ambas foi o RADFRAC e método termodinâmico escolhido para o processo foi o UNIQUAC.

A primeira coluna, denominada coluna de metanol, opera com pressão de 1 atm no topo, nessa condição a acetona é o componente da mistura com menor ponto de ebulição, de modo a permitir que o metanol seja removido por meio da corrente de base da coluna à 99,5% de pureza. A segunda coluna, de acetona, opera a temperatura de 343 K e pressão de 10 atm no topo, o que torna o metanol mais volátil e possibilita a remoção da acetona pela corrente de fundo com a mesma pureza que o metanol na primeira coluna.

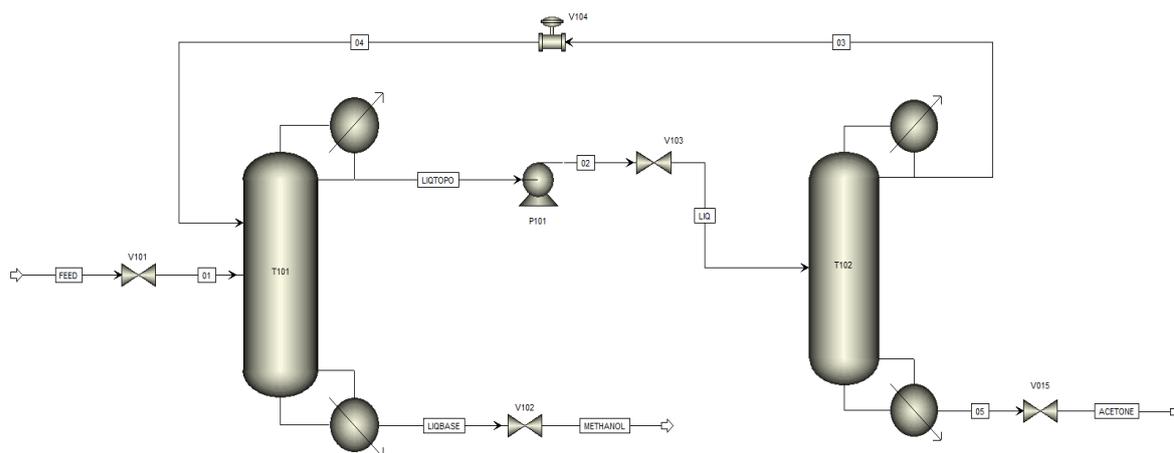


Figura 1 - modelagem fenomenológica do sistema acetona-metanol no software Aspen Plus®

Fonte: próprios autores

O processo é alimentado com uma mistura equimolar de metanol e acetona, com vazão de 540 kmol/h, temperatura de 320 K e pressão de 1,1 atm. A primeira coluna possui diâmetro de 3,30 m, razão de refluxo de 2,84 e 52 estágios, sendo a alimentação feita no 37°. A corrente de topo desta alimenta a segunda coluna de destilação no 41° estágio. A mesma possui 1,89 m de diâmetro, razão de refluxo de 3,11 e 62 estágios no total. O destilado desta é reciclado para a primeira, alimentando-a no 42° estágio à uma vazão de 181,4 Kmol/h, sem modificação na pressão. Ambas as colunas operam com condensador total (LUYBEN, 2008).

Com o intuito de instalar um futuro sistema de controle fez-se o dimensionamento das colunas e adição de alguns equipamentos para o ajuste de pressão e posteriores ações dos controladores. Para o dimensionamento, inicialmente calcula-se o diâmetro da coluna. Isto é possível pela adição do número do prato inicial e final e o tipo, neste caso, o sieve. Feito isso, o próprio simulador gera os valores do diâmetro de cada coluna.

Obtido o diâmetro da coluna é necessário calcular o valor do *sump* (espécie de reservatório) de cada coluna. Com o auxílio da Equação 1, a qual utiliza uma relação da vazão de líquido que chega no final da coluna com o diâmetro calculado, determina-se tal valor.

$$D = \left(\frac{20 V_L}{\pi}\right)^{0,3333}$$

Também é necessário o cálculo das dimensões do vaso de refluxo, tomando como base o valor do volume do primeiro prato da coluna T101 e T102. Depois de calculados e adicionados todos os valores, o PFD é inicializado e então realiza-se o pressure cheque – teste realizado para avaliar as condições de pressão antes do processo ser exportado para o meio dinâmico –. Feito isso, e corrigido todos os possíveis erros, o processo está apto para ser exportado para o meio dinâmico, onde pode ser adicionado a ação de controladores como, por exemplo, controle de nível e temperatura.

### **Resultados e Discursões**

O processo de separação da mistura azeotrópica metanol-acetona é composto por duas colunas de destilação T101 e T102, uma bomba P101, quatro trocadores de calor e cinco válvulas V101, V102, V103, V104 e V105. A corrente de alimentação é composta por uma mistura equimolar acetona-metanol, à temperatura de 46,85°C e pressão de 2 bar, que alimenta a coluna T101 pelo prato 49.

A coluna T101 conta com 51 pratos, temperatura de 46,85°C e 1,88 bar de pressão, ela é responsável por remover metanol na corrente de base à 96,28% de pureza. A corrente de topo é composta por 73,34% de acetona e 26,66% de metanol, que alimenta a coluna T102 pelo prato 51.

A coluna T102 conta com 61 pratos, temperatura de 56,22°C e 10,78 bares de pressão, sua função é tornar o metanol mais volátil a fim que a acetona seja removida pela corrente de base com 97,87% de pureza. A corrente de refluxo (corrente 03) que sai do condensador da coluna T102, entra na coluna T101 no estágio 42.

Na Tabela 1, pode-se observar as informações obtidas com a simulação, referentes a todas as correntes do processo.

Tabela 1 - Dados das correntes de processo

Corrente	Temperatura(°C)	Pressão(bar)	Fração molar acetona	Fração molar metanol	Fluxo molar acetona(kmol/h)	Fluxo molar metanol (kmol/h)
FEED	46,85	2,03	0,5	0,5	270	270
01	46,85	1,84	0,5	0,5	270	270
LIQBASE	82,16	2,03	0,0371	0,9628	10,03	259,77
METANOL	82,16	82,16	0,0372	0,9628	10,03	259,77
LIQTOPO	55,27	1,01	0,7333	0,2666	328,32	119,38
02	56,22	11,15	0,7333	0,2666	328,32	119,38
LIQ	56,22	10,78	0,7333	0,2666	328,33	119,38
04	134,34	1,74	0,3850	0,6149	68,35	109,15
03	134,34	10,13	0,3850	0,6149	68,35	109,15
05	146,68	11,13	0,9621	0,0378	259,27	10,23
ACETONE	146,68	10,93	0,9621	0,0378	259,27	10,23

Fonte: próprios autores

A Tabela 2 contém os valores calculados para os diâmetros das colunas, o volume do sump e o dimensionamento do vaso de refluxo (diâmetro e comprimento). Utilizando a Equação 1 e sabendo adotando o volume do líquido como sendo:  $VL= 1,323183$ .

Tabela 2 - Dados de dimensionamento das colunas T101 e T102

	Número de pratos	Diâmetro (m)	Altura (m)
Coluna 1	51	2,374971	35,868
Coluna 2	61	2,30839	43,188
Sump 1	-	2,374971	35,868
Sump 2	-	2,30839	43,188
Vaso de refluxo 1	-	2,374971	35,868
Vaso de refluxo 2	-	1,716758	43,188

Fonte: próprios autores

## Conclusão

O software comercial *Aspen Plus*® foi capaz de reproduzir fielmente e prever o comportamento do sistema acetona-metanol em estado estacionário.

O processo comportou-se de maneira esperada, obtendo-se metanol e acetona com graus de pureza necessários para os padrões comerciais.

A realização do dimensionamento do diâmetro das colunas, valor do *sump* e dimensões do vaso de refluxo, são necessários para realização de trabalhos futuros com a adição de controladores no estado dinâmico.

## Referências Bibliográficas

EBERHARDT Azambuja, M. Comparativo de métricas de sustentabilidade. Graduado. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2013.

VAZ MANGILI, P. Avaliação Da Eco eficiência De Processos De Separação Acetona-Metanol Via Simulação. Graduado. Universidade Federal Fluminense, 2016.

Luyben, W. L; Yu, C. Design of Tame Reactive Distillation Systems. 2008.